

Mecánica Cuántica II

Aníbal Iucci

1 de mayo de 2024

Índice general

1. Potenciales dependientes del tiempo	5
1.1. Representación de Interacción	8
1.2. Problemas con dos estados	10
1.3. Resonancia magnética	13
1.4. Teoría de perturbaciones: Serie de Dyson	14
1.5. Probabilidad de Transición	16
1.6. Primer orden perturbativo	16
1.6.1. Potencial constante	17
1.6.2. Perturbaciones armónicas	17
1.6.3. Análisis de la dependencia temporal	18
1.6.4. Dependencia en energía	19
1.6.5. Estados finales en el continuo	21
1.6.6. Conexión adiabática	23
1.6.7. Dispersión por un potencial	25
1.7. Transiciones de segundo orden	28
1.8. Decaimiento del estado inicial	29
1.9. Interacción del campo electromagnético clásico con un sistema de partículas cargadas	31
1.9.1. Absorción de la luz	34
1.10. Aproximación dipolar eléctrica	37
1.11. Reglas de selección	39
1.11.1. Transiciones prohibidas	41
2. Respuesta lineal	42
2.1. funciones respuesta	42
2.1.1. Respuesta lineal	43
2.1.2. Analiticidad y causalidad	44
2.1.3. Relación de Kramers-Kronig	46
2.2. Ejemplos clásicos	48
2.2.1. El oscilador armónico amortiguado	48
2.2.2. Disipación	50

2.3.	Mecánica cuántica y fórmula de Kubo	51
2.4.	Fórmula de Kubo para la conductividad eléctrica: hacia una teoría de campos	54
3.	Dispersión de partículas	58
3.1.	Condiciones de Contorno	58
3.2.	Amplitud de dispersión y sección eficaz	63
3.3.	Funciones de Green	64
3.4.	Aproximación de Born	67
3.5.	Ondas parciales	70
3.6.	Determinación de corrimientos de fase	75
3.6.1.	Relación entre el corrimiento de fase y el potencial	76
3.6.2.	Dispersión a bajas energías	78
3.6.3.	Longitud de dispersión	79
3.7.	Matriz de dispersión	81
3.8.	Estados Ligados	82
3.9.	Extensión analítica de la matriz S	84
3.10.	Dispersión resonante	87
4.	Partículas Idénticas	93
4.1.	Permutaciones y simetrías	94
4.2.	Interacción de intercambio	100
4.3.	Partículas Independientes	102
4.4.	Átomos con dos electrones	106
5.	Segunda cuantificación	110
5.1.	Espacio de Fock	113
5.2.	Operadores de creación y destrucción	114
5.2.1.	Operadores de un cuerpo	122
5.2.2.	Operadores de dos cuerpos	128
5.3.	Resolviendo con segunda cuantificación	133
5.3.1.	Autovalores y autoestados	133
5.3.2.	Valores de expectación térmicos	134
5.3.3.	Transformaciones canónicas	136
5.3.4.	Ejemplo: Modelo tight binding	139
5.3.5.	Términos anómalos	140
5.4.	Cuantificación del campo electromagnético	144
5.4.1.	Emisión espontánea	146

6. Mecánica cuántica Relativista	151
6.1. La ecuación de Klein-Gordon	151
6.2. Transformaciones de Lorentz	156
6.3. La ecuación de Dirac	161
6.4. La ecuación de continuidad	169
6.5. Los valores posibles de N	170
6.6. Teorema fundamental de Pauli	173
6.7. Invarianza relativista	175
6.8. El grupo de Lorentz	179
6.9. Generadores y álgebra del grupo \mathcal{L}_+^\uparrow	180
6.10. El carácter de ψ	183
6.11. La solución de partícula libre	190
6.12. El spin en Mecánica Cuántica Relativista	193
6.13. Helicidad	196
6.14. Paridad	198
6.15. Partículas de masa cero. Quiralidad	200
6.16. Masa de Dirac y masa de Majorana	204
6.17. Una interpretación física de las matrices de Dirac	206
6.18. La ecuación de Dirac en presencia de un campo electromagnético	208
6.19. El límite no-relativista	211
6.20. Invarianza de gauge	217
6.21. Ecuación de Dirac para potenciales esféricamente simétricos	226
6.22. Dirac+Coulomb	227
6.23. Transformada de Fourier discreta	242

Capítulo 1

Potenciales dependientes del tiempo

La evolución temporal de un dado sistema físico, que en un instante inicial t_0 se encuentra en un estado

$$|\psi(t_0)\rangle \equiv |\psi_0\rangle \quad (1.1)$$

puede entenderse en dos esquemas diferentes:

1. **Representación de Schrödinger (S)**, en la cual evolucionan los vectores de estado de acuerdo a

$$|\psi(t)\rangle_S = \mathcal{U}(t_0, t) |\psi_0\rangle \quad (1.2)$$

donde $\mathcal{U}(t_0, t)$ es el operador de evolución temporal, que satisface una ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t_0, t) = H \mathcal{U}(t_0, t) \quad (1.3)$$

que induce a su vez una ecuación del mismo tipo para los kets de estado:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_S = H |\psi(t)\rangle_S. \quad (1.4)$$

En este esquema, los operadores no dependen del tiempo

$$A_S(t) = A(t_0) \equiv A, \quad (1.5)$$

2. **Representación de Heisenberg (H)**, en la cual los estados no evolucionan,

$$|\psi(t)\rangle_H = |\psi_0\rangle \quad (1.6)$$

mientras que los observables dependen del tiempo según¹

$$A_H(t) = \mathcal{U}^\dagger(t_0, t) A(t_0) \mathcal{U}(t_0, t), \quad (1.9)$$

y que obedecen la ecuación de movimiento de Heisenberg:

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A_H, H] \quad (1.10)$$

El valor de expectación $\langle A \rangle$ es obviamente el mismo en ambas dos representaciones:

$${}_S \langle \psi(t) | A_S | \psi(t) \rangle_S = \langle \psi_0 | \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) A_S \mathcal{U}(t, t_0) | \psi_0 \rangle \quad (1.11)$$

$$= {}_H \langle \psi(t) | A_H(t) | \psi(t) \rangle_H \quad (1.12)$$

En el caso en que el Hamiltoniano no depende del tiempo, la solución de la ecuación (1.3) se obtiene inmediatamente en la forma

$$\mathcal{U}(t_0, t) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}. \quad (1.13)$$

Lo cual permite obtener inmediatamente la dinámica de estados, observables y valores de expectación.

En la naturaleza, sin embargo, hay muchos sistemas cuánticos que sí dependen del tiempo (iluminar un átomo, aplicar voltaje a un metal, absorción y emisión de la luz, etc) y la energía del sistema no se va a conservar. En ese caso, el Hamiltoniano depende explícitamente del tiempo, $H = H(t)$, y se vuelve dificultoso hallar una expresión para el operador de evolución temporal. Puede mostrarse que esa expresión está dada por la serie de Dyson:

$$\mathcal{U}(t_0, t) = \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right) \quad (1.14)$$

donde hemos definido el operador de orden temporal de forma tal que

$$\mathcal{T} [A(t_1) A(t_2) \cdots A(t_n)] = A(t_{i_1}) A(t_{i_2}) \cdots A(t_{i_n}), \quad t_{i_1} > t_{i_2} > \cdots > t_{i_n}, \quad (1.15)$$

¹Los estados de la base $|n\rangle$ no cambian en el esquema de Schrödinger. En el esquema de Heisenberg, la ecuación de autovalores

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (1.7)$$

se convierte en

$$A_H(t) \mathcal{U}^\dagger(t_0, t) |a\rangle = a \mathcal{U}^\dagger(t_0, t) |a\rangle \quad (1.8)$$

de modo que los kets de la base evolucionan con el “signo contrario” $|a(t)\rangle_H = \mathcal{U}^\dagger(t_0, t) |a\rangle$. Sólo los autoestados de H no evolucionan.

es decir, que ordena los operadores sobre los que actúa de manera que el argumento temporal de los operadores correspondientes *decrece* a medida que nos movemos desde izquierda a derecha. Si dos tiempo coinciden no es un problema, ya que en ese caso el operador conmuta con sí mismo. Esta expresión es la forma compacta de escribir el desarrollo en serie

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}(t_0, t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \\
&+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H(t') H(t'') \\
&\vdots \\
&+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \cdots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} H(t') H(t'') \cdots H(t^{(n)}) \\
&+ \cdots
\end{aligned} \tag{1.16}$$

Si bien esta es una expresión perfectamente aceptable, no parece muy adecuada para realizar cálculos por la siguiente razón: usualmente uno se encuentra con el problema en el que el Hamiltoniano puede descomponerse en la forma

$$H = H_0 + V(t) \tag{1.17}$$

donde H_0 no depende explícitamente del tiempo, y se supone además, que el problema con $V(t) = 0$ está resuelto:

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle. \tag{1.18}$$

Sin embargo, típicamente estamos interesados en situaciones en las que el potencial $V(t)$ es pequeño respecto de H_0 y buscamos realizar un cálculo perturbativo. En ese caso, la serie de Dyson para $\mathcal{U}(t_0, t)$ no nos resulta de utilidad ya que conduce a un desarrollo en serie de potencias de H , mientras que lo que buscamos es un desarrollo en potencias de $V(t)$. Debemos por lo tanto cambiar el enfoque.

La pregunta que buscamos responder es cómo obtener en la práctica la evolución temporal de un estado arbitrario $|\psi_0\rangle$. En lo que sigue trabajamos en la representación de Schrödinger, y omitimos la notación $|\rangle_S$.

Supongamos que a $t = t_0$ el sistema físico lo representamos por

$$|\psi_0\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \tag{1.19}$$

Si se tratara de un problema independiente del tiempo, la evolución temporal del estado sería

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i(t-t_0)H/\hbar} |\psi_0\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |n\rangle \tag{1.20}$$

con c_n constantes (independientes de t). Resulta entonces razonable, en el caso de una interacción dependiente del tiempo, proponer que los $c_n = c_n(t)$ y entonces para $t > t_0$ escribir

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |n\rangle \quad (1.21)$$

Nótese que debido a la forma en que hemos separado la dependencia temporal:

- El factor $e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$ está presente aún cuando $V = 0$, y
- La evolución temporal de los $c_n(t)$ se debe solamente a $V(t)$.

En seguida veremos que, con esta separación, las amplitudes $c_n(t)$ satisfacen una ecuación diferencial muy simple.

1.1. Representación de Interacción

Antes de discutir la ecuación diferencial para los $c_n(t)$ es conveniente introducir la **representación de interacción (RI)**. Igual que antes: un sistema físico que en t_0 está en el estado $|\psi_0\rangle$, en un tiempo t posterior estará en el estado $|\psi(t)\rangle_S$. Definimos

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{+iH_0(t-t_0)/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \quad (1.22)$$

donde $|\rangle_I$ representa la misma situación física que $|\rangle_S$ pero en la RI. Análogamente, en la RI, los operadores se definen como:

$$A_I(t) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} A_S(t) e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} \quad (1.23)$$

En particular ($V_S(t) \equiv V(t)$) :

$$V_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V(t) e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (1.24)$$

Vamos a deducir ahora la ecuación que caracteriza la evolución temporal de $|\psi(t)\rangle_I$. Tomando la derivada temporal de (1.22) y haciendo uso de la ecuación de Schrödinger (ES)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_S = (H_0 + V) |\psi(t)\rangle_S \quad (1.25)$$

resulta,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \right) \\ &= -H_0 e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} |\psi(t)\rangle_S + e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} (H_0 + V) |\psi(t)\rangle_S \\ &= e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} V e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \end{aligned} \quad (1.26)$$

Es decir que:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I = V_I(t) |\psi(t)\rangle_I \quad (1.27)$$

También se puede demostrar que para un observable A (que no depende explícitamente del tiempo en la RS) vale:

$$\frac{dA_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A_I, H_0], \quad (1.28)$$

que es una ecuación del tipo Heisenberg con H reemplazado por H_0 . En resumen, la RI en muchos aspectos es intermedia entre la RS y la RH.

Trabajemos la evolución temporal del estado, ahora en la representación de interacción:

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} |\psi(t)\rangle_S = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} |n\rangle \quad (1.29)$$

$$= \sum_n c_n(t) |n\rangle. \quad (1.30)$$

donde usamos la expansión (1.21) de $|\psi(t)\rangle$. Observamos que al trabajar en la representación de interacción nos sacamos de encima de (1.21) las fases $e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$ por completo. Al multiplicar este estado a izquierda por $\langle n|$, los coeficientes se escriben

$$c_n(t) = \langle n|\psi(t)\rangle_I. \quad (1.31)$$

Ya podemos escribir la ecuación diferencial para los $c_n(t)$. Tomemos la ecuación de Schrödinger en RI, (1.27) y multipliquemos a izquierda ambos miembros por $\langle n|$, obtenemos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle n|\psi(t)\rangle_I = \sum_m \langle n|V_I(t)|m\rangle \langle m|\psi(t)\rangle_I. \quad (1.32)$$

Aquí los elementos de matriz del potencial pueden deacomponerse en la forma:

$$\langle n|V_I(t)|m\rangle = \langle n|e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} V(t) e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} |m\rangle = \langle n|V(t)|m\rangle e^{i(E_n - E_m)(t-t_0)/\hbar}. \quad (1.33)$$

Finalmente, insertando (1.31) y (1.33) en (1.32) se encuentra la ecuación buscada,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n(t) = \sum_m V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}(t-t_0)} c_m(t) \quad (1.34)$$

donde

$$V_{nm}(t) \equiv \langle n|V(t)|m\rangle; \quad \omega_{nm} \equiv \frac{E_n - E_m}{\hbar} = -\omega_{mn} \quad (1.35)$$

Explícitamente

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \dot{c}_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}(t-t_0)} & V_{13}e^{i\omega_{13}(t-t_0)} & \dots \\ V_{21}e^{i\omega_{21}(t-t_0)} & V_{22} & V_{23}e^{i\omega_{23}(t-t_0)} & \dots \\ V_{31}e^{i\omega_{31}(t-t_0)} & V_{32}e^{i\omega_{32}(t-t_0)} & V_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (1.36)$$

Este es el sistema de ecuaciones diferenciales acopladas que debemos resolver para hallar las amplitudes $c_n(t)$ en función del tiempo. Al ser un sistema de ecuaciones de primer orden en t debe complementarse con un conjunto de condiciones iniciales $c_n(t_0)$ que se obtienen indicando el estado inicial $|\psi_0\rangle$ y obteniendo

$$c_n(t_0) = \langle n|\psi_0\rangle. \quad (1.37)$$

de (1.19).

Si bien estas ecuaciones permiten hallar todos los coeficientes $c_n(t)$, y por medio de ellos obtener la evolución temporal de cualquier estado inicial, una situación realista usual supone que un sistema se prepara inicialmente en algún autoestado $|i\rangle$ de H_0 , y la dinámica debida a la perturbación lleva a que otros estados $|n\rangle \neq |i\rangle$ comiencen a poblarse. Por otro lado, debido al potencial, la evolución temporal del estado $|i\rangle$ será no trivial. De hecho esa evolución estará dada por la misma ecuación (1.21), tomando $|\psi(t)\rangle \rightarrow |i(t)\rangle$. Tenemos que responder entonces la pregunta: **¿como evoluciona temporalmente la probabilidad de hallar el sistema en estados $|n\rangle \neq |i\rangle$?** Esta probabilidad de acuerdo a los postulados de la mecánica cuántica está dada por

$$P_{i \rightarrow n}(t) = |\langle n|i(t)\rangle|^2. \quad (1.38)$$

Volviendo al esquema de Schrödinger y utilizando la ecuación (1.21) con $|\psi(t)\rangle \rightarrow |i(t)\rangle$ hallamos que

$$P_{i \rightarrow n}(t) = |c_n(t)|^2 \quad (1.39)$$

La información sobre el estado inicial está contenida en los $c_n(t)$ a través de las condiciones iniciales de la ecuación diferencial. Estas probabilidades se denominan **probabilidades de transición**.

1.2. Problemas con dos estados

Análogamente que en los casos de potenciales independientes del tiempo, las soluciones analíticas exactas de las ecuaciones (1.34) son raras y en general sólo se pueden obtener para espacios de Hilbert de baja dimensión. En el caso general habrá que resolver la ec. (1.36) en forma numérica o por medio de un desarrollo perturbativo.

Consideremos el caso de dos estados con un potencial que oscila armónicamente:

$$\begin{aligned} H_0 &= E_1|1\rangle\langle 1| + E_2|2\rangle\langle 2|; \quad (E_2 > E_1) \\ V(t) &= \gamma e^{i\omega t}|1\rangle\langle 2| + \gamma e^{-i\omega t}|2\rangle\langle 1| \end{aligned} \quad (1.40)$$

donde γ y ω son reales y positivos. Esto significa que los elementos de matriz de (1.36) son:

$$V_{12}(t) = V_{21}^*(t) = \gamma e^{i\omega t}; \quad V_{11}(t) = V_{22}(t) = 0. \quad (1.41)$$

Este potencial da origen a las transiciones $|1\rangle \longleftrightarrow |2\rangle$ entre los dos estados.

Si inicialmente, en $t = 0$, está ocupado solamente el nivel más bajo, los coeficientes de (1.19) serán:

$$c_1(0) = 1; \quad c_2(0) = 0, \quad (1.42)$$

y entonces la probabilidad de ocupación de los dos estados en $t > 0$ estará dada por la **fórmula de Rabi**,

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2 \left\{ \left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4} \right]^{1/2} t \right\}, \quad (1.43)$$

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2, \quad (1.44)$$

donde $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$ como se verá en los trabajos prácticos.

Vemos que la probabilidad de que el sistema esté excitado oscila en el tiempo con una frecuencia angular

$$\Omega = \sqrt{\left(\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4} \right)} \quad (1.45)$$

y que es muy grande cuando

$$\omega \approx \omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar \quad (1.46)$$

es decir cuando la frecuencia angular del potencial - usualmente generado por un campo externo (eléctrico o magnético) - es aproximadamente igual a la frecuencia angular del sistema de dos estados. En este caso hablamos de la **condición resonante**.

Veamos que ocurre en el caso resonante, o sea cuando

$$\omega = \omega_{21}; \quad \Omega = \gamma/\hbar \quad (1.47)$$

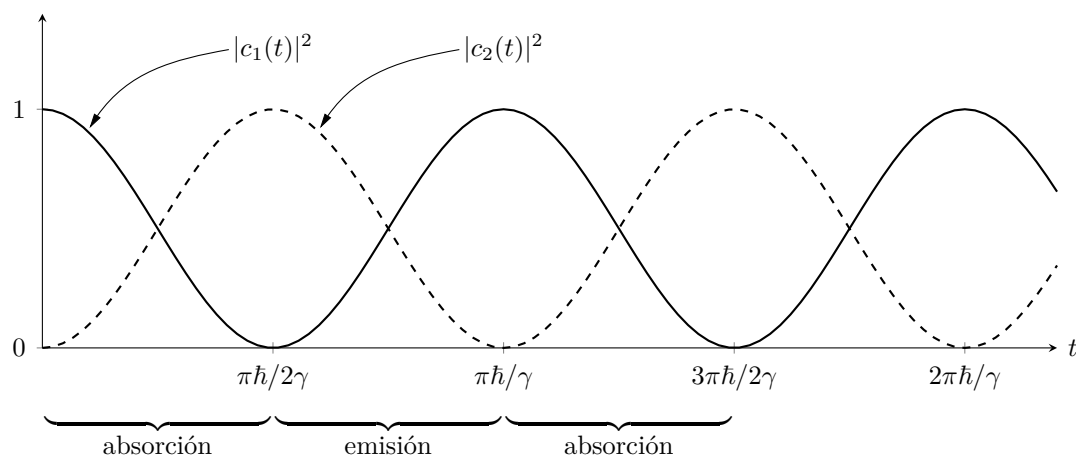


Figura 1.1: Representación gráfica de $|c_1(t)|^2$ y $|c_2(t)|^2$ para $\omega = \omega_{21}$.

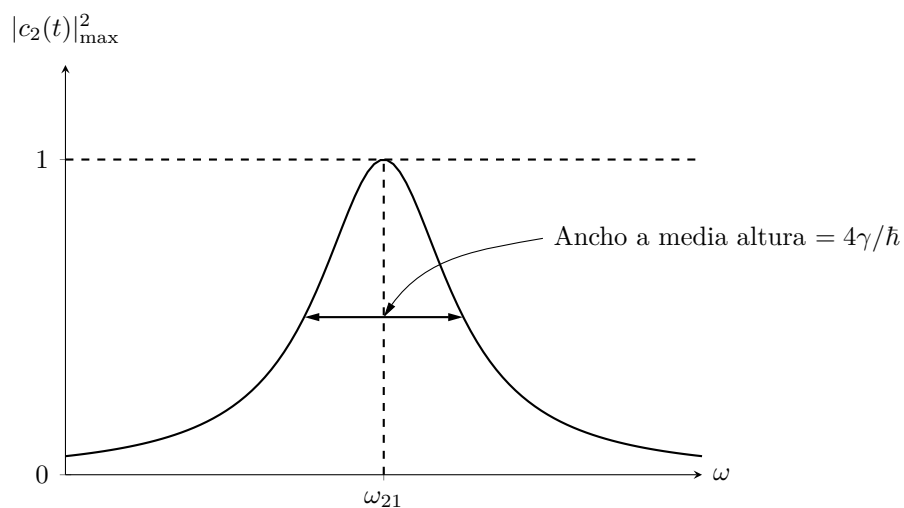


Figura 1.2: Representación gráfica de $|c_2(t)|^2_{\max}$ en función de ω para $\gamma \ll \hbar\omega_{12}$; $\omega = \omega_{21}$ corresponde a la frecuencia resonante.

En la Figura 1.1 están representadas las probabilidades $|c_1(t)|^2$ y $|c_2(t)|^2$ en función del tiempo. Entre $t = 0$ y $t = \pi\hbar/(2\gamma)$ el sistema absorbe energía del potencial $V(t)$. En $t = \pi\hbar/(2\gamma)$ solo el estado superior está poblado y entre $t = \pi\hbar/(2\gamma)$ y $t = \pi\hbar/\gamma$ el sistema se libera del exceso de energía. Este ciclo de *absorción-emisión* se repite indefinidamente y $V(t)$ actúa como una fuente o un sumidero de energía.

El ciclo de absorción-emisión se produce aún cuando estamos fuera de la resonancia. Sin embargo, las amplitudes de oscilación de $|c_1(t)|^2$ y $|c_2(t)|^2$ son ahora menores y sus frecuencias mayores. La Figura 1.2 muestra $|c_2(t)|_{\text{máx}}^2$ en función de ω . La curva tiene un pico resonante en $\omega = \omega_{21}$ cuyo ancho es $4\gamma/\hbar$. Notemos que cuanto más débil es el potencial (γ pequeño) tanto más agudo será el pico resonante.

1.3. Resonancia magnética

Consideremos un sistema de spin 1/2 (por ejemplo, un electrón ligado) sometido a un campo magnético de la forma

$$\mathbf{B} = B_0\hat{z} + B_1(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t) \quad (1.48)$$

donde B_0 y B_1 son constantes. Podemos describir el efecto del campo constante por medio de H_0 y el efecto del campo rotante por medio de $V(t)$. Recordemos que

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}; \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{e}{m_e c} \mathbf{S}, \quad e < 0, \quad (1.49)$$

donde $\boldsymbol{\mu}$ y \mathbf{S} son respectivamente, el momento magnético y el spin del electrón. Si además representamos a los autoestados de S por medio de los autovectores $|+\rangle$ y $|-\rangle$ de S_z , o sea:

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) \\ S_y &= i\frac{\hbar}{2}(-|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) \\ S_z &= \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) \end{aligned} \quad (1.50)$$

resulta²

$$\begin{aligned} H_0 &= -\frac{e\hbar B_0}{2m_e c}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) \\ V(t) &= -\frac{e\hbar B_1}{2m_e c} \left(e^{i\omega t} |-\rangle\langle+| + e^{-i\omega t} |+\rangle\langle-| \right) \end{aligned} \quad (1.51)$$

²Mostrar que S_x, S_y y S_z dados por (1.32) satisfacen las reglas de conmutación: $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$, etc.

Para $e < 0$, $E_+ > E_-$ y por lo tanto podemos identificar:

$$|+\rangle \rightarrow |2\rangle \quad (\text{nivel superior}), \quad (1.52)$$

$$|-\rangle \rightarrow |1\rangle \quad (\text{nivel inferior}), \quad (1.53)$$

para estar de acuerdo con (1.40). De (1.35) vemos, además, que la frecuencia característica del sistema es:

$$\omega_{21} = \frac{|e|B_0}{m_e c} \quad (1.54)$$

que es la frecuencia de precesión del spin en el campo B_0 (cuando $B_1 = 0$). Notemos que, aún cuando los valores de expectación $\langle S_x \rangle$ y $\langle S_y \rangle$ varían debido a la precesión del spin, las cantidades $|c_+(t)|^2$ y $|c_-(t)|^2$ permanecen constantes mientras que el campo rotante no actúa.

De la comparación de (1.40) con (1.51) vemos que:

$$-\frac{e\hbar B_1}{2m_e c} \rightarrow \gamma; \quad \omega \rightarrow \omega \quad (1.55)$$

y que al aparecer el campo rotante las probabilidades $|c_+(t)|^2$ y $|c_-(t)|^2$ varían de la manera indicada en la Figura 1.1 para $\omega = \omega_{12}$. Es decir que además de la precesión del spin ocurren transiciones $|+\rangle \longleftrightarrow |-\rangle$. La condición de resonancia se satisface cuando la frecuencia del campo magnético rotante coincide con la frecuencia de precesión del spin determinada por la intensidad del campo magnético uniforme.

1.4. Teoría de perturbaciones: Serie de Dyson

En un tratamiento perturbativo las soluciones aproximadas de (1.36) serán de la forma:

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots, \quad (1.56)$$

donde $c_n^{(1)}(t)$, $c_n^{(2)}(t)$, \dots representan a las amplitudes de primer orden, de segundo orden, etc. con respecto al parámetro de la intensidad del potencial dependiente del tiempo. El método iterativo para resolver este problema es similar al que se emplea en la teoría de perturbaciones independientes del tiempo. Esto significa que, si inicialmente está poblado sólo el estado i , para obtener $c_n^{(1)}(t)$ aproximamos el lado derecho de (1.36) por $c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}$ y lo relacionamos con $c_n^{(1)}(t)$, integrando la ecuación diferencial. Luego para obtener $c_n^{(2)}(t)$, aproximamos el lado derecho de (1.36) por $c_n^{(1)}(t)$ y procedemos del mismo modo, etc..

En lugar de trabajar con los $c_n(t)$ vamos a analizar el **operador de evolución** $\mathcal{U}_I(t, t_0)$ en la RI, definido por

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} |\psi(t)\rangle_S = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} \mathcal{U}(t_0, t) |\psi_0\rangle \equiv \mathcal{U}_I(t, t_0) |\psi_0\rangle, \quad (1.57)$$

o

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} \mathcal{U}(t_0, t). \quad (1.58)$$

Si derivamos la ecuación anterior obtenemos la ecuación diferencial para $\mathcal{U}_I(t, t_0)$ analoga a (1.27):

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{U}_I(t, t_0) = V_I(t) \mathcal{U}_I(t, t_0) \quad (1.59)$$

que tenemos que resolver con la condición inicial

$$\mathcal{U}_I(t_0, t_0) = 1 \quad (1.60)$$

Al integrar (1.59) obtenemos la ecuación integral equivalente:

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') \mathcal{U}_I(t', t_0) dt' \quad (1.61)$$

La solución aproximada se obtiene por iteración,

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_I(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \\ &+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') \\ &\vdots \\ &+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \cdots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} V_I(t') V_I(t'') \cdots V_I(t^{(n)}) \\ &+ \cdots \end{aligned} \quad (1.62)$$

Esta serie se conoce como *serie de Dyson* para $\mathcal{U}_I(t, t_0)$. Notemos que aquí se ve la potencia de la representación de interacción: al quedar escrito el operador \mathcal{U}_I sólo en términos $V(t)$ nos permite realizar el desarrollo perturbativo en potencias del potencial. Si hubiéramos trabajado en el esquema de Schrödinger, el operador de evolución \mathcal{U} se escribe en una expresión análoga pero en términos del Hamiltoniano completo, lo cual complica la expansión perturbativa.

La serie de Dyson puede escribirse de manera compacta como

$$\mathcal{U}_I(t_0, t) = \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \right) \quad (1.63)$$

donde hemos definido el operador de orden temporal de forma tal que

$$\mathcal{T} [A(t_1)A(t_2) \cdots A(t_n)] = A(t_{i_1})A(t_{i_2}) \cdots A(t_{i_n}), \quad t_{i_1} > t_{i_2} > \cdots > t_{i_n}, \quad (1.64)$$

es decir, que ordena los operadores sobre los que actúa de manera que el argumento temporal de los operadores correspondientes *decrece* a medida que nos movemos desde izquierda a derecha. Si dos tiempo coinciden no es un problema, ya que en ese caso el operador conmuta con sí mismo.

1.5. Probabilidad de Transición

Volviendo a las probabilidades de transición (1.38) y (1.39), pueden ahora evaluarse utilizando $\mathcal{U}_I(t, t_0)$ [ver (1.57)] en la representación de interacción. Primero tomamos la evolución temporal del estado inicial:

$$|i(t)\rangle_I = \mathcal{U}_I(t, t_0)|i\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \mathcal{U}_I(t, t_0) | i \rangle. \quad (1.65)$$

De modo que aquí $\langle n | \mathcal{U}_I(t, t_0) | i \rangle$ no es otra cosa que los coeficientes $c_n(t)$ en (1.29),

$$c_n(t) = \langle n | \mathcal{U}_I(t, t_0) | i \rangle, \quad (1.66)$$

y esta es la expresión que utilizaremos para evaluar las amplitudes $c_n(t)$ dado que contamos con un desarrollo perturbativo para $\mathcal{U}_I(t, t_0)$. Al insertar la expansión (1.56) y las expresiones para los coeficientes que se obtienen de la serie de Dyson (1.62) obtenemos:

$$\begin{aligned} c_n^{(0)}(t) &= \delta_{in} \\ c_n^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n | V_I(t') | i \rangle = \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} V_{ni}(t') \\ c_n^{(2)}(t) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' e^{i\omega_{nm}t'} V_{nm}(t') e^{i\omega_{mi}t''} V_{mi}(t''), \end{aligned} \quad (1.67)$$

donde las frecuencias están definidas por (1.35)

$$\hbar\omega_{ni} = E_n - E_i. \quad (1.68)$$

y

$$V_{ni} = \langle n | V | i \rangle \quad (1.69)$$

son los elementos de matriz de la perturbación ente los estados final e inicial. Las probabilidades de transición se obtienen de tomar el módulo cuadrado,

$$P_{i \rightarrow n}(t) = |c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots|^2 \quad (1.70)$$

1.6. Primer orden perturbativo

Consideremos un estado final con $n \neq i$ de manera que $c_n^{(0)}(t)$ no contribuye. La probabilidad de transición en el orden más bajo está dada entonces por:

$$P_{i \rightarrow n}(t) = |c_n^{(1)}(t)|^2 = \left| \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} V_{ni}(t') \right|^2. \quad (1.71)$$

Vamos a explorar las consecuencias es esta expresión.

1.6.1. Potencial constante

Para calcular la probabilidad de transición tenemos que conocer el potencial $V(t')$ para $t_0 < t' < t$. Consideremos primero una perturbación constante que comienza a actuar en $t_0 = 0$ ³:

$$V(t) = \begin{cases} 0 & \text{para } t < 0 \\ V & \text{(independiente de } t \text{) para } t > 0 \end{cases} \quad (1.72)$$

Insertando (1.72) en (1.71) encontramos:

$$P_{i \rightarrow n}(t) = \left| \frac{V_{ni}}{\hbar\omega_{ni}} (1 - e^{i\omega_{ni}t}) \right|^2 = \frac{|V_{ni}|^2}{|\hbar\omega_{ni}|^2} (2 - 2 \cos \omega_{ni}t) \quad (1.73)$$

$$= \frac{4}{\hbar^2} \left(\frac{\sin \omega_{ni}t/2}{\omega_{ni}} \right)^2 |V_{ni}|^2 \quad (1.74)$$

Esta probabilidad depende del elemento de la matriz de V entre los estados inicial y final, que a su vez función de todas las propiedades del estado final $|n\rangle$, por ejemplo, su cantidad de movimiento, spin, etc. Además depende de la diferencia de energía $E_n - E_i = \hbar\omega_{ni}$ entre ambos estados.

1.6.2. Perturbaciones armónicas

Otro caso de interés es el de una perturbación armónica de la forma

$$V(t) = V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t} \quad (1.75)$$

y supongamos que la perturbación comienza en $t_0 = 0$. Este caso tiene aplicaciones, por ejemplo, a la interacción de momentos magnéticos o átomos con campos electromagnéticos. De (1.67) obtenemos

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} (V_{ni} e^{i\omega t'} + V_{ni}^\dagger e^{-i\omega t'}) \quad (1.76)$$

donde $V_{ni}^\dagger \equiv (V^\dagger)_{ni} = V_{in}^*$. O sea que

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega_{ni} + \omega)t}}{\omega_{ni} + \omega} V_{ni} + \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t}}{\omega_{ni} - \omega} V_{ni}^\dagger \right] \quad (1.77)$$

Es fácil convencerse de que este último resultado es muy similar al que obtuvimos antes para el potencial constante. Para cualquier estado final dado n , ambos términos están presentes y contribuyen a la amplitud de transición, y cuando elevamos

³Generalmente el potencial V depende de operadores tales como \mathbf{r} , \mathbf{p} y \mathbf{S} , pero esa dependencia no nos interesa por el momento.

al cuadrado la amplitud para obtener la probabilidad de transición, hay términos cruzados (términos de interferencia) entre estas dos contribuciones a la amplitud.

A menudo, sin embargo, lo que más nos interesa son los estados finales a los que va la mayor parte de la probabilidad, que son los estados para los que uno u otro de los dos denominadores de la Ec. (1.77) es pequeño. Para estos estados tenemos que $\omega_{ni} \mp \omega \approx 0$, o

$$E_n \approx E_i \pm \hbar\omega \quad (1.78)$$

Vemos que el primer término (frecuencia positiva) es resonante cuando el sistema ha absorbido un cuanto de energía $\hbar\omega$ de la perturbación, mientras que el segundo término (frecuencia negativa) es resonante cuando el sistema ha cedido un cuanto de energía $\hbar\omega$ a la perturbación. Llamamos a estos dos casos *absorción* y *emisión estimulada*, respectivamente.

Tomando el caso de la absorción, y observando solo los estados finales $|n\rangle$ que están cerca de la resonancia ($E_n \approx E_i \pm \omega$), podemos escribir la probabilidad de transición a la teoría de la perturbación de primer orden como

$$P_{i \rightarrow n}^{\text{abs}} = \frac{t^2}{\hbar^2} \left[\frac{\sin(\omega_{ni} - \omega)t/2}{(\omega_{ni} - \omega)t/2} \right]^2 |V_{ni}|^2 \quad (1.79)$$

De manera similar, para estados finales casi resonantes en emisión estimulada, tenemos

$$P_{i \rightarrow n}^{\text{em ind}} = \frac{t^2}{\hbar^2} \left[\frac{\sin(\omega_{ni} + \omega)t/2}{(\omega_{ni} + \omega)t/2} \right]^2 |V_{ni}|^2 \quad (1.80)$$

Estas fórmulas se pueden comparar con la ecuación (1.74). En todos los casos, $P_{i \rightarrow n}$ tiene una dependencia temporal similar, con $\omega_{ni} \rightarrow \omega_{ni} \pm \omega$, lo que significa que el análisis que realizamos anteriormente sigue siendo válido.

1.6.3. Análisis de la dependencia temporal

Fijemos el estado final $|n\rangle$ y examinemos cómo se comporta la probabilidad $P_{i \rightarrow n}(t)$ como una función del tiempo a primer orden en teoría de perturbaciones dependiente del tiempo. Para ser específicos, tomaremos el caso de una perturbación independiente del tiempo y trabajaremos con la ecuación (1.74), pero con ω_{ni} reemplazado por $\omega_{ni} \pm \omega$, todo lo que decimos también se aplica a la absorción o emisión estimulada.

Obviamente $P_{i \rightarrow n}(0) = 0$ (porque $n \neq i$ y toda la probabilidad está en el estado $|i\rangle$ en $t = 0$). Posteriormente vemos que $P_{i \rightarrow n}(t)$ oscila a la frecuencia ω_{ni} entre 0 y un máximo proporcional a $1/\omega_{ni}$. La frecuencia ω_{ni} mide hasta qué punto el estado final está “fuera de resonancia”, es decir, cuánto difiere la energía final de la energía inicial. Si ω_{ni} es grande, la probabilidad $P_{i \rightarrow n}(t)$ oscila rápidamente entre cero y un

máximo pequeño. Pero a medida que acercamos el estado $|n\rangle$ al estado inicial $|i\rangle$ en energía, ω_{ni} se vuelve más pequeño, el período de oscilaciones se vuelve más largo y la amplitud crece.

Si hay un estado final $|n\rangle$ degenerado en energía con el estado inicial $|i\rangle$ (no el mismo estado ya que asumimos $n \neq i$), entonces $\omega_{ni} = 0$ y el factor dependiente del tiempo en la ecuación (1.74) toma su valor límite, que es:

$$\lim_{\omega_{ni} \rightarrow 0} P_{i \rightarrow n}(t) = \frac{t^2}{\hbar^2} |V_{ni}|^2. \quad (1.81)$$

En este caso, la teoría de perturbaciones de primer orden predice que la probabilidad $P_{i \rightarrow n}(t)$ crece sin límite con el tiempo, obviamente un absurdo ya que debemos tener $P_{i \rightarrow n} \leq 1$. Esto es una indicación del hecho de que para tiempos suficientemente largos la teoría de perturbaciones a primer orden falla y debemos tener en cuenta los términos de orden superior en la expansión perturbativa. De hecho, para obtener resultados sensatos para tiempos tan largos, es necesario tener en cuenta un número infinito de términos (es decir, hacer algún tipo de sum de la serie). Pero a tiempos cortos es correcto que $P_{i \rightarrow n}$ para un estado en resonancia crezca como t^2 .

1.6.4. Dependencia en energía

Ahora fijemos el tiempo t y examinemos cómo la expresión para $P_{i \rightarrow n}(t)$ depende de la energía del estado final $|n\rangle$ (trabajando por simplicidad con el caso de una perturbación independiente del tiempo). Nos concentraremos en la dependencia energética del factor dependiente del tiempo entre paréntesis, recordando que el elemento de la matriz también depende de la energía (y otros parámetros) del estado final. Para ello trazamos la función $\sin^2(\omega t/2)/\omega^2$ como función de ω , como se muestra en la Figura 1.3 para dos tiempos diferentes. En el gráfico, ω debe identificarse con $\omega_{ni} = (E_n - E_i)/\hbar$, de modo que ω especifica la energía del estado final y $\omega = 0$ es la condición de resonancia (conservación de energía).

La curva consta en una serie de oscilaciones bajo la envolvente $1/\omega^2$, con ceros en $\omega = 2n\pi/t$. El lóbulo central tiene una altura $t^2/4$ y un ancho proporcional a $1/t$, por lo que su área es proporcional a t .⁴ A medida que t aumenta, éste crece en altura y se vuelve más estrecho, de modo que para tiempos más largos, la probabilidad de transición a estados más alejados en energía decrece. Para tiempos grandes, la probabilidad $P_{i \rightarrow n}(t)$ es apreciable sólo cuando la frecuencia está dentro del pico

⁴De hecho, el área total viene dada exactamente por una integral que puede evaluarse:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\sin^2 \omega t/2}{\omega^2} = \frac{\pi t}{2}, \quad (1.82)$$

mostrando que el área es efectivamente proporcional a t

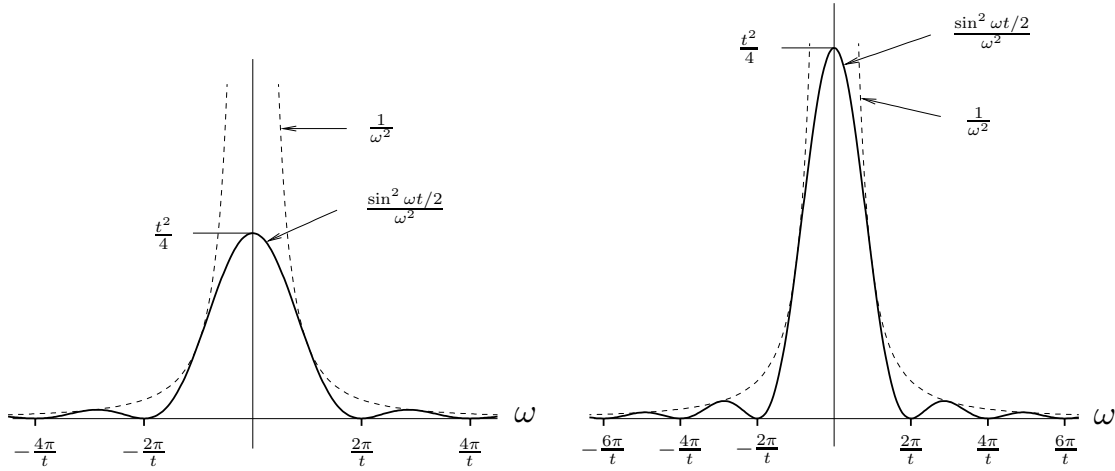


Figura 1.3:

central, es decir, para los estados finales que satisfacen

$$\omega < \frac{2\pi}{t}, \quad (1.83)$$

O bien, si identificamos a t con $t \rightarrow \Delta t$, llamando Δt al intervalo de tiempo durante el cual ha estado encendida la perturbación, la transición posee probabilidad apreciable sólo cuando

$$\Delta t \Delta E \sim \hbar, \quad (1.84)$$

donde $\Delta E = \hbar\omega_{ni}$ representa el cambio en energía involucrado en la transición. Si Δt es pequeño tenemos un pico más ancho, y como resultado podemos tener una cantidad importante de energía “no conservada”. Por otro lado, para tiempos largos tenemos un pico angosto y la energía se conserva aproximadamente para que la transición tenga probabilidad apreciable.⁵ Esto indica que un sistema que estuvo en interacción con un potencial $V(t)$ durante un intervalo de tiempo Δt tiene una energía que es incierta en una cantidad $\Delta E \gtrsim \hbar/\Delta t$.

El comportamiento en frecuencia para tiempos largos nos recuerda a las funciones que se aproximan a una función δ :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \left(\frac{\sin \omega t/2}{\omega} \right)^2 = \frac{\pi}{2} \delta(\omega) \quad (1.85)$$

Para $\omega \neq 0$ fijo, este límite tiende a 0 cuando $t \rightarrow \infty$, mientras que exactamente en $\omega = 0$ crece en proporción a t , con un área total constante. Si analizamos la

⁵Notar que esta “relación de incerteza” es fundamentalmente diferente de la relación de incerteza para x y p : en la mecánica cuántica no relativista tanto x como p son observables, mientras que t es un parámetro y no un observable.

probabilidad de transición (1.74), vemos que tenemos un factor t adicional, de modo que para t muy grande $P(t)$ crecerá lineal en el tiempo. Es usual definir entonces la probabilidad de transición por unidad de tiempo de manera que

$$P_{i \rightarrow n}(t) = \Gamma_{i \rightarrow n} t, \quad \text{para } t \rightarrow \infty \quad (1.86)$$

con

$$\Gamma_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{ni}|^2 \delta(\omega_{ni}). \quad (1.87)$$

En el caso del potencial armónico, esta ecuación se escribe

$$\Gamma_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{ni}|^2 \delta(\omega - \omega_{ni}). \quad (1.88)$$

Esta es la llamada **regla de oro de Fermi** y posee numerosas aplicaciones. Podría ser preocupante que apareciera una función δ , que es infinita en $\omega = \omega_{ni}$ lo que podría invalidar la teoría de perturbaciones. En la práctica esta función tiene que ser integrada por una razón u otra, y en general la validez de la fórmula a primer orden de perturbaciones depende del área bajo la función δ .

La función δ en la ecuación (1.85) impone la conservación de energía en el límite $t \rightarrow \infty$, es decir, en ese límite solo se permiten transiciones a estados finales de la misma energía que el estado inicial. En tiempos finitos se producen transiciones a estados en un rango de energías alrededor de la energía inicial del orden de $\Delta E \sim 1/t$.

Dicho de manera simple: si perturbamos un sistema físico con un potencial armónico de frecuencia ω , para tiempos muy largos (infinitos) vamos a inducir transiciones de estados iniciales $|i\rangle$ a estados finales $|n\rangle$ tales que $\omega = \pm(E_n - E_i)\hbar$, es decir que se conserva la energía. Sin embargo, a tiempos más cortos, también es probable inducir transiciones a estados $|n\rangle$ que que no la conserven.

1.6.5. Estados finales en el continuo

Las consideraciones anteriores son importantes cuando el sistema tiene un espectro discreto, por ejemplo, cuando un espín interactúa con un campo magnético periódico o cuando observamos algunos estados discretos de un átomo en presencia de luz láser. Por otro lado, si los estados finales son miembros de un continuo, entonces hay un número infinito de estados finales arbitrariamente cercanos al estado final en energía.

Dado un espectro de energía E_n , llamemos $N(E)$ al número de estados con energía menor o igual a E . Entonces, el número de estados que poseen energía dentro de un intervalo dE es

$$dN = N(E + dE) - N(E) = \frac{dN(E)}{dE} dE \equiv \rho(E) dE. \quad (1.89)$$

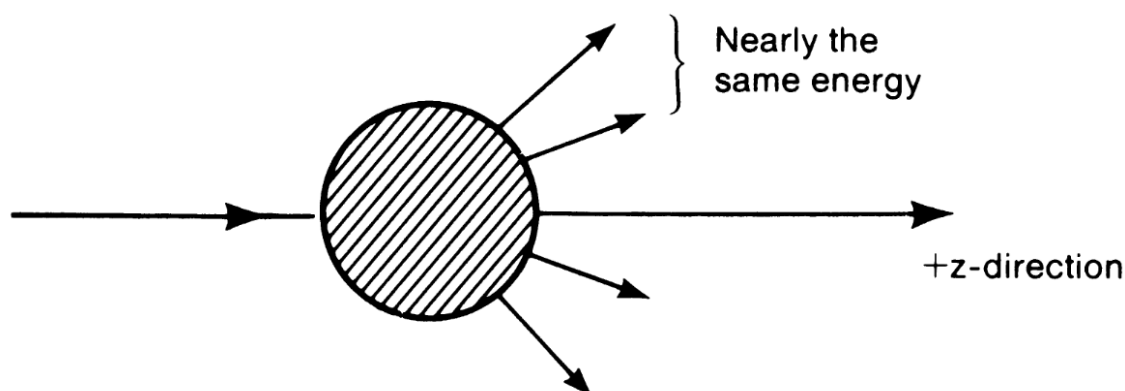


Figura 1.4: Dispersión elástica de una onda plana por un potencial de rango finito.

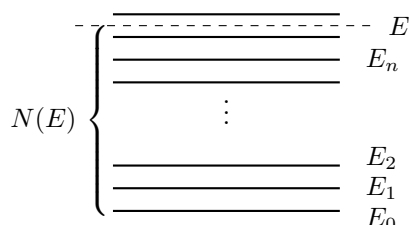


Figura 1.5: Niveles de energía E_n . $N(E)$ representa el número de niveles con energía menor a E

donde $\rho(E) = dN(E)/dE$ es la densidad de estados. Observemos que podemos escribir

$$N(E) = \sum_n \Theta(E_n - E) \quad (1.90)$$

y entonces la densidad de estados resulta

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E_n - E) \quad (1.91)$$

Para obtener la probabilidad de transición entre un estado i y los posibles estados finales n cercanos en energía, debemos sumar (integrar) sobre todos estos estados finales próximos en energía. Dado que la probabilidad sólo es apreciable par estados cercanos a n no nos equivocamos por mucho si sumamos sobre todos los estados finales y consideramos:

$$P_i(t) = \sum_n P_{i \rightarrow n}(t) \quad (1.92)$$

Para evaluar la suma, multiplicamos por

$$1 = \int dE \delta(E - E_n) \quad (1.93)$$

que nos permite reemplazar las energías E_n de las que depende el coeficiente c_n por la variable de integración E . Luego

$$P_i(t) = \sum_n P_{i \rightarrow n}(t) = \int dE_n \rho(E_n) |c_n(t)|^2 \quad (1.94)$$

Si tomamos ahora el caso de la perturbación constante a tiempos largos, reemplazamos (??) entonces

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sum_n P_{i \rightarrow n}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{2\pi t}{\hbar} \int dE_n \delta(E_n - E_i) |V_{ni}|^2 \quad (1.95)$$

$$= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{2\pi t}{\hbar} |V_{ni}|^2 \rho(E_i) \quad (1.96)$$

$$(1.97)$$

En este límite ya vimos que hay transiciones si la energía del estado final es igual a la del inicial. Finalmente escribimos

$$\sum_n P_{i \rightarrow n}(t) \equiv \Gamma_i t \quad (1.98)$$

donde

$$\Gamma_i = \frac{2\pi}{\hbar} \left[|V_{ni}|^2 \rho(E_n) \right]_{E_n=E_i} \quad (1.99)$$

es la probabilidad de transición por unidad de tiempo.

1.6.6. Conexión adiabática

En (1.71) hemos supuesto que la interacción es “conectada” de repente en $t_0 = 0$. En muchas situaciones es más realista pensar que el potencial crece suavemente. Por ejemplo, si hacemos incidir un haz de luz sobre un átomo, el frente de onda al llegar no está perfectamente bien delineado y generalmente la amplitud demora un cierto tiempo para alcanzar su valor estacionario final. Durante ese tiempo los electrones del átomo pueden efectuar muchas rotaciones orbitales, de tal modo que la luz, con respecto al átomo es “conectada” lentamente ó adiabáticamente. Una manera de representar esa situación es escribir⁶

$$V(t) = V e^{\varepsilon t} \quad (1.100)$$

⁶Es interesante desarrollar el formalismo con $V(t) = V e^{-\varepsilon|t|}$, en lugar de (1.100). Nótese que conexión adiabática representa una herramienta matemática que genera los autoestados exactos del sistema a partir de los estados no perturbados.

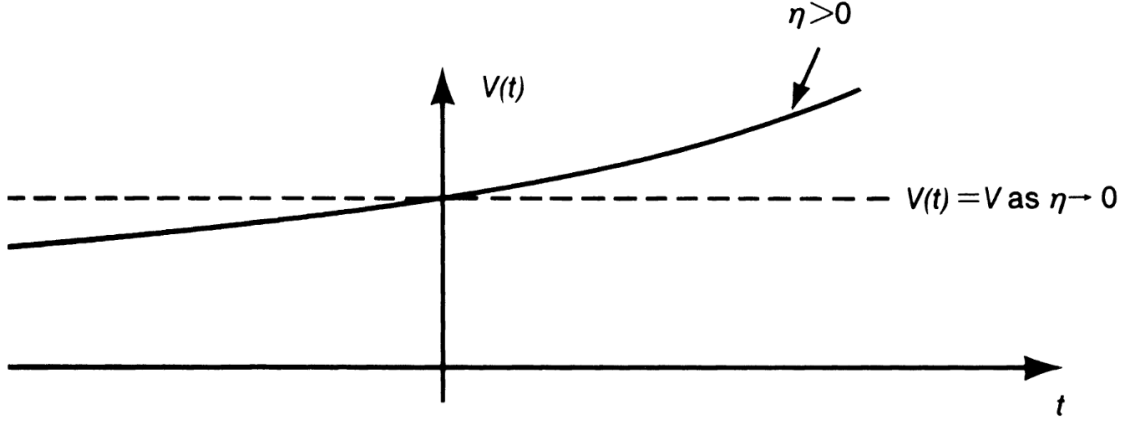


Figura 1.6: Variación de $V(t)$ en el caso adiabático.

donde ε es una cantidad pequeña y positiva. Supondremos, además, que la transición tiene lugar en un tiempo tal que (ver la Figura 1.6

$$-\varepsilon^{-1} \lesssim t \lesssim \varepsilon^{-1}. \quad (1.101)$$

Al final del cálculo hacemos $\varepsilon \rightarrow 0$ de tal modo que el potencial crezca muy lentamente.

De (1.67) tenemos

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{iV_{in}}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} e^{\varepsilon t'} \quad (1.102)$$

Para $t \lesssim -\varepsilon^{-1}$, $e^{\varepsilon t}$ se hace muy pequeño y podemos reemplazar t_0 por $-\infty$, o sea

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{iV_{ni}}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} e^{\varepsilon t'} \quad (1.103)$$

Integrando esta última se tiene

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{e^{\varepsilon t + i\omega_{ni}t}}{\hbar(-\omega_{ni} + i\varepsilon)} V_{ni} \quad (1.104)$$

y la probabilidad de transición es:

$$P_{i \rightarrow n}(t) = |c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{e^{2\varepsilon t}}{(E_n - E_i)^2 + (\varepsilon\hbar)^2} |V_{ni}|^2. \quad (1.105)$$

De la Figura 1.7 vemos que la forma de la probabilidad, en función de E_n , es muy parecida a la que tenía (1.72). El rango de energías finales es $\Delta E \leq \varepsilon\hbar$ y ε^{-1} mide el tiempo durante el cual ha actuado el potencial.

Figura 1.7: Probabilidad de transición en primer orden perturbativo para un potencial que es “conectado” adiabáticamente.

Derivando (1.105) con respecto a t , obtenemos:

$$\Gamma_{i \rightarrow n}(t) = e^{2\varepsilon t} \frac{2\varepsilon}{(E_n - E_i)^2 + (\varepsilon\hbar)^2} |V_{ni}|^2. \quad (1.106)$$

Tomando ahora el límite $\varepsilon \rightarrow 0$, será $e^{2\varepsilon t} \rightarrow 1$ y

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Gamma_{i \rightarrow n} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2\varepsilon}{(E_n - E_i)^2 + (\varepsilon\hbar)^2} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_n) \quad (1.107)$$

que nos lleva al resultado (1.87) que habíamos obtenido antes cuando el potencial era “conectado” de repente. Vemos por lo tanto que la probabilidad de transición $\Gamma(i \rightarrow n)$ no depende de los detalles de cómo actúa el potencial.

1.6.7. Dispersión por un potencial

Como ejemplo de la aplicación de regla de oro, consideramos el problema la dispersión de una partícula por un potencial $V(\mathbf{r})$ de rango finito que se ilustra en la Figura 1.4. El estado inicial es una onda plana que se propaga según el eje z . Los estados finales también son ondas planas, que al ser la dispersión elástica poseen la misma energía que la onda incidente, pero se propagan –en general– en direcciones diferentes que la onda incidente. El Hamiltoniano no perturbado corresponde a una partícula libre y el potencial es tratado como una perturbación:

$$H = H_0 + V(r); \quad H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (1.108)$$

H_0 depende solo del impulso \mathbf{p} y por lo tanto la onda plana

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (1.109)$$

que describe a la partícula es autofunción simultánea del impulso y de la energía con autovalores \mathbf{p} y $\mathbf{p}^2/2m$, respectivamente, y está normalizada como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}/\hbar} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (1.110)$$

Recordemos también que

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'); & \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| &= 1 \\ \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle &= \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'); & \int d\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| &= 1 \end{aligned} \quad (1.111)$$

Se suele introducir el impulso \mathbf{k} (en unidades de \hbar) y el correspondiente ket

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}; \quad |\mathbf{k}\rangle = (\hbar)^{3/2}|\mathbf{p}\rangle \quad (1.112)$$

con:

$$\langle\mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'); \quad \int d\mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| = 1 \quad (1.113)$$

La función de onda asociada es:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv \langle\mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (1.114)$$

Es posible evitar la introducción de las autofunciones continuas y forzar al problema a tener un espectro discreto, lo que es conveniente para contar el número de estados. Esto se consigue encerrando a la partícula dentro de una caja grande pero finita de volumen ℓ^3 e imponiendo condiciones de contorno periódicas⁷

$$\psi(0, y, z) = \psi(\ell, y, z), \quad \text{etc.} \quad (1.115)$$

Las autofunciones para este problema de autovalores se obtiene facilmente por medio de la separación de variables:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\ell^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.116)$$

donde las componentes de \mathbf{k} están dadas por:

$$k_x = \frac{2\pi}{\ell}n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{\ell}n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{\ell}n_z, \quad (1.117)$$

con $n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ Si

$$k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{2\pi}{\ell} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \equiv \frac{2\pi}{\ell}n, \quad (1.118)$$

los autovalores de energía de los estados (1.114) son:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{2\pi n}{\ell} \right)^2 \quad (1.119)$$

Cada triplete de números enteros (n_x, n_y, n_z) corresponde a una onda plana o a un estado de la partícula en el espacio $\mathbf{k} \equiv (k_x, k_y, k_z)$. Notar que cuando $\ell \rightarrow \infty$, k_x, k_y

⁷Dado que un sistema físico real está siempre en algún sentido localizado, la introducción de un contenedor con dimensiones suficientemente grandes, en comparación con las que son relevantes para el sistema considerado, no afectará al sistema en forma significativa. Es decir que podemos tener dentro de una caja una "onda plana física", si la caja es muy grande en comparación con la longitud de onda de la partícula.

y k_z se transforman en variables continuas. Nos interesa saber el número de estados dN en el intervalo $d\mathbf{k}$ y el problema de contarlos se reduce a contar el número de sitios en una red tridimensional en el espacio (n_x, n_y, n_z) . Será⁸:

$$dN = dn_x dn_y dn_z \equiv n^2 d\Omega dn = \left(\frac{\ell}{2\pi}\right)^3 k^2 dk d\Omega = \left(\frac{\ell}{2\pi}\right)^3 \frac{mk}{\hbar^2} dE d\Omega \quad (1.120)$$

y

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \left(\frac{\ell}{2\pi}\right)^3 \int k^2 dk d\Omega = \left(\frac{\ell}{2\pi}\right)^3 \int \frac{mk}{\hbar^2} dE d\Omega \quad (1.121)$$

$$\frac{1}{\ell^3} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \quad (1.122)$$

Vamos a evaluar ahora la probabilidad de transición Γ dentro de un pequeño ángulo sólido $d\Omega'$:

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}' \text{ en } d\Omega'} \Gamma_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}; \quad \Gamma_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}). \quad (1.123)$$

De (1.114)

$$\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle = \int d\mathbf{r} \frac{e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}}{\ell^{3/2}} V(\mathbf{r}) \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{\ell^{3/2}} = \frac{1}{\ell^3} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} = \frac{V_{\mathbf{k} - \mathbf{k}'}}{\ell^3} \quad (1.124)$$

donde $V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}$ es la transformada de Fourier de $V(\mathbf{r})$. Haciendo la sustitución

$$\sum_{\mathbf{k}' \text{ en } d\Omega'} \rightarrow d\Omega' \int_0^\infty \left(\frac{\ell}{2\pi}\right)^3 \frac{mk}{\hbar^2} dE. \quad (1.125)$$

obtenemos de (1.123):

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = \frac{d\Omega'}{\ell^3} \frac{mk}{4\pi^2 \hbar^3} |V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}|^2, \quad (1.126)$$

donde \mathbf{k}' es un vector en $d\Omega'$ de longitud k . Dividiendo finalmente por el flujo de partículas incidentes $\hbar k/m\ell^3$ se obtiene la sección eficaz⁹:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega'} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} |V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}|^2 \quad (1.127)$$

⁸Esto equivale a tomar un estado por cubo $d\mathbf{r}d\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3$ en el espacio de las fases.

⁹La densidad de las de partículas incidentes es ℓ^{-3} (una partícula en el volumen ℓ^3) y su velocidad es $\hbar k/m$.

1.7. Transiciones de segundo orden

Puede darse que, por alguna regla de selección, los elementos de matriz $V_{ni}(t)$ se anulen para todo t . En tal situación no podemos tener transiciones de primer orden entre los estados $|i\rangle$ y $|n\rangle$. Es posible, sin embargo, que la transición ocurra en un orden superior. Vamos a estudiar en detalles el segundo orden perturbativo, suponiendo que el potencial es “conectado” lentamente. De (1.34) tenemos

$$c_n^{(2)}(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' e^{i\omega_{nm}t' + \varepsilon t'} V_{nm} e^{i\omega_{mi}t'' + \varepsilon t''} V_{mi} \quad (1.128)$$

Haciendo $t_0 \rightarrow -\infty$ en las integrales sobre t' y t'' resulta [ver (1.104)]

$$c_n^{(2)}(t) = \frac{e^{2\varepsilon t + i\omega_{ni}t}}{\hbar(-\omega_{ni} + i2\varepsilon)} \sum_m \frac{V_{nm}V_{mi}}{\hbar(-\omega_{mi} + i\varepsilon)} \quad (1.129)$$

Para calcular la probabilidad de transición podemos directamente tomar el cuadrado de esta expresión, ya que $V_{ni} = 0$. Si aquí también suponemos que $|n\rangle$ está en el continuo, luego de derivar, llegamos a la versión de la **Regla de Oro en segundo orden perturbativo**

$$\Gamma_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_m \frac{V_{nm}V_{mi}}{E_i - E_m + i\hbar\varepsilon} \right|^2 \delta(E_i - E_n) \quad (1.130)$$

donde el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ se da por sobreentendido.

Podemos interpretar este resultado diciendo que el sistema hace una transición “prohibida” o virtual de $|i\rangle$ a $|n\rangle$ en dos pasos. Primero va de $|i\rangle$ a un estado intermedio $|m\rangle$ (que no necesita tener la misma energía que $|i\rangle$) para pasar luego de $|m\rangle$ a $|n\rangle$. La amplitud de esta transición doble es proporcional a $V_{nm}V_{mi}/(E_i - E_m + i\hbar\varepsilon)$. Para evaluar la probabilidad de transición tenemos que sumar sobre todos los estados intermedios antes de elevar al cuadrado, con lo que las diferentes contribuciones frecuentemente interfieren entre sí. A la amplitud

$$\sum_m \frac{V_{nm}V_{mi}}{E_i - E_m + i\hbar\varepsilon} \quad (1.131)$$

se la llama *elemento de matriz de segundo orden* ya que juega, en la regla de oro, el mismo papel que V_{ni} . Cuando $|m\rangle$ es parte del continuo el término $i\hbar\varepsilon$ es muy importante en la evaluación del elemento de matriz en la región $E_m \approx E_i$. Finalmente, de (1.56), vemos de inmediato que, si $V_{ni} \neq 0$, la expresión para la probabilidad de transición contiene el término de segundo orden sumado a V_{ni} , todo elevado al cuadrado y multiplicado por $(2\pi/\hbar)\delta(E_i - E_n)$.

1.8. Decaimiento del estado inicial

Hasta aquí nos hemos ocupado de la evolución temporal de las amplitudes $c_n(t)$ con $n \neq i$. La pregunta que surge naturalmente es: ¿qué ocurre con la amplitud $c_i(t)$? De (1.34) tenemos

$$i\hbar\dot{c}_i(t) = V_{ii}(t)c_i(t) + \sum_{n \neq i} V_{in}(t)e^{i\omega_{in}t}c_n(t) \quad (1.132)$$

que luego de dividir por $c_i(t)$ nos conduce a

$$i\hbar\frac{d}{dt}\ln c_i(t) = V_{ii} + \sum_{n \neq i} V_{in}e^{i\omega_{in}t}c_n(t)/c_i(t) \quad (1.133)$$

Haciendo, del lado derecho, las aproximaciones: $c_n(t) \approx c_n^{(1)}(t)$; $c_i(t) \approx 1$, y usando el potencial (1.100) y $c_n^{(1)}(t)$ dado por (1.104), se tiene

$$i\hbar\frac{d}{dt}\ln c_i(t) = V_{ii}e^{\varepsilon t} + \sum_{n \neq i} \frac{|V_{in}|^2 e^{2\varepsilon t}}{\hbar(-\omega_{ni} + i\varepsilon)} \quad (1.134)$$

que para $\varepsilon \rightarrow 0$ (o sea reemplazando $e^{\varepsilon t}$ y $e^{2\varepsilon t}$ por 1) lleva a

$$i\hbar\frac{d}{dt}\ln c_i(t) = \Delta_i; \quad \Delta_i = V_{ii} + \sum_{n \neq i} \frac{|V_{in}|^2}{E_i - E_n + i\varepsilon\hbar} \quad (1.135)$$

Luego

$$c_i(t) = e^{-i\Delta_i t/\hbar}; \quad |i(t)\rangle_I = e^{-i\Delta_i t/\hbar}|i\rangle \quad (1.136)$$

Cuando los estados $|n\rangle$ son discretos, y el estado $|i\rangle$ no está degenerado, el término $i\varepsilon\hbar$ no tiene ningún efecto en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$. En esta situación Δ_i es precisamente la expresión para el corrimiento de energía, en segundo orden perturbativo, producido por una perturbación estacionaria V .

Comparando

$$|i(t)\rangle_S = e^{-i(E_i + \Delta_i)t/\hbar}|i\rangle \quad (1.137)$$

con el ket no perturbado (para $V(t) = 0$), $|i, t_0; t\rangle_S = e^{-iE_i t/\hbar}|i\rangle$, podemos concluir que, al conectar el potencial muy lentamente y cuando el espectro es discreto, los autoestados de H_0 se transforman adiabáticamente en autovalores de $H_0 + V(t)$. Es decir que la teoría de perturbaciones estacionarias pueden ser consideradas como un caso especial de la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo.

Supongamos ahora que el estado $|n\rangle$ es uno de los niveles del continuo con $E_n \approx E_i$. En tal caso la sumatoria en (1.135) hay que interpretarla como una integral, o sea: $\sum_{n \neq i} \rightarrow \int dE_n \rho(E_n)$, como se había hecho antes. Recordando, además, que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\varepsilon} = \text{Pr} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \quad (1.138)$$

podemos reescribir (1.135) en la forma

$$\operatorname{Re}(\Delta_i) = V_{ii} + \operatorname{Pr} \int dE_n \rho(E_n) \frac{|V_{in}|^2}{E_i - E_n}, \quad (1.139)$$

$$\operatorname{Im}(\Delta_i) = -\frac{\hbar\Gamma_i}{2} \quad (1.140)$$

con Γ_i dado por (??). En lugar de (1.137) tendremos

$$|i(t)\rangle_S = e^{-i[E_i + \operatorname{Re}(\Delta_i)]t/\hbar} e^{-\Gamma_i t/2} |i\rangle \quad (1.141)$$

Podemos interpretar este resultado diciendo que la perturbación produce:

1. Un desplazamiento del nivel original de E_i a $E_i + \operatorname{Re}(\Delta_i)$, como en el caso discreto, y
2. Una transición de $|i\rangle$ a $|n\rangle$ con la probabilidad de transición por unidad de tiempo igual a Γ_i .

También vemos que Γ_i caracteriza el decaimiento exponencial del estado inicial¹⁰.

Es interesante verificar la conservación de la probabilidad a segundo orden en V (para t pequeño). Como

$$c_i(t) = e^{-i\operatorname{Re}(\Delta_i)t/\hbar} e^{-\Gamma_i t/2}, \quad (1.142)$$

será $|c_i(t)|^2 = e^{-\Gamma_i t} \approx 1 - \Gamma_i t$. Luego

$$|c_i(t)|^2 + \sum_{n \neq i} |c_n(t)|^2 \approx 1 - \Gamma_i t + \Gamma_i t = 1. \quad (1.143)$$

Es decir que la probabilidad de hallar el sistema en cualquiera de los estados, incluyendo el inicial, es igual a 1. Nótese también que $1/\Gamma_i$ es la vida media del estado $|i\rangle$.

Vamos a mencionar finalmente la distribución en energía de los estados finales, una vez que el estado inicial haya decaído; es decir para $t \gg 1/\Gamma_i$ ¹¹. Con tal fin primero obtendremos una nueva aproximación para las amplitudes $c_n(t)$, haciendo de nuevo uso de la ecuación de movimiento (1.34). Pero en lugar de poner del lado izquierdo $c_n(t) \equiv c_n^{(0)}(t) = \langle n|i\rangle = \delta_{ni}$, como se hizo para llegar al resultado (1.67), usaremos $c_n(t) = c_n^{(0)}(t) = \langle n|i\rangle = \delta_{ni}$, con los $c_i(t)$ dado por (1.126). Para un potencial constante resulta

$$c_n(t) = \frac{-i}{\hbar} V_{ni} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} c_i(t') \quad (1.144)$$

¹⁰Se puede decir que el estado $|i, t_0; t\rangle_S$ tiene una energía compleja igual a $\tilde{E}_i = E_i + \operatorname{Re}(\Delta_i) - i\hbar\Gamma_i/2$.

¹¹La descripción cuántica de estados inestables que se presenta aquí fué desarrollada originalmente por Wigner y Weisskopf en 1930.

Figura 1.8: Forma de la distribución en energía de los estados finales una vez que haya decaído el estado inicial.

$$= V_{ni} \frac{1 - e^{-\Gamma_i t/2} e^{i[E_n - E_i - \text{Re}(\Delta_i)]t/\hbar}}{E_n - E_i - \text{Re}(\Delta_i) + i\Gamma_i/2} \quad (1.145)$$

que para $t \gg 1/\Gamma_i$ conduce a¹²:

$$P_{i \rightarrow n}(t \rightarrow \infty) = \frac{|V_{ni}|^2}{[E_n - E_i - \text{Re}(\Delta_i)]^2 + \Gamma_i^2/4} \quad (1.146)$$

La distribución en energía de los estados finales, $P_{i \rightarrow n}(t \rightarrow \infty)$, está representada en la Figura 1.8. Vemos que el máximo está en $E_n = E_i - \text{Re}(\Delta_i)$ y que tiene forma Lorentziana con un ancho igual a Γ_i .

1.9. Interacción del campo electromagnético clásico con un sistema de partículas cargadas

Consideremos un sistema de partículas cargadas, por ejemplo electrones, contenidos en cierta región del espacio en interacción con una onda electromagnética clásica. Los campos ϕ y \mathbf{A} se consideran *externos* y obedecen las ecuaciones clásicas de Maxwell. En la aproximación semiclassical que utilizaremos las partículas en cuestión no son fuentes para esos campos, y dentro del volumen de nuestro sistema, a efectos de las ecuaciones de Maxwell, podemos considerar que las fuentes son nulas. Es conveniente además trabajar en el *gauge* transversal de Coulomb en el cual

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.147)$$

y $\phi(\mathbf{r}, t) = 0$ en ausencia de cargas¹³ En este gauge, y en ausencia de cargas y corrientes, las ecuaciones de Maxwell se reducen a la ecuaciones de onda,

$$\square^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \equiv \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.149)$$

cuya solución es la onda plana

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = a \boldsymbol{\epsilon} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t} + a^* \boldsymbol{\epsilon}^* e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + i\omega t} \quad (1.150)$$

¹²Antes, con $c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}$, habíamos obtenido: $c_n(t) = V_{ni} (1 - e^{i(E_n - E_i)t/\hbar}) / (E_n - E_i)$

¹³En el *gauge* transversal de Coulomb: $\nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) = -4\pi \rho(\mathbf{r}, t)$, que tiene como solución el potencial instantáneo de Coulomb

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (1.148)$$

con frecuencia

$$\omega = ck \quad (1.151)$$

mientras que el vector de polarización ϵ , para satisfacer (1.147), tiene que ser tal que:

$$\epsilon \cdot \mathbf{k} = 0, \quad (1.152)$$

es decir, la onda debe ser transversal. Siempre podemos elegir $|\epsilon|^2 = 1$.¹⁴ La amplitud a es una constante y como el potencial vector tiene que ser real tenemos que agregar al primer término en (1.150) su complejo conjugado.

Los campos eléctricos y magnéticos se obtienen a partir de $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ en la forma:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (1.154)$$

La densidad de la energía de la radiación radiación es

$$U(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t) + \mathbf{B}^2(\mathbf{r}, t)}{8\pi} \quad (1.155)$$

que para la onda (1.150) resulta:

$$U = \frac{\omega^2}{2\pi c^2} \left[|a|^2 - \text{Re} \left(a^2 \epsilon^2 e^{2i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - 2i\omega t} \right) \right] \quad (1.156)$$

El último término oscila con el tiempo y su promedio es nulo para un período. Luego

$$U = \frac{\omega^2}{2\pi c^2} |a|^2 \quad (1.157)$$

Lo mismo ocurre con el vector de Poynting (flujo de energía: energía transportada por unidad de área y de tiempo):

$$\mathbf{P} = \frac{c}{4\pi} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \check{\mathbf{k}} c U = \check{\mathbf{k}} \frac{\omega^2}{2\pi c} |a|^2, \quad (1.158)$$

que se propaga en la dirección $\check{\mathbf{k}}$ con la velocidad c .

¹⁴Para una polarización lineal ϵ es real y $\epsilon_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{x} \pm i\check{y})$ corresponde a una polarización circular derecha (+) o izquierda (-). Notemos también que si $\epsilon = \epsilon_+$, será $\epsilon^* = \epsilon_-$, como que:

$$\epsilon_{\pm} \cdot \epsilon_{\pm}^* = 1; \quad \epsilon_{\pm} \cdot \epsilon_{\pm} = \epsilon_{\pm}^* \cdot \epsilon_{\pm}^* = 0 \quad (1.153)$$

Consideremos el Hamiltoniano de un sistema de N partículas cargadas de masa m y carga e ¹⁵ en un campo electromagnético, representado por el potenciales (ϕ, \mathbf{A}) ¹⁶:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \left[\mathbf{p}_i - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t)}{c} \right]^2 + \sum_{i=1}^N e\phi(\mathbf{r}_i, t). \quad (1.159)$$

Enfaticemos que si bien las partículas son objetos cuánticos ya que sus posiciones y momentos están representadas por operadores \mathbf{r}_i y \mathbf{p}_i , el campo electromagnético es clásico, es decir, obedece las ecuaciones clásicas de Maxwell. No obstante, las cantidades $\mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t)$ y $\phi(\mathbf{r}_i, t)$ en la expresión anterior son operadores por depender de las posiciones y momentos de las partículas.

Vamos a utilizar además una aproximación en la que \mathbf{A} es pequeño y quedarnos con el término lineal en el potencial vector, de manera que si denotamos

$$H_0 = \sum_i^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} \quad (1.160)$$

entonces el Hamiltoniano de interacción se escribe

$$V(t) = \frac{1}{2m} \left[\mathbf{p}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t) \right]^2 - H_0 \quad (1.161)$$

$$= - \sum_i \frac{e}{2mc} [\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t) + \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t) \cdot \mathbf{p}_i] + \mathcal{O}(A^2) \quad (1.162)$$

$$= - \frac{e}{c} \int d\mathbf{r} \frac{1}{2m} \sum_i [\mathbf{p}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{p}_i] \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \mathcal{O}(A^2) \quad (1.163)$$

$$= - \frac{e}{c} \int d\mathbf{r} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (1.164)$$

donde hemos definido el operador corriente en la forma

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i}{m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \frac{\mathbf{p}_i}{m} \right] \quad (1.165)$$

Este operador es la suma de términos que representan la velocidad de las partículas multiplicadas por los operadores densidad $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$. Debido a la forma simétrica de (1.165), $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ es un operador hermítico. Observemos que $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t) \neq \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t) \cdot \mathbf{p}$, y lo mismo vale para ambos términos en la corriente. Solo en el *gauge* transversal de Coulomb, para el cual vale (1.147), tendremos que $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p}$. Nótese además que en la ecuación (1.164) $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ no es más un operador ya que todos los operadores de posición \mathbf{r}_i están contenidos en $\mathbf{j}(\mathbf{r})$

¹⁵El electron posee carga $e < 0$.

¹⁶Se podría incluir también un potencial U que describiera a todos los demás potenciales que ven las partículas, por ejemplo, los que mantienen al sistema en un volumen finito, o si se tratara de electrones en átomos, las interacción Coulombianas con el núcleo atómico, o incluso entre electrones del mismo o de diferentes átomos.

1.9.1. Absorción de la luz

Para fuentes luminosas usuales los campos eléctricos generados por \mathbf{A} son generalmente pequeños comparados con los campos atómicos ($\sim e/a_0^2$). En esta situación el efecto del término $\rho\mathbf{A}^2$, de segundo orden en \mathbf{A} , es pequeño comparado con el efecto de $\mathbf{j} \cdot \mathbf{A}$ y podemos despreciarlo en el cálculo de la absorción de la luz por un sistema de partículas cargadas, tales como átomos. En tal caso:

$$V(t) = -\frac{e}{c} \int d\mathbf{r} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (1.166)$$

Si representamos a $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ por una ondas planas como en (1.150) el potencial resulta

$$V(t) = -\frac{e}{c} \left(a\mathbf{j}_{-\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} e^{-i\omega t} + a^*\mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* e^{i\omega t} \right) \quad (1.167)$$

donde

$$\mathbf{j}_{\mathbf{k}} \equiv \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \frac{\mathbf{p}_i}{m} \right). \quad (1.168)$$

son los operadores. Vamos a calcular ahora la probabilidad de que un haz de luz, representado por (1.150), sea absorbido por el sistema, que está en un estado $|i\rangle$.

Vemos de inmediato que cada sumando de $V(t)$ es de la forma (1.75) con

$$\begin{aligned} -\frac{e}{c} a^* \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* &\rightarrow V \\ -\frac{e}{c} a \mathbf{j}_{-\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} &\rightarrow V^\dagger \end{aligned} \quad (1.169)$$

Luego, podemos utilizar los resultados (1.79) y (1.80), que para tiempos grandes nos devuelven

$$\Gamma_{i \rightarrow n}^{\text{abs}}(\mathbf{k}\boldsymbol{\epsilon}) = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \frac{e^2}{c^2} |a|^2 |\langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* | i \rangle|^2 \quad (1.170)$$

En general la radiación no es monocromática (con una única ω) sino una mezcla incoherente de ondas con distintos $\boldsymbol{\epsilon}$, \mathbf{k} y ω . Supongamos entonces una superposición de ondas planas de la forma (1.150) donde cada modo posee su propia amplitud. Supondremos que el haz es incoherente de tal modo de que no exista ninguna correlación entre las diferentes componentes de Fourier del haz. Por ejemplo, la luz emitida por un gas caliente, tal como el vapor de mercurio, resulta de las contribuciones de todos los átomos del gas, entere cuyas componentes no hay ningún tipo de correlación. (Se dice que la *distribución de fases es al azar*.) En esta situación podemos calcular el efecto de cada una de las componentes de Fourier del haz incidente por separado y luego sumar sobre todas las contribuciones. (No hay efectos de interferencia en la interacción de la luz con el átomo.)

Sumando ahora sobre todos los modos $\{\mathbf{k}\epsilon\}$ obtenemos:

$$\Gamma_{i \rightarrow n}^{\text{abs}} = \frac{1}{V} \frac{e^2}{c^2} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} |a_{\mathbf{k}\epsilon}|^2 |\langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* | i \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \quad (1.171)$$

Transformando la suma sobre \mathbf{k} en una integral, como se hizo en (1.121),

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} = \int \frac{k^2 dk d\Omega}{(2\pi)^3} = \int \frac{\omega^2 d\omega d\Omega}{(2\pi c)^3}, \quad (\omega = ck) \quad (1.172)$$

realizando la integral en ω resulta:

$$\Gamma_{i \rightarrow n}^{\text{abs}} = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2 c^2} \frac{\omega^2}{(2\pi c)^3} \int d\Omega \sum_{\epsilon} |\langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* | i \rangle|^2 |a_{\mathbf{k}\epsilon}|^2 \quad (1.173)$$

donde ahora $\hbar\omega = E_n - E_i$.

Supongamos ahora que la luz incidente está polarizada según $\boldsymbol{\epsilon}$ y que está comprendida dentro de un ángulo sólido $d\Omega$. De (1.173) la correspondiente probabilidad de transición (diferencial) será:

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow n}^{\text{abs}}(\boldsymbol{\epsilon}) &= \frac{2\pi e^2}{\hbar^2 c^2} \frac{\omega^2}{(2\pi c)^3} |\langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* | i \rangle|^2 |a_{\mathbf{k}\epsilon}|^2 d\Omega \\ &= \frac{(2\pi)^2 e^2}{\hbar^2 \omega^2 c} |\langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* | i \rangle|^2 I(\omega) d\Omega, \end{aligned} \quad (1.174)$$

donde

$$I(\omega) = \frac{\omega^4}{(2\pi c)^4} |a_{\mathbf{k}\epsilon}|^2. \quad (1.175)$$

Es fácil ver que $I(\omega)$ es la intensidad de la luz incidente dentro de un ángulo sólido $d\omega$ por unidad de frecuencia. En efecto, según (1.158), y pasando al continuo de acuerdo a (1.172) el flujo de energía transportada es:

$$\frac{c}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\omega^2}{2\pi c^2} |a_{\mathbf{k}\epsilon}|^2 = \int d\Omega \int d\omega \frac{\omega^4}{(2\pi c)^4} |a_{\mathbf{k}\epsilon}|^2 = \int d\Omega \int d\omega I(\omega) \quad (1.176)$$

De una forma análoga se obtiene que la probabilidad de transición por unidad tiempo, inducida por el haz incidente desde el estado inicial $|n\rangle$ al estado final $|i\rangle$, es

$$\Gamma_{i \rightarrow n}^{\text{em.ind}}(\boldsymbol{\epsilon}) = \frac{(2\pi^2) e^2}{\hbar^2 \omega^2 c} |\langle i | \mathbf{j}_{-\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | n \rangle|^2 I(\omega) d\Omega \quad (1.177)$$

siendo aquí también $\omega = (E_n - E_i) / \hbar$. Notemos que, como

$$\langle i | \mathbf{j}_{-\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | n \rangle = \langle i | (\mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^*)^\dagger | n \rangle = \langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* | i \rangle^*, \quad (1.178)$$

será

$$\Gamma_{i \rightarrow n}^{\text{abs}} = \Gamma_{n \rightarrow i}^{\text{em.ind}} \quad (1.179)$$

o también

$$\Gamma_{i \rightleftharpoons n} = \frac{1}{V} \frac{e^2}{c^2} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} |a_{\mathbf{k}\epsilon}|^2 |\langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* | i \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \left\{ \begin{array}{l} \text{absorción} \\ \text{emisión estimulada} \end{array} \right\} \quad (1.180)$$

En un proceso de absorción el sistema absorbe un fotón de energía $\hbar\omega = E_n - E_i$. La energía ganada por el átomo es compensada por la correspondiente pérdida de energía del campo electromagnético. Análogamente en un proceso de emisión la energía del sistema disminuye en $\hbar\omega = E_n - E_i$, debido a la emisión de un fotón, y la energía del campo aumenta en la misma cantidad. Se dice que la emisión es estimulada o inducida ya que la probabilidad de que esto ocurra es proporcional a la intensidad de la radiación aplicada. Cada fotón en el haz incidente de frecuencia ω tiene una energía $\hbar\omega$. Luego la energía total del haz incidente es:

$$\mathcal{E} = \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \hbar\omega n_{\mathbf{k}\epsilon} \quad (1.181)$$

donde $n_{\mathbf{k}\epsilon}$ es el número de fotones en el modo $\{\mathbf{k}\epsilon\}$ del haz incidente. Comparando esta última expresión con la energía del campo electromagnético

$$\mathcal{E} = \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{\omega^2}{2\pi c^2} |a_{\mathbf{k}\epsilon}|^2 \quad (1.182)$$

vemos que la amplitud $a_{\mathbf{k}\epsilon}$ está relacionada con el número de fotones por

$$|a_{\mathbf{k}\epsilon}|^2 = \frac{2\pi \hbar c^2}{\omega} n_{\mathbf{k}\epsilon} \quad (1.183)$$

Luego en lugar de (1.180) podemos escribir

$$\Gamma_{i \rightleftharpoons n} = \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{4\pi^2 e^2}{\omega V} n_{\mathbf{k}\epsilon} |\langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* | i \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \quad (1.184)$$

Por medio de $n_{\mathbf{k}\epsilon}$ podemos expresar solamente la magnitud de $a_{\mathbf{k}\epsilon}$ y no su fase. Notemos también que suponer que el haz incidente es incoherente es equivalente a no tener ninguna información sobre las fases relativas de las diferentes $a_{\mathbf{k}\epsilon}$. Calcular los efectos de cada una de las componentes de Fourier y luego sumar sobre las diferentes componentes es equivalente a promediar sobre todas las posibles fases de los $a_{\mathbf{k}\epsilon}$. Es decir que para especificar un haz incoherente basta dar el número de fotones en cada modo $\{\mathbf{k}\epsilon\}$. En otras palabras, sí lo único que que sabemos sobre

un haz son los números $n_{\mathbf{k}\epsilon}$, no tenemos ninguna información sobre las fases entre las diferentes componentes de Fourier del haz¹⁷.

La probabilidad de transición total por unidad de tiempo producida por un haz de $n_{\mathbf{k}\epsilon}$ fotones incidentes será, de (1.184)

$$\Gamma_i^{\text{abs}}(\boldsymbol{\epsilon}; \omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{\omega c} \frac{cn_{\mathbf{k}\epsilon}}{V} \sum_n |\langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* | i \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \quad (1.185)$$

Dado que $n_{\mathbf{k}\epsilon}/V$ es la densidad de fotones, $cn_{\mathbf{k}\epsilon}/V$ es el flujo de fotones incidentes. El cociente entre $\Gamma_i^{\text{abs}}(\omega)$ y este flujo define la sección eficaz de absorción,

$$\sigma_i^{\text{abs}}(\boldsymbol{\epsilon}; \omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{\omega c} \sum_n |\langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* | i \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \quad (1.186)$$

que, además de depender de la frecuencia, depende de la dirección y polarización de la radiación.

1.10. Aproximación dipolar eléctrica

Si bien en la sección anterior consideramos un sistema de electrones libres acoplado a un campo electromagnético, podemos extrapolar los resultados a problemas más generales. La aproximación dipolar eléctrica se basa en el hecho de que la energía del campo de radiación $\hbar\omega = \hbar ck$ tiene que ser comparable, en magnitud, con la separación entre los niveles del sistema irradiado por el campo electromagnético. En un sistema atómico tendrá que satisfacerse:

$$\hbar\omega \sim \frac{Ze^2}{a_0/Z} \approx \frac{Ze^2}{R_{\text{átomo}}} \quad (1.187)$$

Esto conduce a:

$$k = \frac{\omega}{c} \sim \frac{Ze^2}{\hbar c R_{\text{átomo}}} = \frac{Z}{137 R_{\text{átomo}}} \quad (1.188)$$

o sea

$$k R_{\text{átomo}} = R_{\text{átomo}}/\lambda \sim Z/137, \quad (1.189)$$

donde $\lambda = 1/k$ es la longitud de onda del campo de radiación. Si ahora expandimos la exponencial $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ en la integral (1.168) con respecto a la posición del núcleo atómico $\mathbf{r}_0 = 0$, i.e.,

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 1 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + \dots \quad (1.190)$$

¹⁷En una descripción cuántica completa de la radiación, los $n_{\mathbf{k}\epsilon}$ y las fases de $a_{\mathbf{k}\epsilon}$ son cantidades complementarias (como el impulso y la posición) y cuanto mejor especificamos a una de ellas tanto menos información tenemos sobre la otra.

por lo menos para átomos livianos ($Z/137 \ll 1$) será

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \lesssim kR_{\text{átomo}} \ll 1 \quad (1.191)$$

Obtendremos por lo tanto resultados razonables si hacemos $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$, que es la *aproximación dipolar*. Resulta, entonces,

$$\langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} | i \rangle = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle n | \mathbf{j}(\mathbf{r}) | i \rangle \approx \int d\mathbf{r} \langle n | \mathbf{j}(\mathbf{r}) | i \rangle = \langle n | \mathbf{j}_0 | i \rangle \quad (1.192)$$

donde

$$\mathbf{j}_0 = \frac{\mathbf{P}}{m} = \frac{1}{-ei\hbar} [\mathbf{d}, H_0]. \quad (1.193)$$

Aquí, $\mathbf{P} = \sum_i \mathbf{p}_i$ es el operador de impulso total, H_0 es el Hamiltoniano del átomo en ausencia de la radiación [ver (1.160)] y $\mathbf{d} = -e \sum_i \mathbf{r}_i$ es el operador del momento dipolar eléctrico.

Luego, como $\hbar\omega = E_n - E_i$, en la aproximación dipolar será:

$$\langle n | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} | i \rangle \approx \frac{i\omega}{-e} \mathbf{d}_{ni}; \quad \mathbf{d}_{ni} = \langle n | \mathbf{d} | i \rangle \quad (1.194)$$

donde \mathbf{d}_{ni} es el elemento de matriz no-diagonal del *momento dipolar eléctrico*. La sección eficaz es ahora

$$\sigma_i^{\text{abs;dip}}(\lambda; \omega) = \frac{(2\pi)^2 \omega}{c} \sum_n |\mathbf{d}_{ni} \cdot \boldsymbol{\epsilon}|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \quad (1.195)$$

y la sección eficaz total se obtiene integrando la anterior sobre todas las frecuencias:

$$\sigma_i^{\text{abs;dip}}(\boldsymbol{\epsilon}) = \int_0^\infty d\omega \sigma_i^{\text{abs;dip}}(\boldsymbol{\epsilon}; \omega) = \frac{(2\pi)^2}{\hbar^2 c} \sum_n (E_n - E_i) |\mathbf{d}_{ni} \cdot \boldsymbol{\epsilon}|^2, \quad (1.196)$$

donde la suma se extiende sobre $E_n > E_i$. Si $|i\rangle$ es el estado fundamental la suma va sobre todos los estados. Es fácil demostrar que, si $\check{\mathbf{u}}$ es un versor real, se satisface la relación

$$\sum_n (E_n - E_i) |\mathbf{d}_{ni} \cdot \check{\mathbf{u}}|^2 = \frac{\hbar^2 e^2 N}{2m}, \quad (1.197)$$

conocida como la *regla de suma dipolar*, donde N es el número total de partículas. Por lo tanto, cuando la luz incidente esta polarizada linealmente, la sección eficaz total satisface la regla de suma¹⁸

$$\sigma_i^{\text{abs;dip}}(\text{pol. lineal}) = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} N. \quad (1.201)$$

¹⁸La ecuación (1.196) es una consecuencia de la relación de conmutación entre \mathbf{r} y \mathbf{p} . En efecto,

1.11. Reglas de selección

Las transiciones estudiadas arriba, llamadas dipolares, solo tienen lugar si el elemento de matriz $\langle n|\mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\epsilon}|i\rangle$ es no nulo. Como el momento dipolar $\mathbf{d} = -e \sum \mathbf{r}_i$ cambia ante una transformación de paridad, los elementos de matriz serán no nulos solo si la paridad P de los estados $|i\rangle$ y $|n\rangle$ es opuesta. Es decir, debe ser

$$\Delta P = P_n - P_i \neq 0 \quad (1.202)$$

Esta es la llamada regla de Laporte, descubierta en 1924. Consideremos como ejemplo el caso de un único electrón atómico (en un campo central). Las funciones de onda serán

$$\langle \mathbf{r}|i\rangle = R_i(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.203)$$

$$\langle \mathbf{r}|n\rangle = R_n(r)Y_{l'm'}(\theta, \varphi) \quad (1.204)$$

Si usamos las conocidas expresiones

$$z = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}(\theta, \varphi) \quad (1.205)$$

$$x + iy = -r\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{11}(\theta, \varphi) \quad (1.206)$$

$$x - iy = r\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1-1}(\theta, \varphi) \quad (1.207)$$

podemos escribir

$$\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon} = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(\epsilon_z Y_{10}(\theta, \varphi) + \frac{\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1}(\theta, \varphi) - \frac{\epsilon_x - i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{11}(\theta, \varphi) \right) \quad (1.208)$$

tomando el valor medio del operador

$$[\mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{u}}, \mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{u}}] = -e \left[\sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}, \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \hat{\mathbf{u}} \right] = i\hbar e \sum_{ij} \delta_{ij} = ie\hbar N, \quad (1.198)$$

con respecto al estado $|i\rangle$ (no necesariamente el estado fundamental), se tienen

$$\langle i|(\mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{u}} \mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{u}} - \mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{u}} \mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{u}})|i\rangle = ie\hbar N, \quad (1.199)$$

ó

$$\sum_n \langle i|\mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{u}}|n\rangle \langle n|\mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{u}}|i\rangle - \sum_n \langle i|\mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{u}}|n\rangle \langle n|\mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{u}}|i\rangle = ie\hbar N. \quad (1.200)$$

Usando finalmente (1.193) y (1.194) se obtiene de inmediato (1.197).

Luego, podremos escribir a los elementos de matriz en la forma

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{r} = & \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int_0^\infty r^3(r) R_i(r) R_n(r) \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ & \times Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) \left(\epsilon_z Y_{10}(\theta, \varphi) + \frac{\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1}(\theta, \varphi) - \frac{\epsilon_x - i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{11}(\theta, \varphi) \right) Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (1.209)$$

La parte angular de (1.209) se reduce entonces a integrales de productos de 3 armónicos esféricos que se pueden hacer explícitamente usando la ortogonalidad y la relación

$$Y_{1m}(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = AY_{l'+1, m+m'}(\theta, \varphi) + BY_{l', m+m'}(\theta, \varphi) + CY_{l'-1, m+m'}(\theta, \varphi) \quad (1.210)$$

A partir de estas integrales angulares llegamos a las siguientes reglas de selección para transiciones permitidas:

- $\Delta l = l' - l = \pm 1$
- $\Delta m = m' - m = 0, \pm 1$

Para átomos como el de Hidrógeno, o los alcalinos (con un único electrón fuera de capa cerrada), estas reglas de selección determinan totalmente el espectro. En otros átomos, con muchos electrones disponibles para hacer transiciones, las reglas se complican. He aquí la lista de reglas (incluyendo al spin):

- La paridad de los estado implicados debe cambiar.
- Cuando el sistema puede ser aproximado por orbitales, la configuración debe cambiar de manera que $\Delta \sum l_i = \pm 1$
- $\Delta J = 0, \pm 1$
- $J = 0 \rightarrow J = 0$ está prohibida
- $\Delta m_J = 0, \pm 1$
- $\Delta L = 0, \pm 1$
- $\Delta M_L = 0, \pm 1$
- $\Delta S = 0$
- $\Delta M_S = 0$

Notemos que está permitido que $\Delta L = 0$. Pero este L nada tiene que ver con la paridad del estado (No es el L que aparece en un armónico esférico determinando su paridad a través de algún $(-1)^L$).

1.11.1. Transiciones prohibidas

Los resultados anteriores los obtuvimos reteniendo solo el primer término (i.e. el 1) en el desarrollo de $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$. Debemos analizar cómo cambian los resultados si incluimos el término siguiente. Este término $i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$ da, al elemento de matriz $\langle n|\mathbf{j}_{\mathbf{k}}|i\rangle$, la contribución v^s siguiente:

$$v^s = -\frac{ie}{mc} \sum_i (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_i) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i) \quad (1.211)$$

Podemos escribir a v^s de la siguiente manera

$$v^s = v^M + v^Q \quad (1.212)$$

con

$$\begin{aligned} v^M &= -\frac{ie}{2mc} \sum_i ((\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_i) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i) - (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{r}_i) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_i)) \\ v^Q &= -\frac{ie}{2mc} \sum_i ((\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_i) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i) + (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{r}_i) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_i)) \end{aligned} \quad (1.213)$$

Es fácil ver que

$$(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_i) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i) - (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{r}_i) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_i) = (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}) \cdot \mathbf{L}_i \quad (1.214)$$

de manera que

$$v^M = -\frac{ie}{2mc} (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}) \cdot \sum_i \mathbf{L}_i \quad (1.215)$$

o, recordando la relación entre momento angular orbital y momento magnético $\boldsymbol{\mu}$

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2mc} \mathbf{L} \quad (1.216)$$

$$v^M = -i(\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}) \cdot \sum_i \boldsymbol{\mu}_i = -i(\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}) \cdot \mathbf{M} \quad (1.217)$$

donde hemos llamado \mathbf{M} al momento dipolar magnético total. Como \mathbf{M} es un vector axial, no cambia de signo ante transformaciones de paridad, así que los elementos de matriz de v^M serán no nulos solo si $\Delta P = 0$. Se puede proceder de manera análoga con v^Q , relacionado con el momento cuadrupolar eléctrico y se llega a que

$$v^Q = -\frac{ie}{mc} \epsilon_{ikj} Q_{ij} \quad (1.218)$$

donde Q_{ij} es el momento cuadrupolar eléctrico.

Capítulo 2

Respuesta lineal

El objetivo de la teoría de la respuesta lineal es averiguar cómo reacciona un sistema a las influencias externas tales como campos eléctricos y magnéticos, presión aplicada, o una fuerza impulsora. Por ejemplo cuando introducimos una cuchara en un líquido cuántico y lo agitamos.

Si se aplica una fuerza cortante a un fluido, su respuesta es moverse; cuánto se mueve está determinado por la viscosidad. Si se le aplica un gradiente de temperatura, la respuesta es que fluya el calor; la cantidad de calor está determinada por la conductividad térmica. Sin embargo, en ambos casos, la influencia externa es independiente del tiempo. Nuestro propósito aquí es explorar el caso más general de influencias dependientes del tiempo. Como veremos, al estudiar la respuesta del sistema a diferentes frecuencias, obtendremos información importante sobre lo que sucede dentro del propio sistema.

2.1. funciones respuesta

Fuerzas en la dinámica clásica

Consideremos un sistema dinámico simple con algunas coordenadas generalizadas $x_i(t)$ que dependen del tiempo. En un sistema aislado estas coordenadas obedecerán las ecuaciones de movimiento,

$$\ddot{x}_i + h_i(\dot{x}, x) = 0. \quad (2.1)$$

Esta dinámica no tiene por qué ser necesariamente hamiltoniana y de hecho, nos interesarán las situaciones con fricción. La influencia externa en este ejemplo surge de la perturbación del sistema mediante la adición de fuerzas impulsoras $F_i(t)$, de modo que las ecuaciones de movimiento se convierten en,

$$\ddot{x}_i + h_i(\dot{x}, x) = F_i(t). \quad (2.2)$$

En esta expresión, $x_i(t)$ son grados de libertad dinámicos. Esto es lo que estamos resolviendo. Por el contrario, las $F_i(t)$ no son dinámicas: son fuerzas que están bajo nuestro control, como si alguien tirara del extremo de un resorte.

Puede ser útil tener un ejemplo aún más concreto en el fondo de nuestras mentes. Para ello, tomamos el juguete favorito de todo físico: el oscilador armónico simple. Aquí incluiremos un término de fricción, proporcional a γ , de modo que tengamos el oscilador armónico amortiguado con ecuación de movimiento

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = F(t) \quad (2.3)$$

Discutiremos este modelo con cierto detalle en la sección 2.2.1.

Fuentes en Mecánica Cuántica

En mecánica cuántica, introducimos las influencias externas de una manera ligeramente diferente. Los observables del sistema ahora son operadores, \mathcal{O}_i . En general la dinámica de estos operadores estará gobernada por un Hamiltoniano $H(\mathcal{O})$. Sin embargo, no tenemos ningún interés en dejar el sistema sólo. Queremos darle una patada. Matemáticamente, esto se logra agregando un término adicional al Hamiltoniano,

$$V(t) = \sum_i g_i(t) \mathcal{O}_i \quad (2.4)$$

Los $g_i(t)$ se conocen como fuentes. Son campos externos que están bajo nuestro control, análogos a las fuerzas motrices del ejemplo anterior. De hecho, si tomamos un Hamiltoniano clásico y añadimos un término de la forma gx , las ecuaciones de Euler-Lagrange resultantes incluyen la fuente g en el lado derecho de la misma manera que la fuerza F aparece en (2.3).

2.1.1. Respuesta lineal

Queremos entender cómo reacciona nuestro sistema ante la presencia de la fuente o la fuerza impulsora. Para ser concretos, elegiremos trabajar en el lenguaje de la mecánica cuántica, pero todo lo que discutimos en esta sección también se trasladará a los sistemas clásicos. Nuestro objetivo es comprender cómo cambian las correlaciones de la teoría cuando activamos una fuente (o fuentes) $g_i(t)$. En general, es una pregunta difícil de responder cómo las fuentes deforman la teoría. Para resolver esto, solo necesitamos sentarnos y resolver la teoría nuevamente. Sin embargo, podemos avanzar bajo el supuesto de que la fuente es una pequeña perturbación del sistema original. Esto es bastante restrictivo, pero es el lugar más simple donde podemos progresar, por lo que, de ahora en adelante, nos centraremos en este límite. Matemáticamente, esto significa que asumimos que el cambio en el valor esperado

de cualquier operador es lineal en la fuente perturbadora. Nosotros escribimos

$$\delta\langle\mathcal{O}_i(t)\rangle = \sum_j \int dt' \chi_{ij}(t, t') g_j(t') \quad (2.5)$$

Aquí $\chi_{ij}(t, t')$ se conoce como *función respuesta* o *susceptibilidad*. Podríamos escribir una expresión similar para el sistema dinámico clásico (2.3), donde $\delta\langle\mathcal{O}_i(t)\rangle$ se reemplaza por $x_i(t)$ y f se reemplaza por la fuerza impulsora $F_j(t)$. En mecánica clásica, está claro por la forma de la ecuación de movimiento (2.1) que la función respuesta es simplemente la función de Green para el sistema. Por esta razón, las funciones respuesta a menudo se denominan funciones de Green y, a menudo, se verán denotadas como G en lugar de χ . De ahora en adelante, supondremos que nuestro sistema es invariante bajo traslaciones en el tiempo. En este caso, tenemos

$$\chi_{ij}(t, t') = \chi_{ij}(t - t') \quad (2.6)$$

y es útil realizar una transformada de Fourier para trabajar en el espacio de frecuencias. Definimos la transformada de Fourier de la función $f(t)$

$$f(\omega) = \int dt e^{i\omega t} f(t) \quad \text{y} \quad f(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} f(\omega) \quad (2.7)$$

En particular, usaremos la convención donde las dos funciones se distinguen solo por su argumento. Tomando la transformada de Fourier de (2.5) da

$$\delta\langle\mathcal{O}_i(\omega)\rangle = \sum_j \int dt' \int dt e^{i\omega t} \chi_{ij}(t - t') g_j(t') \quad (2.8)$$

$$= \sum_j \int dt' \int dt e^{i\omega(t-t')} \chi_{ij}(t - t') e^{i\omega t'} g_j(t') \quad (2.9)$$

$$= \sum_j \chi_{ij}(\omega) g_j(\omega) \quad (2.10)$$

Aprendemos que la respuesta es “local” en el espacio de frecuencias: si sacudes algo a la frecuencia ω , responde a la frecuencia ω . Cualquier cosa más allá de esto se encuentra dentro del dominio de la respuesta no lineal. En esta sección describiremos algunas de las propiedades de la función respuesta $\chi(\omega)$ y cómo interpretarlas. Muchas de estas propiedades se derivan de ideas físicas muy simples. Para evitar el desorden, eliminaremos principalmente los índices i, j . Cuando haya algo interesante que decir, los pondremos de nuevo.

2.1.2. Analiticidad y causalidad

Si trabajamos con una fuente real f y un operador hermítico \mathcal{O} (lo que significa un valor esperado real $\langle\mathcal{O}\rangle$) entonces $\chi(t)$ también debe ser real. Veamos qué significa

esto para la Transformada de Fourier $\chi(\omega)$. Es útil introducir alguna notación nueva para las partes real e imaginaria,

$$\chi(\omega) = \text{Re } \chi(\omega) + i \text{Im } \chi(\omega) \equiv \chi'(\omega) + i\chi''(\omega) \quad (2.11)$$

Esta notación en términos de números primos es bastante extraña la primera vez que la ves, pero es estándar en la literatura. ¡Solo tienes que recordar que, en este contexto, los números primos no significan derivadas! Las partes real e imaginaria de la función respuesta $\chi(\omega)$ tienen diferentes interpretaciones:

- **Parte imaginaria:** Podemos escribir la parte imaginaria como

$$\chi''(\omega) = -\frac{i}{2}[\chi(\omega) - \chi^*(\omega)], \quad (2.12)$$

$$= -\frac{i}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \chi(t)[e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}], \quad (2.13)$$

$$= -\frac{i}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} [\chi(t) - \chi(-t)]. \quad (2.14)$$

Vemos que la parte imaginaria de $\chi(\omega)$ se debe a la parte de la función respuesta que no es invariante bajo la inversión de tiempo $t \rightarrow -t$. En otras palabras, $\chi''(\omega)$ conoce la flecha del tiempo. Dado que los sistemas microscópicos suelen ser invariantes ante la inversión del tiempo, la parte imaginaria $\chi''(\omega)$ debe surgir debido a procesos disipativos y se denomina *parte disipativa* o absorbente de la función respuesta. También se la conoce como la *función espectral*. Resultará que contiene información sobre la densidad de estados en el sistema que participan en los procesos de absorción. Veremos esto más claramente en un ejemplo en breve. Finalmente, obsérvese que $\chi''(\omega)$ es una función impar,

$$\chi''(-\omega) = -\chi''(\omega). \quad (2.15)$$

- **Parte Real:** El mismo análisis anterior muestra que

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} [\chi(t) + \chi(-t)] \quad (2.16)$$

A la parte real no le importa la flecha del tiempo. Se llama la parte *reactiva* de la función respuesta y es una función par,

$$\chi'(-\omega) = +\chi'(\omega) \quad (2.17)$$

Antes de continuar, debemos mencionar brevemente lo que sucede cuando colocamos las etiquetas i, j de nuevo en las funciones respuesta. En este caso, un análisis similar al anterior muestra que la parte disipativa proviene de la parte antihermítica,

$$\chi''_{ij}(\omega) = -\frac{i}{2}[\chi_{ij}(\omega) - \chi_{ji}^*(\omega)] \quad (2.18)$$

Causalidad

No podemos afectar el pasado. Esta declaración de causalidad significa que cualquier función respuesta debe satisfacer

$$\chi(t) = 0 \quad \text{para todo } t < 0. \quad (2.19)$$

Por esta razón, a menudo se hace referencia a χ como la función de Green causal o la *función de Green retardada* y, a veces, se denota como $G_R(t)$. Veamos qué significa este simple requisito de causalidad para la expansión de Fourier de χ ,

$$\chi(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \chi(\omega). \quad (2.20)$$

Cuando $t < 0$, podemos realizar la integral cerrando el contorno por el semiplano superior (de manera que el exponente se vuelve $-i\omega \times (-i|t| \rightarrow -\infty)$). La respuesta tiene que ser cero.

Por supuesto, la integral viene dada por la suma de los residuos dentro del contorno. Entonces, si queremos que la función respuesta se anule para todo $t < 0$, $\chi(\omega)$ no puede tener polos en el semiplano superior. En otras palabras, la causalidad requiere que

$$\chi(\omega) \text{ es analítica para } \text{Im } \omega > 0 \quad (2.21)$$

2.1.3. Relación de Kramers-Kronig

El hecho de que χ sea analítica en el semiplano superior significa que existe una relación entre las partes real e imaginaria, χ' y χ'' . Esto se llama la relación de Kramers-Kronig y la derivaremos en esta sección. Primero, recordemos la expresión

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) \mp i\pi\delta(x) \quad (2.22)$$

donde el lado derecho es una suma de dos distribuciones: la δ de Dirac, y la distribución $\mathcal{P}(1/x)$ que, como toda distribución, se define bajo el signo de integral por su acción frente a una función de prueba

$$\int \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) \varphi(x) dx \equiv \mathcal{P} \int \frac{\varphi(x)}{x} dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\varepsilon} + \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{\varphi(x)}{x} dx. \quad (2.23)$$

Apliquemos ahora esta expresión a la siguiente integral:

$$\frac{1}{i\pi} \oint_C d\omega' \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega + i\varepsilon}, \quad \omega \in \mathbb{R} \quad (2.24)$$

donde el contorno C se corre ligeramente por encima del eje real, antes de cerrarse en el infinito por el semiplano superior. Por un lado esta integral se anula, ya que $\chi(\omega)$ es analítica en el semiplano superior, y el denominador aporta polos en el inferior. Por otro lado, con la suposición adicional de que $\chi(z) \rightarrow 0$ cuando $|z| \rightarrow \infty$, la contribución del semicírculo superior también se anula. Entonces

$$0 = \frac{1}{i\pi} \oint_C d\omega' \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega + i\varepsilon} = \frac{1}{i\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega + i\varepsilon} \quad (2.25)$$

Finalmente, si usamos (2.22) para descomponer el ultimo miembro, llegamos a

$$\chi(\omega) = \frac{1}{i\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega}, \quad (2.26)$$

La parte importante para nosotros es ese factor i ubicado en el denominador. Tomando partes reales e imaginarias, nos damos cuenta de que

$$\text{Re } \chi(\omega) = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } \chi(\omega')}{\omega' - \omega}, \quad (2.27)$$

y

$$\text{Im } \chi(\omega) = -\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Re } \chi(\omega')}{\omega' - \omega}. \quad (2.28)$$

Estas son las relaciones de *Kramers-Kronig*. Se derivan únicamente de la causalidad y nos dicen que la parte imaginaria disipativa de la función respuesta $\chi''(\omega)$ queda determinada por la parte real reactiva, $\chi'(\omega)$ y viceversa. Sin embargo, la relación no es local en el espacio de frecuencias: se necesita conocer $\chi'(\omega)$ para todas las frecuencias a fin de reconstruir χ'' para cualquier frecuencia particular.

Hay otra forma de escribir estas relaciones que también es útil y nos dice cómo podemos reconstruir la función respuesta completa $\chi(\omega)$ si sólo conocemos la parte disipativa. Para esto, observemos que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{i\pi} \frac{\text{Im } \chi(\omega')}{\omega' - \omega - i\varepsilon} \quad (2.29)$$

Nuevamente usando la fórmula (2.22), tenemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{i\pi} \frac{\text{Im } \chi(\omega')}{\omega' - \omega - i\varepsilon} = \text{Im } \chi(\omega) + \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{i\pi} \frac{\text{Im } \chi(\omega')}{\omega' - \omega - i\varepsilon} \quad (2.30)$$

$$= \text{Im } \chi(\omega) - i \text{Re } \chi(\omega). \quad (2.31)$$

O, reescribiendo la susceptibilidad como $\chi(\omega) = \text{Re } \chi(\omega) + i \text{Im } \chi(\omega)$, obtenemos

$$\chi(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } \chi(\omega')}{\omega' - \omega - i\varepsilon} \quad (2.32)$$

Si se conoce la parte disipativa de la función respuesta, se conoce todo.

Una aplicación: la susceptibilidad

Supongamos que al encender una perturbación f se induce una respuesta $\langle \mathcal{O} \rangle$ para algún observable de nuestro sistema. Entonces la susceptibilidad se define como

$$\chi = \left. \frac{\partial \langle \mathcal{O} \rangle}{\partial f} \right|_{\omega=0} \quad (2.33)$$

Hemos llamado a la susceptibilidad χ con el mismo nombre que le dimos a la función respuesta. Y, de hecho, a partir de la definición de respuesta lineal (2.5), la primera es simplemente el límite a frecuencia cero de la segunda:

$$\chi = \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi(\omega) \quad (2.34)$$

Un ejemplo común, que conocimos en nuestro primer curso de termodinámica, es el cambio de magnetización m de un sistema en respuesta a un campo magnético externo B . La susceptibilidad magnética acertadamente denominada está dada por $\chi = \partial m / \partial B$.

De (2.32), podemos escribir la susceptibilidad como

$$\chi = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } \chi(\omega')}{\omega' - i\varepsilon}. \quad (2.35)$$

Vemos que si se puede hacer un experimento para determinar cuánto absorbe el sistema en todas las frecuencias, a partir de esta información podemos determinar la respuesta del sistema a frecuencia cero. Esto se conoce como la regla de la suma termodinámica.

2.2. Ejemplos clásicos

Las definiciones y manipulaciones de la sección anterior pueden parecer algo abstractas la primera vez que se las encuentra. Algunos ejemplos simples deberían arrojar algo de luz. El ejemplo principal en el que nos centraremos es el mismo que nos acompaña en la mayor parte de la física: el oscilador armónico clásico.

2.2.1. El oscilador armónico amortiguado

La ecuación de movimiento que gobierna el oscilador armónico amortiguado en presencia de una fuerza impulsora es

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega_0^2 x = F(t), \quad (2.36)$$

donde γ es la fricción. Denotamos la frecuencia no amortiguada como ω_0 , guardando ω como la frecuencia de la fuerza impulsora como en la sección anterior. Queremos determinar la función respuesta, o función de Green, $\chi(t - t')$ de este sistema. Esta es la función que efectivamente resuelve la dinámica, lo que significa que si alguien nos dice la fuerza impulsora $F(t)$, el movimiento viene dado por

$$x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi(t - t') F(t'). \quad (2.37)$$

Existe un método estándar para calcular $\chi(t)$. En primer lugar, introducimos la transformada de Fourier (inversa)

$$\chi(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \chi(\omega). \quad (2.38)$$

Reemplazamos esto en la ecuación de movimiento (2.36) para obtener

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{*\infty} dt' [-\omega^2 - i\gamma\omega + \omega_0^2] e^{-i\omega(t-t')} \chi(\omega) F(t') = F(t), \quad (2.39)$$

que se resuelve si la $\int d\omega$ da una función delta. Pero como podemos escribir un delta en la forma $2\pi\delta(t) = \int d\omega e^{-i\omega t}$, lo resolvemos simplemente tomando

$$\chi(\omega) = \frac{1}{-\omega^2 + i\gamma\omega + \omega_0^2} \quad (2.40)$$

Hay una gran cantidad de física sencilla en esta ecuación; nos tomaremos el tiempo para extraerla. Todas las lecciones que aprenderemos se trasladan a sistemas más complicados.

En primer lugar, podemos mirar la *susceptibilidad*, es decir, $\chi(\omega = 0) = 1/\omega_0^2$. Esto nos dice cuánto cambia el observable por una perturbación del sistema, en este caso una fuerza estática: $x = F/\omega_0^2$ como se esperaba.

Veamos la estructura de la función respuesta en el plano complejo ω . Los polos se encuentran en $\omega_* 2 + i\gamma\omega_* - \omega_0^2 = 0$ o, resolviendo la ecuación cuadrática, en

$$\omega_* = -\frac{i\gamma}{2} \pm \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2/4} \quad (2.41)$$

Hay dos regímenes diferentes que debemos considerar por separado,

- **Subamortiguado:** $\omega_0^2 > \gamma^2/4$. En este caso, los polos tienen tanto una parte real como una imaginaria. Ambos se sientan en el semiplano inferior. Esto está de acuerdo con nuestra lección general de causalidad que nos dice que la función respuesta debe ser analítica en el semiplano superior.

- **Sobreamortiguado:** $\omega_0^2 < \gamma^2/4$. Ahora los polos se encuentran en el eje imaginario negativo. Nuevamente, no hay ninguno en el semiplano superior, consistente con la causalidad.

Podemos ganar algo de intuición graficando la parte real e imaginaria de la función respuesta para $\omega \in \mathbb{R}$. En primer lugar, la parte real se muestra en la Figura 11 donde graficamos

$$\operatorname{Re} \chi(\omega) = \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \quad (2.42)$$

Esta es la parte reactiva. Cuanto mayor sea la función, más responderá el sistema a una frecuencia dada. Obsérvese que $\operatorname{Re} \chi(\omega)$ es una función par, como se esperaba.

Más interesante es la parte disipativa de la función respuesta,

$$\operatorname{Im} \chi(\omega) = \frac{\omega \gamma}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2}, \quad (2.43)$$

que es una función impar. En el caso subamortiguado, esto se representa en la figura 12. Obsérvese que $\operatorname{Im} \chi$ es proporcional a γ , el coeficiente de fricción. La función alcanza su punto máximo alrededor de $\pm \omega_0$, a frecuencias en las que el sistema vibra naturalmente. Esto se debe a que aquí es donde el sistema puede absorber energía. Sin embargo, como $\gamma \rightarrow 0$, la parte imaginaria no se vuelve cero sino que tiende hacia dos funciones delta situadas en $\pm \omega_0$.

2.2.2. Disipación

Podemos ver directamente cómo se relaciona $\operatorname{Im} \chi(\omega)$ con la disipación calculando la energía absorbida por el sistema. Así solíamos llamar al trabajo realizado sobre el sistema antes de que nos volviéramos sofisticados y adultos. Es

$$\frac{dW}{dt} = F(t)\dot{x}(t) \quad (2.44)$$

$$= F(t) \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi(t-t')(t') \quad (2.45)$$

$$= F(t) \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (-i\omega) e^{-i\omega(t-t')} \chi(\omega) F(t') \quad (2.46)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d\omega'}{2\pi} [-i\omega \chi(\omega)] e^{-i(\omega+\omega')t} F(\omega) F(\omega') \quad (2.47)$$

Impulsemos el sistema con una fuerza de una frecuencia específica Ω , de modo que

$$F(t) = F_0 \cos \Omega t = F_0 \operatorname{Re}(e^{i\Omega t}) \quad (2.48)$$

Téngase en cuenta que es crucial asegurarse de que la fuerza sea real en esta etapa del cálculo porque este fue el punto de partida para nuestra discusión de las propiedades analíticas de las funciones respuesta en la sección (2.1.2). De una manera más pedestre, podemos ver que será importante porque nuestra ecuación anterior no es lineal en $F(\omega)$, por lo que es necesario tomar la parte real antes de avanzar. Tomando la transformada de Fourier, la fuerza impulsora es

$$F(\omega) = 2\pi F_0[\delta(\omega - \Omega) + \delta(\omega + \Omega)]. \quad (2.49)$$

Al insertar esto en (2.47) se obtiene

$$\frac{dW}{dt} = -iF_0^2\Omega [\chi(\omega)e^{-i\Omega t} - \chi(-\Omega)e^{+i\Omega t}] [e^{-i\Omega t} + e^{i\Omega t}] \quad (2.50)$$

Esto todavía está oscilando con el tiempo. Es más útil tomar un promedio durante un ciclo,

$$\frac{d\bar{W}}{dt} \equiv \frac{\Omega}{2\pi} \int_0^{2\pi\Omega} dt \frac{dW}{dt} = -iF_0^2\Omega [\chi(\Omega) - \chi(-\Omega)] \quad (2.51)$$

Pero ya hemos visto que $\text{Re } \chi(\omega)$ es una función par, mientras que $\text{Im } \chi(\omega)$ es una función impar. Esto nos permite escribir

$$\frac{d\bar{W}}{dt} = 2F_0^2\Omega \text{Im } \chi(\Omega). \quad (2.52)$$

Vemos que el trabajo realizado es proporcional a $\text{Im } \chi$. Para derivar este resultado, no necesitábamos la forma exacta de la función respuesta; sólo la propiedad par/impar de las partes real/imaginaria, que se siguen por motivos generales. Para nuestro oscilador armónico amortiguado, ahora podemos usar la forma explícita (2.43) para derivar

$$\frac{d\bar{W}}{dt} = 2F_0^2 \frac{\gamma\Omega^2}{(\omega_0^2 - \Omega^2)^2 + (\gamma\Omega)^2} \quad (2.53)$$

Este es un máximo cuando agitamos el oscilador armónico en su frecuencia natural, $\omega = \omega_0$. Como ilustra este ejemplo, la parte imaginaria de la función respuesta nos dice las frecuencias en las que el sistema vibra naturalmente. Estas son las frecuencias en las que el sistema puede absorber energía cuando se agita.

2.3. Mecánica cuántica y fórmula de Kubo

Volvamos ahora a la mecánica cuántica. Consideremos la siguiente configuración básica: para $t < t_0$ el sistema se encuentra en el estado fundamental de un cierto

Hamiltoniano H_0 , que llamamos $|\psi_0\rangle$, con energía E_0 . Si analizamos los valores de expectación de un conjunto de observables \mathcal{O}_i , estos toman los valores

$$\langle \mathcal{O}_i \rangle_0 = \langle \psi_0 | \mathcal{O}_i | \psi_0 \rangle. \quad (2.54)$$

independientes del tiempo. En el instante t_0 se enciende la perturbación

$$V(t) = \sum_j g_j(t) \mathcal{O}_j \quad (2.55)$$

donde el índice j etiqueta los distintos operadores en la teoría y, correspondientemente, las diferentes fuentes que podemos encender. Por lo general, en cualquier situación dada, sólo encendemos una fuente para un solo operador, pero nos puede interesar cómo esta fuente afecta el valor esperado de cualquier otro operador \mathcal{O}_j .

Luego de encender la perturbación, el estado fundamental evoluciona en el tiempo (en el esquema de Schrödinger) de acuerdo a

$$|\psi_0(t)\rangle_S = \mathcal{U}(t_0, t) |\psi_0\rangle_S, \quad (2.56)$$

y entonces los valores de expectación adquieren la dependencia temporal

$$\langle \mathcal{O}_i \rangle(t) = \langle \psi_0 | \mathcal{U}^\dagger(t_0, t) \mathcal{O}_i \mathcal{U}(t_0, t) | \psi_0 \rangle \quad (2.57)$$

además de inducirse las transiciones a los estados excitados estudiadas antes. Resulta más conveniente trabajar en la representación de interacción, es decir, escribirlo en términos del operador de evolución en la representación de interacción \mathcal{U}_I (1.59):

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} \mathcal{U}(t_0, t), \quad (2.58)$$

para el cual disponemos de una serie de Dyson (1.63):

$$\mathcal{U}_I(t_0, t) = \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \right). \quad (2.59)$$

Entonces, introduciendo la relación inversa a (2.58),

$$\langle \mathcal{O}_i \rangle(t) = \langle \psi_0 | \mathcal{U}_I^\dagger(t_0, t) e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} \mathcal{O}_i e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} \mathcal{U}_I(t_0, t) | \psi_0 \rangle \quad (2.60)$$

que reescribimos introduciendo la representación de interacción para el operador \mathcal{O}_i

$$\langle \mathcal{O}_i \rangle(t) = \langle \psi_0 | \mathcal{U}_I^\dagger(t_0, t) \mathcal{O}_i(t) \mathcal{U}_I(t_0, t) | \psi_0 \rangle. \quad (2.61)$$

Obsérvese que omitimos el subíndice I para los operadores $\mathcal{O}_i(t)$ en representación de interacción,

$$\mathcal{O}_i(t) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} \mathcal{O}_i e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}.$$

Queda sobrentendido del hecho de que poseen una dependencia temporal. Consideremos que el instante en el que se enciende la perturbación $t_0 \rightarrow -\infty$, y si nos restringimos a valores pequeños de las fuentes, podemos realizar el cálculo usando la teoría de perturbaciones al orden mas bajo,

$$\langle \mathcal{O}_i \rangle(t) = \langle \psi_0 | \left(1 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_I(t') + \dots \right) \mathcal{O}_i(t) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_I(t') + \dots \right) | \psi_0 \rangle \quad (2.62)$$

$$= \langle \mathcal{O}_i \rangle_0 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \psi_0 | V_I(t') \mathcal{O}_i(t) | \psi_0 \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \psi_0 | \mathcal{O}_i(t) V_I(t') | \psi_0 \rangle \quad (2.63)$$

$$= \langle \mathcal{O}_i \rangle_0 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \psi_0 | [V_I(t'), \mathcal{O}_i(t)] | \psi_0 \rangle \quad (2.64)$$

Finalmente insertamos la expresión explícita para el potencial que contiene a las fuentes, (2.55) obtenemos el cambio en el valor de expectación,

$$\begin{aligned} \varepsilon \langle \mathcal{O}_i \rangle(t) &= \langle \mathcal{O}_i \rangle(t) - \langle \mathcal{O}_i \rangle_0 = \frac{i}{\hbar} \sum_j \int_{-\infty}^t dt' g_j(t') \langle \psi_0 | [\mathcal{O}_j(t'), \mathcal{O}_i(t)] | \psi_0 \rangle \quad (2.65) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_j \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \Theta(t-t') \langle \psi_0 | [\mathcal{O}_i(t), \mathcal{O}_j(t')] | \psi_0 \rangle g_j(t') \quad (2.66) \end{aligned}$$

donde en la segunda línea utilizamos la función escalón para extender el límite superior de integración hasta $+\infty$ y $[\dots, \dots]$ refiere al conmutador de los operadores. Comparando este resultado con nuestra definición original (2.5), vemos que la función respuesta en la teoría cuántica está dada por

$$\boxed{\chi_{ij}(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') \langle [\mathcal{O}_i(t), \mathcal{O}_j(t')] \rangle}, \quad (2.67)$$

que, debido a la función de Heaviside, naturalmente emerge como una función respuesta causal. Dado que en representación de interacción la evolución temporal de los operadores (2.3) es con H_0 y que $|\psi_0\rangle$ es autoestado de H_0 , no es difícil convenirse de que

$$\chi_{ij}(t, t') = \chi_{ij}(t - t')$$

Con esta función, el valor de expectación del observable \mathcal{O}_i a tiempo t se escribe, en respuesta lineal, como

$$\boxed{\langle \mathcal{O}_i \rangle(t) = \langle \mathcal{O}_i \rangle_0 + \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{ij}(t-t') g_j(t')}. \quad (2.68)$$

5.4.4 Fórmula de Kubo para la conductividad eléctrica: hacia una teoría de campos

Esta fórmula es importante y se conoce como *fórmula de Kubo*. Más allá de la decoración (la función escalón, o el hecho de que debe tomarse un conmutador) la función respuesta así escrita consiste en un valor de expectación de un producto de dos operadores (que pueden ser iguales o distintos) en tiempos diferentes. Esto genéricamente se denomina función de correlación o función de Green, y ya vimos que en este caso es una función retardada. Observemos que el observable i -ésimo para el que estamos tomando su valor de expectación no necesariamente tiene que estar perturbado, basta que la respuesta χ_{ij} sea no nula con algún observable perturbado para obtener un resultado no trivial.

Dada la expresión de la función respuesta en términos de un conmutador de operadores hermíticos, es claro que la respuesta del operador i a una perturbación externa que se acopla con j está simplemente relacionada con la respuesta de j a una perturbación que se acopla con i , en otras palabras, donde los operadores tienen roles invertidos. Estas son las *relaciones de reciprocidad de Onsager*.

2.4. Fórmula de Kubo para la conductividad eléctrica: hacia una teoría de campos

Finalicemos este capítulo describiendo cómo esta teoría de la respuesta lineal puede utilizarse para calcular propiedades de transporte en un sistema de muchas partículas. Consideremos un sistema de partículas cargadas en presencia de un campo electromagnético. Como hemos visto, el Hamiltoniano está dado por (1.159), que bajo las suposiciones realizadas en la sección 1.9 se escribe $H = H_0 + V(t)$, donde

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}, \quad (2.69)$$

$$V(t) = -\frac{e}{c} \int d\mathbf{r} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (2.70)$$

y el vector corriente (1.165) se escribe

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i}{m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \frac{\mathbf{p}_i}{m} \right]. \quad (2.71)$$

este operador, un observable, al ser una función de la posición, está describiendo una teoría cuántica de campos, que es el lenguaje en el que los sistemas de partículas se expresan naturalmente. Una extensión natural de la fórmula de Kubo (2.67) al continuo, es decir, cuando los índices i se convierten en un continuo en tres dimensiones, el valor medio del operador corriente está dado por

$$\langle j_\alpha(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle j_\alpha(\mathbf{r}) \rangle_0 + \sum_\beta \int d\mathbf{r}' dt' \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') A_\beta(\mathbf{r}', t') \quad (2.72)$$

donde la función respuesta para la corriente es

$$\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t) \langle [j_\alpha(\mathbf{r}, t), j_\beta(0, 0)] \rangle, \quad (2.73)$$

y $\langle \dots \rangle_0$ es un valor de expectación calculado en el estado fundamental del Hamiltoniano H_0 (que no vamos a especificar por ahora, baste decir que si se trata de un sistema de electrones, éste tendrá que ser un mar de Fermi). Usualmente el primer término en la ecuación anterior se anula (no hay corriente inducida en ausencia de campo). La invarianza frente a traslaciones se traduce en el hecho de que la función respuesta depende sólo de la diferencia entre coordenadas. Sin embargo, si lo que buscamos es obtener la conductividad, necesitamos recuperar una ley de Ohm. Para ello quisiéramos encontrar una expresión análoga a (2.72) pero que involucre al campo eléctrico en lugar del potencial vector

Detengámonos un momento en el operador corriente (2.71): es una suma de términos de la forma velocidad de la partícula i -ésima multiplicada por la $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, que es la justamente su densidad. Sin embargo, como se ha discutido, \mathbf{p}_i/m no puede ser la velocidad de cada partícula en presencia de un campo electromagnético, porque \mathbf{p} es momento canónico. En su lugar, en presencia de un campo electromagnético, la velocidad de una partícula está representada por el momento cinemático (o mecánico) $\mathbf{\Pi}$:

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{\Pi}}{m} = \frac{1}{m} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right]. \quad (2.74)$$

Esto significa que el verdadero operador corriente, o corriente física, es

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [\mathbf{v}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{v}_i] \quad (2.75)$$

$$= \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \left\{ \left[\mathbf{p}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t) \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left[\mathbf{p}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t) \right] \right\} \quad (2.76)$$

$$= \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N [\mathbf{p}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{p}_i] - \frac{e}{mc} \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t) \quad (2.77)$$

$$= \mathbf{j}(\mathbf{r}) - \frac{e}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}) \quad (2.78)$$

donde hemos definido el operador

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (2.79)$$

58.4 Fórmula de Kubo para la conductividad eléctrica: hacia una teoría de campos

Este operador se interpreta como la densidad de partículas,¹ ya que

$$\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) = N. \quad (2.81)$$

El primer término en (2.78) se denomina paramagnético, mientras que el segundo es el término diamagnético. Este es el observable que debe entrar en la ley de Ohm.

Utilizando su definición (2.78), calculemos entonces el valor de expectación de la corriente física

$$\langle \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \rangle - \frac{e}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (2.82)$$

Para el primer término podemos utilizar (2.32). Para el segundo, tendríamos que escribir una nueva fórmula de Kubo. Sin embargo, puede mostrarse que el conmutador de ρ con j_α se anula en muchos casos, y si no se anulara, en todo caso la contribución adicional es de orden A^2 y la despreciamos. Por lo tanto escribimos

$$\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle_0 = \frac{N}{V} = n \quad (2.83)$$

donde V es el volumen del sistema, y n la densidad media de partículas.

El potencial vector y el campo eléctrico se relacionan mediante

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \nabla \phi(\mathbf{r}, t) \quad (2.84)$$

En el gauge de Coulomb y en ausencia de cargas y corrientes $\phi = 0$.

Es conveniente trabajar en el espacio recíproco, donde observables y fuentes dependen de la frecuencia. En el caso del campo eléctrico tenemos,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \int dt e^{i\omega t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (2.85)$$

y una expresión análoga para el potencial vector. Por un lado, la relación entre campo eléctrico y potencial vector (en el gauge de Coulomb, donde $\phi = 0$) se escribe

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega), \quad (2.86)$$

¹Un eventual término de potencial escalar en el Hamiltoniano se puede escribir como

$$\sum_{i=1}^N e\phi(\mathbf{r}_i, t) = e \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t) \quad (2.80)$$

donde ahora ϕ es una función clásica.

y por otro, para el valor de expectación de la corriente física tenemos

$$\langle J_\alpha(\mathbf{r}, \omega) \rangle = \langle j_\alpha(\mathbf{r}, \omega) \rangle - \frac{en}{mc} A_\alpha(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.87)$$

$$= \sum_\beta \int d\mathbf{r}' \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \omega) A_\beta(\mathbf{r}', \omega) - \frac{en}{mc} A_\alpha(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.88)$$

$$= \sum_\beta \int d\mathbf{r}' \left[\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \omega) - \frac{en}{mc} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha\beta} \right] \frac{c}{i\omega} E_\alpha(\mathbf{r}', \omega) \quad (2.89)$$

$$(2.90)$$

Adicionalmente, podemos tomar la transformada de Fourier en el espacio y escribir

$$\langle J_\alpha(\mathbf{q}, \omega) \rangle = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) E_\beta(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.91)$$

donde

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = -i \frac{c}{\omega + i\varepsilon} \left[\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) - \frac{en}{mc} \delta_{\alpha\beta} \right] \quad (2.92)$$

Finalmente, hemos agregado una pequeña parte imaginaria ε a la frecuencia porque la función respuesta causal debe ser analítica en el semiplano superior.

4) En un gas de electrones libres, el operador corriente conmuta con el Hamiltoniano. En consecuencia,

$$\mathbf{j}(0, t) = e^{iH_0 t} \mathbf{j}(0, 0) e^{-iH_0 t} = \mathbf{j}(0, 0) \quad \text{et} \quad [j_\alpha(0, t), j_\beta(0, 0)] = 0. \quad (2.93)$$

De este modo,

$$\sigma_{\alpha\beta}(0, \omega) = i \delta_{\alpha\beta} \frac{ne^2}{m\omega^+} = \delta_{\alpha\beta} \left[\frac{ne^2}{m} \pi \delta(\omega) + i \frac{ne^2}{m\omega} \right]. \quad (2.94)$$

La parte real corresponde al llamado “pico de Drude”. Notando que

$$\pi \delta(\omega) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\tau^{-1}}{(\omega\tau)^2 + 1},$$

vemos que obtenemos para $\omega = 0$ el modelo de Drude para la conductividad, $\text{Re} \sigma = \frac{ne^2 \tau}{m}$, donde τ es el tiempo de vida medio de las cuasipartículas entre dos colisiones; para electrones libres, sin embargo, este tiempo de vida medio es infinito y lo mismo para la conductividad dc². Si incluyéramos interacciones entre los electrones obtendríamos un tiempo de vida finito. La parte imaginaria de $\sigma_{\alpha\beta}(0, \omega)$ describe la absorción óptica (aquí entra la disipación) que decrece como $1/\omega$.

²En inglés se utiliza la sigla *dc*, o *direct current* para la corriente continua y *ac* o *alternate current* para la corriente alterna.

Capítulo 3

Dispersión de partículas

La dispersión, procesos en los cuales un haz de electrones, protones, fotones, etc. incide sobre un blanco compuesto a la vez por átomos o núcleos, es un proceso fundamental que es importante en una amplia gama de aplicaciones. Por ejemplo, la mayor parte del trabajo experimental en física de partículas involucra la dispersión, y una gran parte de lo que se sabe sobre las propiedades de las partículas se ha obtenido a través de experimentos de dispersión. Para otro ejemplo, la dispersión de especies nucleares en un plasma caliente es importante para determinar las tasas de reacción termonuclear en estrellas o en el universo primitivo. Por otro lado, una de las técnicas experimentales actuales para investigar los nanotubos de carbono es la dispersión de fotones. Se podría acumular una larga lista de ejemplos.

En capítulo 1 consideramos algunos problemas de dispersión como una aplicación de la teoría de la perturbación dependiente del tiempo. En este capítulo consideramos la dispersión por un potencial en tres dimensiones, adoptando un enfoque independiente del tiempo y presentando algunos de los hechos básicos más importantes. Desde el punto de vista teórico, el aspecto más relevante de los procesos de dispersión es que nos proveen información sobre el sector continuo del espectro. Nos enfocamos entonces en las soluciones con energía positiva de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, que satisfacen ciertas condiciones de contorno. Estas soluciones en general se extienden hasta el infinito y no son normalizables.

3.1. Condiciones de Contorno

En estas notas nos concentraremos en la dispersión por un potencial $V(\mathbf{r})$ que decae en el infinito,

$$V(\mathbf{r}) \xrightarrow{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} 0 \quad (3.1)$$

y en general consideraremos potenciales que decaen más rápido que $1/|\mathbf{r}|$, a los que llamamos de *corto alcance*. Hablaremos de la dispersión de una partícula por el

potencial $V(\mathbf{r})$, como si fuera un potencial fijo en el espacio, pero en realidad la partícula del haz incidente interactúa con un blanco que muchas veces es otra partícula móvil, y un tratamiento adecuado nos obliga a tener en cuenta la dinámica de ambas partículas, por ejemplo utilizando las coordenadas del centro de masa. Omitiremos aquí los detalles, y sólo supondremos en lo que sigue que se utiliza este sistema de referencia

Estamos interesados en resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \quad (3.2)$$

para energías positivas $E > 0$. Como la energía es positiva, la función de onda se extiende hasta el infinito y no hay cuantización, es decir, existe una solución para cada valor de $E > 0$, que llamaremos ψ_E . De hecho, existen muchas soluciones linealmente independientes para una dada energía y buscamos aquella que satisfaga las condiciones de contorno correctas para representar la física del problema de dispersión.

Supongamos un haz de partículas que incide con momento \mathbf{p} sobre un blanco, como se muestra en la figura 3.1. Como el potencial es de corto alcance, muy lejos del blanco las partículas del haz no lo perciben, y entonces supondremos que el haz incidente está representado por una onda plana de momento definido \mathbf{p} . Esto implica cierta idealización ya que una onda plana real llena todo el espacio y, en particular, se extiende hasta el infinito en la dirección transversal, mientras que los haces reales son siempre de extensión finita en la dirección transversal. En la figura 3.2 se muestra una imagen de lo que sucede cuando la onda plana incidente golpea el objetivo; la interacción produce la onda dispersa, que se irradia lejos del objetivo. Si el potencial de dispersión es de corto alcance, podemos esperar intuitivamente que parte de la onda incidente, las partes con un gran parámetro de impacto, no alcancen el objetivo y continúen corriente abajo como una onda plana casi sin modificar. Consideraremos dispersión elástica, en la que si las partículas incidentes ganan algo de energía cinética al caer en el pozo de potencial creado por el blanco, la pierden al escapar del pozo, y a grandes distancias las partículas dispersadas conservan su energía. Sin embargo, en general van a cambiar su momento, y por lo tanto su dirección.

Otra idealización recae en el uso de autofunciones ψ para describir el proceso de dispersión, ya que una función propia es un estado estacionario, y los haces reales se encienden en algún momento y se apagan en un momento posterior. Una autofunción representa el estado estacionario idealizado que se obtendría si una onda plana pudiera dirigirse contra un objetivo para todos los tiempos desde $t \rightarrow \infty$.

Otro problema es que las autofunciones de energía positiva no son normalizables, por lo que no pueden representar el estado de una sola partícula. Tratamos con este problema en estas notas interpretando la densidad $\rho = |\psi|^2$, no como una densidad

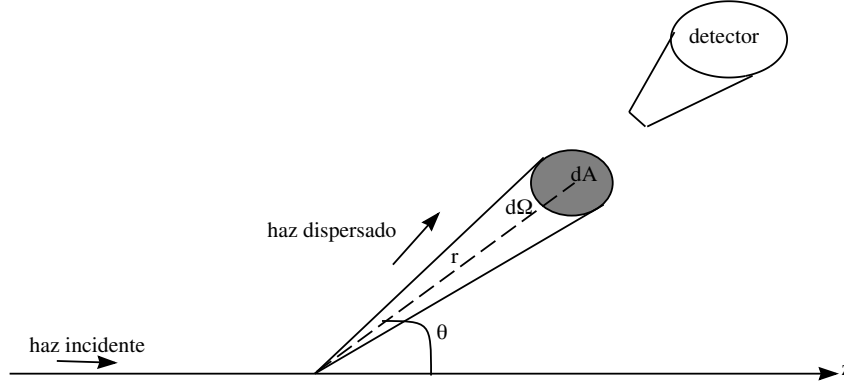


Figura 3.1: Un detector de partículas intercepta partículas que se dispersan dentro de un pequeño ángulo sólido $d\Omega$.

de probabilidad, sino como una densidad de partículas en el haz.

Del mismo modo, interpretamos la corriente,

$$\mathbf{J} = \text{Re} \left[\psi^* \left(-\frac{i\hbar\nabla}{m} \right) \psi \right], \quad (3.3)$$

como una corriente de partículas, no una corriente de probabilidad. La normalización general de la función de onda ilimitada es arbitraria y representa simplemente la intensidad del haz. Las cantidades de interés, como la sección eficaz diferencial, son independientes de esta normalización.

La solución ψ_E debe tener las condiciones de contorno correctas a grandes distancias del centro dispersor de manera de representar tanto la onda plana incidente como la onda dispersada. Definimos la onda incidente por

$$\psi_i = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.4)$$

que se entiende que está presente en todo el espacio, incluso en zonas de $|\mathbf{r}|$ chico, donde el potencial V está activo. La onda incidente está parametrizada por un vector de onda \mathbf{k} o un momento equivalente $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. En general esta onda incidente no satisface la ecuación de Schrödinger (6.4) en todo el espacio, pero, al suponer que $V(\mathbf{r})$ decae lo suficientemente rápido, lo podemos ignorar lejos del centro dispersor. Esto se aplica también a grandes distancias, cerca del detector y luego de ser dispersado el haz. Entonces, a grandes distancias, en todo el espacio, la onda incidente satisface la ecuación de Schrödinger (6.4) y, posee una energía

$$E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \quad (3.5)$$

Para un vector de onda incidente \mathbf{k} dado, el efecto del potencial será dispersar esta onda, de manera que en el detector, a grandes distancias del potencial, la función de onda será

$$\psi_{|r|\rightarrow\infty} \sim \psi_i + \psi_d = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \psi_d \quad (3.6)$$

donde ψ_d representa el efecto del potencial dispersor. De acuerdo con la imagen de la figura 3.2, requerimos que a grandes distancias la onda dispersa sea puramente saliente, es decir, que sea una onda esférica que se propague en dirección radial, pero que el efecto de la dispersión dependa de los ángulos (θ, φ) . Por esta razón suponemos que la forma asintótica de la función de onda será

$$\psi_{|r|\rightarrow\infty} \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (3.7)$$

Suponiendo que $V(\mathbf{r})$ puede ignorarse a grandes distancias y observando que la ecuación solo se aplica asintóticamente, requerimos que la onda dispersa satisfaga la ecuación de Schrödinger para partículas libres a orden dominante en $1/r$, lo cual se verifica debido a que

$$\nabla^2 \left[\frac{e^{ikr}}{r} f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \right] = -k^2 \left[\frac{e^{ikr}}{r} f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^3}\right), \quad (3.8)$$

donde el termino dominante proviene del término radial del Laplaciano en coordenadas esféricas¹

Las condiciones de contorno están completamente parametrizadas por el número de onda incidente \mathbf{k} , que también determina el valor de la energía E a través de la relación (3.5). Una misma energía incidente puede obtenerse con muchos números de onda diferentes, variando su dirección. La familia está parametrizada por puntos en una esfera (la dirección de \mathbf{k}). (En la dispersión unidimensional, esta familia se reduce a dos miembros, ondas de dispersión que inciden desde la derecha o desde la izquierda). Por esta razón, de ahora en adelante denotaremos las soluciones de dispersión de la ecuación de Schrödinger $\psi_{\mathbf{k}}$ en lugar de ψ_E , donde se entiende que \mathbf{k} y el valor propio de la energía E están conectados por la relación de partículas libres (3.5).

Es plausible que para cada \mathbf{k} existe una única solución a la ecuación de energía de Schrödinger con energía (3.5) y que satisface las condiciones de contorno (3.7). Este es un hecho que se puede probar con la teoría de las ecuaciones integrales de

¹El Laplaciano en coordenadas esféricas posee la forma

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}. \quad (3.9)$$

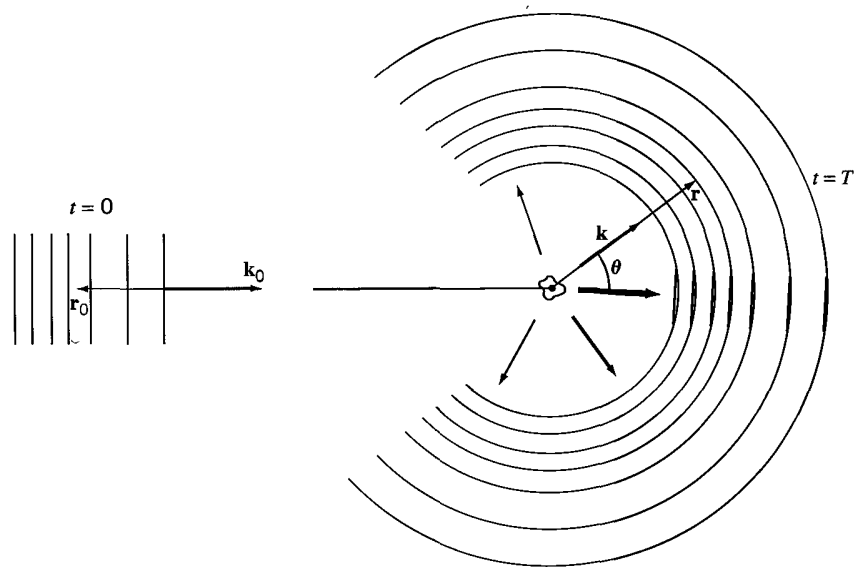


Figura 3.2: Dispersión de un paquete de ondas incidente desde la izquierda con impulso medio $\hbar k_0$. En la dispersión elástica, el paquete de ondas se dispersa con igual energía pero con amplitudes variables en diferentes direcciones (indicadas por el grosor de las flechas). En la dirección de avance, la onda dispersa interfiere con la onda incidente que avanza.

Fredholm. Observamos que en la teoría de la dispersión las únicas cantidades que son interesantes físicamente son aquellas definidas por las propiedades asintóticas (r grande) de la función onda. Esto se aplica a la sección transversal diferencial, que es lo que normalmente se mide en experimentos reales.

3.2. Amplitud de dispersión y sección eficaz

La función $f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)$ se denomina *amplitud de dispersión*. Es en general una función compleja de los ángulos. El objetivo de la teoría de la dispersión a su determinación, ya que guarda una relación simple con la sección eficaz diferencial.

Imaginemos una situación experimental como la ilustrada en la figura 3.1. Un detector, ubicado a cierta distancia del dispersor, intercepta todas las partículas dispersadas dentro de un pequeño cono de ángulo sólido $\Delta\Omega$, centrado en alguna dirección $\hat{\mathbf{k}} = (\theta, \varphi)$.

El flujo incidente es

$$\mathbf{J}_i = \frac{\hbar}{2mi} (\psi_i^* \nabla \psi_i - \psi_i \nabla \psi_i^*) = \frac{\hbar k}{m} \hat{\mathbf{k}} \equiv v_i \hat{\mathbf{k}} \quad (3.10)$$

En cuanto al dispersado, toma la forma, a grandes distancias²

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_d = \frac{\hbar}{2mi} [\psi_d^* \nabla \psi_d - \psi_d \nabla \psi_d^*] &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\frac{2}{r^2} |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 ik \mathbf{e}_r \right. \\ &+ \frac{1}{r^3} \left(f_{\mathbf{k}}^*(\theta, \varphi) \frac{\partial f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} - f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^*(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) \mathbf{e}_\theta + \\ &\left. \frac{1}{r^3 \sin \theta} \left(f_{\mathbf{k}}^*(\theta, \varphi) \frac{\partial f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} - f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^*(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right) \mathbf{e}_\varphi \right] \quad (3.12) \end{aligned}$$

A grandes distancias es el término radial el que domina por lo que podemos escribir

$$\mathbf{J}_d \sim \frac{\hbar k}{m} |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 \frac{1}{r^2} \mathbf{e}_r = v_i |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 \frac{1}{r^2} \mathbf{e}_r \quad (3.13)$$

A partir del flujo dispersado podemos calcular el número de partículas dispersadas por unidad de tiempo que atraviesan el detector ,

$$dN = \mathbf{J}_d \cdot d\mathbf{A} = \mathbf{J}_d \cdot \mathbf{e}_r r^2 d\Omega = v_i |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (3.14)$$

²En coordenadas esféricas el gradiente se escribe

$$\nabla \psi(r, \theta, \varphi) = \frac{\partial \psi}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \mathbf{e}_\varphi. \quad (3.11)$$

Dividiendo esta cantidad por el flujo de partículas incidentes tendremos el diferencial de la sección eficaz de dispersión,

$$d\sigma \equiv \frac{dN}{J_i} = |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (3.15)$$

La sección eficaz diferencial, que mide el número de partículas dispersadas por unidad de flujo incidente y por unidad de ángulo sólido, se obtiene dividiendo por el elemento de ángulo sólido

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 \quad (3.16)$$

Si se mide la sección eficaz diferencial en un experimento, se puede determinar el módulo de la amplitud de dispersión y, de él, tener idea de la función de onda de las partículas dispersadas. Notemos que $f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)$, además de depender de los ángulos (θ, φ) , en general depende de \mathbf{k} , y por lo tanto, de la energía de las partículas incidentes.

La sección eficaz total, σ , se obtiene integrando sobre todos los ángulos sólidos,

$$\sigma = \int d\Omega |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2. \quad (3.17)$$

y refleja la probabilidad total de que una partícula sea dispersada, dividida por el flujo de probabilidad incidente.

3.3. Funciones de Green

Para completar la discusión, deberíamos mostrar que efectivamente existen autofunciones de la forma (3.7). Esto puede hacerse construyendo explícitamente soluciones $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Consideremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un problema como el que nos ocupa. Es decir,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_E(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}) \quad (3.18)$$

donde $V(\mathbf{r})$ es el potencial dispersor. Escribiendo

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad u(\mathbf{r}) = \frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar^2} \quad (3.19)$$

tendremos

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3.20)$$

En este punto, introducimos la función de Green asociada al problema libre, en ausencia de potencial:

$$(\nabla^2 + k^2) G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.21)$$

Conocemos además la solución de la ecuación homogénea correspondiente a una onda plana:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_k^0(\mathbf{r}) = 0 \implies \psi_k^0 = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (3.22)$$

Con esto, podemos escribir la solución general de (3.20) en la forma

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \psi_k(\mathbf{r}') \quad (3.23)$$

Hemos pasado de esta manera del problema de resolver una ecuación diferencial, (3.18), al problema de resolver la ecuación integral. Veremos que la solución, que será iterativa, nos permitirá en particular, calcular $f_k(\theta, \varphi)$ y así podremos calcular la sección eficaz de dispersión.

Debemos ajustar esta solución de manera que se cumpla la condición de contorno (3.7),

$$\psi_{r \rightarrow \infty} \sim \exp(ikz) + \psi_d \quad (3.24)$$

Notemos que la solución de la ecuación homogénea corresponde en (3.23) a una onda plana que viaja en una dirección arbitraria mientras que en (3.7) nos restringimos al eje z . Por supuesto, esto se ajusta fácilmente poniendo en (3.23) $\mathbf{k} = (0, 0, k)$.

Eligiendo el sistema de coordenadas de manera que $\mathbf{k}' = (k'_x, k'_y, k'_z)$ sea tal que k'_z coincida con la dirección de $\hat{\mathbf{r}}$, la exponencial se simplificará a

$$G_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \int k'^2 dk' \sin \theta' d\theta' d\varphi' \frac{1}{k'^2 - k^2} \exp(ik'r \cos \theta') \quad (3.25)$$

donde θ' es el ángulo que forma \mathbf{k} con el eje z' . Luego de integrar trivialmente sobre φ' y sobre θ' , llegamos a

$$\begin{aligned} G_k(\mathbf{r}) &= \frac{i}{\pi r} \int_0^\infty k' dk' \frac{1}{k'^2 - k^2} [\exp(ik'r) - \exp(-ik'r)] \\ &= \frac{1}{i\pi r} \int_{-\infty}^\infty k' dk' \frac{\exp(ik'r)}{k'^2 - k^2} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Esta es una integral que tiene singularidades en el camino de integración. Se trata de un problema que tiene una solución muy simple en la teoría de una variable compleja y que consiste en deformar ligeramente el camino de manera de esquivar los polos. Alternativamente se pueden desplazar esos polos del eje real. Si definimos

$$G_k^\pm(\mathbf{r}) = \lim_{\eta \rightarrow 0} G_{k^2 \pm i\eta}(\mathbf{r}) \quad (3.27)$$

tendremos

$$\begin{aligned} G_k^\pm(\mathbf{r}) &= \frac{1}{i\pi r} \int_{-\infty}^\infty k' dk' \frac{\exp(ik'r)}{k'^2 - (k^2 \pm i\eta)} \\ &= \frac{1}{i\pi r} \int_{-\infty}^\infty k' dk' \frac{\exp(ik'r)}{(k' - \sqrt{k^2 \pm i\eta})(k' + \sqrt{k^2 \pm i\eta})} \end{aligned} \quad (3.28)$$

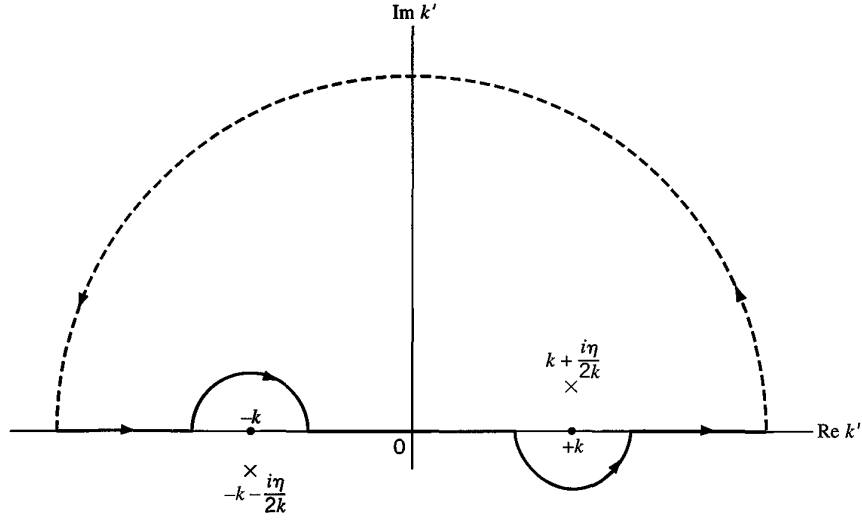


Figura 3.3: Camino de integración en el plano complejo k' .

Si consideramos que k' es una variable compleja con parte imaginaria positiva, $\exp(ik'r)$ decrece exponencialmente cuando $r \rightarrow \infty$. En tal caso, si consideramos un camino de integración en el semiplano positivo como el de la figura 3.3, la integral sobre el semicírculo se anula.

Los polos corresponden a los valores de k' tales que

$$k' = \pm \sqrt{k^2 \pm i\eta} \approx \pm k \left(1 \pm \frac{i\eta}{2k^2} \right) + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (3.29)$$

Para el caso en que se suma $+\eta$ a la parte imaginaria los polos están en $k' = k + i\bar{\eta}$ y en $k' = -k - i\bar{\eta}$ por lo que, en el camino de la figura 3.3 solo contribuye el primero. En este caso se obtiene fácilmente, utilizando el teorema de Cauchy,

$$G_k^+(r) = \frac{\exp(ikr)}{r} \quad (3.30)$$

Análogamente, para el caso en que se suma $-\eta$ solo contribuye el polo que corresponde a $k' = -k + i\eta$ y se obtiene

$$G_k^-(r) = \frac{\exp(-ikr)}{r} \quad (3.31)$$

Lo mismo se hubiera obtenido de considerar un camino en el semiplano inferior. Tenemos entonces para la solución (3.23),

$$\psi_k^\pm(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{\exp(\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} u(\mathbf{r}') \psi_k^\pm(\mathbf{r}') \quad (3.32)$$

Que existan dos soluciones se debe a que la ecuación a resolver es de segundo orden. Debemos entonces elegir la solución que se adecue a la condición de contorno que impusimos, *i. e.* a una onda esférica saliente a grandes distancias. Es fácil convencerse que, para $r \rightarrow \infty$, es la solución ψ_k^+ la que tiene el buen comportamiento. En efecto, desarrollando el argumento del exponencial se tiene

$$k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx kr \left(1 - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} \right) + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \quad (3.33)$$

de manera que

$$\psi_k^\pm(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(\pm ikr)}{r} \int d^3r' \exp(\mp i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \psi_k^\pm(\mathbf{r}') \quad (3.34)$$

donde hemos llamado $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{r}}$. Tenemos entonces como solución acorde con las condiciones de contorno a aquella que se escribe

$$\psi_k^+(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ikr)}{r} \int d^3r' \exp(-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \psi_k^+(\mathbf{r}'). \quad (3.35)$$

De esta expresión podemos identificar a la amplitud de dispersión $f_k(\theta, \varphi)$, ya que la habíamos definido así:

$$\psi_{r \rightarrow \infty} \sim \exp(ikz) + f_k(\theta, \varphi) \frac{\exp(ikr)}{r}. \quad (3.36)$$

Tendremos entonces

$$f_k(\theta, \varphi) = f_k(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' V(\mathbf{r}') \psi_k^+(\mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'). \quad (3.37)$$

Recordemos que θ es el ángulo entre el eje de incidencia (z) y el definido por el detector. Esa elección hizo que no hubiera dependencia en el ángulo azimutal φ .

3.4. Aproximación de Born

Evidentemente, como no hemos resuelto la ecuación, no conocemos ψ_k^+ por lo que no conocemos $f_k(\theta)$. Podemos sin embargo hacer una primera aproximación (llamada de Born) que consiste, sin más, en tomar a ψ_k^+ como la onda plana incidente. En tal caso tendremos

$$f_k^{(1)}(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' V(\mathbf{r}') \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (3.38)$$

donde $V(\mathbf{q})$ es la transformada de Fourier del potencial evaluada en el momento transferido $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$. Insertando este resultado en la fórmula (3.16),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta, \varphi)|^2 \quad (3.39)$$

obtendremos la sección eficaz diferencial en la aproximación de Born

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k^{(0)}(\theta)|^2 = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int d^3r' V(\mathbf{r}') \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}') \right|^2 \quad (3.40)$$

En particular, para un potencial esféricamente simétrico, de

$$\int d\Omega e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = \frac{4\pi}{qr} \sin qr \quad (3.41)$$

obtenemos

$$V(\mathbf{q}) \equiv V(q) = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr V(r) r \sin qr \quad (3.42)$$

Por lo tanto, la amplitud

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \rightarrow f^{(1)}(q) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} V(q) \quad (3.43)$$

solo depende de $q \equiv |\mathbf{q}|$ (recordar que $k' = k$):

$$q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = [2k^2(1 - \cos\theta)]^{1/2} = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (3.44)$$

El ángulo θ está ilustrado en la figura 3.4. Notemos que en la aproximación de Born es conveniente considerar a la sección eficaz diferencial, no como una función del ángulo θ , sino como función del momento transferido q . Fig. 2.6. El impulso transferido es $q = k - k'$. Como ejemplo analizamos al potencial de Yukawa,

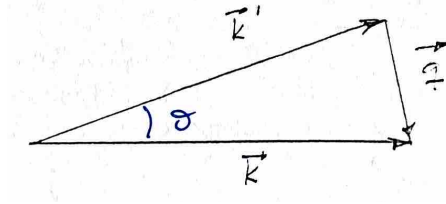
$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}, \quad (3.45)$$

donde: (i) V_0 no depende de r y (ii) a la cantidad $1/\mu$ se la puede considerar como el alcance del potencial, ya que $V(r)$ tiende rápidamente a cero para $r \gg 1/\mu$. Usando

$$\int_0^\infty e^{-\mu r} \sin qr dr = \text{Im} \int_0^\infty e^{-\mu r + iqr} dr = \text{Im} \left(\frac{1}{-\mu + iq} \right) = \frac{q}{\mu^2 + q^2} \quad (3.46)$$

obtenemos,

$$f^{(1)}(q) = -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{q^2 + \mu^2} \quad (3.47)$$



que insertando en (3,16) da lugar a la fórmula:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \right)^2 \left(\frac{1}{4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \mu^2} \right)^2 \quad (3.48)$$

Es interesante observar que si $\mu \rightarrow 0$, al mismo tiempo que $V_0/\mu \rightarrow ZZ'e^2$, el potencial de Yukawa se reduce al potencial Coulombiano, y

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{16} \left(\frac{ZZ'e^2}{E_{cin}} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (3.49)$$

donde $E_{cin} = \hbar^2 k^2 / 2m$. El último resultado es precisamente la sección eficaz para la dispersión de Rutherford que se obtiene clásicamente. (Ha desaparecido \hbar !) Sin embargo, la obtención del resultado correcto es accidental, ya que la ec. (3.48) no es válida para el potencial Coulombiano cuyo alcance es infinito.

Remarquemos las siguientes propiedades de la amplitud $f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ cuando se trata de un potencial central:

1. $f^{(1)}$ depende solamente de q .
2. $f^{(1)}$ es siempre real. Notemos que esto lleva, en principio, a una dificultad con respecto al teorema óptico (3.79). Como éste esencialmente expresa la conservación del número de partículas, se dice que la aproximación de Born no es conservativa. Sin embargo, la aproximación de Born es consistente, por lo siguiente: $f^{(1)}$ es de orden de V , luego σ es de orden de V^2 , y por lo tanto según (3.79) la parte imaginaria de $f_k(\theta)$ también tendrá que ser de orden V^2 .
3. $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ no depende del signo del potencial.
4. Para k pequeños [de (3.38) con $e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} \simeq 1$]

$$f^{(1)} = -\frac{m}{\hbar^2} \int V(r)r^2 dr \quad (3.50)$$

y $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ es isotrópica.

5. $f^{(1)}$ es pequeña para valores grandes de q , debido a las oscilaciones rápidas oscilaciones del integrando en (3.42).

Vamos a discutir ahora brevemente la validez de la aproximación de Born de primer orden. De la deducción de la misma es obvio que será aplicable cuando $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ no sea muy diferente de $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ dentro del rango del potencial. En otras palabras la modificación de la onda incidente tiene que ser pequeña. De la ecuación integral, ec. (3.23) vemos que esta condición se satisface en el centro del potencial dispersor ($r = 0$) cuando:

$$\left| \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}}{r'} V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \right| \ll 1. \quad (3.51)$$

En particular, en el caso del potencial de Yukawa (3.45), y para bajas energías ($k \ll \mu$) cuando es legítimo reemplazar $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}$ por 1, resulta

Es interesante comparar este resultado con la condición para que el potencial de Yukawa desarrolle un estado ligado, que es:

$$\frac{2m |V_0|}{\hbar^2 \mu^2} \geq 2,7, \quad (3.52)$$

con $V_0 = 0$. En otras palabras, si el potencial es lo suficientemente atractivo como para desarrollar un estado ligado, la aproximación de Born probablemente llevará a un resultado incorrecto.

Se puede demostrar que, para el potencial de Yukawa, la condición para que el segundo término de (3.23) sea pequeño, en el límite de k grande implica

$$\frac{2m |V_0|}{\hbar^2 \mu k} \ln \left(\frac{k}{\mu} \right) \ll 1. \quad (3.53)$$

3.5. Ondas parciales

El problema de la dispersión que estamos considerando no es más que la búsqueda de soluciones de la ecuación de Schrödinger con energía positiva y que satisfacen las condiciones de contorno (3.7). Concentrémonos en potenciales con simetría esférica, es decir, que depende sólo de $|\mathbf{r}| = r$, $V = V(r)$, para los cuales la ecuación de Schrödinger es separable en coordenadas esféricas, y las soluciones pueden escribirse en la forma

$$\psi_{klm}(\mathbf{r}) = \psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (3.54)$$

donde $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ son los armónicos esféricos, y

$$R_{kl}(r) = \frac{u_{kl}(r)}{r}, \quad (3.55)$$

donde u_{kl} es solución de la ecuación radial,

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right) u_{kl}(r) = 0, \quad (3.56)$$

que satisfice

$$u_{kl}(0) = 0. \quad (3.57)$$

Aquí hemos parametrizado a la energía positiva usando (3.5). En los problemas de dispersión, típicamente $V(r)$ es de rango finito b (es decir, que $V(r) \simeq 0$ para $r > b$ y por lo tanto puede despreciarse), y entonces para r grande las soluciones son de la forma

$$R_{kl}(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr), \quad r \geq b, \quad (3.58)$$

donde j_l y n_l son las funciones de Bessel esféricas, relacionadas con las funciones de Bessel de primera y segunda especie:

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(x), \quad (3.59)$$

$$n_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{l+1/2}(x). \quad (3.60)$$

A_l y B_l son dos constantes que deberían determinarse (para cada l) para que la solución sea continua y bien comportada en todo el espacio, para lo cual se necesitaría resolver la ecuación para $r < a$, lo cual es muy engorroso. Para evitar este paso concentrémonos en el comportamiento asintótico de la solución radial en $r \geq b$, que es de la forma

$$R_{kl}(r) = A_l(k) \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} - B_l(k) \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr}, \quad r \geq b. \quad (3.61)$$

Si el problema fuera el de una partícula libre, la solución (3.58) sería válida para todo r y no sólo en forma asintótica. En este caso deberíamos tomar $B_l = 0$ ya que la función n_l es divergente en el origen y buscamos soluciones regulares. La presencia de un B_l no nulo viene determinada por el potencial, y cuanto más intenso sea éste, mayor la dispersión que produce y más importante el B_l . Si escribimos en (3.58)

$$B_l = -A_l \tan \delta_l \quad (3.62)$$

obtenemos

$$R_{kl}(r) \simeq C_l \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l(k))}{kr} \quad (3.63)$$

donde $C_l = A_l / \cos \delta_l$ es otra constante. Observamos que el comportamiento asintótico de la *onda parcial* l es el mismo que el de la partícula libre, pero con una fase corrida en δ_l . Por ello δ_l se denomina corrimiento de fase producido por el potencial. Estos corrimientos de fase (o *phase shifts* en inglés) dependen de la energía, o del número de onda k en módulo. Veremos que la amplitud de dispersión y por lo tanto las secciones eficaces ¡sólo dependen de los corrimientos de fase! y por lo tanto éstos

poseen toda la información que nos interesa. Entonces, en lugar de resolver la ecuación diferencial completa para todos los valores de r , utilizaremos las expresiones asintóticas (3.58), a las que le imponemos las condiciones de contorno.

La solución más general posible de energía definida (k fijo) es la superposición

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \sum_{lm} a_{klm} Y_{lm}(\theta, \varphi) R_{kl}(r). \quad (3.64)$$

y resta encontrar los coeficientes a_{klm} imponiendo las condiciones de contorno en $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$, ecuación (3.7). El problema que se nos presenta es que la función de onda incidente está expresada como una onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ que es una solución de partícula libre de la ecuación de Schrödinger que se obtiene separando la ecuación de onda en coordenadas rectangulares, mientras que las soluciones (3.58) y (??) se obtienen separándola en coordenadas esféricas. Para poder imponer condiciones de contorno, necesitamos que todo esté expresado en el mismo lenguaje, y comparar bananas con bananas. Esto es posible, ya que siendo ambas formas soluciones de la misma ecuación, la onda plana incidente debe poder expresarse como una combinación lineal de las soluciones (3.54) junto con (3.58). Vamos a omitir los detalles, y simplemente escribir la expansión de la onda plana en armónicos esféricos. El lector interesado puede consultar la Referencia [11] donde se muestra que

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{lm} i^l Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) j_l(kr) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (3.65)$$

Si además utilizamos el teorema de adición para los armónicos esféricos,

$$\frac{4\pi}{2l+1} \sum_m Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) = P_l(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{r}}) = P_l(\cos \gamma), \quad (3.66)$$

donde γ es el ángulo entre \mathbf{r} y \mathbf{k} , obtenemos para la onda plana la expansión

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_l i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \gamma). \quad (3.67)$$

Tomemos al vector incidente \mathbf{k} en la dirección del eje polar, por ser el eje de simetría rotacional del sistema. En tal caso, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \rightarrow kr \cos \theta = kz$. En ese caso, además, el ángulo γ se reduce al ángulo θ , y entonces

$$e^{ikz} = \sum_l i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta). \quad (3.68)$$

Escribimos ahora la condición de contorno (3.7) expresada como expansión en ondas esféricas,

$$\psi_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} \sim \sum_l i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (3.69)$$

que utilizando la forma asintótica para j_l se escribe

$$\psi_{|r|\rightarrow\infty} \sim \sum_l i^l (2l+1) \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} P_l(\cos\theta) + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (3.70)$$

Por otro lado, la forma asintótica de la solución general (3.71), para \mathbf{k} en la dirección del eje z es

$$\psi_k(r, \theta) = \sum_l a_{kl} P_l(\cos\theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr}, \quad r \text{ grande.} \quad (3.71)$$

donde reemplazamos la parte radial por su forma asintótica.

Igualando los coeficientes de $\exp(-ikr)P_l(\cos\theta)$ en los lados derechos de (16,37) y (16.39) obtenemos

$$-(2l+1)i^l = -e^{-i\delta_l(k)} a_{lk}, \quad (3.72)$$

o

$$a_l(k) = (2l+1)i^l e^{i\delta_l(k)} \quad (3.73)$$

Si ahora igualamos el coeficiente de $\exp(ikr)$,

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} P_l(\cos\theta) + f_k(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} e^{2i\delta_l(k)} P_l(\cos\theta) \quad (3.74)$$

obtenemos una expresión explícita para $f_k(\theta)$ en términos de los corrimientos de fase:

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos\theta) \quad (3.75)$$

de manera que la sección eficaz diferencial toma la forma

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta)|^2 &= \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i\delta_l(k)} e^{-i\delta_{l'}(k)} \\ &\quad \sin \delta_l(k) \sin \delta_{l'}(k) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \end{aligned} \quad (3.76)$$

La integral sobre Ω de esta sección eficaz diferencial da la sección eficaz total. Utilizando la ortogonalidad de los polinomios de Legendre se obtiene finalmente:

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \int_{-1}^1 du \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (3.77)$$

Vemos que hemos obtenido una expresión muy simple para la sección eficaz de dispersión en términos de los corrimientos de fase,

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k), \quad (3.78)$$

Si comparamos esta expresión con la ec. (16.43) que da $f_k(\theta)$, se tiene la importante relación

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f_k(\theta = 0) \quad (3.79)$$

Este resultado se conoce como el teorema óptico y refleja la conservación de la probabilidad. Se llama así por la analogía con lo que sucede con la luz cuando atraviesa un medio. En efecto, cuando las ondas electromagnéticas inciden sobre un centro dispersor, la sección eficaz del mismo es proporcional a la parte imaginaria de la amplitud de dispersión de la onda. El cálculo que lleva a esta relación se hace a partir de la potencia total absorbida por el centro dispersor, que a su vez se obtiene de los vectores de Poynting de las ondas incidente y dispersada.

La sección eficaz total puede escribirse como

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k). \quad (3.80)$$

La cantidad σ_l es la *sección eficaz parcial* para la dispersión de la partícula en el estado l de impulso angular. Notemos que la sección eficaz total σ no hay interferencia entre las diferentes ondas parciales; este efecto, en cambio, está presente en la sección eficaz parcial $d\sigma/d\Omega$.

$$\sigma_l \leq \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} = 4\pi(2l+1)\lambda \quad (3.81)$$

Para visualizar el significado físico de las ondas parciales es conveniente pensar por un momento en términos clásicos, dividiendo el haz de partículas incidentes en zonas cilíndricas de radios: $(l+1)\lambda = \lambda, 2\lambda, 3\lambda \dots (\lambda = \hbar/p)$, como se muestra en la Fig. (3.4). Todas las partículas con el parámetro de impacto clásico b entre $l\lambda$ y $(l+1)\lambda$ viajarán en la zona cilíndrica l^3 y

$$\sigma_l^{\text{clásica}} \leq \pi(2l+1)\lambda^2 \quad (3.83)$$

ya que $\pi(2l+1)\lambda^2$ es la superficie del anillo l -ésimo.

Comparando este último resultado con (3.80) vemos que la sección eficaz clásica es menor en un factor 4. Esto se debe a la inevitable presencia de efectos de difracción para los cuales es responsable la naturaleza ondulatoria de la materia; más detalles se darán al discutir la dispersión por una esfera rígida.

³Como la dimensión transversal de una onda plana es infinita, es de esperar que contenga todos los posibles valores del parámetro de impacto

$$\ell = l\hbar/p = l\lambda \quad (3.82)$$

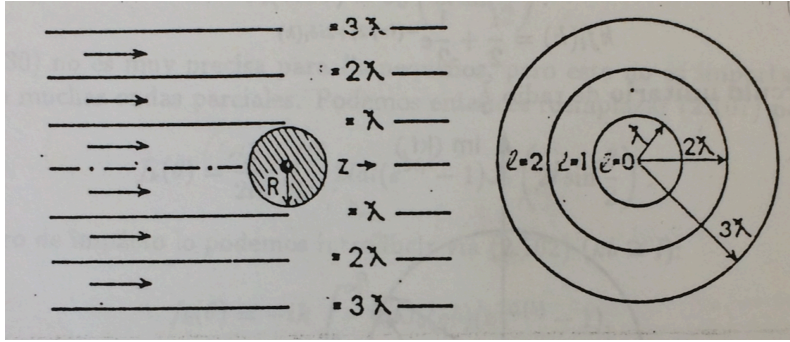


Figura 3.4: Las partículas con con el parámetro de impacto clásico ℓ entre $l\lambda$ y $(l + 1)\lambda$ viajarán en la zona cilíndrica l . El alcance del potencial es b .

Si el alcance del potencial es b , clásicamente habrá dispersión en el anillo l cuando $l\lambda \leq b$. De ahí se puede inferir que en caso cuántico y para un potencial de corto alcance:

- contribuirá solamente un número limitado de ondas parciales con $l_{\text{máx}} = kb$,
- si para un dado l es $\lambda l \gg b$, será $\sigma_l \simeq 0$,
- si $\lambda \gg b$ solo $\sigma_{l=0}$ será apreciable (energías bajas),
- si $\lambda \ll b$ contribuyen todas las ondas parciales (energías altas).

3.6. Determinación de corrimientos de fase

Veamos como se determinan los $\delta_l(k)$ a partir de un potencial V . Supondremos que V se anula para $r > b$, siendo b el rango del potencial. Para $r > b$ la función de onda tiene una forma asintótica que es superposición de ondas esféricas:

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l i^l (2l + 1) R_{kl}(r) P_l(\cos \theta) \quad (r > b) \quad (3.84)$$

con

$$R_{kl}(r) = c_l [\cos \delta_l(k) j_l(kr) - \sin \delta_l(k) n_l(kr)]. \quad (3.85)$$

En la zona interior tendremos que resolver la ecuación radial de Schrödinger de manera aproximada, analíticamente, numéricamente, etc. Supongamos haber obtenido tal solución $R_{kl}(r)$ para $0 < r < b$. En $r = b$, la función $R_{kl}(r)$ y su derivada deben ser continuas. Introducimos, entonces, la derivada logarítmica

$$\alpha_l(k) \equiv \frac{1}{R_{kl}(b)} \left(\frac{dR_{kl}(r)}{dr} \right)_{r=b} \quad (3.86)$$

que podemos evaluar por medio de (3.85):

$$\alpha_l(k) = k \frac{\cos \delta_l(k) j_l'(kb) - \sin \delta_l(k) n_l'(kb)}{\cos \delta_l(k) j_l(kb) - \sin \delta_l(k) n_l(kb)} \quad (3.87)$$

que si conocemos las derivadas logarítmicas en $r = b$, podemos invertir y el corrimiento de fase $\delta_l(k)$

$$\cot \delta_l(k) = \frac{\alpha_l(k) n_l(kb) - k n_l'(kb)}{\alpha_l(k) j_l(kb) - k j_l'(kb)}. \quad (3.88)$$

Esto significa que los corrimientos de fase dependen del potencial solamente por medio de las derivadas logarítmicas correspondientes. Es más, la elección del punto b es arbitraria (siempre que corresponda a la región donde el potencial se anula). Solo necesitamos entonces integrar la ecuación radial desde $r = 0$ hasta b para obtener los α_l

Ejemplo: esfera rígida

Es interesante mencionar la dispersión por una esfera rígida de radio b . El potencial es

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{para } r \leq b \\ 0 & \text{para } r > b \end{cases} \quad (3.89)$$

En este problema ni siquiera necesitamos de los α_l (que valen ∞). Solamente tenemos que saber que en $r = b$ la función de onda se anula ya que la esfera es impenetrable. Será $R_l(r)|_{r=b} = 0$ y de (3.85),

$$\cos \delta_l j_l(kb) - \sin \delta_l n_l(kb) = 0 \quad (3.90)$$

Por lo tanto conocemos los corrimientos de fase para todo l , sin haber hecho ninguna aproximación. En particular para $l = 0$:

$$\cot \delta_0(k) = \frac{-\cos kb/kb}{\sin kb/kb} = -\cot kb, \quad (3.91)$$

o

$$\delta_0 = -kb \quad (3.92)$$

3.6.1. Relación entre el corrimiento de fase y el potencial

Consideremos primero la dispersión $l = 0$ por la esfera rígida. Según (3.85) la función de onda radial para $r > b$, omitiendo el factor c_l , se comporta como

$$R_0(r) \sim \cos \delta_0 \frac{\sin kr}{kr} + \sin \delta_0 \frac{\cos kr}{kr} = \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr}. \quad (3.93)$$

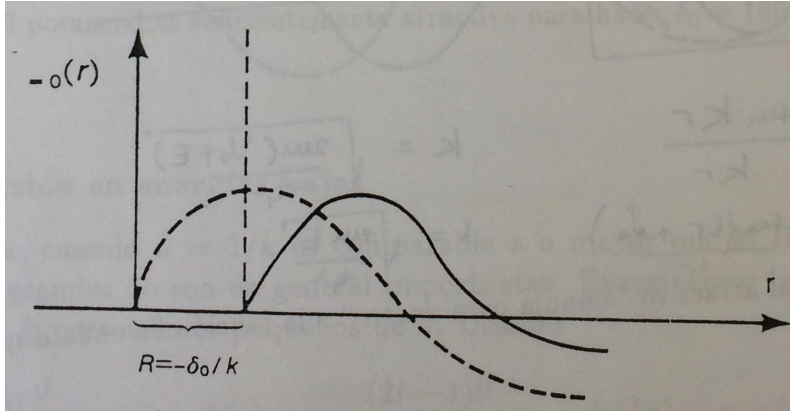


Figura 3.5: La función $rR_0(r)$. La curva punteada es para $V = 0$ y se comporta como $\sin kr$. La curva sólida, desplazada en $b = -\delta_0/k$, corresponde a la dispersión de la onda s por la esfera rígida.

Luego, si representamos $u_0(r) = rR_0(r)$ en función de r , obtenemos una onda sinusoidal, que comparada con la onda libre sinusoidal está corrida en $b = -\delta_0/k$; ver figura 3.5. Ahora tomamos el potencial atractivo representado por el pozo cuadrado:

$$V_{\text{pozo cuad.}}(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{para } r \leq b \\ 0 & \text{para } r > b \end{cases} \quad (3.94)$$

cuyo rango y profundidad son b y V_0 . La solución externa para la función de onda estará de nuevo dada por (3.93). La solución interna también es de la forma sinusoidal

$$R_0(r) \sim \frac{\sin k'r}{k'r}, \quad (3.95)$$

con

$$k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)}, \quad (3.96)$$

es decir, que tendrá una curvatura mayor que en el caso de la partícula libre. Podemos convencernos fácilmente que al crecer el potencial lentamente desde cero hasta su valor final, la función de onda tenderá a oscilar cada vez más rápidamente en la región del potencial, como se ilustra en la figura 3.6

Además, de la expansión asintótica de la parte radial,

$$R_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \begin{cases} \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), & \text{si } V(r) = 0 \\ \frac{e^{i\delta_l}}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right), & \text{si } V(r) \neq 0 \end{cases} \quad (3.97)$$

vemos que el comportamiento anterior de la función de onda dispersada es válido en general. Es decir que el efecto del potencial consiste en “empujar hacia dentro” a la

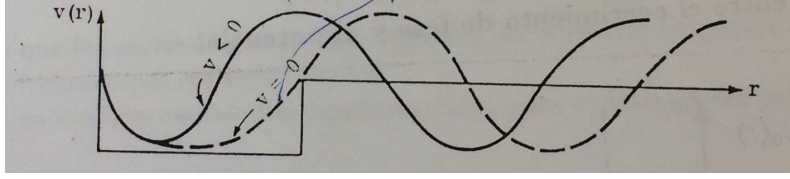


Figura 3.6: Un potencial atractivo “empuja para dentro” a la función de onda dispersada.

función de onda cuando $\delta_l > 0$ (ver la figura 3.6) o en “empujarla para fuera” cuando $\delta_l < 0$. Podemos también concluir que: *un corrimiento de fase positivo (negativo) corresponde a un potencial predominantemente atractivo (repulsivo)*.

La Fig. 3.6 sugiere que un potencial atractivo puede ser lo suficientemente fuerte como para empujar a la onda parcial $l = 0$ en 180° ; ver la figura ???. Lo interesante de este caso es que, por ser $\sin^2 \delta_0 = 0$, resulta: $\sigma_{l=0} = 0$. Y si, además, la energía de la partícula incidente es lo suficientemente baja, para que se puedan despreciar las contribuciones de las ondas parciales con $l > 0$, habrá una perfecta transmisión de la onda incidente ($\sigma = 0$). Este fenómeno se conoce como el efecto de **Ramsauer-Townsen** y fue observado experimentalmente. Por ejemplo, al bombardear los átomos de los gases raros con electrones, la sección eficaz presenta un mínimo pronunciado para una energía incidente de $\simeq 0,7$ eV.

3.6.2. Dispersión a bajas energías

Como ya vimos, cuando $\lambda = 1/k$ es comparable a o mayor que el rango b , las ondas parciales con l grandes no son en general importantes. Examinemos brevemente el comportamiento de δ_l para valores pequeños de k . Usando que para x pequeño,

$$j_l(x) \sim \frac{x^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(x) \sim -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}, \quad (3.98)$$

donde $(2l+1)!! \equiv (2l+1)(2l-1)\cdots 5 \cdot 3 \cdot 1$, para $kb \ll 1$ será,

$$\cot \delta_l(k) \simeq \frac{(2l-1)!!(2l+1)!!}{(kb)^{2l+1}} \frac{l+1 + b\alpha_l(k)}{l - b\alpha_l(k)}. \quad (3.99)$$

Luego cuando $kb \rightarrow 0$, $\alpha_l(k) \rightarrow \alpha_l(0)$ y vemos que

$$\sin \delta_l(k) \simeq k^{2l+1}. \quad (3.100)$$

Es decir que la sección eficaz, dada por (3.80), será proporcional a k^{4l} y por lo tanto muy pequeña, excepto para la onda s :

$$\sigma \simeq \sigma_{l=0} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2 + k^2 \cot^2 \delta_0} \quad \text{para} \quad kb \ll 1 \quad (3.101)$$

Vemos entonces, una vez más, que para energías incidentes suficientemente bajas, las contribuciones a la sección eficaz de todas las ondas parciales con $l \geq 1$, pueden despreciarse. Esto también implica que a bajas energías la dispersión es isotrópica.

3.6.3. Longitud de dispersión

De (3.151) tenemos además que para $kb \ll 1$,

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 \equiv -\frac{1}{a} = -\frac{1 + b\alpha_0(0)}{b^2\alpha_0(0)} \quad (3.102)$$

donde a es la *longitud de dispersión* cuyo significado físico veremos enseguida. De (3.101) resulta:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma = 4\pi a^2 \quad (3.103)$$

En el caso de la esfera rígida la (3.151) se reduce a:

$$(\cot \delta_l(k))_{\text{esf.rig.}} \simeq -\frac{(2l-1)!!(2l+1)!!}{(kR)^{2l+1}}, \quad (3.104)$$

de donde también vemos que es correcto ignorar todos los δ_l con $l \neq 0$ y que $a_{\text{esf.rig.}} = b$. También

$$\sigma_{\text{esf.rig.}} = 4\pi b^2, \quad \text{para } kb \ll 1. \quad (3.105)$$

Podemos concluir que cuando $k \rightarrow 0$, el potencial actúa, cualquiera sea su forma, como una esfera rígida de radio a .

Significado físico de la longitud de dispersión

Partimos de la solución externa (3.93) para el problema de dispersión por un potencial de corto alcance en límite $kr \ll 1$:

$$u_0(r) = e^{i\delta_0} k^{-1} (kr \cos \delta_0 + \sin \delta_0) \quad (3.106)$$

Recordando que la función de onda interna se anula en $r = 0$, podemos dibujar tres diferentes casos, como muestra la figura 3.7. Si nos preguntamos para que otro valor de r se anula la función de onda, encontramos de (3.106) que eso ocurre en $r = -k^{-1} \tan \delta_0$, que es exactamente la relación (3.102) que define a la longitud de dispersión. Tenemos entonces una interpretación geométrica para a y una manera de visualizar a la relación (3.103). Mientras que para la esfera rígida $u_0(r)$ se anula en $r = b$ y la sección eficaz está dada por (3.105), en el caso general $u_0(r)$ se anula en $r = a$ y σ está dada por (3.103). La única deferencia es que a puede ser negativa.

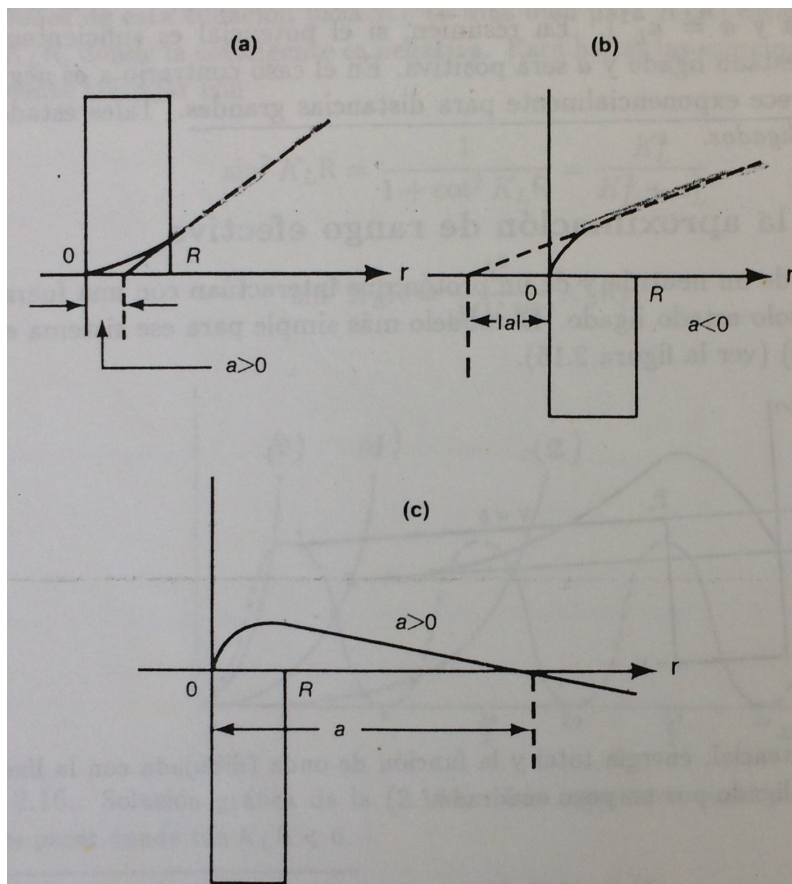


Figura 3.7: Función de onda $u_0(r)$ para (a) potencial repulsivo, (b) para potencial atractivo, y (c) para una atracción mayor. La intersección de $\lim_{kb \rightarrow 0} u_0(r)$ con el eje r se muestra en cada uno de los tres casos.

Para ver el significado del signo de a , analicemos de la ecuación radial

$$u_0''(r) - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)u_0(r) + k^2u_0(r) = 0; \quad u_0(0) = 0 \quad (3.107)$$

para $k = 0$. En la región donde $V(r)$ es atractivo (negativo) $u''(r)$ es negativa (si $u(r)$ es positiva) y por lo tanto tiene que ser cóncava hacia abajo. Cuanto más negativo es $V(r)$ tanto mayor es la concavidad. La cuestión es si la concavidad es suficiente para curvar a $u(r)$ y orientarla hacia abajo mientras que actúa el potencial. Esto, a su vez, está íntimamente relacionado con la existencia del estado ligado, ya que para que haya un estado ligado es necesario que, para $r > b$, $u(r)$ se junte con una función de la forma $e^{-\kappa_L r}$, cuya pendiente es negativa. (Notemos que para valores pequeños de κ_L , $e^{-\kappa_L r}$ es también esencialmente una recta y $a = \kappa_L^{-1}$). En resumen, si el potencial es suficientemente atractivo producirá un estado ligado y a será positiva. En el caso contrario a es negativa y la función de onda crece exponencialmente para distancias grandes. Tales estados se llaman virtuales o anti-ligados.

3.7. Matriz de dispersión

Observemos que existe otro par de soluciones linealmente independientes de parte radial la ecuación de Schrödinger para partículas libres en coordenadas esféricas. Estas son las funciones de Hankel esféricas, que se definen como

$$h_l(kr) = j_l(kr) + in_l(kr) \quad (3.108)$$

junto con su compleja conjugada $h_l^*(x)$. Su expansión asintótica es

$$h_l(kr) \sim \frac{e^{i(kr - l\pi/2)}}{kr}; \quad (3.109)$$

$h_l(kr)$ representa entonces una onda esférica saliente, mientras que h_l^* representa la onda entrante. En esta base, podemos escribir la solución de la ecuación radial como

$$R_{kl}(r) = D_l [h_l^*(kr) + S_l(k)h_l(kr)] \quad (3.110)$$

D_l y S_l son funciones de k que deben determinarse, y pueden expresarse en términos de c_l y δ_l como

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} \quad (3.111)$$

y es llamada la matriz de dispersión. Observemos que

$$|S_l(k)| = 1 \quad (3.112)$$

lo que se conoce como relación de unitariedad para la onda parcial l , e indica que sólo puede haber un cambio de fase en la onda saliente. podemos escribir

$$S_l(k) = \frac{\cot \delta_l(k) + i}{\cot \delta_l(k) - i} \quad (3.113)$$

Esta expresión también puede reacomodarse en la forma

$$S_l(k) - 1 = \frac{2i}{\cot \delta_l(k) - i}. \quad (3.114)$$

3.8. Estados Ligados

Consideremos ahora un potencial atractivo y de corto alcance, de modo que $V(r) = 0$ para $r \geq b$. Sabemos que las soluciones de la ecuación de Schrödinger radial [véase (3.56) y (3.55)] de energía negativa en la región $r \geq b$ son de la forma

$$R_{nl}(r) = C_{nl} h_l(i\kappa_n r) \quad (3.115)$$

donde h_l es la función de Hankel (3.108), que posee un comportamiento asintótico exponencialmente decreciente $h_l(ix) \sim e^{-x}/ix$.⁴ La energía de estas soluciones se parametriza como

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \kappa_n^2}{2m} \quad (3.116)$$

donde κ_n es una cantidad real. Para determinarla, y con ello los valores de las energías, debemos igualar las derivadas logarítmicas de (3.115) en $r = b$,

$$\alpha_l(i\kappa) = i\kappa \frac{h'_l(i\kappa b)}{h_l(i\kappa b)} \quad (3.117)$$

con las de la solución para $r < b$ (que depende del potencial y habrá que obtener de algún modo)⁵. Es interesante destacar que si evaluamos el corrimiento de fase para

⁴La función de Hankel esférica de segunda especie $h_l^*(x) = j_l(x) - in_l(x)$ es linealmente independiente de la de primera especie, pero para argumento imaginario, su comportamiento asintótico es exponencialmente creciente, $h_l^*(ix) \sim e^{+x}/ix$, y entonces debe descartarse.

⁵Es interesante que las derivadas logarítmicas de $h_l(ix)$ son cocientes de polinomios de igual grado:

$$\frac{h'_0(ix)}{h_0(ix)} = -\frac{1+x}{x} \quad (3.118)$$

$$\frac{h'_1(ix)}{h_1(ix)} = -\frac{2+2x+x^2}{x+x^2} \quad (3.119)$$

$$\frac{h'_2(ix)}{h_2(ix)} = -\frac{9+9x+4x^2+x^3}{3x+9x^2+x^3} \quad (3.120)$$

$$\dots = \dots \quad (3.121)$$

el problema de energías positivas (3.88),

$$\cot \delta_l(k) = \frac{\alpha_l(k)n_l(kb) - kn'_l(kb)}{\alpha_l(k)j_l(kb) - kj'_l(kb)}. \quad (3.122)$$

pero en el valor $k \rightarrow i\kappa_n$ de los estados ligados, y reemplazamos la derivada logarítmica $\alpha_l(k)$ por (3.117) obtenemos

$$\cot \delta_l(i\kappa_n) = \frac{\alpha_l(i\kappa_n)n_l(i\kappa_nb) - i\kappa_n n'_l(i\kappa_nb)}{\alpha_l(i\kappa_n)j_l(i\kappa_nb) - i\kappa_n j'_l(i\kappa_nb)}, \quad (3.123)$$

que usando la definición de las funciones de Hankel (3.108) se reduce a

$$\cot \delta_l(i\kappa_n) = i. \quad (3.124)$$

En base a (3.113) vemos entonces que para un estado ligado se verifica que

$$S_l(i\kappa_n) = \frac{\cot \delta_l(i\kappa_n) + i}{\cot \delta_l(i\kappa_n) - i} = \infty, \quad (3.125)$$

es decir que la matriz S , pensada como una función en todo el plano complejo $S_l(k)$ tiene polos en cada uno de los estados ligados $k = i\kappa_n$. Más precisamente, los polos de los estados ligados ($\kappa_n > 0$) están sobre el semi-eje positivo de κ y los de los estados virtuales ($\kappa_n < 0$) están sobre el semi-eje negativo de κ .

Consideremos un estado débilmente ligado, es decir que satisface $\kappa_n b \ll 1$, podemos usar entonces la expresión para argumento pequeño de h_l ,

$$h_l(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} -i \frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}} \quad (3.126)$$

y obtener de (3.117):

$$\alpha_l(i\kappa) = -\frac{l+1}{b} \quad (3.127)$$

o equivalentemente

$$l+1 + b\alpha_l(i\kappa) = 0; \quad \text{para } \kappa b \ll 1 \quad (3.128)$$

Esta es la condición, a orden $\kappa_n b$, para que exista un estado ligado con $E_n \simeq 0$. Más precisamente, (3.128) es la condición para tener un estado ligado con

$$E_n = \frac{\hbar^2 \kappa_n^2}{2m} \ll \frac{\hbar^2}{2mb^2}. \quad (3.129)$$

Luego, en el caso de existir un tal estado, por la continuidad de $\alpha_l(k)$, la cantidad $(l+1 + b\alpha_l(k=0))$ será pequeña. La expresión (3.151) para $\cot \delta_l(k)$,

$$\cot \delta_l(k) \simeq \frac{(2l-1)!!(2l+1)!!}{(kb)^{2l+1}} \frac{l+1 + b\alpha_l(k)}{l - b\alpha_l(k)} \quad (3.130)$$

nos indica que $\cot \delta_l(k)$ será pequeño, y por lo tanto la cantidad

$$\sin^2 \delta_l(k) = \frac{1}{1 + \cot^2 \delta_l(k)} \quad (3.131)$$

se verá incrementada (al igual que el valor de $\delta_l(k)$) respecto del valor que tendría de no existir el estado ligado, al igual que la sección eficaz parcial

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_l(k). \quad (3.132)$$

esto implica que el valor relativo de $\sin \delta_l$ (y por lo tanto de σ_l) será incrementado con respecto al valor que tendría de no existir el estado ligado⁶.

3.9. Extensión analítica de la matriz S

Observamos que existe una íntima relación entre los estados ligados y los estados de dispersión. Luego sería deseable tener una descripción teórica que englobe tanto a las soluciones de la ecuación de Schrödinger con energías positivas como con energías negativas. Esto lo hacemos extendiendo analíticamente la matriz de dispersión (3.111), $S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}$, definidas como funciones de la variable real $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, a la región de los valores complejos de k

$$k \rightarrow \mathbf{k} = k + i\kappa \quad (3.133)$$

que corresponden a las energías complejas⁷,

$$E \rightarrow \eta = E - \frac{i\Gamma}{2} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - \kappa^2 + 2ik\kappa) \quad (3.134)$$

Volvamos por un momento al comportamiento asintótico de la función de dispersada en el lenguaje de las funciones de Hankel (3.108), que para $l = 0$ es proporcional a

$$\frac{e^{-i\kappa r}}{r} + S_{l=0}(k) \frac{e^{i\kappa r}}{r}. \quad (3.135)$$

⁶Cuidado, los términos de orden κb hacen la diferencia entre $\cot \delta_l = 0$, que se obtendría al llevar (3.128) a (3.130) y el resultado (3.124), $\cot \delta_l = i$, que es la condición correcta para un estado ligado. Por ejemplo, para $l = 0$ la función de onda del estado ligado es $h_0(i\kappa_L r) \sim -e^{-\kappa_L r}/\kappa_L r$ y de (3.117), en lugar de (3.128), se obtiene $1 + R\alpha_0(i\kappa_L) + \kappa_L R = 0$, que al ser usada en (3.130) conduce a $\cot \delta_0 \simeq (1 + R\alpha_0(i\kappa_L)) / (-R\alpha_0(i\kappa_L)) / (i\kappa_L b) = (-\kappa_L b) / (1 + \kappa_L b) / (i\kappa_L b) \simeq i$

⁷Valores complejos de energía son usados en la física para describir los estados no-estacionarios de un sistema. Como ya vimos, la cantidad Γ determina la probabilidad de decaimiento y se llama constante de decaimiento; Γ será positiva si la función de onda decrece con el tiempo (que es el caso de un decaimiento radioactivo) o negativa si la norma de la función de onda aumenta con el tiempo, que corresponde a los procesos de captura (por ejemplo, cuando el núcleo atómico captura a un nucleón).

Comparémosla con la función de onda para un estado ligado para $r > b$

$$\frac{e^{-\kappa_L r}}{r} \quad (3.136)$$

La existencia de un estado ligado implica que existe una solución no trivial de la ecuación de Schrödinger con $E < 0$ para un valor particular (discreto) de κ_L . Podemos argumentar que $e^{-\kappa_L r}/r$ es como e^{-ikr}/r excepto que k es ahora imaginario puro. Una diferencia importante entre (3.135) y (3.136), además de $k \rightarrow i\kappa_L$, es que en el caso del estado ligado no tenemos el análogo de la onda incidente e^{-ikr}/r . Lo que es de interés físico es el cociente entre los coeficientes de e^{ikr}/r y e^{-ikr}/r que es $S_{l=0}(k)$. En el caso del estado ligado podemos sostener la onda saliente (con k imaginario) sin que exista la onda incidente. Por lo tanto el cociente es ∞ , lo que significa que $S_{l=0}(k)$ tiene un polo en $k = i\kappa_L$. Es decir que el estado ligado implica un polo (que se puede mostrar que es un polo simple) sobre el eje positivo imaginario del plano complejo de k . La región para la dispersión física corresponde a k real y positivo ($k = k$) y a $\delta_0(k)$ real.

Además, cuando $k \rightarrow 0$, $k \cot \delta_0(k)$ toma el valor límite $-1/a$ (3.102), que es finito. Luego δ_0 tiene que comportarse como:

$$\delta_0 \rightarrow 0, \pm\pi, \dots \quad (3.137)$$

Vamos ahora tratar de construir una función simple que satisfaga:

- Polo en $k = i\kappa_L$ (existencia del estado ligado).
- $|S_{l=0}| = 1$ para k real y positivo (unitariedad).
- $S_{l=0} = 1$ en $k = 0$ (comportamiento de umbral).

La función más simple que satisface las tres condiciones es:

$$S_{l=0}(k) = \frac{-k - i\kappa_L}{k - i\kappa_L}. \quad (3.138)$$

Podemos ahora usar (3.114) para $l = 0$, y extendida a todo el plano complejo k ,

$$S_{l=0}(k) - 1 = \frac{2i}{\cot \delta_0(k) - i} \quad (3.139)$$

y despejar

$$\cot \delta_0 = \frac{-\kappa_L}{k} \quad (3.140)$$

Al tomar el límite se obtiene

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = -\kappa_L = -\frac{1}{a}, \quad (3.141)$$

que es la bien conocida la relación entre el estado ligado y la longitud de dispersión.

Discutiremos ahora algunas propiedades generales de la matriz S . Demostremos primero que la generalización de la condición de unitariedad (3.112) es

$$S_l(\mathbf{k})S_l^*(\mathbf{k}^*) = 1 \quad (3.142)$$

Para simplificar los cálculos vamos a hacer la demostración para $l = 0$, usando la ecuación radial (3.56) que ahora escribimos como

$$u''(\mathbf{k}, r) - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)u(\mathbf{k}, r) + k^2u(\mathbf{k}, r) = 0, \quad u(\mathbf{k}, 0) = 0 \quad (3.143)$$

Las soluciones de esta ecuación continen dos constantes arbitrarias, que tomaremos como $u(\mathbf{k}, 0)$ y una constante multiplicando toda la amplitud. Luego, ignorando la segunda

$$\begin{aligned} u(\mathbf{k}, r) &\sim e^{-ikr} - S(\mathbf{k})e^{ikr} \\ &\sim e^{ikr} - \frac{1}{S(\mathbf{k})}e^{-ikr} \end{aligned} \quad (3.144)$$

Antes de deducir (3.142) analizaremos el reemplazo $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$. La ec. (3.143), incluyendo las condiciones de contorno en $r = 0$, es invariante con respecto a este cambio, mientras que para $u(-\mathbf{k}, r)$ obtenemos

$$u(-\mathbf{k}, r) \sim e^{ikr} - S(-\mathbf{k})e^{-ikr}. \quad (3.145)$$

Vemos que (3.144) y esta son la misma solución de la misma ecuación y por lo tanto

$$S_l(\mathbf{k})S_l(-\mathbf{k}) = 1 \quad (3.146)$$

Del mismo modo escribimos (3.143) para \mathbf{k}^*

$$u''(\mathbf{k}^*, r) - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)u(\mathbf{k}^*, r) + k^{*2}u(\mathbf{k}^*, r) = 0 \quad (3.147)$$

y tomamos el complejo conjugado, resulta

$$u^{''*}(\mathbf{k}^*, r) - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)u^*(\mathbf{k}^*, r) + k^{*2}u^*(\mathbf{k}^*, r) = 0 \quad (3.148)$$

donde, una vez más, $u^*(\mathbf{k}^*, r)$ es una función de \mathbf{k} y no de \mathbf{k}^* . De nuevo la última ecuación es la misma que (2.206) y (2.207) toma la forma

$$u^*(\mathbf{k}^*, r) \sim e^{ikr} - S^*(\mathbf{k}^*)e^{-ikr}, \quad (3.149)$$

que al comparar con (3.144) nos lleva a (3.142). De (3.142) y (3.146) es fácil ver que también se satisface la relación

$$S_l(-\mathbf{k}^*) = S_l^*(\mathbf{k}^*), \quad (3.150)$$

como también que $S_l(\mathbf{k})$ dada por el ejemplo anterior, ec. (3.138), satisface las condiciones (3.142) y (?). En resumen hemos demostrado que:

- (3.142): si la matriz $S_l(\mathbf{k})$ tiene un cero para un valor complejo \mathbf{k}_1 , tendrá que tener necesariamente un polo en $\mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}_1^*$.
- (??): si la matriz $S_l(\mathbf{k})$ tiene un polo para un valor complejo \mathbf{k}_1 , tendrá que tener necesariamente otro polo en $\mathbf{k}'_1 = -\mathbf{k}_1^*$.

3.10. Dispersión resonante

Sabemos que a energías muy bajas la dispersión ocurre predominantemente en el canal s . Examinaremos ahora los procesos de dispersión a energías un poco más altas para que las ondas con $l \geq 1$ también entren en juego. Supondremos, sin embargo, que kb continúa siendo lo suficientemente pequeño para que la aproximación de $\cot \delta_l(k)$ a bajas energías, ec. (3.151),

$$\cot \delta_l(k) \simeq \frac{(2l-1)!(2l+1)! l + 1 + b\alpha_l(k)}{(kb)^{2l+1} (l - b\alpha_l(k))}. \quad (3.151)$$

siga siendo válida. De esta vemos que si estamos cerca de la energía $E_R = 2k_R \hbar^2 / 2m$, para la cual $l + 1 + b\alpha_l(k)$ pasa por cero, *i. e.* si

$$l + 1 + b\alpha_l(k_R) = 0, \quad \text{para } k_R b \ll 1. \quad (3.152)$$

$\cot \delta_l(E)$ también pasará por cero. [Nótese la similitud con (3.128)]. En esta situación σ_l será proporcional a k^{-2} y por lo tanto relativamente grande. Este tipo de salto en la sección eficaz se denomina resonancia (o dispersión resonante); véase la figura 3.8.

Expandiendo $\alpha_l(E)$ en torno a E_R , obtenemos:

$$\alpha_l(E) = \alpha_l(E_R) + (E - E_R) \left(\frac{\partial \alpha_l(E)}{\partial E} \right)_{E=E_R} + \dots, \quad (3.153)$$

y de (3.152) resulta:

$$l + 1 + b\alpha_l(E) \simeq (E - E_R) b \left(\frac{\partial \alpha_l(E)}{\partial E} \right)_{E=E_R}. \quad (3.154)$$

Luego la ec. (3.151) se puede ahora expresar en la forma $(l - R\alpha_l(E) \simeq 2l + 1)$:

$$\cot \delta_l(E) \simeq -\frac{2(E - E_R)}{\Gamma_R}, \quad (3.155)$$

donde

$$\Gamma_R = -\frac{2k^{2l+1} R^{2l}}{[(2l-1)!!]^2 \left(\frac{\partial \alpha_l(E)}{\partial E} \right)_{E=E_R}} \quad (3.156)$$

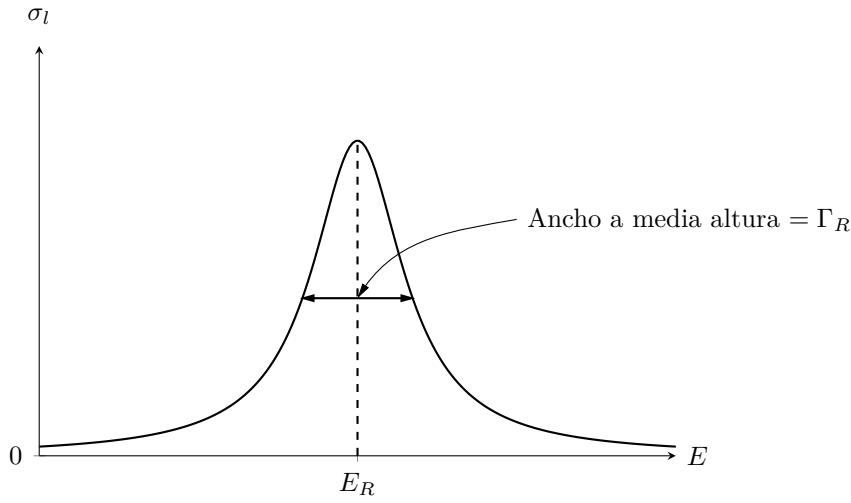


Figura 3.8: Pico resonante en la energía E_R , con un ancho igual a Γ_R . Cuando $E = E_R \pm \frac{\Gamma_R}{2}$, $\sigma_l(E)$ cae a la mitad de su valor máximo que alcanza para $E = E_R$, y por lo tanto Γ_R es el ancho de la resonancia.

(Se puede demostrar que para el decaimiento de un estado resonante $\left(\frac{\partial \alpha_l(E)}{\partial E}\right)_{E=E_R} < 0$ y por lo tanto $\Gamma_R > 0$.) Es decir que cerca de una resonancia

$$\sigma_l(E) = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \frac{\Gamma_R^2}{4(E - E_R)^2 + \Gamma_R^2} \quad (3.157)$$

que es la fórmula de Breit-Wigner representada en la figura 3.8. De la ecuación (3.156) vemos que, cuanto más rápidamente varía $\alpha_l(E)$ con respecto a E tanto más angosta será la resonancia. También se ve que cuanto menor sea el valor de kb y mayor el valor de l para el cual ocurre la resonancia, tanto mayor será el ancho Γ_R .

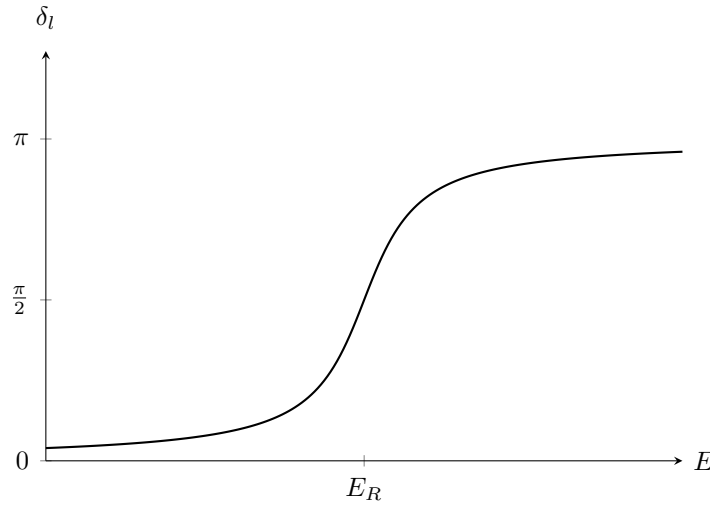
Para $l \geq 1$ la resonancia se produce cada vez que $\cot \delta_l(E)$ se anula, o cuando:

$$\delta_l(E_R) = \left(\frac{1}{2} + n\right) \pi \quad (3.158)$$

donde n es un entero. Además de (3.154) vemos que cerca de la resonancia $\delta_l(E)$ se comporta como:

$$\delta_l(E) = \frac{\pi}{2} + \arctan\left(\frac{E - E_R}{\Gamma_R/2}\right). \quad (3.159)$$

Es decir que al pasar E por E_R , el corrimiento de fase varía bruscamente desde un valor próximo a cero (más $n\pi$) a un valor próximo a π (más $n\pi$); el salto se produce en un pequeño intervalo de energía de orden de Γ_R , como se ilustra en la figura 3.9. La condición (3.152) para una resonancia es muy similar a la condición


 Figura 3.9: Comportamiento de $\delta_l(E)$ cerca de una resonancia.

(3.128) para un estado ligado. Hasta cierto punto la resonancia es un estado ligado, pero con energía positiva. Veámoslo con más detalles. Para un potencial atractivo $V(r)$, el potencial efectivo que ve la partícula incidente es:

$$V_{\text{efec}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (3.160)$$

donde el último término es la barrera centrífuga (ver la figura 3.10). La partícula que está en un estado resonante es detenida por la barrera centrífuga. Eventualmente, sin embargo, puede atravesar la barrera por el efecto túnel, con una constante de decaimiento Γ_R . Obviamente, cuanto más baja sea la energía de la partícula tanto más tiempo estará dentro del pozo. Cuando la partícula incidente llega con una energía próxima a la energía resonante tiene una mayor probabilidad de ser atrapada en un estado cuasi-ligado. Esta mayor probabilidad, a su vez, se refleja en el aumento de la sección eficaz.

Haciendo $E \rightarrow \mathbb{E} = E - i\Gamma/2$ de (3.157) y (3.159) resulta

$$S(\mathbb{E}) = \frac{\mathbb{E} - E_R - i\frac{\Gamma}{2}}{\mathbb{E} - E_R + i\frac{\Gamma}{2}} = \frac{\mathbb{E} - \mathbb{E}_R^*}{\mathbb{E} - \mathbb{E}_R} \quad (3.161)$$

Vemos que $S_l(\mathbb{E})$ tiene un polo en

$$\mathbb{E}_R = E_R - i\frac{\Gamma_R}{2} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_R^2 - \kappa_R^2 + 2ik_R\kappa_R) \quad (3.162)$$

Analizaremos primero los polos de $S(\mathbf{k})$ en el plano \mathbf{k} . La ecuación (??) sugiere que

$$S(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_R^{2*}}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_R^2} = \frac{\mathbf{k}^2 - k_R^2 + 2ik_R\kappa_R + \kappa_R^2}{\mathbf{k}^2 - k_R^2 - 2ik_R\kappa_R + \kappa_R^2} \quad (3.163)$$

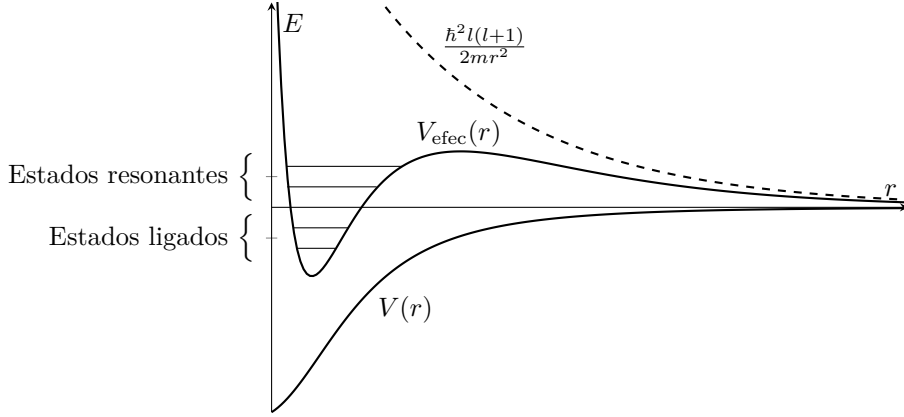


Figura 3.10: Potencial efectivo resulta de sumar el término centrífugo $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ al potencial $V(r)$.

pero vemos de inmediato que esta $S(k)$ no satisface la condición (3.150). Modificándola apropiadamente (haciendo $k_R \rightarrow k$ a orden κ_R^2) resulta

$$S(k) = \frac{(k - k_R^*)(k + k_R)}{(k - k_R)(k + k_R^*)} = \frac{k^2 - k_R^2 + 2ik\kappa_R + \kappa_R^2}{k^2 - k_R^2 - 2ik\kappa_R + \kappa_R^2} \quad (3.164)$$

Hemos aproximado k_R por k a orden κ_R^2 , lo que es muy razonable ya que cerca de la resonancia $k \simeq k_R$.

Para localizar los polos en el plano k estudiamos el comportamiento de la onda s , dada por (3.144), agregándole ahora la dependencia temporal. En el polo $k = k_R$ es $S(k = k_R + i\kappa_R) = \infty$, y

$$u(k_R, r; t) \sim e^{ik_R r} e^{-iE_R t/\hbar} = e^{ik_R r} e^{-iE_R t/\hbar} e^{-\kappa_R r} e^{-\Gamma_R t/2\hbar} \quad (3.165)$$

La resonancia consiste en la captura de una partícula seguida por su liberación con la misma energía. Como solo tenemos la componente saliente de la onda, lo que estamos describiendo realmente es el decaimiento de un estado resonante. Sin embargo, es obvio que antes de emitir la onda, primero la tuvimos que haber formado, y que durante el período de formación del estado, tienen que estar presentes también las ondas entrantes. Con nuestro requerimiento ($S = \infty$), las últimas están siempre excluidas. Por lo tanto, no estamos describiendo una situación físicamente realizable. Pero, podemos obtener una realización física aproximada del decaimiento del estado resonante, suponiendo que el sistema fue formado en un tiempo T muy anterior al momento de la medición. En esa situación, y como se ilustra en la figura 3.11, la función de onda en la región externa del potencial ($r > b$) tendrá que ser:

- para $r \leq vT$: puramente saliente ($\sim e^{ik_R r}$ con $k_R > 0$) y aumentar con la distancia ($\sim e^{-\kappa_R r}$ con $\kappa_R < 0$), y

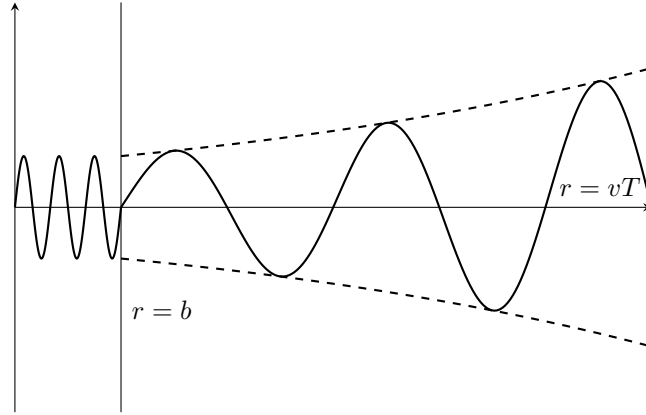


Figura 3.11: Representación esquemática de la onda emergente en una realización física (aproximada) del decaimiento de un estado resonante en $t = T$. Para $r > b$ la onda es saliente ($k_R > 0$) y aumenta con la distancia ($\kappa_R < 0$). Este incremento refleja precisamente el hecho de que las partículas que están en $r = vT$ fueron emitidas en un tiempo $t = -T$ cuando la intensidad de la fuente fue mayor.

- cero para $r > vT$,

donde v es la velocidad de la partícula.

Es decir que el polo de $S(\mathbf{k})$ para el decaimiento de un estado resonante está en el cuarto cuadrante del plano \mathbf{k} . Por otra parte, la relación (3.150) nos dice que tiene que existir también un polo en el tercer cuadrante. Este necesariamente debe corresponder al proceso de captura de la partícula. También, de

$$\Gamma_R = -\frac{2\hbar^2}{m}k_R\kappa_R \quad (3.166)$$

vemos que Γ_R será positivo para el decaimiento de la resonancia y negativo durante su formación. Esto es totalmente consistente con el hecho de que el valor absoluto de la función de onda

$$|u(\mathbf{k}_R, r; t)|^2 \sim e^{-2\kappa_R r} e^{-2\Gamma_R t/\hbar} \quad (3.167)$$

dentro de una esfera de radio $r = b$, tiene que decrecer ($\Gamma > 0$) para una resonancia que decae y crecer ($\Gamma < 0$) para una resonancia que se está formando.

Finalmente para relacionar los polos de $S(\mathbf{E})$ con los de $S(\mathbf{k})$ tenemos que hacer la transformación de \mathbf{k} en \mathbf{E} . El plano \mathbf{k} se transformará en una superficie de Riemann de dos hojas en el plano \mathbf{E} . Si estas hojas se juntan a lo largo del semi eje $0 < E < \infty$, donde se encuentran los estados físicos de dispersión, la primera hoja corresponde al semi-plano superior de \mathbf{k} :

$$S(\mathbf{k}) = S(\mathbf{E}); \quad (\kappa \geq 0). \quad (3.168)$$

Los valores de $S(E)$, en la primera y segunda hoja de Riemann, para la línea de ramificación $0 < E < \infty$, están relacionados por

$$S(E + i\epsilon) = S^*(E - i\epsilon); \quad (E > 0) \quad (3.169)$$

ya que en límite $\epsilon \rightarrow 0$, $E \pm i\epsilon$ corresponde, respectivamente, a $\pm k$.

En resumen, los polos de la matriz S están distribuidos de la siguiente manera:

- **estados ligados** ($k_L = 0, \kappa_L > 0; E_L < 0, \Gamma_L = 0$): sobre el semi-eje $\kappa > 0$ en el plano k (sobre el semi-eje $E < 0$ de la primera superficie de Riemann en el plano E).
- **estados virtuales** ($k_L = 0, \kappa_L < 0; E_L < 0, \Gamma_L = 0$): sobre el semi-eje $\kappa < 0$ en el plano k (sobre el semi-eje $E < 0$ de la segunda superficie de Riemann en el plano E).
- **estados resonantes en formación** ($k_R < 0, \kappa_R < 0; E_R > 0, \Gamma_L < 0$): en el tercer cuadrante del plano k (en el primer cuadrante de la segunda superficie de Riemann del plano E).
- **estados resonantes en decaimiento** ($k_R > 0, \kappa_R < 0; E_R > 0, \Gamma_L > 0$): en el cuarto cuadrante del plano k (en el cuarto cuadrante de la segunda superficie de Riemann del plano E).

La región para la dispersión física corresponde a k real y positivo ($k > 0, \kappa = 0$) y al semi-eje $E > 0$ de la primera superficie de Riemann en el plano E .

Capítulo 4

Partículas Idénticas

La indistinguibilidad de las partículas constituyentes de un sistema físico, o sea la no existencia de propiedades físicas que permitan identificarlas individualmente, tiene consecuencias mucho más radicales en el contexto de la Mecánica Cuántica que en la Mecánica Clásica. Veamos esto con más detalles.

Cuando en la mecánica clásica enfrentamos el estudio de un sistema con dos o más partículas idénticas (es decir, partículas indistinguibles por tener masa, carga, momento angular y cualquier otra propiedad física idéntica) nada cambia en la manera en que aplicamos las leyes de la cinemática y la dinámica respecto del caso de una única partícula o de varias partículas diferentes.

Si se trata de partículas idénticas, podemos, eventualmente “numerarlas” (por ejemplo, para dos partículas escribiendo las coordenadas con un subíndice $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$, etc. para distinguir a las dos partículas) y entonces, conocida la posición y velocidad de cada partícula del sistema en un instante inicial podemos, en el caso de la mecánica clásica, seguir sus trayectorias aplicando las leyes de Newton, y reconocer en el estado final cuál partícula ha seguido cada una de las trayectorias.

Es evidente que lo anterior no es posible en el caso de la mecánica cuántica. Básicamente, esta imposibilidad se debe a que, eliminada la noción de trayectoria (por el principio de incerteza), aunque sepamos con precisión absoluta la posición inicial de cada partícula idéntica del sistema, al no poder seguir o calcular trayectorias individuales pues el momento \mathbf{p}_i estaría indeterminado, no podremos saber en el estado final cuál partícula es la que ocupa una dada posición. En otras palabras, las situaciones *a*) y *b*) de la figura no pueden diferenciarse. Al intentar medir algún observable, a lo sumo podremos medir la densidad de probabilidad de encontrar a las partículas, y ambas situaciones darán lugar a la misma distribución de probabilidad. Esto se conoce como *principio de indistinguibilidad cuántico*: Si un sistema está constituido por dos partículas idénticas 1 y 2, la densidad de probabilidad asociada al sistema no permite determinar cuál de ellas es la partícula “1” y cuál la “2”. Esto

implica que debe verificarse la identidad

$$|\Psi(1, 2)|^2 = |\Psi(2, 1)|^2 \quad (4.1)$$

lo cual nos dice que la función de onda debe satisfacer

$$\Psi(1, 2) = \exp(i\alpha)\Psi(2, 1) \quad (4.2)$$

Este resultado es interesante dado que si bien el observable físico permanece invariante frente a la permutación de partículas, ¡la función de onda no tiene por que hacerlo! Sin embargo, esta condición es demasiado débil. La indistinguibilidad impone que el Hamiltoniano sea invariante frente a la permutación de partículas, y esto a su vez impone valores precisos que puede tomar el valor de α .

4.1. Permutaciones y simetrías

Consideremos primero el caso de dos partículas idénticas, con la función de onda $\Psi(1, 2)$; el índice 1 especifica las coordenadas espaciales \mathbf{r}_1 y de spin s_1 y análogamente el índice 2. A la partícula descrita por el primer argumento de la función de onda la llamaremos primera partícula y a la descrita por el segundo argumento segunda partícula. Es decir que $\Psi(1, 2)$ es la amplitud de observar la primera partícula en el punto \mathbf{r}_1 con el valor de spin s_1 y la segunda partícula en el punto \mathbf{r}_2 con el valor de spin s_2 . Nótese que al proponer estos nombres no estamos agregando ninguna información adicional y tanto la matemática como los aparatos de medición tendrán que tratar a las dos partículas de forma totalmente equivalente.

Decir que dos partículas son idénticas significa que no existe ninguna interacción que pueda diferenciarlas. En otras palabras, todo operador que corresponde a un observable físico tiene que ser simétrico con respecto a las coordenadas de las partículas. Por ejemplo, un Hamiltoniano de la forma

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V_{\text{par}}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_1) + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_2) \quad (3.1)$$

es simétrico con respecto al intercambio de los índices 1 y 2. Aquí V_{par} es la interacción entre las dos partículas, y V_{ext} representa el acoplamiento con un campo externo.

Es conveniente introducir en este punto un operador P_{12} , cuya acción consiste en intercambiar o permutar a la partícula 1 y la partícula 2, *i.e.* un operador de permutación de partículas:

$$P_{12}\Psi(1, 2) = \Psi(2, 1). \quad (4.3)$$

Debe cumplirse que

$$P_{12}^2 \Psi(1, 2) = P_{12} \Psi(2, 1) = \Psi(2, 1), \quad (4.4)$$

para cualquier función $\Psi(1, 2)$, y por lo tanto

$$P_{12}^2 = 1. \quad (4.5)$$

Ahora, dado que el Hamiltoniano es simétrico respecto del intercambio de partículas, conmuta con este operador,

$$[P_{12}, H] = 0 \quad (4.6)$$

Esta simetría, llamada simetría de intercambio, implica que el Hamiltoniano posee una degeneración, la *degeneración de intercambio*¹: si considero a $\Psi(1, 2)$ una autofunción de H con energía E ,

$$H\Psi(1, 2) = E\Psi(1, 2) \quad (4.9)$$

entonces, la autofunción $\Psi(2, 1) = P_{12}\Psi(1, 2)$ también es autofunción de H con la misma energía:

$$H\Psi(2, 1) = HP_{12}\Psi(1, 2) = P_{12}H\Psi(1, 2) = EP_{12}\Psi(1, 2) = E\Psi(2, 1). \quad (4.10)$$

Para clasificarlas, busquemos los autovalores y autofunciones de P_{12}

$$P_{12}\Psi_p(1, 2) = \lambda_p\Psi_p(1, 2) \quad (4.11)$$

Por (4.5) tenemos

$$\Psi_p(1, 2) = \lambda_p^2\Psi_p(1, 2), \quad (4.12)$$

o,

$$\lambda_p^2 = 1, \quad (4.13)$$

es decir que

$$\lambda_p = \pm 1, \quad (4.14)$$

¹Supongamos que tenemos un operador \mathcal{O} que conmuta con H , y tomemos un autoestado de H con energía E :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (4.7)$$

Entonces, la función $|\phi\rangle = \mathcal{O}|\psi\rangle$ también es autofunción de H con la misma energía. En efecto,

$$H|\phi\rangle = H\mathcal{O}|\psi\rangle = \mathcal{O}H|\psi\rangle = E\mathcal{O}|\psi\rangle = E|\phi\rangle \quad (4.8)$$

Salvo que correspondan a la misma autoestado (cosa que podría ocurrir) forman un espacio degenerado

debido a que el operador de permutación es hermítico. Podemos clasificar entonces a las funciones de onda en simétricas y antisimétricas respecto al intercambio de partículas:

$$P_{12}\Psi_S(1, 2) = +\Psi_S(1, 2) \quad (4.15)$$

$$P_{12}\Psi_A(1, 2) = -\Psi_A(1, 2) \quad (4.16)$$

que podemos construir a partir de $\Psi(1, 2)$ como:

$$\Psi_S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(1, 2) + \Psi(2, 1)], \quad (4.17)$$

$$\Psi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(1, 2) - \Psi(2, 1)], \quad (4.18)$$

donde hemos introducido el factor $1/\sqrt{2}$ por razones de normalización. Obviamente si $\Psi(1, 2)$ es una autofunción de H , las funciones de onda $\Psi_S(1, 2)$ y $\Psi_A(1, 2)$ lo son de H y de P_{12} .

Podemos también definir los operadores de simetrización y de antisimetrización como:

$$S_{12} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + P_{12}), \quad (4.19)$$

$$A_{12} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - P_{12}), \quad (4.20)$$

Al aplicar S_{12} o A_{12} a una combinación lineal arbitraria de $\Psi(1, 2)$ y $\Psi(2, 1)$ la función de onda resultante es necesariamente simétrica o antisimétrica respectivamente; en efecto:

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{12} \\ A_{12} \end{array} \right\} [a\Psi(1, 2) + b\Psi(2, 1)] = \frac{1}{\sqrt{2}} [a\Psi(1, 2) + b\Psi(2, 1)] \pm \frac{1}{\sqrt{2}} [a\Psi(2, 1) + b\Psi(1, 2)] \quad (4.21)$$

$$= \frac{a \pm b}{\sqrt{2}} [\Psi(1, 2) \pm \Psi(2, 1)]. \quad (4.22)$$

Las consideraciones anteriores se pueden extender a sistemas que tienen más de dos partículas idénticas. Definimos:

$$P_{ij}\Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \Psi(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \quad (4.23)$$

Obviamente, igual que antes:

$$P_{ij}^2 = 1 \quad (4.24)$$

y los autovalores permitidos de P_{ij} son $+1$ y -1 . Es importante notar que en general

$$[P_{ij}, P_{ki}] \neq 0 \quad (4.25)$$

aunque sí conmutan en el caso en que $i, j \neq k, l$. Un Hamiltoniano $H(1, 2, \dots, N)$ totalmente simétrico debe verificar

$$[H, P_{ki}] = 0 \quad (4.26)$$

Decimos que una función de onda $\Psi(1, 2, \dots, N)$ es totalmente simétrica o totalmente antisimétrica si:

$$P_{ij}\Psi_S(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = +\psi_S(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N), \quad (4.27)$$

$$P_{ij}\Psi_A(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = -\psi_A(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) \quad (4.28)$$

para todo P_{ij} . Para construirlas, extendemos las definiciones de los proyectores de simetrización y antisimetrización en la forma

$$S = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu=1}^{N!} P_{\nu}, \quad A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu=1}^{N!} (-1)^{\epsilon_{\nu}} P_{\nu} \quad (4.29)$$

donde la suma se extiende sobre todas las $N!$ permutaciones P_{ν} de las N partículas y $(-1)^{\epsilon_{\nu}}$ es igual $+1$ si la permutación es par o a -1 para una permutación impar. Las funciones simetrizadas resultan entonces,

$$\Psi_S(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu=1}^{N!} P_{\nu} \Psi(1, 2, \dots, N) \quad (4.30)$$

$$\Psi_A(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu=1}^{N!} (-1)^{\epsilon_{\nu}} P_{\nu} \Psi(1, 2, \dots, N). \quad (4.31)$$

Por ejemplo, para tres partículas,

$$S = \frac{1}{\sqrt{3!}} (1 + P_{12} + P_{12}P_{13} + P_{13} + P_{23}P_{13} + P_{23}), \quad (4.32)$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{3!}} (1 - P_{12} + P_{12}P_{13} - P_{13} + P_{23}P_{13} - P_{23}). \quad (4.33)$$

Y entonces las funciones simétricas y antisimétricas resultan

$$\Psi_S(1, 2, 3) = \frac{1}{\sqrt{6}} [\Psi(1, 2, 3) + \Psi(2, 1, 3) + \Psi(2, 3, 1) \quad (4.34)$$

$$+ \Psi(3, 2, 1) + \Psi(3, 1, 2) + \Psi(1, 3, 2)] \quad (4.35)$$

$$\Psi_A(1, 2, 3) = \frac{1}{\sqrt{6}} [\Psi(1, 2, 3) - \Psi(2, 1, 3) + \Psi(2, 3, 1) \quad (4.36)$$

$$- \Psi(3, 2, 1) + \Psi(3, 1, 2) - \Psi(1, 3, 2)]. \quad (4.37)$$

En total hay $3! = 6$ funciones de onda diferentes. Las restantes cuatro:

$$\Psi_I(1, 2, 3) = \frac{1}{2}[\Psi(1, 2, 3) + \Psi(2, 1, 3) - \Psi(2, 3, 1) - \Psi(3, 2, 1)] \quad (4.38)$$

$$\Psi_{II}(1, 2, 3) = \frac{1}{2}[\Psi(1, 2, 3) + \Psi(2, 1, 3) - \Psi(3, 1, 2) - \Psi(1, 3, 2)] \quad (4.39)$$

$$\Psi_{III}(1, 2, 3) = \frac{1}{2}[\Psi(1, 2, 3) + \Psi(3, 2, 1) - \Psi(2, 1, 3) - \Psi(3, 1, 2)] \quad (4.40)$$

$$\Psi_{IV}(1, 2, 3) = \frac{1}{2}[\Psi(1, 2, 3) + \Psi(3, 2, 1) - \Psi(1, 3, 2) - \Psi(2, 3, 1)] \quad (4.41)$$

no son totalmente simétricas ni totalmente antisimétricas.

Experimentalmente se verifica que la función de onda que describe a un sistema de N partículas idénticas es o bien totalmente simétrica, o totalmente antisimétrica. En el primer caso se dice que las partículas obedecen la estadística de Bose-Einstein (BE) y se conocen como bosones, y en el segundo caso decimos que satisfacen la estadística de Fermi-Dirac (FD) y hablamos de fermiones. Resumiendo,

$$P_{ij}\Psi(N \text{ bosones idénticos}) = +\Psi(N \text{ bosones idénticos}), \quad (4.42)$$

$$P_{ij}\Psi(N \text{ fermiones idénticos}) = -\Psi(N \text{ fermiones idénticos}). \quad (4.43)$$

Es notable que la simetría mixta no ocurre en la naturaleza. Pero es más notable todavía la correspondencia entre el spin de las partículas y la estadística que obedecen:

- partículas con spin entero ($S = 0, 1, 2, \dots$) son bosones
- partículas con spin semi-entero ($S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$) son fermiones.

En la mecánica cuántica no-relativista esta correspondencia tiene que ser aceptada como un postulado empírico y para entenderla habría que utilizar el formalismo relativista.

Supongamos ahora que estamos estudiando las propiedades de un átomo de hidrógeno localizado en La Plata, y nos hacemos las siguientes preguntas: ¿Por qué las funciones de onda de un solo electrón describen correctamente las propiedades del átomo de hidrógeno? ¿No tendríamos que tomar en cuenta a todos los demás electrones que existen en el universo, y construir una función de onda totalmente antisimétrica para todos estos electrones, incluyendo el nuestro? La respuesta es que no tenemos que antisimetrizar ya que no existe ninguna superposición entre la función de onda de nuestro electrón y las funciones de onda de los demás electrones. Para ver esto más claramente supongamos que la función de onda de nuestro electrón es $\phi_L(\mathbf{r})$ y que tenemos otro electrón en París que describimos por medio

de la función de onda $\phi_P(\mathbf{r})$. También suponemos que las funciones de onda no se superponen, es decir que:

$$\phi_L(\mathbf{r})\phi_P(\mathbf{r}) = 0 \text{ para todo } \mathbf{r} \quad (4.44)$$

La función de onda antisimetrizada y normalizada es:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_L(\mathbf{r}_1)\phi_P(\mathbf{r}_2) - \phi_H(\mathbf{r}_1)\phi_L(\mathbf{r}_2)], \quad (4.45)$$

y la probabilidad de encontrar un electrón en el punto \mathbf{r} es

$$P(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}_2 |\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2)|^2 + \int d\mathbf{r}_1 |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r})|^2, \quad (4.46)$$

es decir, igual a la probabilidad de que el electrón 1 esté en el punto \mathbf{r} y el electrón 2 en cualquier otro punto más la probabilidad de que el electrón 2 esté en el punto \mathbf{r} y el electrón 1 en cualquier otro punto del espacio. Luego:

$$P(\mathbf{r}) = |\phi_L(\mathbf{r})|^2 \int d\mathbf{r}' |\phi_P(\mathbf{r}')|^2 + |\phi_P(\mathbf{r})|^2 \int d\mathbf{r}' |\phi_L(\mathbf{r}')|^2 \quad (4.47)$$

$$- 2 \operatorname{Re} \left(\phi_L(\mathbf{r})\phi_P^*(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}' \phi_L^*(\mathbf{r}')\phi_P(\mathbf{r}') \right) \quad (4.48)$$

y por ser $\phi_L(\mathbf{r})\phi_P^*(\mathbf{r}) = 0$, se cumple que

$$P(\mathbf{r}) = |\phi_L(\mathbf{r})|^2 + |\phi_P(\mathbf{r})|^2 \quad (4.49)$$

Si el punto \mathbf{r} está en La Plata, será $P(\mathbf{r}) = |\phi_L(\mathbf{r})|^2$, ya que un electrón que está en París tiene probabilidad nula de encontrarse en La Plata. De tal modo obtenemos el mismo resultado como si de entrada nos hubiésemos olvidado de todos los demás electrones. La regla es: tenemos que antisimetrizar o simetrizar la función de onda de un conjunto de fermiones o bosones solamente para las partículas que son relevantes.

Otra pregunta: ¿Cómo son las funciones de onda de sistemas formados por partículas idénticas compuestas, tales como átomos? Consideremos, por ejemplo, la función de onda $\Psi(\mathbf{r}_{e_1}, \mathbf{r}_{p_1}, \mathbf{r}_{e_2}, \mathbf{r}_{p_2})$, que describe a dos átomos de hidrógeno; \mathbf{r}_{e_1} es la posición del electrón del primer átomo, \mathbf{r}_{p_1} es la posición del protón del primer átomo, etc. $\Psi(\mathbf{r}_{e_1}, \mathbf{r}_{p_1}, \mathbf{r}_{e_2}, \mathbf{r}_{p_2})$ cambiará de signo si intercambiamos las coordenadas de los electrones o de los protones. En cambio, no habrá ningún cambio de signo si intercambiamos las coordenadas de un electrón con las coordenadas de un protón, por ser partículas diferentes. Por otro lado, si intercambiamos los dos átomos entre sí, será

$$\Psi(\mathbf{r}_{e_1}, \mathbf{r}_{p_1}, \mathbf{r}_{e_2}, \mathbf{r}_{p_2}) = -\Psi(\mathbf{r}_{e_2}, \mathbf{r}_{p_1}, \mathbf{r}_{e_1}, \mathbf{r}_{p_2}) = \Psi(\mathbf{r}_{e_2}, \mathbf{r}_{p_2}, \mathbf{r}_{e_1}, \mathbf{r}_{p_1}) \quad (4.50)$$

y por lo tanto los átomos de hidrógeno se comportan como bosones. Es fácil convencerse que la regla general es: las partículas compuestas que contienen un número par de fermiones y cualquier número de bosones se comportan como bosones, mientras que aquellas con un número impar de fermiones y cualquier número de bosones se comportan como fermiones. Por ejemplo, los átomos de ${}^4\text{He}$ se comportan como bosones y los de ${}^3\text{He}$ como fermiones.

En este punto conviene detenerse un poco para preguntarse: ¿Que significa la palabra partícula, o más bien que es una *partícula elemental*? Supongamos que estamos haciendo un experimento con el helio líquido, que está formado por átomos de ${}^4\text{He}$. A muy bajas temperaturas las colisiones en el fluido no son lo suficientemente energéticas como para excitar al átomo desde su estado fundamental y el átomo de ${}^4\text{He}$ puede ser tratado como una partícula elemental de spin cero. En cambio, cuando irradiamos el líquido con luz ultravioleta aparecen en el espectro de absorción los estados excitados del átomo y el ${}^4\text{He}$ ya no podrá ser tratado como una partícula elemental. Los datos experimentales en este caso los podemos interpretar satisfactoriamente utilizando un modelo de tres partículas: un núcleo atómico con spin igual a cero (partícula α) y dos electrones de spin $\frac{1}{2}$. Al cambiar la sonda que usamos para estudiar el sistema, por otra de energía ≥ 25 MeV (por ejemplo rayos γ) descubrimos que la descripción anterior ya no es más válida: la partícula α se puede romper y entramos al dominio de la física nuclear, donde las partículas elementales son los nucleones. Para energías ≥ 140 MeV hay producción de piones, que también tienen que ser considerados. Aumentando más todavía la energía de la sonda hallamos que el nucleón tiene varios estados excitados. Por lo tanto no podrá seguir siendo tratado como una partícula elemental; se recurre al modelo de los quarks en el cual el nucleón está formado por tres quarks. Podemos concluir entonces que: *el concepto de partícula elemental y el tamaño espacio de Hilbert necesario para una descripción adecuada del sistema depende del dominio de energía en el cual estamos trabajando.*

La antisimetría de la función de onda para fermiones idénticos implica que la probabilidad de hallar dos fermiones idénticos en el mismo punto es nula. Más precisamente: dos fermiones idénticos no pueden ocupar el mismo punto espacial si sus spins están orientados en la misma dirección. Este es el principio de exclusión de Pauli, que se demuestra muy fácilmente. En efecto, como $\Psi_A(2, 1, 3, \dots) = -\Psi_A(1, 2, 3, \dots)$ vemos que si $1 = 2$, resulta $\Psi_A(1, 1, 3, \dots) \equiv 0$.

4.2. Interacción de intercambio

Consideremos el caso de partículas idénticas, cargadas, en presencia de un campo eléctrico constante. Hemos aprendido en el curso de mecánica cuántica I que en este caso, el Hamiltoniano H no incluye términos con operador de spin S , es decir que H

es diagonal en lo que respecta al spin) y la función de onda se factoriza trivialmente en una parte que depende solo de las coordenadas \mathbf{r}_i , $i = 1, 2, \dots, N$ y otra que depende solo de las variables de spin, s_i ,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; s_1, s_2, \dots, s_N) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \Upsilon(s_1, s_2, \dots, s_N) \quad (4.51)$$

Nótese que el hecho de que H no contenga al operador de spin no implica que la partícula cuya dinámica es gobernada por H no tenga spin.

En principio, el factor Υ de la función de onda es arbitrario ya que como el Hamiltoniano no contiene al spin, H solo determina la dependencia de las coordenadas. O sea que parecería que podemos olvidar el spin para resolver tal problema. Pero si se trata de un sistema de partículas idénticas, veremos que la necesidad de simetría o antisimetría de la función de onda completa (i.e., los dos factores incluidos) hace que el spin juegue un rol aún en este caso.

Para comprender esto, volvamos al caso más simple, de dos partículas idénticas que obedecen la ecuación de Schrödinger,

$$H\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; s_1, s_2) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; s_1, s_2) \quad (4.52)$$

con un Hamiltoniano en el que el operador de spin está ausente (no hay interacción spin-órbita, no hay campo magnético, etc). Es decir un Hamiltoniano que podemos escribir así:

$$H = H_c \otimes I_s \quad (4.53)$$

donde los subíndices c y s indican los factores de coordenadas y de spin del producto tensorial con el que debe escribirse el Hamiltoniano. En el caso presente el factor de spin actúa trivialmente como la identidad en el espacio de las funciones de onda del sistema.

Si escribimos a la función de onda como un producto,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; s_1, s_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Upsilon(\sigma_1, \sigma_2) \quad (4.54)$$

entonces, para determinar los niveles de energía del sistema se estudia el problema estacionario para el factor dependiente de las coordenadas.

$$H\psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_\alpha\Phi_\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (4.55)$$

En principio, a partir de las autofunciones de onda espaciales Φ_α podremos construir autofunciones simétricas y antisimétricas.

Consideremos el caso en que se trata de bosones de spin cero. En tal caso, la parte de spin que hemos llamado Υ en la ec. (4.51) estará ausente de la ec.(4.52). Por tratarse de bosones, en general la función de onda Ψ debe ser simétrica por lo que en este caso, sin spin, la función de onda de la parte espacial, que llamamos Φ , es la única presente por ello debe ser simétrica.

Se trata entonces de un problema de dos bosones idénticos con un potencial adecuado, por ejemplo coulombiano en que, intercambiarlos, equivale a una inversión espacial, un cambio de paridad. En efecto, dado el vector $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, el cambio $1 \leftrightarrow 2$ equivale al cambio $\mathbf{r}_{12} \rightarrow \mathbf{r}_{21} = -\mathbf{r}_{12}$. En un desarrollo en armónicos esféricos, las autofunciones con l impar cambiarán ante paridad por lo que quedan descartadas en la construcción de estados simétricos.

Con este ejemplo hemos aprendido entonces que aunque el spin esté ausente del Hamiltoniano, el hecho de que las partículas sean bosones idénticos a los que se aplica el principio de indistinguibilidad que enunciamos, afecta la forma de la función de onda. Hablamos por ello de una interacción de intercambio que produce el efecto de prohibir los estados con l impar.

Si se tratara de fermiones de spin $1/2$, la función de onda tendría una parte de spin Υ no trivial y, a pesar de estar el spin ausente del Hamiltoniano, debemos encargarnos de construir las autofunciones que lo contienen. Como aclaramos al iniciar este tema, consideramos el caso de la mecánica cuántica no relativista pero en la que los espinores tienen dos componentes (espinores de Pauli). Tratándose de dos partículas de spin $1/2$, el spin total puede ser $S = 0, 1$, y podemos tener cuatro estados posibles: un estado singlete con $S = M = 0$ y un triplete de estados con $S = 1, M = -1, 0, +1$. Explícitamente si denotamos estos estados por Υ_{SM} tendremos:

$$\Upsilon_{00}(s_1, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\uparrow}(s_1) \chi_{\downarrow}(s_2) - \chi_{\downarrow}(s_1) \chi_{\uparrow}(s_2)] \quad (4.56)$$

$$\Upsilon_{11}(s_1, s_2) = \chi_{\uparrow}(s_1) \chi_{\uparrow}(s_2) \quad (4.57)$$

$$\Upsilon_{10}(s_1, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\uparrow}(s_1) \chi_{\downarrow}(s_2) + \chi_{\downarrow}(s_1) \chi_{\uparrow}(s_2)] \quad (4.58)$$

$$\Upsilon_{1,-1}(s_1, s_2) = \chi_{\downarrow}(s_1) \chi_{\downarrow}(s_2) \quad (4.59)$$

donde $\chi_{\sigma}(s)$, con $\sigma = \uparrow, \downarrow$ son espinores con *spin up* y *spin down* respectivamente,

$$\chi_{\sigma}(s) = \langle s | \sigma \rangle \quad (4.60)$$

($\chi_{\uparrow}(s = \uparrow) = 1$ y $\chi_{\uparrow}(s = \downarrow) = 0$, etc). Para que la función de onda total,

$$\Psi(1, 2) \equiv \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Upsilon_{SM}(s_1, s_2) \quad (4.61)$$

sea antisimétrica con respecto a la transformación: $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2; s_1 \leftrightarrow s_2$, la función de onda radial $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ tendrá que ser simétrica con respecto al intercambio de \mathbf{r}_1 por \mathbf{r}_2 cuando $S = 0$ y antisimétrica cuando $S = 1$.

4.3. Partículas Independientes

Es instructivo discutir la función de onda para N partículas idénticas que no interactúan entre sí y que están con un pozo de potencial $V(\mathbf{r})$, como el que se

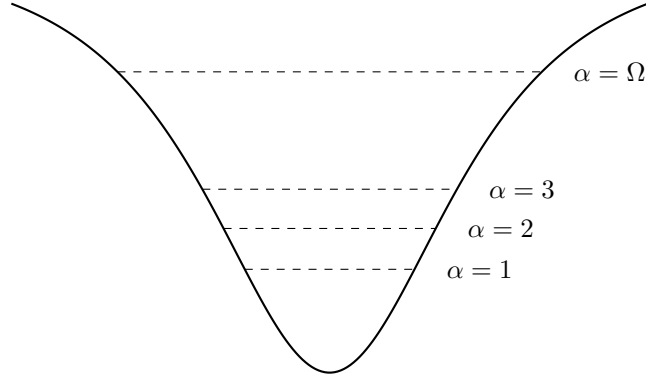


Figura 4.1: Niveles de energía de partículas independientes para un pozo de potencial $V(\mathbf{r})$.

muestra en la figura 4.1. El Hamiltoniano de una sola partícula es:

$$H(1) = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + V(\mathbf{r}_1) \quad (4.62)$$

y las autofunciones son $\varphi_\alpha(1)$ con energías ϵ_α :

$$H(1)\varphi_\alpha(1) = \epsilon_\alpha\varphi_\alpha(1) \quad (4.63)$$

En el caso de N partículas independientes el Hamiltoniano será:

$$H = H(1) + H(2) + \dots + H(N) \quad (4.64)$$

y una de sus posibles soluciones es

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = \varphi_{\alpha_1}(1)\varphi_{\alpha_2}(2) \cdots \varphi_{\alpha_N}(N) \quad (4.65)$$

donde la partícula 1 está en el nivel de energía ϵ_{α_1} , la partícula 2 está en el nivel de energía ϵ_{α_2} , ... la partícula N está en el nivel de energía ϵ_{α_N} . La energía total es:

$$E = \epsilon_{\alpha_1} + \epsilon_{\alpha_2} + \dots + \epsilon_{\alpha_N} \quad (4.66)$$

En general, la función de onda (4.65) no es una solución admisible para N partículas idénticas, ya que no está simetrizada (o antisimetrizada) con respecto a ninguna de las partículas. Notemos también que cualquier permutación de los índices en $1, 2, \dots, N$ en (4.65) conduce a la misma energía, lo que se denomina degeneración de intercambio. Por ejemplo, el vector

$$\Psi(2, 1, \dots, N) = \varphi_{\alpha_1}(2)\varphi_{\alpha_2}(1) \cdots \varphi_{\alpha_N}(N) \quad (4.67)$$

tiene la misma energía que el vector $\Psi(1, 2, \dots, N)$.

Para construir autofunciones admisibles para N partículas idénticas tenemos que tomar combinaciones lineales de (4.65) y sus permutaciones, que sean totalmente simétricas para bosones o totalmente antisimétricas para fermiones. Esto se consigue con la aplicación de los operadores (4.29) sobre (4.65),

$$\Psi_S(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu=1}^{N!} P_\nu \varphi_{\alpha_1}(1) \varphi_{\alpha_2}(2) \cdots \varphi_{\alpha_N}(N), \quad (4.68)$$

$$\Psi_A(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu=1}^{N!} (-1)^{\epsilon_\nu} P_\nu \varphi_{\alpha_1}(1) \varphi_{\alpha_2}(2) \cdots \varphi_{\alpha_N}(N). \quad (4.69)$$

En particular, por ejemplo, para tres partículas idénticas las funciones de onda normalizados son:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_S(1, 2, 3) \\ \Psi_A(1, 2, 3) \end{array} \right\} = \frac{1}{\sqrt{6}} [\varphi_{\alpha_1}(1) \varphi_{\alpha_2}(2) \varphi_{\alpha_3}(3) \pm \varphi_{\alpha_1}(2) \varphi_{\alpha_2}(1) \varphi_{\alpha_3}(3) \quad (4.70)$$

$$+ \varphi_{\alpha_1}(2) \varphi_{\alpha_2}(3) \varphi_{\alpha_3}(1) \pm \varphi_{\alpha_1}(3) \varphi_{\alpha_2}(2) \varphi_{\alpha_3}(1) \quad (4.71)$$

$$+ \varphi_{\alpha_1}(3) \varphi_{\alpha_2}(1) \varphi_{\alpha_3}(2) \pm \varphi_{\alpha_1}(1) \varphi_{\alpha_2}(3) \varphi_{\alpha_3}(2)] \quad (4.72)$$

que también podemos poner en la forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_S(1, 2, 3) \\ \Psi_A(1, 2, 3) \end{array} \right\} = \frac{1}{\sqrt{3!}} \left| \begin{array}{ccc} \varphi_{\alpha_1}(1) & \varphi_{\alpha_1}(2) & \varphi_{\alpha_1}(3) \\ \varphi_{\alpha_2}(1) & \varphi_{\alpha_2}(2) & \varphi_{\alpha_2}(3) \\ \varphi_{\alpha_3}(1) & \varphi_{\alpha_3}(2) & \varphi_{\alpha_3}(3) \end{array} \right|_{\pm} \quad (4.73)$$

donde el signo $-$ corresponde al determinante y el signo $+$ al “permanente”.

Al escribir (4.72) hemos supuesto implícitamente que teníamos solo una partícula por estado (o sea que α_1 , α_2 y α_3 eran diferentes entre sí). Vemos de inmediato que no podemos tener más de un fermión por estado, ya que en ese caso se anula el determinante. Esta es otra manera de expresar el principio de exclusión de Pauli. En cambio, cualquier número de bosones puede ocupar el mismo estado. Notemos, sin embargo, que en el último caso la función de onda no está normalizada a uno. En particular, si $\alpha_1 = \alpha_2$, la función de onda normalizada para tres bosones es:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{3}} [\varphi_{\alpha_1}(1) \varphi_{\alpha_1}(2) \varphi_{\alpha_2}(3) + \varphi_{\alpha_1}(1) \varphi_{\alpha_2}(2) \varphi_{\alpha_1}(3) + \varphi_{\alpha_2}(1) \varphi_{\alpha_1}(2) \varphi_{\alpha_1}(3)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{3!2!}} \left| \begin{array}{ccc} \varphi_{\alpha_1}(1) & \varphi_{\alpha_1}(2) & \varphi_{\alpha_1}(3) \\ \varphi_{\alpha_1}(1) & \varphi_{\alpha_1}(2) & \varphi_{\alpha_1}(3) \\ \varphi_{\alpha_2}(1) & \varphi_{\alpha_2}(2) & \varphi_{\alpha_2}(3) \end{array} \right|_+ \end{aligned} \quad (4.74)$$

Podemos entonces generalizar los resultados anteriores para N partículas, resultan-
do:

$$\psi_A(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{\alpha_1}(1) & \varphi_{\alpha_1}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_1}(N) \\ \varphi_{\alpha_2}(1) & \varphi_{\alpha_2}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_2}(N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_{\alpha_\Omega}(1) & \varphi_{\alpha_\Omega}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_\Omega}(N) \end{vmatrix}_- \quad (3.28)$$

para fermiones (determinante de Slater), y

$$\psi_A(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!n_{\alpha_1}!n_{\alpha_2}!\cdots n_{\alpha_\Omega}!}} \begin{vmatrix} \varphi_{\alpha_1}(1) & \varphi_{\alpha_1}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_1}(N) \\ \varphi_{\alpha_2}(1) & \varphi_{\alpha_2}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_2}(N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_{\alpha_\Omega}(1) & \varphi_{\alpha_\Omega}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_\Omega}(N) \end{vmatrix}_+ \quad (3.28)$$

para bosones, donde de las N partículas, n_{α_1} están en el nivel α_1 , n_{α_2} están en el nivel α_2 , etc., y por supuesto que se verifica que $n_{\alpha_1} + n_{\alpha_2} + \cdots + n_{\alpha_\Omega} = N$.

Como ejemplo, consideremos solamente dos bosones de spin cero y dos fermiones de spin $\frac{1}{2}$ que pueden ocupar solo dos niveles. Usaremos la notación: $\varphi(1) \equiv \varphi(\mathbf{r}, s) = \phi(\mathbf{r})\chi(s)$. Si los bosones fueran partículas distinguibles tendríamos 4 estados distin-
tos:

$$\phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2) \quad (4.75)$$

$$\phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1)\phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) \quad (4.76)$$

$$\phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) \quad (4.77)$$

$$\phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2)\phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1) \quad (4.78)$$

con energías $2\epsilon_{\alpha_1}$, ϵ_{α_2} y $\epsilon_{\alpha_1} + \epsilon_{\alpha_2}$; el último nivel de energía es dos veces degenerado. Sin embargo, los dos últimos estados son físicamente indistinguibles y el único estado permitido de 2 bosones idénticos [uno en $\phi_{\alpha_1}(\mathbf{r})$ y el otro en $\phi_{\alpha_2}(\mathbf{r})$] es:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) + \phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2)\phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1)] \quad (4.79)$$

o sea que no existe la degeneración del nivel $\epsilon_{\alpha_1} + \epsilon_{\alpha_2}$. En el caso de fermiones, a cada estado (4.78) le corresponderían 4 estados debido al spin. Sin embargo, el principio

de exclusión nos dice que los únicos estados permitidos son:

$$\phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2) \Upsilon_{00}(s_1, s_2) \quad (4.80)$$

$$\phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) \Upsilon_{00}(s_1, s_2) \quad (4.81)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) + \phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2) \phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1)] \Upsilon_{00}(s_1, s_2) \quad (4.82)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) - \phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2) \phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1)] \Upsilon_{11}(s_1, s_2) \quad (3.31)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) - \phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2) \phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1)] \Upsilon_{1,0}(s_1, s_2) \quad (4.83)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) - \phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2) \phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1)] \Upsilon_{1,-1}(s_1, s_2) \quad (4.84)$$

con energías $2\epsilon_{\alpha_1}$ (singlete), $2\epsilon_{\alpha_2}$ (singlete) y $\epsilon_{\alpha_1} + \epsilon_{\alpha_2}$ (un singlete y 3 triplete).

4.4. Átomos con dos electrones

Los átomos más simples, después del átomo de hidrógeno, son aquellos que tienen solamente dos electrones, tales como He, H⁻, Li⁺ y Be⁺⁺. La interacción spin-órbita es una perturbación pequeña en átomos livianos y se puede despreciar en una primera aproximación. Luego el Hamiltoniano es de la forma

$$H(1, 2) = H_0(1, 2) + V_{12} \quad (4.85)$$

donde

$$H_0(1, 2) = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} \quad (4.86)$$

$$V_{12} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (4.87)$$

En la aproximación de orden cero cada electrón está en el potencial Coulombiano $-Ze^2/r$ y el estado de energía más baja es aquel en el cual los dos electrones están en el estado 1s de ese potencial, que resulta ser un singlete:

$$\Psi_0(1, 2) = \phi_{1s}(\mathbf{r}_1) \phi_{1s}(\mathbf{r}_2) \Upsilon_{00}(s_1, s_2) \quad (4.88)$$

donde

$$\phi_{1s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \quad (4.89)$$

y a_0 es el radio de Bohr,

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (4.90)$$

Dentro de la misma aproximación, la energía del estado fundamental es²

$$E_0^{(0)} = 2\epsilon_{1s} = -\frac{Z^2 c^2}{a_0} = -2Z^2 \text{ Ry}. \quad (4.91)$$

La corrección de primer orden se obtiene del valor medio de V_{12} para el estado (4.88):

$$\Delta E_0 = \int d1 d2 \psi_0^\dagger(1, 2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_0(1, 2), \quad (4.92)$$

donde

$$\int d1 \equiv \sum_{s_1} \int d\mathbf{r}_1. \quad (4.93)$$

Como

$$\sum_{s_1 s_2} \Upsilon_{SM}^\dagger(s_1, s_2) \Upsilon_{SM}(s_1, s_2) = 1 \quad (3.39)$$

obtenemos:

$$\Delta E_0 = \frac{e^2}{\pi^2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^6 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)/a_0}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (3.40)$$

Para hacer la integral usamos la relación:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}}{k^2} \quad (4.94)$$

y entonces

$$\Delta E_0 = e^2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^6 \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi^4 k^2} \left| \int d\mathbf{r} c^{-2Zr/a_0 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right|^2. \quad (4.95)$$

Como además,

$$\int d\mathbf{r} e^{-2Zr/a_0 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{16\pi Z/a_0}{[k^2 + (2Z/a_0)]^2} \quad (4.96)$$

resulta:

$$\Delta E_0 = \frac{4Ze^2}{\pi a_0} \int_0^\infty \frac{dx}{(x^2 + 1)^4} = \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a_0} \quad (3.44)$$

Es decir que la energía del estado fundamental en primer orden perturbativo es:

$$E_0^{(1)} = E_0^{(0)} + \Delta E_0 = -\frac{Ze^2}{a_0} \left(Z - \frac{5}{8} \right) \quad (4.97)$$

Para el átomo de helio $Z = 2$ y $E_0^{(1)} = -5,5 \text{ Ry} = -74,8 \text{ eV}$, mientras que el valor experimental es $E_0^{\text{exp}} = -78,8 \text{ eV}$.

²El Ry es una unidad de energía que corresponde a $1 \text{ Ry} = e^2/2a_0 = 13,6056923 \text{ eV}$.

Consideremos ahora el estado excitado que resulta de promover un electrón del estado 1s al estado 2s. De acuerdo a (4.84) las correspondientes funciones de onda son:

$$\Psi_{S=0,M=0}(1,2) = \Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Upsilon_{0,0}(s_1, s_2) \quad (4.98)$$

$$\Psi_{S=1,M}(1,2) = \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Upsilon_{S=1,M}(s_1, s_2) \quad (4.99)$$

donde

$$\begin{cases} \Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \end{cases} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{1s}(\mathbf{r}_1) \phi_{2s}(\mathbf{r}_2) \pm \phi_{1s}(\mathbf{r}_2) \phi_{2s}(\mathbf{r}_1)]$$

y

$$\phi_{2s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \quad (4.100)$$

La energía perturbada es: $E_1^{(1)}(S) = E_1^{(0)} + \Delta E_1(S)$ donde³

$$E_1^{(0)} = \epsilon_{1s} + \epsilon_{2s} = -\frac{3}{4} \frac{Z^2 e^2}{a_0}$$

y

$$\Delta E_1(S) = \left\langle \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right\rangle = D \pm I,$$

con

$$D = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_{1s}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{2s}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_{1s}(\mathbf{r}_1) \phi_{2s}(\mathbf{r}_2) \quad (4.101)$$

$$I = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_{1s}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{2s}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_{1s}(\mathbf{r}_2) \phi_{2s}(\mathbf{r}_1) \quad (3.50)$$

El signo + corresponde a los estados de $S = 0$ y el - a $S = 1$.

Los elementos de matriz D e I se denominan, respectivamente, directo y de intercambio. D es necesariamente positivo y los cálculos muestran que I también es positivo. Vemos por lo tanto que $E_1^{(1)}(S = 0) > E_1^{(1)}(S = 1)$, o sea que la energía del estado singlete es mayor, como se muestra en la figura ???. Para el átomo de helio los valores experimentales son:

$$E_1^{\text{exp}} = \begin{cases} -4,182 \text{ Ry} = -56,87 \text{ eV} & \text{singlete - parahelio} \\ -4,350 \text{ Ry} = -599,16 \text{ eV} & \text{triplete - ortohelio} \end{cases} \quad (4.102)$$

de donde se obtiene que $D \cong 23,58 \text{ eV}$ y $I \cong 1,14 \text{ eV}$.

³La perturbación es diagonal porque no conecta estados con distinto spin.

La interpretación física es la siguiente. En el caso del singlete la función de onda espacial es simétrica y los dos electrones tienden de estar juntos. Luego el efecto de la interacción Coulombiana es mayor, lo que hace que el estado singlete este menos ligado. Es importante notar que, aunque el Hamiltoniano (4.85) no depende de spin, la energía sí depende del spin total de los dos electrones; esta dependencia proviene de la estadística de Fermi-Dirac.

Capítulo 5

Segunda cuantificación

Queremos considerar ahora el caso de muchas partículas cuánticas. Normalmente este es un problema que sabemos muy bien cómo tratar en mecánica cuántica: si conocemos el espacio de Hilbert \mathcal{H}_1 de una sola partícula y una base completa $|\alpha\rangle$, sabemos que para \mathcal{N} partículas tenemos un espacio de Hilbert que se construye como el producto directo de los espacios individuales:

$$\mathcal{H}_{\mathcal{N}} = \bigotimes_{i=1}^{\mathcal{N}} \mathcal{H}_i, \quad (5.1)$$

y que una base completa de tal espacio es simplemente

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\mathcal{N}}\rangle = |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \cdots |\alpha_{\mathcal{N}}\rangle. \quad (5.2)$$

Entonces tenemos que resolver una ecuación de Schrödinger con una función de onda que depende de las \mathcal{N} variables correspondientes a las \mathcal{N} partículas, $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_{\mathcal{N}})$. Aunque este es un programa perfectamente aceptable cuando el número de partículas es pequeño, es particularmente inadecuado para abordar el caso de muchos fermiones o bosones cuánticos que interactúan, por varias razones.

La primera razón tiene que ver con la indistinguibilidad de las partículas. Incluso si son libres entre ellas, no todos los estados son aceptables para las funciones de onda de \mathcal{N} partículas indistinguibles, para las que sólo se permiten las funciones de onda totalmente simétricas (para bosones) o antisimétricas (para fermiones). Esto significa que incluso para partículas que no interactúan no podemos usar directamente estados producto de la forma (5.2). En cierto modo, el hecho de que tengamos que lidiar con partículas indistinguibles ya introduce correlaciones en la función de onda incluso cuando las interacciones no están presentes. La función de onda se vuelve bastante complicada ya que deben estar correctamente (anti-)simetrizadas y normalizadas, lo que las hace muy difíciles de manejar. Por ejemplo, para dos partículas se tiene

$$|\alpha, \beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\alpha, \beta\rangle \pm |\beta, \alpha\rangle] \quad (5.3)$$

donde el signo $+$ corresponde a bosones y el $-$ a fermiones. En la fórmula anterior denotamos por $|\alpha, \beta\rangle$ a los kets correctamente simetrizados y normalizados para partículas indistinguibles, mientras que a los kets producto los escribimos

$$|\alpha, \beta\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle. \quad (5.4)$$

Nótese que en este caso el orden importa: la primera partícula está en el estado α y la segunda β . Siempre (independientemente de si se trata de un bra o un ket) numeraremos las partículas de izquierda a derecha.

Cuando el número de partículas crece, el uso de una función de onda simetrizada se vuelve más y más pesado ya que el número de términos en la función de onda crece como $\mathcal{N}!$. De hecho, la función de onda en general se escribe como

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_\mathcal{N}) &= (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_\mathcal{N} | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_\mathcal{N}) \\ &= C \sum_P (\pm 1)^{s(P)} \varphi_1(\mathbf{r}_{P_1}) \varphi_2(\mathbf{r}_{P_2}) \cdots \varphi_\mathcal{N}(\mathbf{r}_\mathcal{N}) \end{aligned} \quad (5.5)$$

donde $\varphi_\alpha(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \alpha \rangle$ es la función de onda correspondiente al estado α de las partículas individuales. Para simplificar la notación, en la ecuación anterior hemos escrito $\varphi_1(\mathbf{r})$ en lugar de $\varphi_{\alpha_1}(\mathbf{r})$, y lo mismo con las demás. P son las permutaciones del conjunto de números del 1 al \mathcal{N} , $s(P)$ es la firma o signatura de la permutación P (es decir, el número de transposiciones en P) y, como de costumbre, el signo $+$ es para bosones y el $-$ para fermiones. La constante C debe determinarse de manera que la función de onda esté correctamente normalizada. Para los fermiones, se puede reescribir la función de onda como un determinante (conocido como determinante de Slater)¹

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_\mathcal{N}) = \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}_1) & \cdots & \varphi_1(\mathbf{r}_\mathcal{N}) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_\mathcal{N}(\mathbf{r}_1) & \cdots & \varphi_\mathcal{N}(\mathbf{r}_\mathcal{N}) \end{vmatrix}. \quad (5.6)$$

lo que ayuda un poco para los cálculos prácticos, pero no mucho. En resumen, incluso para los electrones que no interactúan, habría que tratar con funciones de onda que contuvieran $10^{23}!$ términos, lo cual es realmente desagradable.

El segundo problema está relacionado con la forma en que representamos a los operadores en la mecánica cuántica estándar. Si consideramos, por ejemplo, un operador que mide el momento total de un sistema de partículas, éste tiene que escribirse como una suma de operadores que actúan sobre cada partícula individualmente:

$$P_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} P_i \quad (5.7)$$

¹En el caso bosónico puede representarse mediante un objeto análogo conocido como “permanente”, que se calcula como un determinante, pero utilizando siempre signos $+$ en los distintos términos.

donde P_i es el operador que actúa sobre la partícula i -ésima. Téngase en cuenta que esto es un abuso de notación ya que P_{tot} es un operador de $\mathcal{H}_{\mathcal{N}}$, que rigurosamente se debe escribir como

$$P_i = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes P \otimes \dots \otimes \mathbf{1}, \quad (5.8)$$

donde $\mathbf{1}$ es la identidad y P se inserta en la posición i -ésima. El operador y las funciones de onda dependen así explícitamente del número de partículas. Por lo tanto, uno debería cambiar completamente todo el cálculo dependiendo de si miramos 2 o 20000 partículas, lo que nuevamente es particularmente molesto. También impide tomar de manera directa el límite termodinámico $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ cuando el volumen de los sistemas también tiende a infinito. Dada la gran cantidad de partículas, está claro que tomar este límite es lo deseable ya que simplificaría mucho los cálculos.

Una tercera razón, quizás más profunda y más física, y que definitivamente liquida la posibilidad de utilizar la mecánica cuántica usual, es que ¡en muchos sistemas el número de partículas no se conserva! y esta sí. Esto puede ocurrir por varias razones, por ejemplo, en sistemas de altas energías, porque buscamos describir sistemas de partículas que pueden aniquilarse y convertirse en otras, tales como electrones y positrones. O para un ejemplo más ligado a los materiales, mencionemos el modelo BCS para un superconductor, que discutiremos en el capítulo siguiente. Veremos que las cuasipartículas fermiónicas que son responsables de la superconductividad se forman por una superposición de electrones y huecos y no se conservan en número.

Por estas razones, debemos buscar una reformulación de la representación estándar de la mecánica cuántica (también conocida como primera cuantificación) para sistemas de varias partículas indistinguibles. Idealmente deberíamos hallar un formalismo que se ocupe automáticamente de lo siguiente:

1. Que la simetrización o antisimetrización se realizara de manera automática sin tener que tratar explícitamente con $\mathcal{N}!$ términos.
2. Que La forma de describir el sistema no dependa explícitamente del número de partículas presentes en él. Esto debería permitir tomar el límite termodinámico fácilmente y también abordar situaciones más generales en las que el número de partículas puede cambiar.

Esto lo proporciona el llamado método de “segunda cuantificación”² que describiremos en este capítulo y usaremos en los siguientes.

²La terminología usual de “primera” y “segunda” cuantificación es bastante desafortunada. Da a entender que hay otro objeto que ahora se está cuantificando, más específicamente la función de onda, pero esto es incorrecto, como veremos más adelante.

5.1. Espacio de Fock

La idea básica es convertir el hecho de que las partículas sean indistinguibles en una ventaja. De hecho, si este es el caso, significa que no es necesario conocer el estado cuántico de cada partícula individual, sino simplemente cuántas partículas hay en un estado cuántico dado. Supongamos que uno tiene una base completa $|\alpha\rangle$ de estados para una sola partícula. En general, esta base es infinita, pero si el sistema se pone en una caja, se pueden cuantificar los estados (por ejemplo, cuantificando el momento) y tener un número finito de estados (generalmente proporcional al volumen del sistema Ω). Así, denotamos todos los estados en esta base como

$$|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \dots, |\alpha_\Omega\rangle, \quad (5.9)$$

donde hemos usado la notación $|\alpha_\Omega\rangle$ para el último estado para recordar que, en general, el número total de estados en esta base crece con el volumen del sistema. Téngase en cuenta que el tamaño de la base no está relacionado con la cantidad de partículas que están presentes en el sistema. Para los bosones, por ejemplo, uno podría tener una base completa de los estados de una partícula que contienen solo dos estados y tener 10000 bosones presentes en el sistema (ya que varios de ellos pueden ir en el mismo estado cuántico). Para los fermiones, por supuesto, el número total de partículas siempre es menor que el número total de estados disponibles debido al principio de Pauli. Podemos describir completamente el sistema y reconstruir su función de onda si conocemos el número de partículas n_i en cada estado $|\alpha_i\rangle$ de la base completa de estados de partículas individuales, y por lo tanto, podemos caracterizar completamente la función de onda del sistema mediante el conjunto de números $n_1, n_2, \dots, n_\Omega$. El número total de partículas en el sistema es, por supuesto, $\mathcal{N} = n_1 + n_2 + \dots + n_\Omega$, y puede variar si uno varía uno de los n_i .

Definamos entonces un espacio en el que puedan existir un número arbitrario de partículas. Si llamamos $\mathcal{H}_\mathcal{N}$ al espacio de Hilbert con \mathcal{N} partículas, como en la ec. (5.1), podemos definir

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{j=0}^{+\infty} \mathcal{H}_j \quad (5.10)$$

que es la suma directa de todos los espacios de Hilbert con 0, 1, 2, etc. partículas. Tal espacio se llama espacio de Fock. En este espacio definamos ahora el estado

$$|n_1, n_2, n_3, \dots, n_\Omega\rangle \quad (5.11)$$

donde, n_i es el número de partículas en el estado cuántico $|\alpha_i\rangle$. Podemos dar completamente la expresión de la función de onda correspondiente al estado (5.11). Si llamamos $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_\mathcal{N}$ a las posiciones de cada partícula (téngase en cuenta que

$\mathcal{N} = n_1 + n_2 + \dots + n_\Omega$), tenemos

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_\mathcal{N} | n_1, n_2, \dots, n_\Omega \rangle = & \frac{\sqrt{\mathcal{N}!}}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_\Omega!}} S_\pm \left[\overbrace{\varphi_1(\mathbf{r}_1) \varphi_2(\mathbf{r}_2) \dots \varphi_2(\mathbf{r}_{n_1})}^{n_1 \text{ términos}} \right. \\ & \overbrace{\varphi_2(\mathbf{r}_{n_1+1}) \varphi_2(\mathbf{r}_{n_1+2}) \dots \varphi_2(\mathbf{r}_{n_1+n_2})}^{n_2 \text{ términos}} \dots \\ & \left. \overbrace{\varphi_\Omega(\mathbf{r}_{n_1+\dots+n_{\Omega-1}+1}) \varphi_\Omega(\mathbf{r}_{n_1+\dots+n_{\Omega-1}+2}) \dots \varphi_\Omega(\mathbf{r}_{n_1+\dots+n_{\Omega-1}+n_\Omega})}^{n_\Omega \text{ términos}} \right]. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Aquí los prefactores aseguran que la función de onda esté adecuadamente normalizada. El (anti)simetrizador S_\pm se define como

$$S_\pm [\phi_1(\mathbf{r}_1) \dots \phi_\mathcal{N}(\mathbf{r}_\mathcal{N})] = \frac{1}{\mathcal{N}!} \sum_P (\pm 1)^{s(P)} \phi_1(\mathbf{r}_{P_1}) \phi_2(\mathbf{r}_{P_2}) \dots \phi_\mathcal{N}(\mathbf{r}_{P_\mathcal{N}}). \quad (5.13)$$

Dos estados de la forma (5.11) que tienen un número diferente de partículas \mathcal{N} pertenecen a dos espacios de Hilbert diferentes y, por lo tanto, son obviamente ortogonales en el espacio de Fock. Para sistemas con el mismo número total de partículas, se puede verificar usando la función de onda (5.12) que los estados (5.11) para una base ortogonal y normalizada satisfacen

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_\Omega | n'_1, n'_2, \dots, n'_\Omega \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \dots \delta_{n_\Omega, n'_\Omega} \quad (5.14)$$

Por lo tanto, podemos usar la base (5.11) para caracterizar cada operador y elemento de matriz en el espacio de Fock. Como se mencionó antes, esta base es extremadamente conveniente ya que se basa en la cantidad mínima de información necesaria para describir un sistema de partículas indistinguibles. En particular, el número de “contadores” n_i necesarios no crece con el número total de partículas.

5.2. Operadores de creación y destrucción

Introduciremos a continuación un conjunto de operadores que nos permitirá generar todos los elementos de la base (5.11). Para cada estado α_i de la base completa de una sola partícula, definimos un operador de creación y destrucción, que aumentará o disminuirá en uno el número de partículas en este estado particular. De este modo, podremos usar estos operadores para modificar el contador n_i dando el número de partículas en un estado cuántico dado, y así abarcar todo el espacio de Fock. La definición práctica de estos operadores es diferente dependiendo de la estadística de las partículas.

Bosones

Introducimos los operadores de creación a_i^\dagger y destrucción a_i por su acción sobre todos los estados de una base completa en el espacio de Fock, en la forma

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_\Omega\rangle, \\ a_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Estas definiciones determinan por completo a los operadores por sus elementos de matriz en la base de números de ocupación (5.11). Comprobemos que los operadores a_i^\dagger y a_i son efectivamente hermíticos conjugados uno del otro. Dado que (5.11) es una base ortogonal, el único elemento de matriz distinto de cero para a_i^\dagger es

$$\langle n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_\Omega | a_i^\dagger | n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega \rangle = \sqrt{n_i + 1}. \quad (5.16)$$

Tomando el complejo conjugado de esta expresión se obtiene

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega | a_i | n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_\Omega \rangle = \sqrt{n_i + 1}, \quad (5.17)$$

que de hecho es exactamente la definición del operador a_i en (5.15) (con el reemplazo de n_i por $n_i + 1$). Otra propiedad importante de los operadores es que solo abarcan el espacio de Fock. De hecho, aunque parece formalmente de (5.15) que el operador a_i podría operar en un estado que tiene $n_i = 0$ partículas en el estado α_i el prefactor en la definición asegura que el elemento de matriz correspondiente es cero:

$$a_i |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega\rangle = 0, \quad (5.18)$$

y así, si uno intenta aplicar el operador de destrucción en un estado que no tiene ninguna partícula en el estado cuántico correspondiente, obtiene un resultado trivial, lo que significa que no se pueden generar estados no físicos con números de ocupación negativos.

Si definimos el estado que no contiene partículas en ninguno de los estados cuánticos (a veces denominado vacío) en la forma

$$|0\rangle = |n_1 = 0, n_2 = 0, \dots, n_\Omega = 0\rangle, \quad (5.19)$$

se verifica que a partir de este vacío $|0\rangle$ y los operadores a_i^\dagger podemos construir todos los vectores de la base completa del espacio de Fock, ya que

$$|n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{n_1} \dots (a_\Omega^\dagger)^{n_\Omega}}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_\Omega!}} |0\rangle. \quad (5.20)$$

Por lo tanto, uno puede generar completamente el espacio de Fock desde el estado único $|0\rangle$ mediante los operadores de creación (y destrucción ya que son conjugados hermíticos). El vacío verifica la propiedad de que para cualquier i

$$a_i |0\rangle = 0 \quad (5.21)$$

Debemos tener cuidado de no mezclar el vacío $|0\rangle$, que es un vector del espacio de Fock, y uno sobre el que los operadores pueden actuar para dar otros estados del espacio de Fock, con el cero 0.

Los operadores de creación y destrucción constituyen así una manera muy conveniente de describir el espacio de Fock. En lugar de definirlos a partir de sus elementos de matriz en una base dada, tal como (5.11), es más conveniente definirlos a partir de sus propiedades intrínsecas. Mostremos que la definición (5.15) implica que los operadores a_i^\dagger y a_i poseen ciertas relaciones de conmutación específicas. Y a la inversa, si se obedecen estas relaciones de conmutación, entonces los operadores, y el vacío correspondiente definido por (5.19), servirán para construir un espacio de Fock a partir de (5.20) en el que tendrán los elementos de matriz (5.16) y (5.17).

Calculemos primero la acción de un producto de dos operadores de creación a_i^\dagger y a_j^\dagger en estados distintos ($i \neq j$) sobre un estado arbitrario de la base:

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_j^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle &= a_i^\dagger \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j + 1, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_j + 1, \dots, n_\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (5.22)$$

y es fácil comprobar que la acción de $a_j^\dagger a_i^\dagger$ producirá exactamente el mismo resultado. Así, para cualquier elemento de la base se tiene

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle = 0, \quad (5.23)$$

lo que significa que

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0. \quad (5.24)$$

Dado que un operador conmuta consigo mismo, esto también es cierto cuando $i = j$. Tomando el hermítico conjugado del conmutador anterior obtenemos

$$[a_i, a_j] = 0. \quad (5.25)$$

Veamos ahora qué ocurre si calculamos la acción del producto de un operador de destrucción con uno de creación, siempre con ($i \neq j$):

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_j |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle &= a_i^\dagger \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j - 1, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_j - 1, \dots, n_\Omega\rangle \end{aligned} \quad (5.26)$$

y de manera similar la acción de $a_j a_i^\dagger$ (con $i \neq j$) daría el mismo resultado. Se tiene así $[a_i^\dagger, a_j] = 0$ cuando $i \neq j$. El caso $i = j$ es especial. Por un lado tenemos que

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= a_i^\dagger \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= \sqrt{(n_i - 1) + 1} \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= n_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle, \end{aligned} \quad (5.27)$$

y por otra parte

$$\begin{aligned}
a_i a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= a_i \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_\Omega\rangle \\
&= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle \\
&= (n_i + 1) |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle.
\end{aligned} \tag{5.28}$$

Concluimos entonces que

$$[a_i, a_i^\dagger] |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle = |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle. \tag{5.29}$$

Juntando los dos resultados, encontramos finalmente que el conmutador es

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j}. \tag{5.30}$$

Se puede entonces resumir las propiedades de los operadores de creación y destrucción mediante el conjunto de relaciones fundamentales

$$\begin{aligned}
[a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{i,j}, \\
[a_i^\dagger, a_j^\dagger] &= 0, \\
[a_i, a_j] &= 0.
\end{aligned} \tag{5.31}$$

llamado también álgebra de los operadores. Junto con la acción de los operadores de destrucción sobre el vacío (5.21), son equivalentes a las definición de los elementos de matriz (5.17) y (5.16). Esto implica que si disponemos de

1. Una base completa $|\alpha_i\rangle$ de estados de partículas individuales (y las funciones de onda correspondientes $\langle \mathbf{r} | \alpha_i \rangle$)
2. Operadores de creación y destrucción, a_i^\dagger y a_i , para cada uno de estos estados, que obedecen relaciones conmutación canónicas (5.31).
3. Un vacío $|0\rangle$ que es destruido por los operadores de destrucción $a_i |0\rangle = 0$,

podemos construir completamente un espacio de Fock para bosones. La idea es entonces explotar directamente las propiedades anteriores y utilizar las relaciones de conmutación canónicas entre los operadores bosónicos para calcular las propiedades físicas, en lugar de las funciones de onda. Esta descripción se conoce como segunda cuantificación.

Tomemos por ejemplo el siguiente estado de dos partículas:

$$|\psi\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle. \tag{5.32}$$

y reconstruyamos la expresión para la función de onda usando (5.12). Se obtiene

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) + \varphi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2) \varphi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1)], \quad (5.33)$$

que es la función correctamente simetrizada que describe dos bosones. Sin embargo, el interés de la segunda cuantificación es apegarse a los operadores y sus relaciones de conmutación y evitar volver a las funciones de onda, que en general son bastante intratables. Por ejemplo, los operadores de creación conmutan entre sí, y por lo tanto $a_1^\dagger a_2^\dagger = a_2^\dagger a_1^\dagger$. Entonces

$$a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle = a_2^\dagger a_1^\dagger |0\rangle, \quad (5.34)$$

y así la función de onda $|\psi\rangle$ resulta ser simétrica por permutación de las partículas. Los operadores de creación y destrucción están así directamente diseñados para tener en cuenta adecuadamente la simetrización de las funciones de onda y la indistinguibilidad de las partículas. De hecho, las relaciones de conmutación permiten obtener directamente la información sin pasar por ningún proceso de simetrización. En particular, los promedios se pueden calcular directamente. Ilustrémoslo calculando la normalización de la función $|\psi\rangle$. Queremos calcular

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle 0 | a_2 a_1 a_1^\dagger a_2^\dagger | 0 \rangle. \quad (5.35)$$

Aunque este es un ejemplo específico, veremos que generalmente todos los observables físicos se reducen al promedio en el vacío de un determinado producto de los operadores de creación y destrucción, por lo que el método que describimos se puede aplicar de manera general. Para calcular el promedio, lo único que necesitamos usar es el hecho de que el vacío es destruido por todos los a_i . Por tanto, utilizando las relaciones de conmutación, deberíamos llevar los operadores a_i a la derecha, de modo de hacerlos actuar sobre el vacío. Para actuar sobre el vacío. Primero escribimos $a_1 a_1^\dagger = 1 + a_1^\dagger a_1$ de la relación de conmutación. Tenemos entonces

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \langle 0 | a_2 (1 + a_1^\dagger a_1) a_2^\dagger | 0 \rangle, \\ &= \langle 0 | a_2 a_2^\dagger | 0 \rangle + \langle 0 | a_2 a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (5.36)$$

En el segundo término podemos usar ahora la relación de conmutación $a_1 a_2^\dagger = a_2^\dagger a_1$ para reescribirlo como $\langle 0 | a_2 a_1^\dagger a_2^\dagger a_1 | 0 \rangle$ que inmediatamente da cero. Para el primero usamos de nuevo las relaciones de conmutación, y obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \langle 0 | a_2 a_2^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | (1 + a_2^\dagger a_2) | 0 \rangle, \\ &= \langle 0 | 1 | 0 \rangle, \\ &= 1. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Aunque los cálculos pueden volverse tediosos cuando crece el número de operadores, la mecánica siempre es la misma, y con un poco de práctica se pueden acelerar.

Fermiones

Pasemos ahora a los operadores de creación y destrucción de fermiones. De manera similar que para los bosones, definimos

$$\begin{aligned} c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= (1 - n_i)(-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_\Omega\rangle, \\ c_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= n_i(-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_\Omega\rangle, \end{aligned} \quad (5.38)$$

donde $\epsilon_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j$ y $\epsilon_1 = 0$. El orden de los elementos en la base debe fijarse una vez, y utilizar siempre la misma convención, pero, por supuesto, es arbitraria.

En estas definiciones, algunos términos son bastante transparentes: dado que para los fermiones el principio de Pauli impide que dos fermiones estén en el mismo estado, los números de ocupación n_i están restringido a tomar los valores 0 o 1. Por lo tanto, es importante que el operador de creación no pueda crear dos partículas en un estado, lo cual queda asegurado por el factor $1 - n_i$ que garantiza que si c_i^\dagger actúa sobre un estado con $n_i = 1$ entonces la acción del operador dará cero. De manera similar, el factor n_i asegura que el operador de destrucción no puede destruir una partícula en el estado para el cual $n_i = 0$. La física del factor extraño $(-1)^{\epsilon_i}$ no es obvia por el momento, y uno podría tener la tentación de definir los operadores sin tal factor de fase. Veremos su utilidad un poco más adelante.

Procedemos ahora exactamente como con los bosones: comprobemos primero que los operadores c_i^\dagger y c_i son efectivamente hermíticos conjugados uno del otro. De hecho, los cálculos con fermiones son más simples en cierto sentido, ya que para cada estado α_i solo hay dos posibilidades $n_i = 0$ o $n_i = 1$ para el estado correspondiente. El único elemento de matriz distinto de cero para el operador c_i^\dagger es

$$\langle n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega | c_i^\dagger | n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega \rangle = (-1)^{\epsilon_i}. \quad (5.39)$$

mientras que para c_i el único elemento de matriz distinto de cero es

$$\langle n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega | c_i | n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega \rangle = (-1)^{\epsilon_i}. \quad (5.40)$$

que obviamente es el complejo conjugado del otro.

Para continuar con las relaciones de conmutación y comprender el papel de los coeficientes $(-1)^{\epsilon_i}$, veamos primero la acción de $c_i c_i^\dagger$. Como esto solo afecta al estado α_i , podemos simplemente considerar su acción sobre los dos estados con $n_i = 0$ y $n_i = 1$:

$$\begin{aligned} c_i c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega\rangle &= (-1)^{\epsilon_i} c_i |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= (-1)^{2\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega\rangle \end{aligned} \quad (5.41)$$

Por otro lado,

$$c_i^\dagger c_i |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega\rangle = 0. \quad (5.42)$$

Nótese que en este resultado los factores $(-1)^{\epsilon_i}$ no juegan ningún papel, y podríamos haber definido los operadores sin incluirlos. En forma similar,

$$\begin{aligned} c_i c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega\rangle &= 0 \\ c_i^\dagger c_i |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega\rangle &= |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Se observa entonces que $[c_i, c_i^\dagger]$ no tiene ninguna expresión simple. En cambio, el anticonmutador

$$[c_i, c_i^\dagger]_+ = c_i c_i^\dagger + c_i^\dagger c_i \quad (5.44)$$

conduce a

$$[c_i, c_i^\dagger]_+ |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle = |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle, \quad (5.45)$$

y por lo tanto

$$[c_i, c_i^\dagger]_+ = 1 \quad (5.46)$$

Por lo tanto, se puede adivinar que en lugar del conmutador, es el anticonmutador el que jugará un papel importante. El rol del factor $(-1)^{\epsilon_i}$ será, por lo tanto, asegurar que para las otras combinaciones también se obtengan relaciones simples para el anticonmutador. Ilustrémoslo con la acción de $c_i c_j^\dagger$ con $i \neq j$. Suponiendo que $i < j$, tenemos que

$$\begin{aligned} c_i c_j^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle &= (1 - n_j)(-1)^{\epsilon_j} c_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j + 1, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= (1 - n_j)(-1)^{\epsilon_j} n_i (-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots, n_\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (5.47)$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} c_j^\dagger c_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle &= n_i (-1)^{\epsilon_i} c_j^\dagger |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= (1 - n_j)(-1)^{\epsilon'_j} n_i (-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots, n_\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (5.48)$$

El término ϵ'_j corresponde al factor de fase en un estado con $n_i - 1$ en lugar de n_i . Así, $\epsilon'_j = \epsilon_j - 1$. En ausencia de dichos términos de fase, las dos expresiones (5.47) y (5.48) serían idénticas y tendríamos que $[c_i, c_j^\dagger] = 0$. Gracias a los factores de fase ϵ_j ahora tenemos un signo menos entre los dos términos y la relación se convierte en

$$[c_i, c_j^\dagger]_+ = 0, \quad (5.49)$$

lo que permitirá definir los operadores c_i sólo en términos de sus anticonmutadores. Es fácil comprobar las restantes relaciones, y así se tiene, de forma similar que para los bosones,

$$\begin{aligned} [c_i, c_j^\dagger]_+ &= \delta_{i,j}, \\ [c_i^\dagger, c_j^\dagger]_+ &= 0, \\ [c_i, c_j]_+ &= 0. \end{aligned} \quad (5.50)$$

Por otro lado, de la misma forma que para los bosones, se puede construir todos los estados del espacio de Fock a partir de un vacío $|0\rangle$ que es destruido por todos los c_i ($c_i|0\rangle = 0$) usando la relación (5.20)

Las funciones de onda y los promedios se pueden calcular también con las mismas técnicas que antes,, veamos como ejemplo la función de onda de dos fermiones en los estados α_1 y α_2 :

$$|\psi\rangle = c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle. \quad (5.51)$$

y entonces, de (5.12) la función de onda resulta

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha_1(\mathbf{r}_1) \alpha_2(\mathbf{r}_2) - \alpha_1(\mathbf{r}_2) \alpha_2(\mathbf{r}_1)], \quad (5.52)$$

que es, por supuesto, la función de onda correctamente antisimetrizada para fermiones. Sin ir a la función de onda, se puede ver directamente la antisimetrización a nivel de estados y operadores: usando la relación de anticonmutación $[c_1, c_2]_+ = 0$ se encuentra que

$$c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle = -c_2^\dagger c_1^\dagger |0\rangle, \quad (5.53)$$

y así la función de onda $|\psi\rangle$ es obviamente antisimétrica por permutación de las partículas.

El hecho de que el operador c_i se ocupe automáticamente de la antisimetrización hace que sea muy conveniente escribir incluso funciones complicadas. Por ejemplo, el mar de Fermi, que corresponde a un estado donde todos los niveles con energía más baja que la energía de Fermi están ocupados. Para describir el estado de una partícula necesitamos una base completa, y para ello elegimos la base del momento $|\mathbf{k}\rangle$ para la parte orbital, mientras que para el sector de spin podemos tomar los dos estados propios de S_z denotados por $|\uparrow\rangle$ o $|\downarrow\rangle$ o $|\sigma = \pm\rangle$. Los estados α son así $\alpha = (\mathbf{k}, \sigma = \pm)$. Podemos entonces definir los operadores de creación correspondientes $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ que crean un electrón con el momento \mathbf{k} y el espín $\sigma = \uparrow, \downarrow$. En términos de estos operadores, el mar de Fermi es simplemente

$$|F\rangle = \prod_{\mathbf{k}, \varepsilon(\mathbf{k}) \leq E_F} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle. \quad (5.54)$$

Los promedios en el vacío se pueden calcular exactamente con la misma técnica descrita para los bosones. Por ejemplo, si tomamos $|\psi\rangle = c_1^\dagger|0\rangle$, entonces (usando las relaciones de anticonmutación),

$$\begin{aligned}\langle\psi|\psi\rangle &= \langle 0|c_i c_i^\dagger|0\rangle \\ &= \langle 0|1 - c_i^\dagger c_i|0\rangle \\ &= \langle 0|1|0\rangle = 1.\end{aligned}\tag{5.55}$$

Generalizando el cálculo anterior puede mostrarse el mar de Fermi está correctamente normalizado, $\langle F|F\rangle = 1$.

5.2.1. Operadores de un cuerpo

Ahora que tenemos definidos a los operadores que permiten construir todo el espacio de Fock, lo que queda por resolver es expresar los observables físicos que queremos calcular en términos de estos operadores. Para hacerlo, debemos tener en cuenta que los observables deben actuar sobre partículas indistinguibles, lo que establece algunas restricciones sobre su forma. Antes de dar sus expresiones en segunda cuantificación, es conveniente clasificarlos de acuerdo al número de partículas sobre las que actúan. Hay observables físicos que miden solo los números cuánticos de una partícula a la vez (tales como el momento, la densidad, etc.) y otros que necesitan tratar con los números cuánticos de dos de las partículas para determinar sus elementos de matriz. Este es caso, por ejemplo, del operador que mide las interacciones entre las partículas. El primer tipo se llama operadores de un cuerpo, mientras que el segundo es de dos cuerpos. En principio, se pueden tener operadores que involucren más de dos partículas (tales como colisiones de tres cuerpos y más), pero son de poca utilidad práctica en la física del estado sólido, por lo que discutiremos principalmente aquí los de uno y dos cuerpos. Las fórmulas dadas aquí se pueden generalizar fácilmente si es necesario.

Definición

Comencemos primero con los operadores de un cuerpo. De manera bastante general, llamemos O a un operador que representa alguna propiedad de una partícula a la vez. Por supuesto, si O actúa en el espacio de Hilbert con \mathcal{N} partículas, debe actuar sobre cada partícula del sistema. Llamemos $O^{(1)}$ al operador que actúa en el espacio de Hilbert de una sola partícula; el operador O correspondiente a las \mathcal{N} partículas debe ser

$$O = O_1^{(1)} \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_{\mathcal{N}} + \mathbf{1}_1 \otimes O_2^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_{\mathcal{N}} + \dots + \mathbf{1}_1 \otimes \dots \otimes O_{\mathcal{N}}^{(1)} \tag{5.56}$$

Figura 5.1: El operador de un cuerpo en segunda cuantificación. El operador $c_\alpha^\dagger c_\beta$ cambia el estado cuántico de cualquier partícula en el sistema del estado β al estado α . El elemento de amplitud de dicho proceso está dado por los elementos de matriz del operador de una sola partícula $O^{(1)}$: $\langle\alpha|O^{(1)}|\beta\rangle$. Esto asegura que el operador $O^{(1)}$ esté operando en cada partícula a su vez.

donde $O_i^{(1)}$ es el operador que actúa sobre la partícula i -ésima. El hecho de que en la suma anterior, todos los coeficientes sean idénticos, es la consecuencia directa del hecho de que las partículas son indistinguibles, y no podemos distinguir en una medida si un cierto conjunto de números cuánticos corresponden a una u otra partícula del sistema. La forma (5.56) es por lo tanto la forma más general posible de un operador de un solo cuerpo para partículas indistinguibles.

Para expresar (5.56) en segunda cuantificación, debemos comenzar por analizar qué sucede si tenemos un sistema con una sola partícula (si no hay ninguna partícula, un operador de un cuerpo es trivialmente nulo). En ese caso $O = O^{(1)}$ y usando la base completa α podemos escribir

$$O = \sum_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle\langle\alpha|O^{(1)}|\beta\rangle\langle\beta|, \quad (5.57)$$

y luego utilizamos que $|\alpha\rangle = c_\alpha^\dagger|0\rangle$ para obtener

$$O = \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha|O^{(1)}|\beta\rangle c_\alpha^\dagger|0\rangle\langle 0|c_\beta. \quad (5.58)$$

La interpretación física de esta fórmula es bastante simple: el operador c_β destruye una partícula en un estado β ; como solo tenemos una partícula en el sistema, nos vemos obligados a ir al vacío, luego, desde el vacío, el operador c_α^\dagger recrea la partícula en el estado α . El resultado neto es que todavía tenemos una partícula en el sistema pero ha cambiado su estado cuántico al pasar del estado β al estado α . La amplitud de dicha transición está dada por los elementos de matriz del operador $O^{(1)}$ entre los estados β y α .

Si en lugar de una partícula tuviéramos ahora un número arbitrario de partículas en el sistema, tendríamos que hacer exactamente lo mismo para cada una de ellas, dejando invariantes los números cuánticos de las demás, como sugiere (5.56), y hacer la suma. Un operador que logra esto está dado por la expresión

$$O = \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha|O^{(1)}|\beta\rangle c_\alpha^\dagger c_\beta \quad (5.59)$$

que es idéntica a (5.58) excepto que no estamos obligados a ir al vacío después de la destrucción de la partícula en el estado β . De hecho, si hay varias partículas, el

operador $c_\alpha^\dagger c_\beta$ cambiará el número cuántico de una partícula del estado β al estado α y dejará intactos los números cuánticos de todas las demás partículas del sistema. Sin embargo, el operador c_β operará en todas las partículas del sistema y, por lo tanto, hará esa transición para la primera, segunda, etc. realizando automáticamente la suma en (5.56). La interpretación de (5.59) se muestra en la figura 5.1.

La expresión (5.59) permite así representar cualquier operador de un solo cuerpo en segunda cuantificación, conociendo sólo la acción del operador $O^{(1)}$ en el espacio de una sola partícula. Nótese que las funciones de onda provenientes de la elección de la base completa α sólo intervienen en el cálculo de los elementos de matriz $\langle \alpha | O^{(1)} | \beta \rangle$. Una vez que se calculan estos elementos de matriz, todo el operador se reduce a una combinación lineal de operadores de creación y destrucción y, por lo tanto, todos los promedios físicos se pueden calcular mediante las técnicas descritas en la sección anterior, sin tener que volver a las funciones de onda. Por supuesto, todos los aspectos de su simetrización o la antisimetrización son tenidos en cuenta automáticamente por la naturaleza de los operadores de creación o destrucción.

Ejemplos

Comencemos con el operador que mide la densidad de partículas en un punto \mathbf{r}_0 , que para una partícula se escribe

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}_0) = |\mathbf{r}_0\rangle\langle\mathbf{r}_0|, \quad (5.60)$$

debido a que $\langle \psi | \rho^{(1)}(\mathbf{r}_0) | \psi \rangle = |\psi(\mathbf{r}_0)|^2$. En segunda cuantificación la forma del operador dependerá de la elección de la base completa α que tomemos. Empecemos tomando la base de autoestados de posición $|\mathbf{r}\rangle$, en cuyo caso, el operador $c_{\mathbf{r}}^\dagger$ es el operador que crea una partícula en el punto \mathbf{r} . Usando esta base y la relación (5.59) se obtiene

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}_0) &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}' \rangle c_{\mathbf{r}}^\dagger c_{\mathbf{r}'}, \\ &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}') c_{\mathbf{r}}^\dagger c_{\mathbf{r}'}, \\ &= c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}. \end{aligned} \quad (5.61)$$

La expresión $c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}$ es particularmente simple de interpretar. El operador $c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}$ destruye y recrea una partícula en el mismo estado cuántico. Por lo tanto, no ha cambiado nada en el sistema. Sin embargo, la acción del operador $c_{\mathbf{r}_0}$ dará cero si no hay ninguna partícula a destruir en el estado cuántico correspondiente (aquí una partícula en el punto \mathbf{r}_0). El operador $c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}$ da cero si no hay ninguna partícula en el estado cuántico correspondiente y uno si hay una partícula. Por tanto, simplemente cuenta el número de partículas en el punto \mathbf{r}_0 . Generalmente, el operador $c_\alpha^\dagger c_\alpha$

simplemente cuenta el número de partículas en el estado α . El operador que cuenta el número total de partículas en el sistema está dado entonces por

$$N = \int d\mathbf{r} c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}}. \quad (5.62)$$

La generalización al caso de partículas con spin es inmediata. Para ello la base completa será $\alpha = (\mathbf{r}, \sigma)$ y el operador densidad solo actúa en la parte espacial, por lo tanto

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}_0) = |\mathbf{r}_0\rangle\langle\mathbf{r}_0| \otimes \mathbf{1}_{\text{spin}}, \quad (5.63)$$

y así (5.59) da lugar a

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}\sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}'\sigma' \rangle c_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r}'\sigma'}, \\ &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r}'\sigma'}, \\ &= c_{\mathbf{r}_0\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{r}_0\uparrow} + c_{\mathbf{r}_0\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{r}_0\downarrow}. \end{aligned} \quad (5.64)$$

También podríamos calcular la densidad de spin a lo largo del eje z en el punto \mathbf{r}_0 . En ese caso el operador de una partícula es

$$S_z^{(1)}(\mathbf{r}_0) = |\mathbf{r}_0\rangle\langle\mathbf{r}_0| \otimes S_z, \quad (5.65)$$

y usando (5.59) se obtiene³

$$\begin{aligned} S_z(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}\sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \otimes S_z | \mathbf{r}'\sigma' \rangle c_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r}'\sigma'}, \\ &= \sum_{\sigma\sigma'} \langle \sigma | S_z | \sigma' \rangle c_{\mathbf{r}_0\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r}_0\sigma'}, \\ &= \frac{1}{2} (c_{\mathbf{r}_0\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{r}_0\uparrow} - c_{\mathbf{r}_0\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{r}_0\downarrow}). \end{aligned} \quad (5.66)$$

³Recordemos que las expresiones de los operadores de spin en la base $|\pm\rangle$ son

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{1}{2} [|+\rangle\langle-| + |- \rangle\langle+|], \\ S_y &= \frac{i}{2} [-|+\rangle\langle-| + |- \rangle\langle+|], \\ S_z &= \frac{1}{2} [|+\rangle\langle+| - |- \rangle\langle+|]. \end{aligned}$$

De manera similar, la densidad de spin a lo largo de la dirección x es

$$\begin{aligned}
S_x(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} \sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \otimes S_x | \mathbf{r}' \sigma' \rangle c_{\mathbf{r} \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}' \sigma'}, \\
&= \sum_{\sigma \sigma'} \langle \sigma | S_x | \sigma' \rangle c_{\mathbf{r}_0 \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \sigma'}, \\
&= \frac{1}{2} (c_{\mathbf{r}_0 \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \downarrow} + c_{\mathbf{r}_0 \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \uparrow}),
\end{aligned} \tag{5.67}$$

y para la dirección y ,

$$\begin{aligned}
S_y(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} \sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \otimes S_y | \mathbf{r}' \sigma' \rangle c_{\mathbf{r} \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}' \sigma'}, \\
&= \sum_{\sigma \sigma'} \langle \sigma | S_y | \sigma' \rangle c_{\mathbf{r}_0 \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \sigma'}, \\
&= \frac{i}{2} (-c_{\mathbf{r}_0 \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \downarrow} + c_{\mathbf{r}_0 \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \uparrow}),
\end{aligned} \tag{5.68}$$

Alternativamente, podríamos haber usado la base de los autoestados del operador momento, $|\mathbf{k}\rangle$, cuyas funciones de onda son

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \tag{5.69}$$

Dado que el spin y la parte orbital son independientes, solo daremos las expresiones para el caso sin espín. Incorporar el spin se realiza exactamente de la misma forma que en la base de coordenadas. El operador $c_{\mathbf{k}}$ ahora destruye una partícula momento \mathbf{k} (es decir, en un estado de onda plana con momento \mathbf{k}). La ecuación (5.59) da lugar a

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \langle \mathbf{k}_1 | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{k}_2 \rangle c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
&= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_0} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_0} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}.
\end{aligned} \tag{5.70}$$

La expresión (5.70) no es tan simple como (5.61) ya que el operador densidad no es diagonal en la base de momentos. Sin embargo, tanto (5.70) como (5.61) representan el mismo operador. Esto nos da una conexión directa entre los operadores que crean una partícula en el punto \mathbf{r} y los que crean una partícula con momento \mathbf{k} . Comparando las ecuaciones (5.70) y (5.61) se obtiene

$$c_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}}. \tag{5.71}$$

Esta expresión constituye un ejemplo de una transformación, en este caso lineal y dada por una transformada de tipo Fourier, entre operadores de creación. Esta transformación preserva los conmutadores, como puede verificarse en forma simple, y por lo tanto constituye un ejemplo de transformación canónica. Discutiremos más sobre este tema más adelante.

Usando la expresión (5.70) también podemos calcular el número total de partículas en el sistema:

$$\begin{aligned}
 N &= \int d\mathbf{r} \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}},
 \end{aligned} \tag{5.72}$$

y si tenemos en cuenta que $c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}$ cuenta el número de partículas en el estado cuántico \mathbf{k} , se obtiene nuevamente que el número total de partículas es la suma de todos los números de partículas en todos los estados cuánticos posibles. Finalmente se puede usar (5.70) para obtener una expresión simple de la transformada de Fourier de la densidad:

$$\begin{aligned}
 \rho(\mathbf{q}) &= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q} \mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}), \\
 &= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q} \mathbf{r}} \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k} - \mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}}.
 \end{aligned} \tag{5.73}$$

Otro operador importante es, por supuesto, la energía cinética de las partículas. Para una partícula se tiene $H^{(1)} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$, y de manera más general, podríamos tener cualquier función del momento $H^{(1)} = \epsilon(\mathbf{p})$. Por lo tanto, es muy conveniente utilizar la base de momentos. La energía cinética se expresa así como

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \langle \mathbf{k}_1 | \epsilon(\mathbf{p}) | \mathbf{k}_2 \rangle c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \epsilon(\mathbf{k}_2) c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}},
 \end{aligned} \tag{5.74}$$

que tiene la interpretación simple de que la energía cinética total del sistema es la suma de el número de partículas en cada estado \mathbf{k} (dado por $c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}$) multiplicado por la energía cinética $\varepsilon(\mathbf{k})$ de tal estado. La generalización para sistemas con spin es inmediata y, en general se obtiene

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (5.75)$$

asumiendo que la energía cinética no depende del espín (en ausencia de acoplamiento espín-órbita). Debemos tener en cuenta que dado que el número total de partículas es $N = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}$, agregar un potencial químico $-\mu N$ no cambia la forma del Hamiltoniano:

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (5.76)$$

y simplemente reemplaza $\varepsilon(\mathbf{k})$ por $\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$. A temperatura cero la energía $\xi(\mathbf{k})$ es cero en el nivel de Fermi, negativa por debajo, y positiva por encima.

5.2.2. Operadores de dos cuerpos

Veamos ahora los operadores que involucran dos partículas y como definir sus elementos de matriz. Es en particular el caso del potencial de interacción entre dos partículas

$$V = \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \quad (5.77)$$

Definición

Con un espíritu similar al de los operadores de un solo cuerpo, llamemos $O^{(2)}$ al operador correspondiente que actúa en el espacio de Hilbert de sólo dos partículas. El operador de dos cuerpos que actúa en $\mathcal{H}_{\mathcal{N}}$ debe tener la forma

$$O = \sum_{i < j} O_{i,j}^{(2)} \bigotimes_{k \neq i,j} \mathbf{1}_k = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} O_{i,j}^{(2)} \bigotimes_{k \neq i,j} \mathbf{1}_k, \quad (5.78)$$

para que el operador $O^{(2)}$ pueda operar sobre cada par de partículas en el sistema. De manera similar que para los operadores de un solo cuerpo, los coeficientes en la suma anterior deben ser todos iguales, de lo contrario significaría que las partículas podrían distinguirse.

Para entender cómo escribir O en segunda cuantificación, veamos el caso en el que hay exactamente dos partículas en el sistema. Debemos definir el operador O por sus elementos de matriz en el espacio físico de las funciones (anti)simetrizadas $|\alpha, \beta\rangle$, lo que significa que debemos conocer todos los elementos

$$\langle \alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta \rangle. \quad (5.79)$$

Tomemos primero la expresión (5.3) y escribamos $|\alpha, \beta\rangle$ en términos de los kets ordenados (5.4)

$$(\alpha, \beta|O^{(2)}|\gamma, \delta) = (\beta, \alpha|O^{(2)}|\delta, \gamma), \quad (5.80)$$

aquí la igualdad se debe a que simplemente estamos intercambiando partículas, y por lo tanto obtenemos

$$\langle \alpha, \beta|O^{(2)}|\gamma, \delta\rangle = (\alpha, \beta|O^{(2)}|\gamma, \delta) \pm (\alpha, \beta|O^{(2)}|\delta, \gamma). \quad (5.81)$$

Ahora deberíamos encontrar en segunda cuantificación un operador que reproduzca estos elementos de matriz y, por supuesto, funcione para \mathcal{N} partículas en lugar de dos. Se verifica que

$$O = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} (\alpha, \beta|O^{(2)}|\gamma, \delta) c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma, \quad (5.82)$$

funciona tanto para fermiones como para bosones. No demostraremos esta relación en general, lo cual puede hacerse calculando los elementos de matriz a ambos lados, sino que simplemente comprobaremos que funciona para $\mathcal{N} = 2$ partículas. Calculemos, a partir de (5.82), los elementos de matriz

$$\langle \alpha_0, \beta_0|O|\gamma_0, \delta_0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} (\alpha, \beta|O^{(2)}|\gamma, \delta) \langle \alpha_0, \beta_0|c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma|\gamma_0, \delta_0\rangle. \quad (5.83)$$

Como $|\alpha_0, \beta_0\rangle = c_{\alpha_0}^\dagger c_{\beta_0}^\dagger |0\rangle$ tenemos que calcular promedios de la forma

$$\langle 0|c_{\beta_0} c_{\alpha_0} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma c_{\gamma_0}^\dagger c_{\delta_0}^\dagger |0\rangle \quad (5.84)$$

lo cual puede realizarse mediante la técnica que discutimos antes, consistente en llevar hacia la derecha a los operadores de destrucción para que actúen sobre el vacío. Esto da

$$\langle 0|c_{\beta_0} c_{\alpha_0} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma c_{\gamma_0}^\dagger c_{\delta_0}^\dagger |0\rangle = [\delta_{\alpha_0, \alpha} \delta_{\beta_0, \beta} \pm \delta_{\alpha_0, \beta} \delta_{\beta_0, \alpha}] [\delta_{\gamma_0, \gamma} \delta_{\delta_0, \delta} \pm \delta_{\gamma_0, \delta} \delta_{\delta_0, \gamma}]. \quad (5.85)$$

El signo + es el habitual para los bosones y el - para los fermiones. Físicamente significa que cuando los operadores de destrucción actúan en la forma

$$c_\delta c_\gamma |\gamma_0, \delta_0\rangle, \quad (5.86)$$

tienen que destruir las dos partículas en los dos estados cuánticos posibles y así δ tiene que ser uno de los estados y γ el otro con el signo adecuado dependiendo de la (anti)simetría de la función de onda. Usando (5.85) en (5.83) de hecho recuperamos los mismos elementos de matriz que (5.81).

Físicamente, la fórmula (5.82) tiene una interpretación similar a la de los operadores de un solo cuerpo. El término $c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma$ destruye dos partículas con los números

cuánticos γ y δ , para esto es necesario que el sistema contenga dos partículas (que es lo que debe ocurrir para que un operador de dos cuerpos pueda actuar). Luego recrea las dos partículas con dos nuevos números cuánticos α y β . La amplitud para este proceso está dada por los elementos de matriz del operador $O^{(2)}$ en una transición donde la primera partícula va del estado γ al estado α y la segunda del estado δ al estado β . El elemento de matriz se escribir para kets ordenados (son kets producto y por lo tanto más simples); los operadores de creación y destrucción se encargan de todas las permutaciones y de realizar esta transición para cualquier par de partículas en el sistema.

Ejemplos

La interacción más común entre los electrones es aquella que depende de la distancia entre las dos partículas. Los dos operadores de tal interacción son, por lo tanto,

$$O^{(2)} = V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2), \quad (5.87)$$

donde $\hat{\mathbf{r}}_1$ y $\hat{\mathbf{r}}_2$ son los operadores que miden la posición de la primera y la segunda partícula respectivamente. Excepcionalmente utilizaremos aquí la notación con el sombrero para indicar que son operadores. Por ejemplo, para la interacción de Coulomb es

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (5.88)$$

pero otros tipos de interacciones como una interacción local $V(\mathbf{r}) = U\delta(\mathbf{r})$ también son opciones posibles. Mantendremos V como función general en lo que sigue.

Para expresar el operador en segunda cuantificación, tenemos nuevamente que realizar la elección de la base. Debido a que el operador $V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)$ es diagonal en la base de posición, comencemos con ésta. Usando (5.82) y el hecho de que α es la base de posiciones, obtenemos

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 (\mathbf{r}_3 \mathbf{r}_4 | V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2) | \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_3}^\dagger c_{\mathbf{r}_4}^\dagger c_{\mathbf{r}_2} c_{\mathbf{r}_1}, \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_3}^\dagger c_{\mathbf{r}_4}^\dagger c_{\mathbf{r}_2} c_{\mathbf{r}_1}, \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2} c_{\mathbf{r}_1}. \end{aligned} \quad (5.89)$$

Si se incluye el espín, la base completa se convierte en $\alpha = (\mathbf{r}, \sigma)$ y como el operador $V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)$ es la identidad en el sector de espín, se obtiene

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}. \quad (5.90)$$

La expresión (5.90) puede escribirse en una forma más familiar utilizando las relaciones de (anti)conmutación para fermiones

$$\begin{aligned}
 c_{\mathbf{r}_1\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2\sigma_2} c_{\mathbf{r}_1\sigma_1} &= -c_{\mathbf{r}_1\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_1\sigma_1} c_{\mathbf{r}_2\sigma_2}, \\
 &= -c_{\mathbf{r}_1\sigma_1}^\dagger (\delta_{\mathbf{r}_1,\sigma_1;\mathbf{r}_2\sigma_2} - c_{\mathbf{r}_1\sigma_1} c_{\mathbf{r}_2\sigma_2}^\dagger) c_{\mathbf{r}_2\sigma_2}, \\
 &= -\delta_{\mathbf{r}_1,\sigma_1;\mathbf{r}_2\sigma_2} c_{\mathbf{r}_1\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2\sigma_2} + c_{\mathbf{r}_1\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_1\sigma_1} c_{\mathbf{r}_2\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2\sigma_2}, \\
 &= -\delta_{\mathbf{r}_1,\sigma_1;\mathbf{r}_2\sigma_2} \rho_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) + \rho_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \rho_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2),
 \end{aligned} \tag{5.91}$$

(para bosones se obtiene una expresión similar, con signo +). El segundo término da lugar a la expresión

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \rho_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2), \tag{5.92}$$

que es la forma familiar de la interacción entre dos densidades de partículas (o cargas) en dos puntos diferentes. La diferencia es que ahora los ρ son operadores que miden la densidad en lugar de variables clásicas. El primer término se reduce a

$$\sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r} = 0) \rho_{\sigma}(\mathbf{r}_1) = V(\mathbf{r} = 0) N, \tag{5.93}$$

que es simplemente un término de potencial químico. Téngase en cuenta que puede ser infinito para algunas interacciones, como la interacción de Coulomb. Este primer término está ahí para corregir el hecho de que la expresión (5.92) contrariamente a (5.90) no contiene solo la interacción entre dos partículas diferentes. Efectivamente, (5.90) tiene dos operadores de destrucción a la derecha, lo que significa que los operadores solo pueden actuar en estados que contienen dos partículas. Por el contrario, (5.92) es de la forma

$$c_{\mathbf{r}_1\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_1\sigma_1} c_{\mathbf{r}_2\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2\sigma_2}, \tag{5.94}$$

y por lo tanto puede actuar incluso si solo hay una partícula en el sistema. Por lo tanto, contiene una falsa “autointeracción” de la partícula consigo misma. Es esta interacción la que conduce al potencial químico (5.93) que debe incluirse adecuadamente junto con (5.92). No obstante, si se fija el número de partículas del sistema, entonces esta modificación es irrelevante ya que simplemente se absorbe en una redefinición del potencial químico y se puede usar (5.90) o (5.92) indistintamente.

Reescribamos ahora la interacción en la base del impulsos. Usando (5.82) y una base $\alpha = (\mathbf{k}, \sigma)$ se tiene

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2, \\ \mathbf{k}_3\sigma_3, \mathbf{k}_4\sigma_4}} (\mathbf{k}_3\sigma_3, \mathbf{k}_4\sigma_4 | V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2) | \mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2) c_{\mathbf{k}_3\sigma_3}^\dagger c_{\mathbf{k}_4\sigma_4}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}. \tag{5.95}$$

Lo que sigue es calcular un elemento de matriz que involucra operadores de posición en una base de estados de momentos. Esto se realiza, como es habitual en mecánica cuántica, insertando resoluciones de la identidad en el espacio de coordenadas

$$\mathbf{1} = \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|, \quad (5.96)$$

y utilizando la función de onda plana (5.69). Se obtiene

$$V = \frac{1}{2\Omega^2} \sum_{\substack{\sigma_1\sigma_2 \\ \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-i(\mathbf{k}_3\mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_4\mathbf{r}_2)} V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{i(\mathbf{k}_1\mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2\mathbf{r}_2)} \\ \times c_{\mathbf{k}_3\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_4\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, \quad (5.97)$$

A continuación aprovechamos que el potencial depende de la diferencia de coordenadas de las dos partículas y cambiamos a las variables de centro de masa $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ y coordenada relativa $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ para obtener

$$V = \frac{1}{2\Omega^2} \sum_{\substack{\sigma_1\sigma_2 \\ \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}} \int d\mathbf{R} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)\mathbf{R}} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4)\mathbf{r}/2} \\ \times c_{\mathbf{k}_3\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_4\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \quad (5.98)$$

Finalmente, integramos en \mathbf{r} y \mathbf{R} ,

$$V = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\substack{\sigma_1\sigma_2 \\ \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} V(\mathbf{q} = \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) c_{\mathbf{k}_3\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_4\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, \quad (5.99)$$

Comentemos brevemente esta expresión. La integración sobre \mathbf{R} da lugar al factor $\delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}$ que expresa la conservación de los momentos de las dos partículas antes y después de la interacción. Esto es consecuencia directa del hecho de que hemos elegido un potencial de interacción que es invariante frente a traslaciones $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ y, por lo tanto, el momento total ($\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$) y $\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$) debe conservarse. La integral sobre la coordenada relativa conduce directamente a la transformada de Fourier del potencial de interacción con un vector de onda que corresponde al momento transferido de una a otra de las partículas durante la interacción. Finalmente, se puede reescribir el operador V teniendo en cuenta la restricción $\delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}$ como

$$V = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q} \\ \sigma_1\sigma_2}} V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \quad (5.100)$$

que se representa gráficamente como se muestra en la figura 5.2

Figura 5.2: Visualización pictórica del término (3.97). Cada operador de destrucción está representado por una flecha entrante, cada creación por una saliente. Uno ve que la interacción puede verse como la dispersión de una partícula que va del estado $\mathbf{k}_1\sigma_1$ al $\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1$ por otra que va del estado $\mathbf{k}_2\sigma_2$ al estado $\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2$. La amplitud de estos elementos de matriz es la transformada de Fourier del potencial de interacción $V(\mathbf{q})$. Dado que el potencial es invariable por traslación en el espacio, el impulso se conserva a lo largo de la interacción. Dado que el potencial no depende de los grados de libertad del espín, la interacción conserva individualmente el espín de cada partícula. Esta representación se conoce como diagramas de Feynman. Es extremadamente útil cuando se construye la teoría de la perturbación.

5.3. Resolviendo con segunda cuantificación

Ahora que tenemos las herramientas para expresar todos los operadores que necesitamos en segunda cuantificación, ya sea para el Hamiltoniano u otros observables físicos, y que sabemos calcular promedios de un número arbitrario de tales operadores de creación y destrucción en el vacío, podemos preguntarnos cómo resolver en la práctica un problema cuando conocemos el Hamiltoniano. En el esquema usual de la mecánica cuántica, escribimos la ecuación de Schrödinger y, a partir de ella, encontramos tanto los autovalores como las autofunciones, pero la esencia misma de la segunda cuantificación es evitar tener que lidiar con la función de onda, por lo que queremos seguir otra ruta para obtener tales cantidades. Cómo hacer esto es lo que examinaremos ahora.

5.3.1. Autovalores y autoestados

Veamos primero si podemos encontrar los valores propios o vectores propios de algún Hamiltoniano simple. Comencemos con un Hamiltoniano cuadrático general

$$H = \sum_{\alpha}^{\Omega} A_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} \quad (5.101)$$

donde α es una base completa y los coeficientes A_{α} son números arbitrarios. Varios Hamiltonianos de sistemas físicos tienen tales formas, por ejemplo, la energía cinética de un sistema de partículas (5.75) y (5.76). Para Hamiltonianos cuadráticos y diagonales de la forma (5.101) el problema está resuelto. De hecho cada vector de p partículas de la forma

$$c_{\alpha_1}^{\dagger} c_{\alpha_2}^{\dagger} c_{\alpha_3}^{\dagger} \dots c_{\alpha_p}^{\dagger} |0\rangle \quad (5.102)$$

es un vector propio de H con autovalor

$$E = \sum_{i=1}^p A_i \quad (5.103)$$

Para mostrar esto, ilustremos el cálculo en un estado de dos fermiones $|\psi\rangle = c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle$ (se puede realizar un cálculo análogo para bosones):

$$\begin{aligned}
Hc_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle &= \left(\sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha} \right) c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle, \\
&= \sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger (\delta_{\alpha, \alpha_1} - c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha}) c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle, \\
&= A_{\alpha_1} |\psi\rangle - \sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha} c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle, \\
&= A_{\alpha_1} |\psi\rangle - \sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger (\delta_{\alpha, \alpha_2} - c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha}) |0\rangle, \\
&= A_{\alpha_1} |\psi\rangle - A_{\alpha_2} c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle, \\
&= A_{\alpha_1} |\psi\rangle + A_{\alpha_2} |\psi\rangle.
\end{aligned} \tag{5.104}$$

La física de este resultado es simple de entender. El operador $n_{\alpha} = c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha}$ no es otra cosa que el número de ocupación, y cuenta las partículas en el estado α . Así, si en $|\psi\rangle$ hay una partícula en tal estado devolverá 1 y la energía correspondiente se contará en H .

Así vemos que si tenemos un Hamiltoniano que está en una forma cuadrática diagonal como (5.101) entonces podemos obtener todos los valores propios y vectores propios del sistema. A temperatura cero el estado fundamental consistirá simplemente (para los fermiones) en ocupar todos los estados con la mínima energía posible según el número de partículas en el sistema.

$$|F\rangle = \prod_{i=1}^{\mathcal{N}} c_{\alpha_i}^\dagger |0\rangle, \tag{5.105}$$

si $E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_{\Omega}$. Nótese que el mar de Fermi (5.54) es un caso particular de (5.105).

5.3.2. Valores de expectación térmicos

A temperatura finita también podemos calcular los promedios de muchos operadores. Un caso importante es el operador que da el número de partículas en el estado α_p

$$\begin{aligned}
 \langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle &= \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta H} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta H} \right]}, \\
 &= \frac{\sum_{n_1, \dots, n_\Omega} \langle n_1, \dots, n_\Omega | e^{-\beta \sum_\alpha A_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} | n_1, \dots, n_\Omega \rangle}{\sum_{n_1, \dots, n_\Omega} \langle n_1, \dots, n_\Omega | e^{-\beta \sum_\alpha A_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha} | n_1, \dots, n_\Omega \rangle}.
 \end{aligned} \tag{5.106}$$

Usando el hecho de que (tanto para fermiones como para bosones) $[c_\alpha^\dagger c_\alpha, c_\gamma] = 0$ si $\alpha \neq \gamma$ y una relación similar para c_γ^\dagger , vemos que el término $e^{-\beta H}$ se factoriza en la forma

$$e^{-\beta H} = \prod_{j=1}^{\Omega} e^{-\beta A_{\alpha_j} c_{\alpha_j}^\dagger c_{\alpha_j}}. \tag{5.107}$$

Como en la traza cada término n_i es independiente, la media también se factoriza, y el numerador se convierte en

$$\left(\sum_{n_{\alpha_p}} \langle n_{\alpha_p} | e^{-\beta A_{\alpha_p} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p}} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} | n_{\alpha_p} \rangle \right) \prod_{j \neq p} \left(\sum_{n_{\alpha_j}} \langle n_{\alpha_j} | e^{-\beta A_{\alpha_j} c_{\alpha_j}^\dagger c_{\alpha_j}} | n_{\alpha_j} \rangle \right). \tag{5.108}$$

Todos los términos con $j \neq p$ son idénticos en el numerador y el denominador y se cancelan entre sí. La traza se reduce entonces a

$$\langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle = \frac{\sum_{n_{\alpha_p}} \langle n_{\alpha_p} | e^{-\beta A_{\alpha_p} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p}} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} | n_{\alpha_p} \rangle}{\sum_{n_{\alpha_p}} \langle n_{\alpha_p} | e^{-\beta A_{\alpha_p} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p}} | n_{\alpha_p} \rangle}, \tag{5.109}$$

lo cual es bastante obvio físicamente. De hecho, dado que el Hamiltoniano es diagonal en α , sólo el estado α_p puede contribuir al promedio de un operador que solo involucra al estado α_p . Como $c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} | n_p \rangle = n_p | n_p \rangle$ simplemente obtenemos

$$\langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle = \frac{\sum_{n_{\alpha_p}} e^{-\beta A_{\alpha_p} n_p} n_p}{\sum_{n_{\alpha_p}} e^{-\beta A_{\alpha_p} n_p}}. \tag{5.110}$$

Hasta ahora todo lo que hicimos es independiente de tener bosones o fermiones. Sin embargo, el resultado final dependerá de cuáles sean los valores permitidos de n_p . Para fermiones solo $n_p = 0$ y $n_p = 1$ están en la suma, y de este modo

$$\langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle = \frac{e^{-\beta A_{\alpha_p}}}{1 + e^{-\beta A_{\alpha_p}}} = \frac{1}{1 + e^{\beta A_{\alpha_p}}}, \tag{5.111}$$

y se recupera el factor de Fermi. Vemos que este es un resultado totalmente general (no limitado a autoestados del impulso) para Hamiltonianos bilineales y se está en equilibrio térmico.

Para bosones $n_p = 0, \dots, +\infty$, y así la suma se convierte en

$$\begin{aligned}
 \langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[\sum_{n_p=0}^{+\infty} e^{-\beta n_p A_{\alpha_p}} \right], \\
 &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[\frac{1}{1 - e^{-\beta A_{\alpha_p}}} \right], \\
 &= \frac{e^{-\beta A_{\alpha_p}}}{1 - e^{-\beta A_{\alpha_p}}}, \\
 &= \frac{1}{e^{\beta A_{\alpha_p}} - 1},
 \end{aligned} \tag{5.112}$$

y se recupera el factor de Bose.

5.3.3. Transformaciones canónicas

Con Hamiltonianos cuadráticos diagonales podemos calcular entonces esencialmente cualquier valor de expectación o cantidad física que se necesite. Por supuesto, en general, el Hamiltoniano del sistema no será ni cuadrático ni diagonal. Entonces, resolver en segunda cuantificación significa esencialmente que tenemos que encontrar una transformación de los operadores c y c^\dagger que lleven al Hamiltoniano en una forma diagonal cuadrática. Aunque en principio cualquier transformación es posible, no todas las son buenas. Queremos que los nuevos operadores d y d^\dagger que son los resultados de la transformación sigan generando el espacio Fock. Significa que sólo podemos considerar transformaciones que conserven las relaciones canónicas de conmutación. Por supuesto, encontrar tales transformaciones es, en general, una tarea formidable. Sin embargo, hay una clase muy importante de transformaciones cuando el Hamiltoniano sigue siendo una forma cuadrática, pero no diagonal, que examinaremos en la siguiente sección.

Antes de hacerlo, comentemos finalmente que incluso sin resolver el Hamiltoniano se puede explotar la libertad de elegir diferentes operadores de creación y destrucción para usar una representación más conveniente. Como ya se mencionó, se permite toda transformación que conserve las relaciones canónicas de conmutación. Pongamos un ejemplo sencillo, se verán más ejemplos en la siguiente sección. La transformación más simple es la transformación partícula-agujero.

$$\begin{aligned}
 c_\alpha^\dagger &= d_\alpha, \\
 c_\alpha &= d_\alpha^\dagger.
 \end{aligned} \tag{5.113}$$

Para los fermiones es fácil comprobar, por sustitución de los operadores d verifican

las relaciones canónicas de anticonmutación. Por ejemplo

$$[d_\alpha, d_\beta^\dagger]_+ = [c_\alpha^\dagger, c_\beta]_+ = \delta_{\alpha,\beta}. \quad (5.114)$$

Si los operadores c_α y c_α^\dagger respectivamente destruyen y crean un electrón en el estado α , el operador d_α y d_α^\dagger también son operadores de destrucción y creación de “algo más”, que también tiene una estadística fermiónica y por lo tanto, se puede utilizar para construir un espacio de Fock. En ese caso particular, el operador d_α destruye un hueco en el estado estado α (que es idéntico a crear un electrón) y el operador d_α^\dagger crea un hueco (que es lo mismo que destruir un electrón).

Un punto importante al hacer la transformación es no olvidar modificar también el vacío. De hecho, el vacío de las partículas d no es el mismo que el vacío de las partículas c . Se tiene así $|0_c\rangle$ y $|0_d\rangle$. El vacío de las partículas d se define como siempre por

$$d_\alpha|0_d\rangle = 0,$$

para todos los estados α . Es fácil comprobar usando la relación (5.113) que

$$|0_d\rangle = \prod_\alpha c_\alpha^\dagger |0_c\rangle.$$

Destruir una partícula d sobre este vacío es equivalente a crear una de tipo c . Pero esto no es posible, porque todos los estados están ocupados.

Más generalmente, consideremos un Hamiltoniano cuadrático, no diagonal, arbitrario:

$$H = \sum_{i,j=1}^{N_s} c_i^\dagger A_{ij} c_j \quad (5.115)$$

donde A_{ij} son los elementos de una matriz hermítica \mathbf{A} , y N_s es un número del orden del volúmen del sistema, Ω , que especifica la cantidad de estados accesibles de partícula independiente. Para simplificar la notación conviene escribir en forma matricial:

$$H = \mathbf{c}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{c} \quad (5.116)$$

donde

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{N_s} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}^\dagger = (c_1^\dagger \quad c_2^\dagger \quad \cdots \quad c_{N_s}^\dagger) \quad (5.117)$$

es un vector de N_s elementos, donde cada elemento es un operador de creación, y su transpuesto conjugado. Obsérvese que hemos introducido la notación con una barra sobre \mathbf{c} para indicar la operación de transposición sobre el vector en conjunto con el dagado de sus elementos. La utilidad de esta notación quedará más clara en la

próxima sección. La matriz \mathbf{A} , al ser hermítica, puede ser diagonalizada por una matriz unitaria \mathbf{U} ,

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U} = \tilde{\mathbf{A}} \quad (5.118)$$

donde $\tilde{\mathbf{A}}$ es la matriz diagonal que contiene a los autovalores de \mathbf{A} , A_1, \dots, A_{N_s} y \mathbf{U} se construye ordenando los autovectores de \mathbf{A} en columnas. Una vez hallada la matriz \mathbf{U} , podemos utilizarla para definir un nuevo conjunto de operadores d_α mediante la transformación

$$\mathbf{d} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{c}, \quad (\text{en componentes, } d_\alpha = \sum_{k=1}^{N_s} U_{i\alpha}^* c_k) \quad (5.119)$$

de manera tal que el Hamiltoniano, expresado en términos de los d resulta

$$H = \mathbf{d}^\dagger \mathbf{U}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U} \mathbf{d} = \mathbf{d}^\dagger \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{d} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} d_{\alpha}^{\dagger} d_{\alpha}. \quad (5.120)$$

Es decir, resulta ser de la forma diagonal (5.101).

Una condición importante para que esto funcione es que la transformación (5.119) conserve los anticonmutadores entre d , que es el caso debido a su unitariedad, ya que

$$[d_{\alpha}^{\dagger}, d_{\beta}]_{+} = \sum_{ij} U_{i\alpha} U_{\beta j}^{\dagger} [c_i^{\dagger}, c_j]_{+} = \sum_j U_{j\alpha} U_{\beta j}^{\dagger} = (\mathbf{U}^{\dagger} \mathbf{U})_{\beta\alpha} = \delta_{\alpha\beta}. \quad (5.121)$$

Una vez hallada la forma diagonal (5.120), el estado fundamental de \mathcal{N} partículas está dado por (5.105)

$$|\mathbf{F}\rangle = \prod_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} d_{\alpha}^{\dagger} |0_d\rangle \quad (5.122)$$

donde $|0_d\rangle$ es el estado de vacío de los operadores d , que satisface

$$d_{\alpha} |0_d\rangle = 0 \quad \forall \alpha. \quad (5.123)$$

Para este tipo de transformación, el vacío resulta invariante, es decir $|0_c\rangle = |0_d\rangle$. En efecto, debido a que los d están linealmente relacionados a los c , si aplicamos algún d_{α} sobre $|0_c\rangle$, encontramos

$$d_{\alpha} |0_c\rangle = \sum_j U_{\alpha j}^{\dagger} c_j |0_c\rangle = 0, \quad (5.124)$$

y viceversa, si aplicamos c_j sobre $|0_d\rangle$ también se anula, utilizando la transformación inversa.

Por supuesto, en general, la matriz $A_{\alpha\beta}$ es de tamaño $N_s \times N_s$ y la diagonalización será muy difícil de realizar analíticamente. Sin embargo, hay casos simples donde puede hacerse. En especial, obsérvese que la transformada de Fourier (5.71), utilizada para relacionar la base de coordenadas, donde la energía cinética de los electrones en una caja es no diagonal, con la base de momentos, donde sí lo es, es un ejemplo de tal transformación unitaria.

5.3.4. Ejemplo: Modelo tight binding

Veamos otro modelo que puede resolverse mediante este tipo de transformaciones: el Hamiltoniano de ligadura fuerte o *tight-binding* que vimos en la sección ???. Adicionalmente, esto nos permitirá escribir este Hamiltoniano en segunda cuantificación. Los estados en cada sitio $|i\rangle$ proporcionan una base completa y, por lo tanto, podemos definir los operadores de creación y destrucción asociados con él, es decir, c_i^\dagger es el operador que crea una partícula en el sitio i . Estos son los análogos a los c_r^\dagger utilizados al estudiar operadores de un cuerpo, sólo que en un espacio discreto. La expresión en segunda cuantificación de H se escribe

$$H = \sum_{i,j} \langle i | H^{(1)} | j \rangle c_i^\dagger c_j,$$

donde $H^{(1)}$ es el Hamiltoniano (??). Obtenemos así

$$H = \epsilon \sum_i c_i^\dagger c_i - t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j. \quad (5.125)$$

El segundo término describe un proceso en el que una partícula en el sitio i reaparece en el sitio vecino j y viceversa. Si bien es posible hacer todo este análisis en dimensión arbitraria, para simplificar la diagonalización suponemos que los sitios electrónicos se acomodan en un anillo, e identificamos el sitio en la posición $N_s + 1$ con el sitio 1, es decir, introducimos un operador de destrucción fermiónico adicional

$$c_{N_s+1} \equiv c_1, \quad (5.126)$$

y su complejo conjugado. Este Hamiltoniano es obviamente cuadrático pero no diagonal. En el lenguaje de (5.115) corresponde a una matriz tridiagonal. Para diagonalizarla, primero pensamos en la física del problema: dado que el Hamiltoniano es invariante frente a traslaciones, el momento debe ser un buen número cuántico, y vamos utilizar entonces una combinación lineal de operadores de creación y destrucción c_i que corresponden a su transformada de Fourier. Este es exactamente el mismo razonamiento que el que conduce a (5.71), sólo que ahora utilizaremos una transformada de Fourier discreta [véase el apéndice 6.23]. Tratados simplemente como una combinación lineal de operadores, podemos definir

$$d_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{j=0}^{N_s-1} e^{ikr_j} c_j^\dagger, \quad (5.127)$$

donde hemos usado un nombre diferente d para enfatizar que se trata de nuevos operadores, e introducido las posiciones $r_j = aj$ donde a es la constante de red, y

$$k = \frac{2\pi n_k}{N_s a}, \quad n_k \in \mathbb{Z}.$$

Se puede comprobar inmediatamente que los operadores d_k cumplen las reglas canónicas de conmutación. Verifiquemos uno de los anticonmutadores y dejemos las otras relaciones como ejercicio:

$$\begin{aligned}
[d_k, d_q^\dagger]_+ &= \frac{1}{N_s} \sum_{ij} e^{-ikr_i} e^{iqr_j} [c_i, c_j^\dagger]_+, \\
&= \frac{1}{N_s} \sum_{ij} e^{-ikr_i} e^{iqr_j} \delta_{ij}, \\
&= \frac{1}{N_s} \sum_j e^{i(k-q)r_j}, \\
&= \delta_{kq}.
\end{aligned} \tag{5.128}$$

Los operadores d_k son, por lo tanto, buenos operadores de Fermiones. Hay exactamente N_s operadores diferentes (el tamaño del espacio de Hilbert no puede cambiar) y k está confinado dentro de la primera zona de Brillouin $k \in [-\pi/a, \pi/a]$ como se discutió para la solución en primera cuantificación. Además, como resulta obvio de la definición (5.127), $|0_d\rangle = |0_c\rangle$. La transformación (5.127) se invierte fácilmente

$$c_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k e^{-ikr_j} d_k^\dagger, \tag{5.129}$$

y así, reemplazando los c_j en (5.125) y haciendo un poco de álgebra, se encuentra

$$H = \epsilon \sum_k d_k^\dagger d_k - \sum_k 2t \cos(ka) d_k^\dagger d_k. \tag{5.130}$$

Ahora que el Hamiltoniano es diagonal, podemos usar los operadores d_k para obtener el estado fundamental y los diversos promedios. A nivel físico, hemos utilizado que, dado que la cantidad de movimiento se conserva, se pueden diagonalizar simultáneamente los operadores de impulso y el Hamiltoniano. Por lo tanto, el Hamiltoniano es una matriz diagonal por bloques en la base a los autovectores del operador impulso. Como esta base es de tamaño N_s (N_s diferentes k valores en la primera zona de Brillouin) nos queda para cada valor de k una matriz de 1×1 a diagonalizar, con lo cual el problema está completamente resuelto.

5.3.5. Términos anómalos

Estudiemos ahora un Hamiltoniano más general, que incluya términos de la forma $c^i c_j$. Este tipo de términos se denominan anómalos, y hacen que en el Hamiltoniano no conmute con el operador N y por lo tanto no conserve el número de partículas,

y por lo tanto no tiene una expresión simple en primera cuantificación. Típicamente aparecen cuando uno considera teorías para superconductividad, tales como el llamado Hamiltoniano de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) que estudiaremos más adelante. Consideremos el Hamiltoniano

$$H = \sum_{ij=1}^{N_s} c_i^\dagger A_{ij} c_j + \frac{1}{2} \sum_{ij=1}^{N_s} c_i B_{ij} c_j + \text{h.c.} \quad (5.131)$$

siendo $i, j = 1, \dots, N_s$, \mathbf{A} una matriz hermítica ($\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$), y \mathbf{B} una matriz antisimétrica ($\mathbf{B}^t = -\mathbf{B}$), ambas condiciones impuestas por la necesidad de que H sea un operador hermítico en conjunto con la estadística fermiónica. Para escribirlo en forma matricial, debemos considerar ahora que existen estos dos tipos de términos. Si buscamos utilizar una sola matriz, no será posible que su dimensión sea N_s . La forma usual de hacerlo consiste en introducir la notación de Nambu, en la cual se define un vector o spinor de Nambu de dimensión $2N_s$ cuyos elementos son tanto los operadores de creación como de destrucción:

$$\Psi^\dagger = (c_1^\dagger \quad \dots \quad c_{N_s}^\dagger \quad c_1 \quad \dots \quad c_{N_s}) \quad (5.132)$$

en conjunto con la matriz

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & -\mathbf{B}^* \\ \mathbf{B} & -\mathbf{A}^* \end{pmatrix}, \quad (5.133)$$

que se conoce como Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes. Con estas definiciones el Hamiltoniano se escribe

$$H = \frac{1}{2} \Psi^\dagger \mathbf{H} \Psi + E_0 \quad (5.134)$$

dónde

$$E_0 = -\frac{1}{2} \text{tr } \mathbf{A}, \quad (5.135)$$

Obsérvese que a matriz \mathbf{H} continúa siendo hermítica (para mostrarlo es importante la antisimetría de \mathbf{B}) y por lo tanto diagonalizable mediante una transformación unitaria \mathbf{M} de $2N_s \times 2N_s$, de manera similar a como lo realizamos en la sección anterior, de manera tal que

$$\mathbf{M}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{M} = \tilde{\mathbf{H}} = \text{diag}(\Lambda_1, \dots, \Lambda_{N_s}, \bar{\Lambda}_1, \dots, \bar{\Lambda}_{N_s}), \quad (5.136)$$

donde Λ_α y $\bar{\Lambda}_\alpha$ son los autovalores de \mathbf{H} . El spinor transformado Φ se relaciona con el sin transformar a través de \mathbf{M} :

$$\Phi = \mathbf{M} \Psi, \quad (5.137)$$

Y entonces el Hamiltoniano, en términos de los nuevos operadores, resulta

$$H = \frac{1}{2} \Phi^\dagger \mathbf{M}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{M} \Phi = \frac{1}{2} \Phi^\dagger \tilde{\mathbf{H}} \Phi \quad (5.138)$$

Si escribimos al vector Φ en términos de un nuevo conjunto de operadores η_α, ξ_α en la forma

$$\Phi^\dagger = \left(\eta_1^\dagger \quad \cdots \quad \eta_{N_s}^\dagger \quad \xi_1^\dagger \quad \cdots \quad \xi_{N_s}^\dagger \right). \quad (5.139)$$

el Hamiltoniano se escribe

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N_s} \Lambda_\alpha \eta_\alpha^\dagger \eta_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N_s} \bar{\Lambda}_\alpha \xi_\alpha^\dagger \xi_\alpha \quad (5.140)$$

Al ser unitaria, la transformación \mathbf{M} preserva los conmutadores y es por lo tanto canónica, pero observemos que ahora la transformación mezcla a los operadores de creación y destrucción.

La forma (5.140) del Hamiltoniano posee dos términos y a simple vista daría la impresión de que como consecuencia de la existencia de términos anómalos debemos duplicar el número de grados de libertad. Veamos que esto es sólo así en apariencia.

Observemos que \mathbf{H} satisface la relación

$$\mathbf{H} = -\sigma_x \mathbf{H}^* \sigma_x, \quad (5.141)$$

donde la matriz de Pauli σ_x actúa sobre la estructura de Nambu (5.133), de 2×2 . Esta transformación constituye una simetría de \mathbf{H} , y resulta ser antiunitaria⁴. La transformación (5.141) no es más que la simetría partícula-hueco. Esto implica que si ψ es un autoestado de \mathbf{H} con autovalor λ ,

$$\mathbf{H}\psi = \lambda\psi,$$

entonces ψ^* es autoestado de \mathbf{H}^* con el mismo autovalor (que es real, dado que \mathbf{H} es hermítico):

$$\mathbf{H}^*\psi^* = \lambda\psi^*$$

y entonces el vector $\psi' = \sigma_x \psi^*$ también es vector de \mathbf{H} con autovalor $-\lambda$:

$$\mathbf{H}\psi' = \mathbf{H}\sigma_x \psi^* = -\sigma_x \mathbf{H}^* \sigma_x \sigma_x \psi^* = -\sigma_x \mathbf{H}^* \psi^* = -\lambda \sigma_x \psi^* = -\lambda \psi'.$$

⁴Una transformación antiunitaria K entre vectores $|x\rangle, |y\rangle$ de un espacio de Hilbert ($|y\rangle = K|x\rangle$) es un operador antilineal (es decir, tal que $K(a|x\rangle + b|y\rangle) = a^*K|x\rangle + b^*K|y\rangle$ con $a, b \in \mathbb{C}$) tal que transforma el producto escalar en el producto escalar conjugado:

$$\langle x|K^\dagger K|y\rangle = \langle x|y\rangle^*. \quad (5.142)$$

Este tipo de operadores, al igual que los operadores unitarios, no cambia el resultado de una medida, es decir que

$$|\langle x|K^\dagger K|y\rangle|^2 = |\langle x|y\rangle|^2. \quad (5.143)$$

Dado que son vectores distintos, de otro modo tendrían distinto autovalor (a menos que $\lambda = 0$), si escribimos al autovector en la forma

$$\psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

donde u y v son vectores columna de N_s elementos, entonces

$$\psi' = \begin{pmatrix} v^* \\ u^* \end{pmatrix}$$

La matriz \mathbf{M} , que posee los autovectores en columnas, posee entonces la forma

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} u & v^* \\ v & u^* \end{pmatrix}, \quad (5.144)$$

donde u y v son matrices de $N_s \times N_s$. En otras palabras, la forma (5.144) es consecuencia de la simetría partícula-hueco de \mathbf{H} , ec. (5.141). Los autovalores $\bar{\Lambda}_\alpha$ puede tomarse como $\bar{\Lambda}_\alpha = -\Lambda_\alpha$ y la forma diagonal de la matriz de autovalores se escribe entonces

$$\tilde{\mathbf{H}} = \text{diag}(\Lambda_1, \dots, \Lambda_{N_s}, -\Lambda_1, \dots, -\Lambda_{N_s}), \quad (5.145)$$

donde Λ_α son todos positivos. Observemos además la transformación (5.137) se escribe explícitamente

$$\eta_i = u_{ij}c_j + v_{ij}^*c_j^\dagger, \quad (5.146)$$

$$\xi_i = v_{ij}c_j + u_{ij}^*c_j^\dagger, \quad (5.147)$$

pero entonces ξ_i no es más que el adjunto de η_i , $\xi_i = \eta_i^\dagger$, y el Hamiltoniano se escribe

$$H = \sum_{j=1}^{N_s} \Lambda_j \eta_j^\dagger \eta_j + \text{Const.} \quad (5.148)$$

De modo que sólo tenemos N_s grados de libertad, como se esperaba físicamente. Para diagonalizar el Hamiltoniano debimos duplicar el número de grados de libertad introduciendo huecos, pero vimos que esta duplicación es espuria. Sin embargo, en determinadas circunstancias puede ser útil mantener la duplicación, pero en ese caso debe recordarse que el par de niveles con energía $\pm\Lambda_j$ no corresponde a dos estados cuánticos distintos, sino a uno solo, que es una superposición coherente de electrones y huecos —una cuasipartícula de Bogoliubov, el bogoliubon: tiene una energía de excitación Λ_j , y es creada por el operador $\eta_j^\dagger = u_{ij}c_j + v_{ij}c_j^*$. Llenar el estado asociado en energía $-\Lambda_j$ es equivalente a vaciar el estado de energía positiva.

El Hamiltoniano (5.131) no conserva el número de partículas, ya que no conmuta con $N = \sum_j c_j^\dagger c_j$, aunque conserva el número de cuasi partículas, $M = \sum_j \eta_j^\dagger \eta_j$. Como consecuencia de que la transformación \mathbf{M} mezcla operadores c_j y c_j^\dagger el vacío no es invariante, tenemos un vacío $|0_c\rangle$ que satisface $c_j|0_c\rangle = 0$, y un vacío $|0_\eta\rangle$ que verifica $\eta_j|0_\eta\rangle = 0$. Encontrar la relación entre ambos puede ser complicado y depende de la forma de A y B . Lo haremos en el caso específico del modelo BCS más adelante. Una vez determinado $|0_\eta\rangle$, el estado fundamental de \mathcal{M} cuasipartículas se escribe como un mar de Fermi de bogoliubones:

$$|F\rangle = \prod_j^{\mathcal{M}} \eta_j^\dagger |0_\eta\rangle. \quad (5.149)$$

cuya energía resulta

$$E = \sum_j^{\mathcal{M}} \Lambda_j \quad (5.150)$$

El estado de mínima energía para un cierto potencial químico es entonces aquel con $\mathcal{M} = 0$ cuasipartículas, es decir, el vacío mismo de los Bogoliubones.

Si bien el número de partículas no es una cantidad conservada, el operador de paridad global,

$$P = (-1)^N = e^{i\pi N} \quad (5.151)$$

conmuta con H , y por lo tanto los autoestados de energía poseen paridad fermiónica definida ± 1 .

5.4. Cuantificación del campo electromagnético

En el capítulo ?? hemos descrito el proceso absorción de la luz por un sistema cargado, en el que el campo de radiación fue considerado como un campo clásico. En esta sección revisaremos ese problema, pero considerando ahora la versión cuántica del campo electromagnético que introducimos en la sección anterior. Es decir que, al mismo tiempo que el sistema de partículas absorbe un fotón y efectúa una transición $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$, el campo electromagnético realiza una transición desde su estado inicial a un estado final con un fotón menos. Dado que un haz incoherente de luz está especificado totalmente por el número de fotones en cada uno de los modos $\kappa \equiv \{\mathbf{k}\lambda\}$, podemos representar a los estados del campo electromagnético por

$$|n_\alpha, n_\beta, \dots, n_\zeta\rangle. \quad (5.152)$$

Lo que nos interesa aquí es calcular la probabilidad de transición desde el estado inicial $|i; \dots, n_\kappa, \dots\rangle$ al estado final $|n; \dots, n_\kappa - 1, \dots\rangle$, producido por un Hamiltoniano de interacción \hat{H}_{int} , que acopla al campo con el sistema cargado.

$$\Gamma^{abs}(i \rightarrow n; \kappa) = \frac{4\pi^2 e^2}{\omega V} n_\kappa |\langle n | j_{-k} \cdot \lambda | i \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega), \quad (5.153)$$

donde $\omega = kc$. Es decir que \hat{H}_{int} será tal que la regla de oro de Fermi,

$$\Gamma^{abs}(i \rightarrow n; \kappa) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n; \dots, n_n - 1, \dots | \hat{H}_{int} | i; \dots, n_n, \dots \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega), \quad (5.154)$$

nos lleve a (5.1). Tendrá que satisfacerse entonces que:

$$|\langle n; \dots, n_n - 1, \dots | \hat{H}_{int} | i; \dots, n_n, \dots \rangle|^2 = \frac{e^2}{V c^2} \frac{2\pi \hbar c^2}{\omega} n_\kappa |\langle n | j_{-k} \cdot \lambda | i \rangle|^2 \quad (5.155)$$

Luego, \hat{H}_{int} tendrá que incluir al operador $j_{-k} \cdot \lambda$ que actúa sobre el sistema de cargas, como también a un operador de destrucción de fotones. Por ser además \hat{H}_{int} hermítico será:

$$\hat{H}_{int} = -\frac{e}{c} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_i \left(\frac{2\pi \hbar c^2}{\omega} \right)^{1/2} (a_i j_{-k} \cdot \lambda + a_{k,j}^\dagger j_k \cdot \lambda^*) \quad (5.156)$$

donde a_n y a_K^\dagger son, respectivamente los operadores de creación y de destrucción de fotones en el modo \hat{r} . (El porqué del signo negativo quedará claro de inmediato).

Es conveniente definir un operador (hermitico) para el campo electromagnético,

$$\hat{A}(r) = \sum_\kappa \left(\frac{2\pi/c^2}{V\omega} \right)^{1/2} (a_\kappa \lambda c^{ik \cdot r} + a_\kappa^\dagger \lambda^* c^{-ik \cdot r}) \quad (5.157)$$

por medio del cual podemos escribir a \hat{H}_{int} , incluyendo el término cuadrático en $\hat{A}(r)$, como

$$\hat{H}_{int} = \int d\mathbf{r} \left[-\frac{c}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \hat{A}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{2mc^2} \rho(\mathbf{r}) \hat{A}^2(\mathbf{r}) \right] \quad (5.158)$$

que al comparar con el análogo clásico ¹ notamos que, a diferencia de aquel, no contiene dependencia temporal. Eso se debe a que $\hat{A}(\mathbf{r})$, dado por (5.5), está en la representación de Schrödinger. La analogía es completa, sin embargo, si pasamos a la representación de interacción (ver 1.14):

$$\hat{A}_I(\mathbf{r}, t) = e^{i\hat{H}_0^{em}t/\hbar} \hat{A}(\mathbf{r}) e^{-i\hat{H}_0^{em}t/\hbar} \quad (5.159)$$

donde, en base a (1.112) y (1.114), escribimos

$$\hat{H}_0^{em} = \sum_\kappa \hbar\omega a_\kappa^\dagger a_\kappa \quad (5.160)$$

Usando relaciones del tipo $\hat{n}_\kappa a_\kappa = a_\kappa(\hat{n}_\kappa - 1)$, etc. se puede demostrar fácilmente que

$$e^{i\hat{H}_0^{cm}t/\hbar} a_\kappa e^{-i\hat{H}_0^{em}t/\hbar} = a_\kappa e^{-i\omega t} \quad (5.161)$$

y por lo tanto

$$\hat{\mathbf{A}}_I(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\kappa} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega} \right)^{1/2} (a_\kappa \lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} + \mathbf{a}_\kappa^\dagger \lambda^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\omega t}), \quad (5.162)$$

que tiene la misma forma que su análogo clásico (1.100) con

$$a_{i:} \rightarrow \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega} \right)^{1/2} a_\kappa \quad (5.163)$$

5.4.1. Emisión espontánea

Por construcción, la descripción cuántica de la absorción de la radiación es idéntica a la descripción clásica. Veamos ahora que ocurre con la descripción cuántica de la emisión. Partimos de nuevo de la regla de oro de Fermi:

$$\Gamma^{cm}(n \rightarrow i; \kappa) = \frac{\pi}{\hbar} |\langle i; \dots, n n_\kappa + 1, \dots | \hat{H}_{int} | n; \dots, n_\kappa, \dots \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega), \quad (5.164)$$

¹ En (1.98) teníamos

$$H_{int} = \int d\mathbf{r} \left[-\frac{c}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{c^2}{2mc^2} \rho(\mathbf{r}) \mathbf{A}^2(\mathbf{r}, t) \right] \quad (5.165)$$

que nos lleva al resultado

$$\Gamma^{e,m}(n \rightarrow i; \kappa) = \frac{4\pi^2 e^2}{\omega V} (n_\kappa + 1) |\langle i | j_k \cdot \lambda^* | n \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega). \quad (5.166)$$

Esté no es el mismo resultado que teníamos antes. La probabilidad para la emisión de un proceso adicional para la emisión cuanta ahora proporcional a $n_\kappa + 1$. Aparece entonces un probabilidad de transición es:

$$\Gamma^{emesp}(n \rightarrow i; \kappa) = \frac{4\pi^2 e^2}{\omega V} \langle i | j_k \cdot \lambda^* | n \rangle^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \quad (5.167)$$

que sumada a la probabilidad de emisión estimulada,

$$\Gamma^{emest}(n \rightarrow i; \kappa) = \frac{4\pi^2 e^2}{\omega V} n_\kappa |\langle i | j_k \cdot \lambda^* | n \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \quad (5.168)$$

nos da la probabilidad de emisión total:

$$\Gamma^{em}(n \rightarrow i; \kappa) = \Gamma^{emesp}(n \rightarrow i; \kappa) + \Gamma^{emind}(n \rightarrow i; \kappa) \quad (5.169)$$

La emisión espontánea no depende de la intensidad de la radiación presente antes de que ocurra el proceso. In cambio, la emisión estimulada sí depende de la intensidad de la luz de frecuencia ω , que incide sobre el sistema.

La potencia dP_λ de la luz emitida espontáneamente de $|n\rangle$ a $|i\rangle$, con polarización λ y dirección k dentro del ángulo sólido $d\Omega$, es (ver (1.107)):

$$\begin{aligned} dP_\lambda^{emesp} &= \sum_{\mathbf{k} \in d\Omega} \hbar\omega \Gamma^{emesp}(n \rightarrow i; \kappa) \\ &= d\Omega \int \frac{\omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} \hbar\omega \frac{4\pi^2 e^2}{\omega} |\langle i | \mathbf{j}_\mathbf{k} \cdot \lambda^* | n \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \end{aligned} \quad (5.170)$$

de donde resulta

$$\frac{dP_\lambda^{em}}{d\Omega} = \frac{\omega^2 e^2}{2\pi c^3} |\langle i | \mathbf{j}_\mathbf{k} \cdot \lambda^* | n \rangle|^2 \quad (5.171)$$

La cuantización del campo electromagnético explica de un modo natural la emisión espontánea, que a su vez es la versión cuántica del fenómeno clásico de radiación por cargas aceleradas. Para convencernos de esto es conveniente comparar el último resultado con la fórmula para la potencia emitida por una corriente transversal clásica de frecuencia ω

$$\mathbf{J}_\perp(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}_\perp(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \mathbf{J}_\perp^*(\mathbf{r})e^{i\omega t} \quad (5.172)$$

En el gauge transversal de Coulomb, el potencial \mathbf{A} satisface a la ecuación,

$$\square^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{J}_\perp(\mathbf{r}, t) \quad (5.173)$$

cuya solución es

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \frac{\mathbf{J}_\perp(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{c})}{c|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (5.174)$$

Haciendo la aproximación para distancias grandes ($|\mathbf{r}'| \ll |\mathbf{r}|$, $|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \cong r - \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'$) se obtiene:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{rc} \int d\mathbf{r}' \mathbf{J}_\perp(\mathbf{r}') \exp[-i\omega(t - r/c - \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'/c)] + c.c. = \mathbf{J}_\mathbf{k} \frac{-i\omega[\exp(t - r/c)]}{rc} + c.c. \quad (5.175)$$

donde

$$\mathbf{J}_{\mathbf{k}} = \int d\mathbf{r}' \mathbf{J}_{\perp}(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}; \quad \mathbf{k} = \omega\hat{\mathbf{r}}/c \quad (5.176)$$

La componente de \mathbf{A} en la dirección λ es ² $\mathbf{A} \cdot \lambda^*$ y la potencia emitida por unidad de ángulo sólido ($= r^2 \times$ vector de Poynting) resulta: ³

$$\frac{dP_{\lambda}^{em} da}{d\Omega} = r^2 \frac{\omega^2}{2\pi c} |\mathbf{A} \cdot \lambda^*|^2 = \frac{\omega^2}{2\pi c^3} |\mathbf{J}_{\mathbf{k}} \cdot \lambda^*|^2 \quad (5.177)$$

Al comparar el último resultado con (5.16) vemos que $\langle i|ej_{\mathbf{k}}|n\rangle$ juega el mismo papel en la emisión espontánea que $J_{\mathbf{k}}$ en el caso de la radiación clásica. En particular, en la aproximación dipolar,

$$\langle i|j_{\mathbf{k}}|n\rangle = \langle i|j_0|n\rangle = \frac{1}{m} \langle i|P|n\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle i|[R, \hat{H}_0^a]|n\rangle = \frac{E_n - E_i}{i\hbar} \langle i|R|n\rangle \quad (5.178)$$

y la potencia emitida por la emisión espontánea, por unidad de ángulo sólido y polarización λ , es:

$$\frac{dP^{cmncsp}}{d\Omega} = \frac{\omega^4 e^2}{2\pi c^3} |\langle i|\mathbf{R} \cdot \lambda^*|n\rangle|^2 \quad (5.179)$$

Para fijar ideas consideremos la emisión de la radiación desde un estado excitado del átomo de hidrógeno, despreciando los efectos de estructura fina. Las funciones de onda serán de la forma $\psi_{n\ell m}(r) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ y

$$\langle i|R|n\rangle \rightarrow \langle n'\ell'm'|\mathbf{r}|n\ell m\rangle = \int r^3 dr R_{n'\ell'}^*(r) R_{n\ell}(r) \int d\Omega Y_{\ell'm'}^*(\theta, \phi) \hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (5.180)$$

² Si λ corresponde a la polarización circular derecha: $\lambda \equiv \lambda_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{y})$, λ^* corresponderá a la polarización circular izquierda: $\lambda^* = \lambda_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{y})$ y $\lambda \cdot \lambda^* = 1$, $\lambda \cdot \lambda^2 = \lambda^* \cdot \lambda^* = 0$. Lo mismo ocurre si $\lambda \equiv \lambda_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{y})$.

³ **El** ver. r de Poynting es: $P = \frac{c}{4\pi} \mathbf{E} \times \mathbf{B}$, con $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ y $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Para la emisión de un fotón polarizado circularmente es conveniente elegir el sistema de la figura 5.1 a. Será eje z apuntando según la dirección de emisión, como se muestra en

$$\mathbf{r} \cdot \lambda^* \rightarrow \mathbf{r} \cdot \lambda_{\pm}^* = \mathbf{r} \cdot \lambda_{\mp} = \frac{1}{\sqrt{2}}(x \mp iy) = \frac{r}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{\mp i\phi} = \pm \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y'_{1,\mp 1}(0, \phi). \quad (5.181)$$

tomar el sistema de tratar la emisión de un fotón polarizado linealmente es conveniente $\lambda_0 \equiv \hat{z}$ y la emisión coordenadas de la Fig. 5,1 **b**, donde el versor de polarización es $\lambda_0 \equiv \hat{z}$ y la emisión se produce en la dirección del eje x . Tendremos:

$$\mathbf{r} \cdot \lambda^* \rightarrow \mathbf{r} \cdot \lambda_3 = z = r \cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1,0}(0, \phi) \quad (5.182)$$

Fig. 5.1 Sistemas de coordenadas para: (a) la polarización circular y (b) la polarización lineal.

Por lo tanto el elemento de matriz $\langle i | \mathbf{r} \cdot \lambda^* | n \rangle$ es:

$$\langle i | \mathbf{r} \cdot \lambda^* | n \rangle = \sqrt{\frac{1\pi}{3}} \mathcal{R}_{n\ell, n'\ell'} \times \begin{cases} \langle \ell' m' | Y_{1,-1} | \ell m \rangle & \text{para la pol. cir. derecha,} \\ -\langle \ell' m' | Y_{1,+1} | \ell m \rangle & \text{para la pol. cir. izquierda,} \\ \langle \ell' m' | Y_{1,0} | \ell m \rangle & \text{para la pol. lineal,} \end{cases} \quad (5.183)$$

con

$$\mathcal{R}_{n\ell, n'\ell'} = \int r^3 dr R_{n'\ell'}^*(r) R_{n\ell}(r), \quad (5.184)$$

$$\langle \ell' m' | Y_{1,\mu} | \ell m \rangle = \int d\Omega Y_{\ell' m'}^*(\theta, \phi) Y_{1\mu}(0, \phi) Y_{\ell m}(0, \zeta'). \quad (5.185)$$

Para establecer las reglas de selección usamos el teorema de Wigner-Eckart ⁴ :

$$\langle \ell' m' | Y_{1\mu} | \ell m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\ell + 1}} \langle \ell' | Y_1 | \ell \rangle (\ell m 21\mu | \ell' m') \quad (5.186)$$

donde $\langle \ell' | Y_1 | \ell \rangle$ es el elemento de matriz reducido y el símbolo $(\ell m 21\mu | \ell' m')$ representa al coeficiente de Clebsch-Gordon, que satisface la condición:

$$(\ell' m 1\mu | \ell' m') \neq 0 \text{ si } \begin{cases} |\ell - \ell'| = 1 \\ m' = m + \mu \end{cases}. \quad (5.187)$$

Por lo tanto las reglas de selección son:

$$|\ell - \ell'| = 1 \text{ y } \begin{cases} m' = m - 1, & \text{para la polarización circular derecha,} \\ m' = m + 1, & \text{para la polarización circular izquierda,} \\ m' = m, & \text{para la polarización lineal.} \end{cases} \quad (5.188)$$

Esto significa que un fotón polarizado circularmente a la derecha (a la izquierda) lleva,

fotón polarizado linealmente no lleva ningún impulso angular.

En resumen, las transiciones dipolares eléctricas sólo pueden ocurrir entre estados cuyos momentos angulares difieren en una unidad. Si, además, las proyección del impulso angular son iguales (diferentes) el fotón será emitido con polarización lineal (circular). El efecto de estas reglas de selección, sobre el espectro del átomo de hidrógeno, se ilustra en la Fig. 5.2.

Pol. cir. izquierda

Fig. 5.2 Reglas de selección para la transición $3s \rightarrow 2p$ en el átomo de hidrógeno.

«ver A. Messiah, Mécanique quantique p. 489, o J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics p. 239.

Capítulo 6

Mecánica cuántica Relativista

6.1. La ecuación de Klein-Gordon

A partir de las reglas de cuantificación canónica se puede obtener la ecuación cuántica (no relativista) que describe la dinámica de una partícula libre de masa m . En efecto, de la relación de la mecánica clásica no relativista entre energía E y momento \mathbf{p} ,

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V = E, \quad (6.1)$$

y de las reglas de cuantificación canónica¹

$$\mathbf{p} \rightarrow (-i\hbar)\nabla, \quad (6.2)$$

$$E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad (6.3)$$

se obtiene la ecuación de Schrödinger para la función de onda $\psi(\mathbf{x}, t)$ que contiene toda la información posible sobre el estado de una partícula libre de masa m ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t). \quad (6.4)$$

Esta ecuación es obviamente no covariante relativista (*i.e.* frente a transformaciones de Lorentz): el tiempo y las coordenadas espaciales no son tratados en un pie de igualdad; incluye una derivada primera en el tiempo y derivadas segundas espaciales.

Conviene aquí precisar lo que entendemos por una ecuación covariante relativista. Dada una función $f(\mathbf{x}, t)$ y un operador diferencial $\mathcal{D}_{\mathbf{x},t}$ diremos que la ecuación

$$\mathcal{D}_{\mathbf{x},t}f_s(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (6.5)$$

¹Estas reglas pueden ser enunciada de varias maneras, la elegida es la más simple para los presentes fines.

es covariante relativista si, dada una solución $f_s(x, t)$ en cierto sistema de coordenadas de espacio-tiempo, cuando por ejemplo hacemos una rotación espacial o un boost (*i.e.*, transformación del grupo de Lorentz propio) para pasar a otro sistema de coordenadas, la función transformada satisface la misma ecuación, expresada en términos de las nuevas coordenadas \mathbf{x}', t'

$$\mathcal{D}_{\mathbf{x}', t'} f_s(\mathbf{x}', t') = 0. \quad (6.6)$$

Si a una solución $\psi_s(\mathbf{x}, t)$ de la ecuación de Schrödinger (6.4) le asignamos el carácter de escalar (complejo) frente a transformaciones de Lorentz, un cálculo sencillo confirma que $\psi_s(\mathbf{x}', t')$ no es solución de la correspondiente ecuación transformada.

El cuarto trabajo de la serie de artículos que Schrödinger publicó en 1926 [1] presenta una versión covariante relativista de la ecuación que rige la dinámica cuántica de una partícula masiva, ecuación que fue obtenida independientemente por Oskar Klein, Vladimir Fock y Walter Gordon en el mismo año, [2]-[4]. En su trabajo Schrödinger consideró el caso de un electrón de masa m sometido a la acción de un campo eléctrico coulombiano pero su idea puede presentarse de manera muy simple para el caso de una partícula libre. La propuesta de Schrödinger es muy natural: para llegar a una ecuación relativista que describa la dinámica cuántica de una partícula libre, en lugar de partir de la fórmula de la mecánica clásica newtoniana (6.1), debe hacerse a partir de la relación de energía-impulso de la mecánica clásica relativista,

$$c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4 = E^2. \quad (6.7)$$

La aplicación de las reglas de cuantificación canónica (6.2) y (6.3) lleva a una ecuación cuántica relativista, la ecuación de Klein-Gordon [2]-[4] para una partícula libre (*i.e.* sin potencial) de masa m ,

$$\hbar^2 \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) - m^2 c^2 \psi(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2}. \quad (6.8)$$

No es inesperado que, habiendo partido de la ecuación relativista (6.7), se llegue a una ecuación en la que el orden de las derivadas espaciales y temporal sea el mismo.

Si introducimos el operador d'Alembertiano² \square

$$\square \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \quad (6.9)$$

entonces la ecuación(6.8) se puede escribir de manera compacta como

$$\square \psi(\mathbf{x}, t) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (6.10)$$

²Este operador diferencial lleva el nombre de Jean Le Rond d'Alambert quien lo introdujo en 1747 en un trabajo sobre cuerdas vibrantes.

Es evidente ahora que si el carácter de ψ ante transformaciones de Lorentz es el de un escalar, esta ecuación no solo es covariante sino también invariante relativista ya que tanto la función ψ como el operador \square lo son.

Es fácil encontrar una solución de la ecuación de Klein Gordon para la partícula libre. Basta hacer un “ansatz”³ como el que se hace en el caso no-relativista, de la forma

$$\psi(\mathbf{x}, t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - E_p t)\right), \quad (6.11)$$

y ajustar las constantes \mathbf{p} y E_p (asociadas con el impulso y la energía de la partícula respectivamente) de manera que se satisfaga (6.8). En efecto, si se inserta el ansatz (6.11) en la ecuación (6.8), para que se satisfaga la ecuación debe satisfacerse la condición:

$$E_p = \pm c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 c^2}, \quad (6.12)$$

que coincide con la relación clásica relativista entre el impulso y la energía.

Recordemos que en la mecánica relativista clásica, al escribir (6.12) solo se retiene el signo positivo. Si bien ambos signos son aceptables, de incluir a ambos se tendría un espectro de energía que no sería continuo: habría un “salto” entre el valor mínimo positivo $E_{0+} = mc^2$ y el valor máximo negativo $E_{0-} = -mc^2$. Como en mecánica clásica no hay ninguna razón para aceptar discontinuidades en la energía, debe elegirse un signo y resulta natural, por tratarse del caso de una partícula libre, el seleccionar la rama positiva (Recordemos que en el caso no-relativista los niveles con energía negativa corresponden a estados ligados y aquí se trata de partículas libres).

Con lo anterior, el desarrollo para valores pequeños (en comparación con mc) del impulso conduce, si no se tiene en cuenta la energía en reposo, a la conocida expresión clásica del Hamiltoniano no-relativista de una partícula de masa m ,

$$E_p \simeq \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (6.13)$$

En contraste con las argumentación de la física clásica y de la cuántica no relativista para desechar el signo negativo de la energía de una partícula libre, notemos que las discontinuidades en los valores posibles de la energía son precisamente una de las características fundamentales de la mecánica cuántica, por lo que en este caso relativista no hay razón alguna para descartar una de las dos ramas, aún para el caso de una partícula libre.

Pero se plantea en este caso un problema serio: de no descartarse la solución con signo negativo la energía de la partícula libre no estaría acotada por abajo y se podría entonces extraer una cantidad arbitrariamente grande de energía tomando simplemente una partícula en reposo con energía $+mc^2$ y perturbándola de manera

³Ansätze: del alemán, propuesta.

de que saltara el “gap”⁴ de $2mc^2$ y cayera en un estado con más y más energía negativa. Volveremos a este asunto más adelante.

Ahora bien, utilizando la ecuación relativista propuesta por Schrödinger (y que hoy se conoce ecuación de Klein Gordon), se obtienen resultados razonables para las series de Balmer y Lyman del átomo de hidrógeno pero los resultados eran inaceptables para la constante de estructura fina α determinada ya en esa época con bastante precisión por F. Paschen y E. Back en el estudio de la acción de un campo magnético intenso sobre los niveles de energía del átomo de hidrógeno ($\alpha = e^2 / (4\pi\epsilon_0\hbar c)$).

Es importante aquí recordar que Schrödinger no ignoraba la existencia del spin del electrón, sugerido por G. Uhlenbeck y S. Goudsmit en 1925 para dar cuenta del desdoblamiento de niveles atómicos en un campo magnético externo (efecto Zeeman). Comprendía correctamente que las discrepancias que encontraba provenían de que su ecuación no tenía en cuenta el spin del electrón. De tenerlo, la función de onda asociada al electrón no debía tomarse como un escalar frente, en particular, a rotaciones, y la ecuación que rija su dinámica cuántica tendría que incluir interacciones que tengan en cuenta a este momento angular intrínseco.

Existía además un problema conceptual más básico que mostraba la invalidez de la ecuación de Klein-Gordon para describir la dinámica del electrón en el contexto de la física cuántica en la que $|\psi|^2$ se interpreta como una densidad de probabilidad. Fue este problema, que tiene que ver con la imposibilidad de definir una densidad de probabilidad consistente a partir de la ecuación de Klein-Gordon, el que llevó a Paul Dirac a cambiar radicalmente el frente de ataque y proponer la ecuación que lleva su nombre y que sí daba cuenta de todos los resultados experimentales conocidos al momento (1928) sobre el átomo de hidrógeno.

Para comprender la contradicción entre la ecuación de Klein-Gordon y una densidad de probabilidad consistente, recordemos que en el caso no relativista descrito por la ecuación (6.4), a partir de la función de onda $\psi(\mathbf{x}, t)$ se puede construir la densidad de probabilidad ρ y la corriente de probabilidad \mathbf{J} . La densidad $\rho(\mathbf{x}, t)$ resulta ser una función real, semidefinida positiva y de carácter escalar que satisface, junto a $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t)$, que tiene carácter vectorial, una ecuación de continuidad:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (6.14)$$

donde

$$\rho = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \quad (6.15)$$

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\mathbf{x}, t)\nabla\psi(\mathbf{x}, t) - \psi(\mathbf{x}, t)\nabla\psi^*(\mathbf{x}, t)] \quad (6.16)$$

⁴gap: del inglés, hueco, brecha.

Esta ecuación confirma la interpretación de $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x$ como la probabilidad de encontrar, en el instante t , a la partícula en el diferencial de volumen d^3x centrado en el punto \mathbf{x} . Como siempre, de tal ecuación de continuidad se prueba fácilmente la conservación de una “carga”, en este caso probabilidad, siempre que el flujo de \mathbf{J} se anule adecuadamente en el infinito. Se obtiene

$$\frac{d}{dt} \int \rho(\mathbf{x}, t) d^3x = 0, \quad (6.17)$$

o,

$$\frac{dQ}{dt} = 0, \quad Q \equiv \int \rho(\mathbf{x}, t) d^3x. \quad (6.18)$$

En el párrafo anterior el entrecomillado de la palabra “carga” se debe a lo siguiente. La definición de Q dada por (6.18) corresponde a la probabilidad de encontrar al sistema descrito por ψ en el volumen de integración. Pero vista a la luz del teorema de Noether, Q puede interpretarse como la carga conservada asociada a la invarianza de la ecuación de Schrödinger frente a un cambio de fase constante α de la forma

$$\psi(x, t) \rightarrow \exp(i\alpha)\psi(x, t). \quad (6.19)$$

Es decir, existe en la mecánica cuántica una invarianza global $U(1)$ (el grupo unitario $U(N)$ representado por matrices es el grupo de las matrices U unitarias de $N \times N$ –i.e. $U^\dagger U = U U^\dagger = I$). El caso $N = 1$ puede identificarse con el de los números complejos de módulo 1. que es el caso de la transformación (6.19). Cuando se trata de una partícula cargada eléctricamente en interacción con el campo electromagnético, esta invarianza pasa a ser una invarianza local (es decir, $\alpha = \alpha(\mathbf{x}, t)$) donde un cambio con fase $\alpha(x)$ en la función de onda va acompañado de un cambio de gauge en el campo electromagnético.

Planteada la ecuación de conservación (6.18), la interpretación de ρ , definida positiva, como densidad de probabilidad se vuelve natural. A ello se agrega que la probabilidad de encontrar a la partícula en algún lugar de todo el espacio resulta constante en el tiempo –conservada– (e igual a 1 con una adecuada normalización de la función de onda).

Para obtener tal ecuación de continuidad se multiplica la ecuación de Schrödinger por $\psi^*(\mathbf{x}, t)$ y se resta el resultado de multiplicar la ecuación conjugada por $\psi(\mathbf{x}, t)$. Si procedemos de la misma manera con la ecuación de Klein-Gordon (6.8), obtenemos

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_R + \frac{\partial \rho_R}{\partial t} = 0 \quad (6.20)$$

donde \mathbf{J}_R (con R indicamos que se trata del caso relativista) tiene la misma forma que en el caso no relativista mientras que la densidad de carga ρ_R cambia radical-

mente:

$$\rho_R = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \psi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right], \quad (6.21)$$

$$\mathbf{J}_R = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \psi(\mathbf{x}, t) - \psi(\mathbf{x}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{x}, t)]. \quad (6.22)$$

Haber forzado la covarianza implica que ρ_R tenga una forma funcional análoga a las componentes de \mathbf{J}_R con t jugando un rol idéntico al de las coordenadas.

Es evidente que ρ_R es una función escalar real pero, a diferencia de $\rho = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2$, puede ser negativa y por ello se pierde la posibilidad de asociarla con una densidad de probabilidad. Esto es consecuencia de que siendo la ecuación de Klein-Gordon de segundo orden en el tiempo, es en principio necesario dar dos condiciones iniciales (para $\psi(\mathbf{x}, t)$ y para $\partial\psi(\mathbf{x}, t)/\partial t$) para determinarla y no queda excluida la posibilidad de elegir la función y su derivada de manera que $\rho_R < 0$. De hecho, dada una elección de $\psi(\mathbf{x}, t)$ y $\partial\psi(\mathbf{x}, t)/\partial t$ en el instante inicial que haga a ρ_R positiva, la elección igualmente aceptable de $\psi(\mathbf{x}, t)$ y $-\partial\psi(\mathbf{x}, t)/\partial t$ como condición inicial hará que $\rho_R < 0$.

Otra manera de ver el problema señalado arriba es la siguiente: si se considera un estado estacionario, puede reemplazarse en (6.21) $i\hbar \partial\psi(\mathbf{x}, t)/\partial t$ por $E\psi(\mathbf{x}, t)$, obteniéndose

$$\rho_R = \frac{E}{mc^2} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \quad (6.23)$$

y las soluciones con energía negativa (rama negativa de la raíz (6.12)) corresponderán, evidentemente a $\rho_R < 0$. De esta última fórmula vemos que, en el límite no relativista, cuando $E \rightarrow mc^2$, ρ_R deviene la densidad de probabilidad no relativista habitual,

$$\rho_R \rightarrow |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \rho. \quad (6.24)$$

6.2. Transformaciones de Lorentz

Antes de embarcarnos en la descripción de la ecuación de onda relativista es conveniente mencionar brevemente las transformaciones de Lorentz (TL) que se usan en la cinemática clásica relativista [2], para luego discutir sus análogos cuánticos y finalmente encontrar la generalización relativista para los grados de libertad intrínsecos.

Consideremos dos eventos en el espacio-tiempo, (x, y, z, t) y $(x + dx, y + dy, z + dz, t + dt)$. Podemos generalizar el concepto de distancia entre dos puntos en el espacio introduciendo el "intervalo" ds entre dos puntos en el espacio-tiempo. Para que sea el mismo para todos los observadores (inerciales), ds tendrá que ser invariante con

respecto a las rotaciones y a las TL y por lo tanto debe estar dado por:

$$ds^2 = c^2 dt^2 - (dx^2 + dy^2 + dz^2) \quad (6.25)$$

El grupo de todas las transformaciones que dejan invariante ds^2 se denomina el grupo homogéneo de Lorentz⁵. Restringiremos nuestra discusión a este tipo de transformaciones y en lo que sigue omitiremos la palabra homogéneo al referirnos al grupo de Lorentz (GL).

En un espacio 3-dimensional (x, y, z) son componentes de un 3-vector, y $dr^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2$ se puede escribir en la forma

$$dr^2 = \sum_{i=1,2,3} (dx^i)^2, \quad x^1 = x, x^2 = y, x^3 = z \quad (6.26)$$

que resulta ser una forma bilineal definida positiva por ser suma de cuadrados, e invariante respecto de las rotaciones en el espacio usual. Para generalizar a 4 dimensiones esta manera de escribir el intervalo ds^2 tenemos el problema de que ya no resulta positivo definido, y necesitamos introducir algún objeto que contenga la información del signo de cada coordenada. La forma usual de hacerlo es introducir la “métrica” del espacio, $g_{\mu\nu}$, como los elementos de la matriz diagonal

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.27)$$

donde las filas y las columnas corresponden a las componentes 0, 1, 2 y 3. De esta forma el intervalo puede escribirse

$$ds^2 = \sum_{\mu=0,1,2,3} dx^\mu g_{\mu\nu} dx^\nu \quad (6.28)$$

donde agregamos además la coordenada $x^0 = ct$ e introducimos el cuadvivector (llamado *contravariante*, con el índice en la posición superior)⁶

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z). \quad (6.29)$$

Es conveniente, para no escribir sistemáticamente la métrica en todos lados, definir un cuadvivector *covariante*, con el índice en posición inferior, en la forma

$$x_\mu = \sum_{\nu} g_{\mu\nu} x^\nu = g_{\mu 0} x^0 + g_{\mu 1} x^1 + g_{\mu 2} x^2 + g_{\mu 3} x^3. \quad (6.30)$$

⁵El grupo homogéneo excluye las traslaciones

⁶Lo pronunciamos cuadvivector o tetraivector según la literatura.

Mirando (6.30), vemos que $x^0 = x_0, x^1 = -x_1$, etc, de manera que el intervalo se escribe

$$ds^2 = \sum_{\mu} dx^{\mu} dx_{\mu} \quad (6.31)$$

Finalmente, para simplificar la notación, adoptaremos la convención de suma de Einstein: un índice que aparece una vez en la posición superior y una vez en la posición inferior se suma automáticamente de 0 a 3 :

$$\sum_{\mu=0}^3 V^{\mu} V_{\mu} \rightarrow V^{\mu} V_{\mu} \quad (6.32)$$

así, el intervalo se escribe

$$ds^2 = dx^{\mu} dx_{\mu}. \quad (6.33)$$

Así escrito, posee la forma de producto interno entre un vector contravariante con otro covariante la cual arroja como resultado un escalar (o invariante).

Dado que el determinante de $g_{\mu\nu}$ es no nulo, existe su inversa, que es $g^{-1} = g$. A los elementos de matriz de g^{-1} los llamamos $g^{\mu\nu}$. Al ser inversas, satisfacen

$$g_{\mu\rho} g^{\rho\nu} = \delta_{\mu}^{\nu}. \quad (6.34)$$

Volviendo a las transformaciones homogéneas de Lorentz, ahora que hemos introducido los cuadvectores, podemos escribirlas en la forma

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu}, \quad \Lambda^{\mu}_{\nu} \in \mathbb{R}. \quad (6.35)$$

que inducen una transformación análoga en los dx^{μ} (atención que el orden en que aparecen los índices μ y ν es importante). Dado que tienen que mantener invariante el intervalo ds^2 , se debe satisfacer que

$$g_{\mu\nu} \Lambda^{\mu}_{\rho} \Lambda^{\nu}_{\sigma} = g_{\rho\sigma}. \quad (6.36)$$

Observemos que si pensamos a Λ^{μ}_{ν} como los elementos de una matriz Λ , entonces podemos escribir (6.36) como un producto matricial,

$$\Lambda^T g \Lambda = g. \quad (6.37)$$

Esto significa que el grupo de transformaciones que dejan invariante al intervalo ds^2 , lo que se conoce como grupo de Lorentz, es lo que se denomina grupo pseudo-ortogonal $O(1,3)$, usualmente denotado \mathcal{L} para los físicos.

También haremos uso de los 4-tensores antisimétricos que son de la forma:

$$T^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & V^1 & V^2 & V^3 \\ -V^1 & 0 & -A^3 & A^2 \\ -V^2 & A^3 & 0 & -A^1 \\ -V^3 & -A^2 & A^1 & 0 \end{pmatrix} \equiv \{\mathbf{V}, \mathbf{A}\}; \quad T_{\mu\nu} = \{-\mathbf{V}, \mathbf{A}\} \quad (6.38)$$

Las componentes espaciales T^{32}, T^{13}, T^{21} constituyen, con respecto a las transformaciones espaciales, un vector axial, \mathbf{A} , en tres dimensiones. En cambio, las componentes T^{01}, T^{02} y T^{03} forman con relación a las mismas transformaciones, un vector tridimensional polar \mathbf{V} [3]. Como ejemplos podemos citar al tensor para el campo electromagnético:

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu = \{-\mathbf{E}, \mathbf{B}\} \quad (6.39)$$

donde $A^\mu \equiv (\phi, \mathbf{A})$ es el campo electromagnético y

$$L^{\mu\nu} = x^\mu p^\nu - x^\nu p^\mu = \{\mathbf{K}, -\mathbf{L}\} \quad (6.40)$$

donde

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (6.41)$$

es el impulso angular orbital y

$$\mathbf{K} = ct\mathbf{p} - E\mathbf{r}/c = x^0\mathbf{p} - p^0\mathbf{r} \quad (6.42)$$

El producto escalar de dos 4-tensores antisimétricos, $T^{\mu\nu}$ y $T'^{\mu\nu}$

$$T \cdot T' \equiv T_{\mu\nu} T'^{\mu\nu} = 2(\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}' - \mathbf{V} \cdot \mathbf{V}') \quad (6.43)$$

es invariante con respecto a las TL. Por ejemplo, para el campo electromagnético:

$$F \cdot F = 2(\mathbf{B}^2 - \mathbf{E}^2) = \text{inv.} \quad (6.44)$$

Ejemplos de Transformaciones de Lorentz

Entre las distintas transformaciones del grupo de Lorentz, encontramos las inversiones espaciales, o transformaciones de paridad ($\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}, t \rightarrow t$),

$$\Lambda_P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (6.45)$$

inversiones temporales ($\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}, t \rightarrow -t$),

$$\Lambda_T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (6.46)$$

rotaciones, por ejemplo de un ángulo θ alrededor del eje z :

$$\Lambda_R(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (6.47)$$

y transformaciones propias de Lorentz o “boosts” temporales, que afectan a una de las coordenadas y al tiempo, por ejemplo para el caso en que la velocidad relativa entre los dos sistemas es v en la dirección del eje x , se escriben

$$\Lambda_B(\omega) = \begin{pmatrix} \cosh \omega & \sinh \omega & 0 & 0 \\ \sinh \omega & \cosh \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.48)$$

donde $\tanh \omega = v/c$ y por lo tanto $\cosh \omega = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ y $\sinh \omega = v/c(1 - v^2/c^2)^{-1/2}$. Los boosts y las rotaciones pueden formarse mediante transformaciones infinitesimales consecutivas a partir de la identidad Λ_I (están “continuamente conectadas” a Λ_I), mientras que Λ_T y Λ_P no pueden (están “desconectadas” de Λ_I , o se dice que son transformaciones “discretas”). Cualquier producto de boosts, rotaciones, Λ_T y Λ_P pertenece al grupo de Lorentz, y resulta que saturan el grupo de Lorentz.

Adoptaremos la convención seguida hasta ahora, que corresponde a las rotaciones activas. Esto significa que la rotación afecta al sistema físico, mientras que los ejes de coordenadas quedan fijos. Lo mismo hacemos con los boosts de Lorentz, y para una TL en la dirección x con velocidad relativa v .

En relación a los operadores diferenciales definimos:

$$\begin{aligned} \partial_\mu &= \frac{\partial}{\partial x^\mu} = (\partial_0, \partial_1, \partial_2, \partial_3) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right) \\ \partial^\mu &= g^{\mu\nu} \partial_\nu = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right) \end{aligned} \quad (6.49)$$

que da origen al operador d’Alambertiano:

$$\square = \partial^\mu \partial_\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \quad (6.50)$$

El cuadrivector energía-impulso de una partícula es:

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right), \quad p_\mu = \left(\frac{E}{c}, -\mathbf{p} \right) \quad (6.51)$$

dando lugar al invariante

$$p^2 = p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = m^2 c^2 \quad (6.52)$$

o, cuando $c = 1$

$$p^2 = E^2 - \mathbf{p}^2 = m^2. \quad (6.53)$$

Usaremos la notación $p \cdot x$ para el producto escalar de los cuadvectores p_μ y x^ν :

$$p \cdot x = p_\mu x^\mu = Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \quad (6.54)$$

Consideremos un sistema invariante relativista que obedece la ecuación covariante de Klein-Gordon. Si pretendemos que el módulo cuadrado de la función de onda, ligado a una cantidad medible, no cambie frente a este grupo de transformaciones, la función de onda deberá permanecer invariante a menos de una posible fase:

$$\psi(\mathbf{x}, t) \xrightarrow{\Omega} \psi'(\mathbf{x}', t') = \exp(i\alpha)\psi(\mathbf{x}, t) \quad (6.55)$$

Supongamos que α representa una inversión espacial. Entonces, si se consideran dos inversiones espaciales, se tendrá que $\exp(2i\alpha) = 1$ y por lo tanto $\alpha = 0, \pi$. Luego, ante una inversión espacial

$$\psi'(-\mathbf{x}, t) = \pm\psi(\mathbf{x}, t) \quad (6.56)$$

Es decir que $\psi(\mathbf{x}, t)$ puede ser un escalar (signo $+$) o pseudoescalar (signo $-$). En cuanto a rotaciones, que son continuas, debemos incluir, por continuidad, a la identidad. Al hacer una rotación de 2π si α no se mantuviera constante tendríamos una inconsistencia (lo mismo sucede para boosts, que pueden considerarse como rotaciones hiperbólicas).

Luego $\psi(\mathbf{x}, t)$ es un escalar o pseudoescalar frente a reflexiones espaciales y un escalar frente a transformaciones propias de Lorentz y rotaciones. Tal función de onda sólo puede describir partículas que no tengan otros grados de libertad que los asociados con el espacio-tiempo. Es decir, la ecuación de Klein-Gordon describe partículas de spin 0. Fueron Pauli y Weisskopf [5] quienes justamente propusieron utilizar la ecuación de Klein-Gordon para describir la dinámica cuántica de bosones.

6.3. La ecuación de Dirac

P.A.M. Dirac (1902-1984) logró resolver en 1928 el problema de cómo compatibilizar la necesaria covarianza relativista de una ecuación de ondas, con la necesidad

de tener una densidad de probabilidad definida positiva asociada con la función de onda cuántica que describe el estado de un electrón⁷.

Dirac hizo hincapié que el hecho de que la densidad de probabilidad no tuviera signo definido provenía de que la derivada temporal en la ecuación de Klein-Gordon era de segundo orden (y no de primero como en la ecuación no relativista). Cambió entonces radicalmente el punto de partida de Schrödinger para la obtención de una ecuación de ondas relativista que describiera correctamente la dinámica cuántica de partículas de spin 1/2 como el electrón. Publicó un trabajo con su propuesta [6] y desde entonces la ecuación básica de la mecánica cuántica relativista para el electrón ha tomado su nombre.

Quedó claro en el análisis previo que la ecuación de Klein-Gordon conduce a una densidad de probabilidad negativa por tratarse de una ecuación de segundo orden en el tiempo. Esto último, a su turno, es obligado por requerimientos de la covarianza relativista: las derivadas espaciales que resultan de la cuantificación canónica de la energía cinética

son de segundo orden.

Dando un corte drástico a la contradicción, Dirac propuso una ecuación de primer orden tanto en las variables espaciales como en las temporales. En cierto modo, en lugar de aplicar las reglas de cuantificación canónica a la relación entre el cuadrado de la energía y el impulso,

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (6.57)$$

Dirac lo hizo con la idea de que relativísticamente la energía se relaciona con la masa y el impulso a través de una raíz cuadrada,

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (6.58)$$

Pero como no era razonable abandonar la linealidad de la ecuación de ondas escribiendo para la ecuación de ondas una en que ψ apareciera dentro de raíces cuadradas, lo que violaría el principio de superposición), Dirac no planteó una ecuación con raíces cuadradas sino que propuso una que, “elevada al cuadrado”, reprodujera (6.57) de manera que en el límite $c \rightarrow \infty$ se recupera el resultado no relativista $E = \mathbf{p}^2 / (2m)$ (El sentido de de escribir “elevar al cuadrado” una ecuación diferencial quedará aclarado más adelante).

⁷Según G. Gamow, Dirac entrevió la solución una noche del invierno de 1928, mientras meditaba sentado frente al fuego en el St. John College de Cambridge. Cuenta Dirac que en esa noche jugaba con matrices de 2×2 con propiedades muy notables que había inventado y que no son otra cosa que las que llamamos matrices de Pauli. En ese relato comenta que él ignoraba que Pauli había encontrado esas matrices y que suponía que Pauli igualmente ignoraba que él también las había inventado.

En este punto recordemos que cuando en la mecánica cuántica no relativista se pretende describir al electrón incluido su spin, debe considerarse una función de onda que no es un escalar sino que tiene 2 componentes (más precisamente se trata de un espinor de dos componentes ψ que suele llamarse espinor de Pauli),

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}, t) \\ \psi_-(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} \quad (6.59)$$

Por ejemplo, consideremos el caso de un electrón en presencia de un campo eléctrico

$$\mathbf{E} = -e \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{d\phi}{dr} \quad (6.60)$$

con ϕ el potencial escalar. Vimos en el primer curso de mecánica cuántica que el hamiltoniano del electrón, tratado como un espinor de 2 componentes toma en este caso la forma

$$H = \begin{pmatrix} p^2/2m + e\phi(r) & 0 \\ 0 & p^2/2m + e\phi(r) \end{pmatrix} + w(r)\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \quad (6.61)$$

con

$$w(r) = -\frac{e^2 \hbar}{4m^2 c^2} \frac{d\phi}{r dr} \quad (6.62)$$

donde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3)$ son las matrices de Pauli, de 2×2 .

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.63)$$

Para mayor generalidad que la de los espinores de Pauli, Dirac consideró a la función de onda como un objeto no de 2 sino de N componentes, esperando que ciertas propiedades básicas a exigir a la teoría fijaran N y el carácter espinorial de ψ . Escribió entonces

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi^1(\mathbf{x}, t) \\ \psi^2(\mathbf{x}, t) \\ \vdots \\ \psi^N(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} = (\psi^\alpha), \quad \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (6.64)$$

La ecuación diferencial lineal de primer orden con coeficientes constantes⁸ más general que puede escribirse para el caso de un electrón libre en un espacio-tiempo de $3 + 1$ dimensiones es entonces:

⁸Es la homogeneidad del espacio-tiempo la que implica que sean constantes.

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \alpha^1 \frac{\partial \psi}{\partial x^1} + \alpha^2 \frac{\partial \psi}{\partial x^2} + \alpha^3 \frac{\partial \psi}{\partial x^3} + \frac{imc}{\hbar} \beta \psi = 0. \quad (6.65)$$

Las constantes c (velocidad de la luz), m (masa de la partícula) y \hbar (constante de Planck) aparecen por conveniencia posterior. La arbitrariedad de los coeficientes está dada por constantes $\alpha_{\rho\sigma}^i$ y $\beta_{\rho\sigma}$ que, dado que ψ es un vector columna de N elementos, pueden considerarse 4 matrices de $N \times N$ a determinar por razones físicas. La ecuación (6.65) puede reescribirse de manera más compacta en la forma

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} \psi + \frac{imc}{\hbar} \beta \psi = 0 \quad (6.66)$$

Nótese que las componentes α^i de $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)$ son cada una una matriz de $N \times N$. En este caso poner los índices arriba o abajo es solamente una cuestión de estética pues se trata de índices “espinoriales”.

En camino de obtener una ecuación de continuidad, analicemos el resultado de conjugar la ecuación (6.66) (Utilizaremos la notación f^* para indicar el conjugado de una función f). Para el caso de espinores, introducimos la notación

$$\psi^\dagger \equiv \psi^{*T} = (\psi^{1*}, \psi^{2*}, \dots, \psi^{N*}), \quad (6.67)$$

que implica conjugar y trasponer al espinor definido en la ec. (6.64). La ecuación que resulta de conjugar y trasponer (6.66) puede entonces ser escrita así:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} + (\boldsymbol{\nabla} \psi^\dagger) \cdot \boldsymbol{\alpha}^\dagger - \frac{imc}{\hbar} \psi^\dagger \beta^\dagger = 0. \quad (6.68)$$

Aquí $\alpha^{i\dagger}$ es la traspuesta conjugada de la matriz α^i .

Multiplicando (6.66) a izquierda por ψ^\dagger , (6.68) a derecha por ψ y luego sumando ambos resultados se obtiene

$$\frac{1}{c} \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + (\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} \psi + (\boldsymbol{\nabla} \psi^\dagger) \cdot \boldsymbol{\alpha}^\dagger \psi) + \frac{imc}{\hbar} \psi^\dagger (\beta - \beta^\dagger) \psi = 0, \quad (6.69)$$

donde hemos introducido a la función real $|\psi|^2$, semidefinida positiva, de la manera siguiente:

$$|\psi|^2 = \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t). \quad (6.70)$$

Basta pedir que las matrices α^i y β sean hermíticas para que la ecuación (6.69) se simplifique considerablemente y tenga las características de una típica ecuación de continuidad. En efecto, si

$$\alpha^i = \alpha^{i\dagger}, \quad \beta = \beta^\dagger, \quad (6.71)$$

la ecuación (6.69) toma la forma simple

$$\frac{1}{c} \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi) = 0. \quad (6.72)$$

Entonces, si se define

$$\rho(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2, \quad (6.73)$$

y

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) c \boldsymbol{\alpha} \psi(\mathbf{x}, t), \quad (6.74)$$

y se puede escribir a (6.72) como una ecuación de continuidad e interpretar a ρ como una densidad de probabilidad semidefinida positiva,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (6.75)$$

¡El problema de la ecuación de Klein-Gordon no existe entonces para la ecuación de Dirac! Nótese que la definición de ρ es análoga a la que resulta en el caso no-relativista para espinores de dos componentes. En contraste, la de \mathbf{J} es completamente nueva (volveremos a ella más adelante cuando estemos en condiciones de ligarla con la “velocidad” de la partícula cuya función de onda es el espinor ψ).

Hay una manera sugestiva de reescribir la ecuación de Dirac (6.66)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [c \boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\hbar) \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2] \psi \equiv H\psi, \quad (6.76)$$

que nos permite identificar al operador \mathbf{p} con $-i\hbar \boldsymbol{\nabla}$, la misma expresión que la de la cuantificación canónica no relativista. En cuanto al operador H ,

$$H = c \boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\hbar) \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2, \quad (6.77)$$

podemos identificarlo como el generador de traslaciones temporales infinitesimales, es decir con el Hamiltoniano del sistema que pretendemos describir (el de una partícula libre de masa m). Es importante notar que la hermiticidad de las 4 matrices $\boldsymbol{\alpha}$ y β garantiza que $H = H^\dagger$.

Para verificar que la ecuación de Dirac es consistente con la relación entre energía e impulso que debe satisfacer un sistema relativista, apliquemos el operador

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} - \frac{imc}{\hbar} \beta \quad (6.78)$$

a la ecuación (6.66). Nótese el cambio de signo en los dos últimos términos respecto del operador que aparece en (6.68). La idea está inspirada en la acción de multiplicar por $(a-b)$ a la cantidad $(a+b)$ para obtener una diferencia de cuadrados. Obtenemos

$$\left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} - \frac{imc}{\hbar} \beta \right) \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} \psi + \frac{imc}{\hbar} \beta \psi \right) = \quad (6.79)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \alpha^k \alpha^l \frac{\partial^2}{\partial x^k \partial x^l} \psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \beta^2 \psi - \frac{imc}{\hbar} (\alpha^k \beta + \beta \alpha^k) \frac{\partial \psi}{\partial x^k} = 0. \quad (6.80)$$

Dada la simetría de las derivadas del segundo término de la segunda línea se puede escribir

$$\alpha^k \alpha^l \frac{\partial^2}{\partial x^k \partial x^l} = \frac{1}{2} (\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k) \frac{\partial^2}{\partial x^k \partial x^l}. \quad (6.81)$$

Basta entonces pedir que

$$\frac{1}{2} (\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k) = \delta^{kl}, \quad (6.82)$$

para que el término de derivadas espaciales de la segunda línea de (6.79) corresponda al Laplaciano que aparece en la ecuación de Klein-Gordon como parte del d'Alambertiano. Si adoptamos esta condición y además imponemos

$$\alpha^k \beta + \beta \alpha^k = 0, \quad (6.83)$$

$$\beta^2 = I, \quad (6.84)$$

la segunda línea de (6.79) deviene la ecuación de Klein-Gordon (6.8) y por ello se verifica que toda solución de la ecuación de Dirac satisface también la ecuación de Klein-Gordon,

$$\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2} - \hbar^2 \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + m^2 c^2 \psi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (6.85)$$

y por lo tanto es consistente con la relación energía impulso relativista que vimos era verificada por esta última.

La derivación anterior aclara el sentido que tenía la frase que se refería a “elevar al cuadrado” una ecuación.

Las condiciones que ya hemos impuesto a las matrices α y β implican varias propiedades. En particular, si reescribimos la ecuación (6.83) en la forma

$$\beta \alpha^k = -\alpha^k \beta, \quad (6.86)$$

calculamos el determinante,

$$\det \beta \alpha^k = \det (-\alpha^k \beta) = (-1)^N \det (\alpha^k \beta), \quad (6.87)$$

y usamos la propiedad cíclica $\det AB = \det BA$ llegamos a que

$$(-1)^N = 1 \Rightarrow N \equiv \text{par}. \quad (6.88)$$

Si se multiplica a derecha (6.86) por β y luego se usa (6.84), se obtiene

$$\beta \alpha^k \beta = -\alpha^k, \quad (6.89)$$

Si ahora calculamos la traza de ambos miembros,

$$\text{tr } \beta \alpha^k \beta = -\text{tr } \alpha^k \quad (6.90)$$

$$\text{tr } \beta \alpha^k \beta = \text{tr } \beta^2 \alpha^k = \text{tr } \alpha^k = -\text{tr } \alpha^k. \quad (6.91)$$

La propiedad cíclica de la traza implica que el lado izquierdo de la igualdad de (6.89) es $+\alpha^k$ mientras que el lado derecho tiene el signo opuesto por lo que o

$$\text{tr } \alpha^k = 0. \quad (6.92)$$

Analogamente se obtiene que

$$\text{tr } \beta = 0. \quad (6.93)$$

Podemos ahora escribir la ecuación de Dirac (6.66) de una manera explícitamente covariante. Para ello introduzcamos la notación

$$\gamma^0 = \beta, \quad (6.94)$$

$$\gamma^i = \beta\alpha^i, \quad (6.95)$$

que en forma compacta escribimos

$$\gamma^\mu = (\beta, \gamma^i). \quad (6.96)$$

Puede verse fácilmente que

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} I_N, \quad (6.97)$$

con la métrica $g^{\mu\nu}$ definida a partir de la identidad $g^{\mu\nu} g_{\nu\rho} = \delta_\rho^\mu$ con $g_{\nu\rho}$ dada matricialmente por la ec. (6.27).

Si multiplicamos la ecuación de Dirac (6.66) por $i\hbar\beta$ y usamos la nueva notación tendremos

$$i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial x^\mu} - mc\psi(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (6.98)$$

Esta es la manera compacta de escribir, de manera explícitamente covariante, la ecuación matricial que describe la dinámica relativista de una partícula libre de masa m . Se puede lograr una forma más compacta utilizando la notación $(\not{\partial})$, lo cual arroja

$$i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu \psi - mc\psi = 0. \quad (6.99)$$

Finalmente, introducimos la notación de Feynmann, en la que se define

$$\not{\partial} = \gamma^\mu \partial_\mu, \quad \not{A} = \gamma^\mu A_\mu \quad (6.100)$$

y la ecuación de Dirac resulta

$$(i\hbar\not{\partial} - mc)\psi = 0. \quad (6.101)$$

Resta confirmar la covarianza y determinar explícitamente las cuatro matrices γ^μ (llamadas matrices de Dirac). En particular, su orden (por ahora $N \times N$ es arbitrario) o, lo que es lo mismo, cuál es el número N de componentes de $\psi(\mathbf{x}, t)$. Luego, deberemos analizar las propiedades de $\psi(\mathbf{x}, t)$ ante transformaciones de Lorentz, determinar el spin de la partícula que describe y buscar las soluciones.



Figura 6.1: Fotografía de la placa de pizarra verde colocada en la abadía de Westminster, a pocos metros de la tumba de Isaac Newton, en la que fue grabada la ecuación de la mecánica cuántica relativista de una partícula libre de masa m para el caso en que las unidades son aquellas en las que resulta $c = 1$.

6.4. La ecuación de continuidad

La ecuación de Dirac para una partícula relativista de masa m se escribe de manera explícitamente covariante [ec. (6.66)] como

$$i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi - mc\psi = 0 \quad (6.102)$$

donde las matrices γ^μ son cuatro matrices de $N \times N$ que, de acuerdo a su definición en términos de las matrices α y β [ecs.(6.94) y (6.95)] y de las propiedades de estas últimas que fue necesario imponer satisfacen

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}\mathbf{1}_N, \quad (6.103)$$

$$\text{tr}\gamma^\mu = 0. \quad (6.104)$$

En términos de estas matrices (llamadas matrices de Dirac), la ecuación de continuidad (6.75) que obtuvimos a partir de la ecuación (6.102) puede escribirse de manera explícitamente covariante frente a transformaciones de Lorentz. En efecto, definiendo

$$J^0(\mathbf{x}, t) = c\rho(\mathbf{x}, t) = c\psi(\mathbf{x}, t)^\dagger\psi(\mathbf{x}, t) = c\psi(\mathbf{x}, t)^\dagger\gamma^0\gamma^0\psi(\mathbf{x}, t), \quad (6.105)$$

$$\mathbf{J} = c\psi(\mathbf{x}, t)^\dagger\boldsymbol{\alpha}\psi(\mathbf{x}, t) = c\psi(\mathbf{x}, t)^\dagger\gamma^0\boldsymbol{\gamma}\psi(\mathbf{x}, t), \quad (6.106)$$

podemos escribir

$$J^\mu = c\psi(\mathbf{x}, t)^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\psi(\mathbf{x}, t), \quad (6.107)$$

donde hemos usado la ecuación (6.103) para escribir las igualdades (6.106).

Si en este punto se introduce la importante definición

$$\bar{\psi}(\mathbf{x}, t) \equiv \psi(\mathbf{x}, t)^\dagger\gamma^0, \quad (6.108)$$

la corriente puede ser escrita de manera compacta como

$$J^\mu = c\bar{\psi}(\mathbf{x}, t)\gamma^\mu\psi(\mathbf{x}, t), \quad (6.109)$$

y la ecuación de continuidad deviene

$$\frac{\partial J^\mu}{\partial x^\mu} = \partial_\mu J^\mu = 0. \quad (6.110)$$

Veremos que $\bar{\psi}(\mathbf{x}, t)$ jugará un papel más importante que $\psi(\mathbf{x}, t)^\dagger$ en el análisis de la mecánica cuántica relativista. Más aun, en el marco de la cuantificación de las teorías de campos vía el método de la integral funcional⁹ reaparecerá en un pie de igualdad con ψ como una función independiente de ψ .

⁹El método de la integración funcional, desarrollado por R. Feynmann a partir de una idea de Dirac provee una manera alternativa a la cuantificación de las teorías de campos.

Conviene por lo anterior determinar qué ecuación satisface $\bar{\psi}(\mathbf{x}, t)$. Para ello conjugamos y trasponemos la ecuación (6.102). Luego la multiplicamos por γ^0 a derecha y usamos que

$$\gamma^0 \gamma^{\mu\dagger} \gamma^0 = \gamma^\mu, \quad (6.111)$$

para obtener

$$i\hbar \partial_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu + mc \bar{\psi} = 0. \quad (6.112)$$

Recordemos que la ecuación de Dirac para ψ , ec. (6.102) tiene la forma

$$i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu \psi - mc \psi = 0 \quad (6.113)$$

Notemos que estas ecuaciones difieren solo en el signo relativo. De hecho, tomando a ψ y $\bar{\psi}$ como variables independientes, las ecuaciones pueden ser obtenidas a partir de la acción

$$S = \int d^4x \mathcal{L} \quad (6.114)$$

con el Lagrangiano de Dirac dado por

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi \quad (6.115)$$

Nótese que el diferencial en la integral que define a la acción (6.114) implica la integración sobre el tiempo. Recordando la definición del Lagrangiano en la formulación de la mecánica clásica deberíamos llamar a $\mathcal{L}_{\text{Dirac}}$ densidad Lagrangiana.

La ecuación para ψ resulta de las ecuaciones de Euler-Lagrange que resultan de variar respecto a $\bar{\psi}$

$$\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \bar{\psi})} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}}, \quad (6.116)$$

$$0 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} = (i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi, \quad (6.117)$$

(la derivada respecto de $\partial_\mu \bar{\psi}$ del lado izquierdo de esta ecuación se anula porque en el Lagrangiano no aparecen derivadas de $\bar{\psi}$). Para obtener la ecuación que obedece $\bar{\psi}$ conviene integrar por partes la acción (6.114) y luego se procede de manera análoga al caso de ψ . Finalmente, hay otra manera de escribir el Lagrangiano de Dirac, por ejemplo, poniendo un factor 1/2 a la suma de dos términos, uno en el que es ψ quien aparece derivada, el otro en el que es $\bar{\psi}$ quien aparece derivada.

6.5. Los valores posibles de N

Dirac introdujo cuatro matrices de $N \times N$, γ^μ , independiente. Estudiando más en detalle sus propiedades es posible determinar los valores de N y la forma explícita

de cada una de las cuatro matrices. También se puede formar 6 productos tomando de a 2 matrices diferentes

$$\gamma^0\gamma^1 \quad \gamma^0\gamma^2 \quad \gamma^0\gamma^3 \quad i\gamma^1\gamma^2 \quad i\gamma^1\gamma^3 \quad i\gamma^2\gamma^3 \quad (6.118)$$

En cuanto a los 4 productos posibles de tres, se tiene

$$i\gamma^0\gamma^1\gamma^2 \quad i\gamma^0\gamma^1\gamma^3 \quad i\gamma^0\gamma^2\gamma^3 \quad \gamma^1\gamma^2\gamma^3 \quad (6.119)$$

Finalmente, existe un único producto de a cuatro que juega un rol muy importantes en la mecánica cuántica relativista por lo que se le asigna un símbolo específico, γ_5

$$i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \equiv \gamma_5 \quad (6.120)$$

asociado a una simetría muy importante que discutiremos más en detalle luego y que se denomina “quiralidad” (del griego $\chi\epsilon\iota\rho$, (kheir), mano).

No hay más productos distintos a los ya listados: si se tratara de armar un producto de 5 matrices habría que repetir alguna en ese producto. usando la anti-conmutación de de las matrices de Dirac distintas entre sí se puede ubicar de manera contiguas a las dos que son iguales usando esta propiedad. Y siendo que el producto de dos iguales es proporcional a la identidad el producto de 5 se reduce a uno de 3 ya incluido en la lista de las ecs. (??)-(6.120).

Las 11 matrices (6.118)-(6.120) junto con las 4 matrices γ^μ y la identidad I forman un conjunto de 16 matrices que llamaremos Γ^l , con $l = 1, 2, \dots, 16$. A las 4 primeras las escribiremos temporariamente como

$$\Gamma_1 = \gamma^0, \quad \Gamma_2 = i\gamma^1, \quad \Gamma_3 = i\gamma^2, \quad \Gamma_4 = i\gamma^3 \quad (6.121)$$

de manera que su cuadrado sea igual a la identidad. Las 12 siguientes son las que hemos listado en las ecuaciones (6.118)-(6.120) y también cumplen con esta propiedad.

Se puede verificar fácilmente que las matrices Γ_l así definidas satisfacen

1. $\Gamma_l\Gamma_n = a_{ln}\Gamma_m, \quad \Lambda_{ln} = \pm 1, \pm i$
2. $\Gamma_l\Gamma_n = 1 \iff l = n$
3. $\Gamma_l\Gamma_n = \pm\Gamma_n\Gamma_l$
4. Si $\Gamma_n \neq I$ siempre existe Γ_l tal que $\Gamma_l\Gamma_n\Gamma_l = -\Gamma_n$
5. $\text{tr } \Gamma_l = 0, \quad \Gamma_l \neq I$
5. $\sum_{k=1}^{16} \Lambda_k\Gamma_k = 0 \iff \Lambda_k = 0 \forall k$

Como ejemplo, probaremos las dos últimas propiedades:

5. $\text{tr } \Gamma_l = 0, \quad \Gamma_l \neq I$

Por la propiedad 4

$$\text{Si } \Gamma_n \neq I \quad [\text{siempre existe } \Gamma_l \text{ tal que } \Gamma_l \Gamma_n \Gamma_l = -\Gamma_n \quad (6.122)$$

se tiene, tomando traza,

$$\text{tr } \Gamma_l = -\text{tr } \Gamma_k \Gamma_l \Gamma_k \quad (6.123)$$

o, usando la propiedad cíclica de la traza

$$\text{tr } \Gamma_l = -\text{tr } \Gamma_k \Gamma_k \Gamma_l \quad (6.124)$$

Pero por la propiedad 2, $\Gamma_k \Gamma_k = 1$, se tiene que

$$\text{tr } \Gamma_l = -\text{tr } \Gamma_l \implies \text{tr } \Gamma_l = 0 \quad (6.125)$$

La propiedad 6 establece que

$$\sum_{k=1}^{16} \Lambda_k \Gamma_k = 0 \iff \Lambda_k = 0 \forall k \quad (6.126)$$

Separemos uno cualquiera de los términos de la suma del resto:

$$a_m \Gamma_m + \sum_{k \neq m} \Lambda_k \Gamma_k = 0 \quad (6.127)$$

Multipliquemos a derecha por Γ_m y usemos el hecho de que el cuadrado de las F 's es la identidad,

$$a_m I + \sum_{k \neq m} \Lambda_m \Gamma_k \Gamma_m = 0 \quad (6.128)$$

Ahora escribamos, usando la propiedad 1 ,

$$\Gamma_l \Gamma_n = a_{ln} \Gamma_m, \quad \Lambda_{ln} = \pm 1, \pm i \quad (6.129)$$

se tiene

$$a_m I + \sum_{k \neq m} \Lambda_m \Lambda_{km} \Gamma_p = 0 \quad (6.130)$$

para algún p (nótese que $\Gamma_p \neq I$ para $m \neq k$.)

Ahora tomamos la traza de esta igualdad

$$\text{tr} \left(a_m I + \sum_{k \neq m} \Lambda_m \Lambda_{km} \Gamma_p \right) = 0 \quad (6.131)$$

y usamos la propiedad 5, $\text{tr } \Gamma_l = 0$, $\Gamma_l \neq I$ con lo que mostramos

$$a_m N = 0 \implies \Lambda_m = 0 \forall m. \quad (6.132)$$

Este último resultado es muy importante. Por construcción, las 16 matrices Γ_l son independientes y por ello propiedad 6 muestra que de son linealmente independientes. El número mínimo de filas y de columnas que deben tener 16 matrices cuadradas para ser linealmente independientes es 4. Luego, se puede tomar a las matrices Γ_l y, a fortiori, a las matrices γ^μ como matrices de 4×4 . Esta es una representación irreducible. Por supuesto, se podría tomar un orden mayor. En tal caso, puede demostrarse que esta última es una representación reducible a una matriz diagonal por bloques de la forma

$$\Gamma^\mu = \begin{pmatrix} \gamma^\mu & & & 0 \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ 0 & & & \gamma^\mu \end{pmatrix} \quad (6.133)$$

donde las γ^μ son las matrices en la representación mínima de 4×4 .

Debe señalarse que el hecho de que las dimensiones del espaciotiempo son 4 determina que las matrices de Dirac sean 4 pero esto no está ligado unívocamente con que sean elegidas como matrices de 4×4 . En un espacio-tiempo de 3 dimensiones, por ejemplo, la dimensión mínima posible para las 3 matrices γ^μ existentes es 2 pero también es posible representarlas como 3 matrices de 4×4 con 2 bloques de 2×2 en la diagonal.

6.6. Teorema fundamental de Pauli

Dados dos conjuntos de matrices de Dirac, $\{\gamma^\mu\}$ y $\{\bar{\gamma}^\mu\}$, existe siempre una matriz no-singular S que los conecta por una relación de similitud:

$$\bar{\gamma}^\mu = S^{-1} \gamma^\mu S \quad (6.134)$$

No daremos la prueba, que es simple pero trabajosa. Está basada en escribir a S en términos de las $16\Gamma_i$ y $\bar{\Gamma}_i$ a su vez construidas a partir de las γ^μ y $\bar{\gamma}^\mu$,

$$S = \sum \bar{\Gamma}_i F \Gamma_i \quad (6.135)$$

y determinar F que lleva a que valga (6,134) : $\bar{\gamma}^\mu = S^{-1} \gamma^\mu S$.

Este teorema implica que no existe un único conjunto de 4 matrices de Dirac que satisfagan las condiciones necesarias que hemos ido determinando sino que, una

vez encontrado explícitamente un conjunto podremos obtener vía una transformación de similitud S adecuada, conjuntos equivalentes que podrán ser más o menos convenientes según el problema a tratar.

Una forma explícita útil de las matrices de Dirac

Muchas veces es útil que γ^0 , ligada a la coordenada temporal y que aparece en el término de masa del hamiltoniano (6.77) (recordemos que $\beta = \gamma^0$)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\hbar)\boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2) \psi \equiv H\psi \quad (6.136)$$

sea diagonal. Como además se debe tener $(\gamma^0)^2 = I$ y $\text{tr} \gamma^0 = 0$, es natural proponer la forma más simple:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & -I_{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad (6.137)$$

En cuanto a las γ^i , es fácil ver que una elección consistente con (6.137) y con todos los requerimientos de las matrices de Dirac es

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (6.138)$$

donde σ^i son las matrices de 2×2 de Pauli

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.139)$$

A la representación de las γ^μ dada por (6,137) – (6,138) se la conoce como representación de Dirac de las matrices γ^μ pues es la que Dirac utilizó originalmente¹⁰.

Otra representación útil es la llamada quiral. En esta representación se tiene:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{1}_2 \\ -\mathbf{1}_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.140)$$

mientras que las γ^i coinciden con (6,138),

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (6.141)$$

¹⁰Recordemos que según G. Gamow, Dirac entrevió la solución una noche del invierno de 1928, mientras meditaba sentado frente al fuego en el St. John College de Cambridge. Cuenta Dirac que en esa noche jugaba con matrices de 2×2 con propiedades muy notables que había inventado y que no son otra cosa que las que llamamos matrices de Pauli. En ese relato comenta que él ignoraba que Pauli había encontrado esas matrices y que suponía que Pauli igualmente ignoraba que él también las había inventado.

En esta representación es la matriz $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ la que es diagonal y toma la forma

$$\gamma^5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & -I_{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad (6.142)$$

Veremos más adelante que en la teoría de Dirac hay una simetría muy importante que se conoce como simetría quiral y para estudiarla esta representación es la más adecuada.

Puede comprobarse fácilmente que la matriz S que pasa de una representación a la otra es

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & -I \\ I & I \end{pmatrix}, \quad \gamma_{\text{Dirac}}^\mu = S^{-1} \gamma_{\text{quiral}}^\mu S \quad (6.143)$$

Daremos finalmente una representación que permite escribir a la ecuación de Dirac como una ecuación real, llamada representación de Majorana en referencia al físico italiano Ettore Majorana¹¹ que las utilizó en su trabajo relacionado con los neutrinos,

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma^2 \\ \sigma^2 & 0 \end{pmatrix}, & \gamma^1 &= \begin{pmatrix} i\sigma^3 & 0 \\ 0 & i\sigma^3 \end{pmatrix}, & \gamma^2 &= \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^2 \\ \sigma^2 & 0 \end{pmatrix} \\ \gamma^3 &= \begin{pmatrix} -i\sigma^1 & 0 \\ 0 & i\sigma^1 \end{pmatrix}, & \gamma_5 &= \gamma^5 = \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 \\ 0 & -\sigma^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.144)$$

En esta representación las soluciones de la ecuación de Dirac son combinaciones lineales de soluciones reales.

$$S = S^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & \sigma^2 \\ \sigma^2 & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma_{\text{Majorana}}^\mu = S \gamma_{\text{Dirac}}^\mu S^{-1} \quad (6.145)$$

Esta representación es la más adecuada para estudiar ecuaciones relativistas para los neutrinos, que son fermiones de carga eléctrica nula y que no solo tienen un rol muy importante en la física de partículas sino muy recientemente en problemas de la materia condensada como los de los “aisladores y superconductores topológicos”.

6.7. Invarianza relativista

Si tomamos la ecuación de Dirac (6.102)

¹¹Ettore Majorana (1906-1938(?)), “Teoria simmetrica dellelectrone e del positrone”, Il Nuovo Cimento, 14 (1937) 171.

$$i\hbar\gamma^\mu\frac{\partial\psi}{\partial x^\mu} - mc\psi = 0 \quad (6.146)$$

y utilizamos (??), podemos escribir

$$(-i\hbar)\gamma^\mu\Lambda_\mu^\nu\frac{\partial\psi}{\partial x^\nu} + mc\psi = 0 \quad (6.147)$$

Buscamos que la ecuación de Dirac sea covariante, es decir, que tome la misma forma en las variables primadas x'_μ que en las originales x_μ . Para ello definiremos un nuevo conjunto de matrices

$$\tilde{\gamma}^\mu = \Lambda^\mu_\nu\gamma^\nu \quad (6.148)$$

Es fácil ver que, dadas las condiciones que cumple a'_μ , las $\tilde{\gamma}^\mu$ satisfacen todas las condiciones de las matrices de Dirac, de manera que podemos tomarlas como un nuevo conjunto de matrices de Dirac y escribir

$$(-i\hbar)\tilde{\gamma}^\mu\frac{\partial\psi}{\partial x'^\mu} + mc\psi = 0 \quad (6.149)$$

Ahora bien, por el teorema fundamental de Pauli sabemos que si $\{\gamma^\mu\}$ y $\{\tilde{\gamma}^\mu\}$ son dos conjuntos aceptables de matrices de Dirac, debe existir S tal que

$$\tilde{\gamma}^\mu = S^{-1}\gamma^\mu S \quad (6.150)$$

Notemos que de las ecs. (6.150) y (6.150) resulta

$$S^{-1}\gamma^\mu S = \Lambda^\mu_\nu\gamma^\nu \quad (6.151)$$

Podemos reescribir (6.149) en la forma

$$(-i\hbar)S^{-1}\gamma^\mu S\frac{\partial\psi}{\partial x'^\mu} + mc\psi = 0 \quad (6.152)$$

o

$$(-i\hbar)\gamma^\mu\frac{\partial S\psi}{\partial x'^\mu} + mcS\psi = 0 \quad (6.153)$$

Basta que identifiquemos $S\psi$ con la función de onda transformada ψ' para que podamos escribir

$$(-i\hbar)\gamma^\mu\frac{\partial\psi'}{\partial x'^\mu} + mc\psi' = 0 \quad (6.154)$$

O sea que hemos mostrado que la ecuación de Dirac es covariante (y de hecho invariante) frente a las transformaciones de Lorentz (6.354) si la función de onda cambia según

$$\psi'(x') = S\psi(x) \quad (6.155)$$

Es importante notar que las γ^μ que aparecen en la ecuación de Dirac son las mismas en ambos sistemas inerciales.

De hecho, por más que el índice μ puede inducir a pensar que γ^μ es un cuadrivector cuyas componentes son matrices de 4×4 , hacerlo sería incorrecto. En efecto, si lo fuera, debería transformarse como tal al pasar de un sistema de referencia al otro, pero este no es el caso. Veremos luego, al considerar cómo transforma la corriente j_μ frente a transformaciones de Lorentz cuál es la ley de transformación general de cuadrivectores.

En resumen, en la ec. (6.154) solo aparecen transformadas de Lorentz las coordenadas del espacio-tiempo y la función de ondas. Las matrices de Dirac son un conjunto de matrices que permanecen inalteradas.

Tenemos ahora que comprobar que esta interpretación, según la cual la función de onda en el sistema primado está dada por (6.155), es consistente. En particular, tenemos que comprobar que $|\psi'|^2$ tiene una interpretación de densidad de probabilidad, en el sistema primado, análoga a la de $\rho = |\psi|^2$ en el sistema sin primar. Para ello, vamos a derivar nuevas propiedades de S .

Recordemos que escribimos (ec. (6.152))

$$\tilde{\gamma}^\mu = S^{-1}\gamma^\mu S \quad (6.156)$$

Como las matrices de Dirac se relacionan con sus adjuntas según

$$\gamma^\mu = \gamma^0\gamma^{\mu\dagger}\gamma^0 \quad (6.157)$$

se tiene

$$\tilde{\gamma}^\lambda = \Lambda^\lambda_\mu \gamma^\mu = \Lambda^\lambda_\mu \gamma^0\gamma^{\mu\dagger}\gamma^0 = \gamma^0 (\Lambda^\lambda_\mu \gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 (S^{-1}\gamma^\lambda S)^\dagger \gamma^0 \quad (6.158)$$

De aquí, reemplazando $\gamma^{\lambda\dagger}$ a partir de la relación (6.157)

$$\Lambda^\lambda_\mu \gamma^\mu = \gamma^0 S^\dagger \gamma^{\lambda\dagger} (S^{-1})^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \gamma^\lambda \gamma^0 (S^{-1})^\dagger \gamma^0 \quad (6.159)$$

Pero el lado izquierdo es de hecho $S^{-1}\gamma^\mu S$ mientras que el derecho puede ordenarse de manera que la ecuación (6.159) se escriba:

$$S^{-1}\gamma^\lambda S = (\gamma^0 S^\dagger \gamma^0) \gamma^\lambda (\gamma^0 S^\dagger \gamma^0)^{-1} \quad (6.160)$$

Multiplicando ambos miembros a izquierda por S

$$\gamma^\lambda S = S (\gamma^0 S^\dagger \gamma^0) \gamma^\lambda (\gamma^0 S^\dagger \gamma^0)^{-1} \quad (6.161)$$

y a derecha por $(\gamma^0 S^\dagger \gamma^0)$ se tiene

$$\gamma^\lambda (S \gamma^0 S^\dagger \gamma^0) = (S \gamma^0 S^\dagger \gamma^0) \gamma^\lambda \quad (6.162)$$

Pero para que el producto entre paréntesis conmute con todas las matrices γ^λ , debe ser un múltiplo de la identidad

$$S \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = bI \quad (6.163)$$

o

$$S \gamma^0 S^\dagger = b \gamma^0 \quad (6.164)$$

Tomando el adjunto en esta ecuación,

$$S \gamma^0 S^\dagger = b^* \gamma^0 \quad (6.165)$$

de donde resulta que $b = b^*$. Calculamos ahora el determinante en la igualdad (6.164),

$$\det S^2 = b^4 \quad (6.166)$$

de manera que si elegimos que $\det S = 1$, se tendrá $b^4 = 1$ por lo que $b = \pm 1$. Ahora, escribamos la serie de igualdades

$$S^\dagger S = S^\dagger \gamma^0 \gamma^0 S = b \gamma^0 S^{-1} \gamma^0 S = b \gamma^0 \Lambda_\nu^0 \gamma^\nu = b \Lambda_0^0 I - \sum_{k=1}^3 b \Lambda_k^0 \gamma^0 \gamma^k \quad (6.167)$$

Si tomamos traza en ambos miembros de esta igualdad y usamos que $\text{tr } \gamma^0 \gamma^k = 0$ llegamos a que

$$\text{tr } S^\dagger S = 4b \Lambda_0^0 \quad (6.168)$$

Como el lado izquierdo es definido positivo, tenemos finalmente

$$4b \Lambda_0^0 > 0 \quad (6.169)$$

Luego $b = +1$ corresponde a $a_0^0 > 0$, una transformación de Lorentz ortócrona¹² mientras que $b = -1$ corresponde a $a_0^0 < 0$, una inversión temporal.

En cuanto a las propiedades de transformación de ψ' , tenemos

$$\psi' = S\psi \implies (\psi')^\dagger = \psi^\dagger S^\dagger \quad (6.170)$$

¹²ortócrona: que preserve el sentido del tiempo.

Multiplicando a derecha por γ^0 y recordando la definición $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ se tiene

$$\psi'^\dagger = \psi^\dagger S^\dagger \gamma^0 = \psi \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = b \bar{\psi} S^{-1} \quad (6.171)$$

Dado el cuadrivector corriente

$$\frac{1}{c} J^\mu = \bar{\psi}^\mu \psi \quad (6.172)$$

su transformado de Lorentz se escribirá

$$\frac{1}{c} J'^\mu = \bar{\psi}'^\mu \psi' = b \bar{\psi} S^{-1} \gamma^\mu S \psi = b \bar{\psi} \Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu \psi = \frac{b}{c} \Lambda^\mu{}_\nu J^\nu \quad (6.173)$$

Luego, basta elegir $b = +1$ para que J^μ transforme como un cuadrivector ante transformaciones de Lorentz, lo que da la transformación adecuada para $\rho = |\psi|^2$ que puede entonces ser interpretada como densidad de probabilidad.

6.8. El grupo de Lorentz

Cada matriz Λ es real y de 4×4 , de manera que se corresponde con un punto de \mathbb{R}^{16} . Sin embargo no todas sus componentes son independientes; éstas yacen sobre una hipersuperficie determinada por las 10 ecuaciones algebraicas que se obtienen de (6.37), de manera que quedan sólo seis parámetros reales libres. Esta hipersuperficie es la variedad del grupo¹³. En este caso, además, esta variedad resulta diferenciable por lo que el grupo es un grupo de Lie. Un grupo se dice conexo si para cualquiera de sus elementos, existe una curva sobre la variedad del grupo que lo conecta con continuidad con la identidad Λ_I . Mostremos que el grupo de Lorentz es no conexo y está formado por cuatro hojas no conectadas.

De (6.37) se obtiene que

$$\det \Lambda = \pm 1. \quad (6.174)$$

Si $\det \Lambda = +1$ (-1) la transformación Λ se dice propia (impropia). Además, de (6.37) surge que

$$g_{\rho\nu} \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda^\nu{}_\sigma = g_{\mu\sigma} \quad (6.175)$$

y por lo tanto

$$(\Lambda^0{}_0)^2 - \Lambda^i{}_0 \Lambda^i{}_0 = 1, \quad (6.176)$$

y en consecuencia, $(\Lambda^0{}_0)^2 \geq 1$, y las transformaciones son llamadas ortócronas si $\Lambda^0{}_0 \geq 1$, o bien no ortócronas para $\Lambda^0{}_0 \leq -1$. Tampoco aquí es posible pasar de unas a otras mediante la variación de un parámetro continuo. Dado que la identidad está

¹³En general, todo grupo continuo de n parámetros (reales) tiene sus elementos identificados de manera biunívoca con los puntos de una variedad n -dimensional, inmersa en \mathbb{R}^m (con $m \geq n$) y determinada por un conjunto de $m - n$ ecuaciones algebraicas.

sólo en la hoja con $\det \Lambda = +1$ y $\Lambda^0_0 \geq 0$ sólo ésta es un subgrupo, llamado subgrupo propio ortócrono, y denotado \mathcal{L}_+^\uparrow (o $\text{SO}^+(1,3)$ para los matemáticos). Este subgrupo, sin embargo, no es simplemente conexo, ya que por ejemplo, contiene las rotaciones que forman al grupo $\text{SO}(3)$ que no lo es. Su grupo de cubrimiento universal¹⁴, el grupo de espín indefinido $\text{Spin}(1,3)$, es isomorfo tanto al grupo lineal especial $\text{SL}(2, \mathbb{C})$ (matrices complejas de 2×2 de determinante 1) como al grupo simpléctico $\text{Sp}(2, \mathbb{C})$. Estos isomorfismos permiten que el grupo de Lorentz actúe sobre un gran número de estructuras matemáticas distintas, en particular los espinores.

6.9. Generadores y álgebra del grupo \mathcal{L}_+^\uparrow

Centrémonos en el grupo de Lorentz propio ortócrono. Otros elementos del grupo de Lorentz se pueden obtener multiplicando a los de aquel por Λ_T , Λ_P y $\Lambda_T \Lambda_P$. Mostremos que todo elemento del grupo Λ continuamente conectado a la identidad puede escribirse como

$$\Lambda = e^{i\omega_i K_i + i\theta_i L_i}, \quad (i = 1, 2, 3) \quad (6.177)$$

donde ω_i y θ_i son parámetros reales y K_i y L_i son matrices de 4×4 . En general todos los grupos de Lie pueden parametrizarse de esa forma, y los operadores K_i y L_i se denominan generadores del grupo. Para esto consideremos una transformación de Lorentz infinitesimal, es decir, cercanas a la identidad.

$$\Lambda = \Lambda_I + \varepsilon \Omega + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (6.178)$$

donde Ω es una matriz con elementos reales y ε es pequeño. Si insertamos esta expresión en la condición de definición (6.37), obtenemos

$$g + \varepsilon \Omega^T g + \varepsilon g \Omega + \mathcal{O}(\varepsilon^2) = g, \quad (6.179)$$

o bien

$$(g\Omega)^T = -g\Omega \quad (6.180)$$

Es decir, $g\Omega$ resulta una matriz antisimétrica. Sólo debemos entonces elegir una base de matrices antisimétricas de 4×4 para descomponer $g\Omega$, y multiplicar por g^{-1} la

¹⁴Un mismo álgebra de Lie puede generar grupos con diferentes variedades, y que a su vez posean topologías distintas. Cuando un álgebra de Lie genera varios grupos, aquel cuya variedad es simplemente conexa se denomina grupo de cubrimiento universal: $\text{SU}(2)$ es el grupo de cubrimiento universal de $\text{SO}(3)$. El grupo de cubrimiento universal es en general más grande, y es homeomorfo al grupo (varios elementos. a uno)

base para obtener la descomposición de Ω . Una elección conveniente y simple es el conjunto

$$\begin{aligned}
 L_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & L_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & L_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 K_1 &= \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & K_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & K_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{6.181}$$

que al multiplicarlas por g resultan antisimétricas. Luego, la matriz Ω puede escribirse como

$$\Omega = i \sum_{i=1,2,3} (\omega_i K_i + \theta_i L_i), \tag{6.182}$$

con ω_i y θ_i parámetros reales y ε pequeño. Las transformaciones finitas pueden obtenerse tomando el límite $n \rightarrow \infty$ de un producto de n transformaciones infinitesimales, con $\varepsilon \sim 1/n$:

$$\Lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(I + \frac{\Omega}{n} \right)^n = e^{i\omega_i K_i + i\theta_i L_i}. \tag{6.183}$$

Por ejemplo, la rotación (6.47) puede expresarse como

$$\Lambda_R(\theta) = e^{i\theta L_3} \tag{6.184}$$

mientras que el boost resulta

$$\Lambda_B(\omega) = e^{i\omega K_1}. \tag{6.185}$$

Las seis matrices (6.181) satisfacen las relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned}
 [L_i, L_j] &= i\epsilon^{ijk} L_k \\
 [L_i, K_j] &= i\epsilon^{ijk} K_k \\
 [K_i, K_j] &= -i\epsilon^{ijk} L_k
 \end{aligned} \tag{6.186}$$

lo que se denomina el álgebra de Lie del grupo, L_i y K_i son los generadores del grupo, y las constantes ϵ^{ijk} las constantes de estructura. Conocer estas constantes (que obtuvimos analizando transformaciones próximas a la identidad) implica que conocemos la ley de composición de todo el grupo, ya que dados dos elementos del grupo $g_1 = e^A$ y $g_2 = e^B$, su producto se obtiene aplicando la fórmula de Hausdorff,

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\dots}. \tag{6.187}$$

El álgebra y las constantes de estructura garantizan que el lado derecho se puede escribir como e^C con C una combinación lineal de elementos del álgebra.

Dado que la transformación queda caracterizada por 6 parámetros, y que tenemos 6 generadores, resulta conveniente escribirla en la forma siguiente:

$$\Lambda = e^{\frac{i}{2}\omega_{\alpha\beta}M^{\alpha\beta}} \quad (6.188)$$

donde

$$\omega_{0i} = \omega_i, \quad \omega_{ij} = \epsilon_{ijk}\theta_k, \quad \omega_{\alpha\beta} = -\omega_{\beta\alpha} \quad (6.189)$$

contiene a los 6 parámetros, y

$$M_{0i} = K_i, \quad M_{ij} = \epsilon_{ijk}L_k, \quad M^{\alpha\beta} = -M^{\beta\alpha} \quad (6.190)$$

a los generadores. Nótese que cada una de las $M^{\alpha\beta}$ es una matriz de 4×4 . En términos de éstas el álgebra (6.186) se escribe

$$[M^{\alpha\beta}, M^{\mu\nu}] = -ig^{\beta\mu}M^{\alpha\nu} + ig^{\alpha\mu}M^{\beta\nu} + ig^{\beta\nu}M^{\alpha\mu} - ig^{\alpha\nu}M^{\beta\mu}. \quad (6.191)$$

Por definición, los generadores en cualquier otra representación deben satisfacer estas mismas relaciones. Por ejemplo, otra representación del grupo de Lorentz viene dada por los operadores diferenciales

$$L_{\mu\nu} = i(x_\mu\partial_\nu - x_\nu\partial_\mu), \quad (6.192)$$

que es una representación de dimensión infinita. Cada generador actúa sobre funciones en vez de sobre un espacio vectorial de dimensión finita. Estos son los generadores clásicos del momento angular generalizados para incluir el tiempo. Se puede comprobar que $L_{\mu\nu}$ satisface las relaciones de conmutación del álgebra, eq. (6.191).

Para encontrar las representaciones matriciales irreducibles de \mathcal{L}_+^\dagger (en realidad de su grupo de cubrimiento universal) es conveniente considerar las combinaciones lineales *complejas* de los generadores

$$J_k^\pm = \frac{1}{2}(L_k \pm iK_k), \quad (6.193)$$

cuyos conmutadores se reducen a

$$[J_i^\pm, J_j^\pm] = i\epsilon_{ijk}J_k^\pm, \quad [J_i^+, J_j^-] = 0. \quad (6.194)$$

Esto corresponde a dos subálgebras de $SU(2)$ que conmutan entre sí, caracterizadas cada una de ellas por un entero o semientero j^\pm , y enntonces las representaciones matriciales irreducibles de \mathcal{L}_+^\dagger están caracterizadas por un par de enteros o semienteros (j_+, j_-) , siendo su dimensión $(2j_+ + 1)(2j_- + 1)$. Las transformaciones están

entonces representadas por matrices $D^{(j_+, j_-)}$. Una cantidad que transforma según $D^{(0,0)}$ se llama escalar de Lorentz. Una que transforma según $D^{(\frac{1}{2}, 0)}$ corresponde a un espinor de dos componentes (que se conoce como espinor de Weyl) de polarización izquierda ψ_L y uno que transforma según $D^{(0, \frac{1}{2})}$ corresponde a un espinor de Weyl de polarización derecha ψ_R). Estos espinores de dos componentes son los que usamos en la teoría de Pauli de dos componentes para representar a la función de onda en el caso no relativista cuando se incluyó el spin. Los objetos de 4 componentes que aparecen en la ecuación de Dirac son, por construcción, objetos que corresponden a la suma directa $(\frac{1}{2}, 0) \oplus (0, \frac{1}{2})$. El espinor resultante es un espinor de 4 componentes o espinor de Dirac,

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix}. \quad (6.195)$$

La representación $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ es una representación vectorial. Un objeto que transforma según ella es entonces lo que conocemos como cuadrivector.

Es importante notar que los boosts del grupo de Lorentz en una dimension espacial y la temporal están parametrizados por $\omega = v/c$ y por lo tanto la transformación es homeomorfa a un espacio topológico en un intervalo abierto de \mathbf{R} que es no-compacto en la topología generada por la métrica (esto contrasta con las rotaciones en el plano como ejemplo de un grupo compacto: están parametrizadas por un ángulo $0 \leq \theta \leq 2\pi$ en el que el 0 es identificado *con* 2π).

6.10. El carácter de ψ

Hemos escrito a la ecuación de Dirac para una partícula libre de masa m de manera explícitamente covariante en la forma

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi = 0, \quad (6.196)$$

donde las matrices γ^μ son cuatro matrices de 4×4 que satisfacen lo que los matemáticos llaman un álgebra de Clifford¹⁵

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}I_N. \quad (6.197)$$

Vimos que la representación más pequeña posible para que la ecuación de Dirac para una partícula libre de masa m cumpla la relación relativista entre energía e impulso es la que corresponde a matrices γ^μ de 4×4 . Si la adoptamos, ψ será necesariamente

¹⁵El matemático y filósofo inglés William K. Clifford fue quien introdujo este álgebra cuadrática multilineal en la década de 1870.

un objeto de cuatro componentes, un espinor de 4 componentes¹⁶

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \\ \psi^3 \\ \psi^4 \end{pmatrix} = [\psi^\alpha(x)]. \quad (6.198)$$

Dada una transformación de Lorentz para las coordenadas del espacio tiempo que anotamos como

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu, \quad (6.199)$$

mostramos en la clase anterior que la ley de transformación de de la función de onda ψ (el espinor ψ) debía estar dada por

$$\psi'^\alpha(x') = S^{\alpha\beta} \psi^\beta(x), \quad (6.200)$$

o, de manera compacta

$$\psi'(x') = S\psi(x). \quad (6.201)$$

Aquí $S^{\alpha\beta}$ representa una matriz de 4×4 que queda determinada a través de la relación que resulta de combinar las ecs. (6.150) y (6.150),

$$\Lambda^\lambda_\mu (\gamma^\mu)_{\alpha\beta} = (S^{-1})_{\alpha\rho} (\gamma^\lambda)_{\rho\sigma} (S)_{\sigma\beta}, \quad (6.202)$$

o, nuevamente en forma compacta

$$\Lambda^\lambda_\mu \gamma^\mu = S^{-1} \gamma^\lambda S \quad (6.203)$$

Pretendemos ahora responder a la pregunta: ¿Cuál es el carácter de ψ ? O, en otras palabras, ¿cómo se define de manera precisa al objeto que llamamos espinor? La ley de transformación frente al grupo de Lorentz, $\psi'(x') = S\psi(x)$, nos muestra que no es un escalar puesto que de serlo no se transformaría frente a transformaciones de Lorentz. Tampoco es un cuadvivector como x^μ o la corriente de probabilidad J^μ que se transforman según la relación $V'^\mu = \Lambda^\mu_\nu V^\nu$.¹⁷ En lo que sigue determinaremos S explícitamente para poder responder a la pregunta del párrafo anterior.

Consideremos una transformación de Lorentz infinitesimal tal que $a_0^0 > 0$ de manera que se preserve el sentido del tiempo

$$x'^\mu = x^\mu + \epsilon \omega^\mu_\nu x^\nu = (\delta^\mu_\nu + \epsilon \omega^\mu_\nu) x^\nu, \quad (6.204)$$

¹⁶Formalmente, un espinor es un elemento d'un espacio de representación para el "grupo espinorial". En el contexto de la mecánica cuántica relativista, los espinores son elementos de un espacio vectorial complejo asociado al espacio de Minkowski. Los espinores fueron introducidos en la matemática por Elie Cartan en 1913 y originalmente utilizados en la física por Pauli, en 1920.

¹⁷Como ya indicamos, el índice α , con $\alpha = 1, \dots, 4$, de (ψ^α) nada tiene que ver con los índices de Lorentz de espacio-tiempo).

donde ϵ es un parámetro infinitesimal asociado a la transformación. En cuanto a $\omega^\mu{}_\nu$, quedará determinada según el tipo de transformación que represente $\Lambda^\mu{}_\nu$ (inversiones, rotaciones, boosts).

Para comenzar, las condiciones que debe satisfacer $\Lambda^\mu{}_\nu$, (6,36),

$$g_{\mu\nu}\Lambda^\mu{}_\rho\Lambda^\nu{}_\sigma = g_{\rho\sigma}, \quad (6.205)$$

imponen la siguiente relación a orden ϵ , cuando se escribe $\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \epsilon\omega^\mu{}_\nu$,

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \epsilon\omega^\mu{}_\nu \Rightarrow \omega^{\mu\nu} = -\omega^{\nu\mu} \quad (6.206)$$

Para la matriz S que transforma a ψ cuando x^μ se transforma como en (6.204) escribimos también a orden ϵ ,

$$S = I + \epsilon T \quad (6.207)$$

Se trata ahora de determinar T para luego escribir, como hacemos siempre en el caso finito, $S = \exp(\epsilon T)$. Utilizando la relación (6.203),

$$\Lambda^\lambda{}_\mu\gamma^\mu = S^{-1}\gamma^\lambda S, \quad (6.208)$$

se tiene

$$(\delta^\mu{}_\nu + \epsilon\omega^\mu{}_\nu)\gamma^\nu = (I - \epsilon T)\gamma^\mu(I + \epsilon T), \quad (6.209)$$

y al orden ϵ en que trabajamos resulta entonces

$$\omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu = \gamma^\mu T - T\gamma^\mu. \quad (6.210)$$

Esta relación determina T a menos de un múltiplo de la identidad (pues I es la única matriz que conmuta con todas las γ^μ). Podemos entonces imponer que $\text{tr} T = 0$ pues, si su traza diera otro valor, bastaría restar un múltiplo adecuado de la identidad para anularla.

Puede verse entonces que, trabajando a orden ϵ , esto es equivalente a que $\det S = 1$, (recordar el desarrollo de un determinante en terminos de la identidad, la traza, etc.¹⁸)

$$\det S = \det(1 + \epsilon T) = 1 + \epsilon \text{tr} T + \mathcal{O}(\epsilon^2) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (6.211)$$

Usando reiteradamente las propiedades de las γ^μ puede verse que la solución de (6.210) es

$$T = \frac{1}{8}\omega_{\mu\nu}(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu) = -\frac{i}{2}\omega_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu}. \quad (6.212)$$

¹⁸ $\det(1 + \epsilon A) = 1 + \epsilon \text{tr}(A) + \epsilon^2 \frac{1}{2} (\text{tr}^2 A - \text{tr}(A^2)) + \dots$

De este modo, la matriz S se escribe

$$S = e^{-\frac{i}{2}\omega_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu}}, \quad (6.213)$$

con

$$\Sigma^{\mu\nu} \equiv \frac{i}{4} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] \equiv \frac{1}{2} \sigma^{\mu\nu}. \quad (6.214)$$

De manera más general, $\Sigma^{\mu\nu}$ satisface el álgebra del grupo de Lorentz cuando se construye a partir de cualquier conjunto de matrices γ que satisfaga el álgebra de Clifford. Es decir, se puede derivar de $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu}$ que

$$[\Sigma^{\mu\nu}, \Sigma^{\rho\sigma}] = i(g^{\nu\rho}\Sigma^{\mu\sigma} - g^{\mu\rho}\Sigma^{\nu\sigma} - g^{\nu\sigma}\Sigma^{\mu\rho} + g^{\mu\sigma}\Sigma^{\nu\rho}). \quad (6.215)$$

Es importante apreciar que las matrices $\Sigma^{\mu\nu}$ son diferentes de las matrices $M^{\mu\nu}$ correspondientes a los generadores en la representación vectorial. En especial, $\Sigma^{\mu\nu}$ son complejos. Así que hemos encontrado dos representaciones de dimensión 4 no equivalentes. En cada caso, el elemento del grupo está determinado por seis ángulos reales $\omega_{\mu\nu}$ (tres rotaciones y tres boosts). La representación vectorial, o $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ es irreducible y los elementos del grupo que se obtienen por exponenciación son

$$\Lambda_M = \exp(i\omega_{\mu\nu}M^{\mu\nu}), \quad (6.216)$$

mientras que la representación de Dirac, o $(\frac{1}{2}, 0) \oplus (0, \frac{1}{2})$ es reducible y los elementos del grupo se escriben

$$\Lambda_S = \exp(i\theta_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu}). \quad (6.217)$$

Ahora bien, para interpretar el significado de estas cantidades $\Sigma_{\mu\nu}$, representación espinorial de los generadores del grupo, notemos que se trata de un objeto antisimétrico. En especial, sus componentes Σ_{0i} pueden escribirse como

$$\Sigma^{0i} = \frac{i}{4} [\gamma^0, \gamma^i] = \frac{i}{2} \gamma^0 \gamma^i = \frac{i}{2} \beta \alpha^i = -\frac{i}{2} \alpha^i \quad (6.218)$$

(recuérdese que las matrices α^i conmutan con β) lo cual nos indica que las matrices α^i son los generadores de boosts en la representación espinorial. De modo que para un boost genérico tenemos

$$S_B = e^{\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\alpha} / 2} \quad (6.219)$$

donde $\omega_i = \omega_{0i}$. Por otro lado, tomando $i \neq j$, tenemos que

$$\Sigma_{ij} \frac{i}{2} \beta \alpha_i \beta \alpha_j = -\frac{i}{2} \alpha_i \alpha_j \quad (6.220)$$

y entonces, dado que Σ es antisimétrico sólo tres de ellos son no nulos. Definimos

$$\Sigma^i \equiv \frac{1}{2} \epsilon^{ijk} \Sigma^{jk} = \frac{1}{2} \epsilon^{ijk} \frac{i}{4} [\gamma^j, \gamma^k] \quad (6.221)$$

$$= \frac{i}{8} \epsilon^{ijk} [\beta \alpha^j, \beta \alpha^k] = -\frac{i}{8} \epsilon^{ijk} [\alpha^j, \alpha^k] \quad (6.222)$$

Quedan así identificados los $\Sigma_{\mu\nu}$ como los generadores de las transformaciones de Lorentz mientras que los $\omega_{\mu\nu}$ son los parámetros de las diferentes transformaciones (el equivalente a los ángulos de Euler θ_i para las rotaciones: la fórmula análoga (6.212) para el caso de espinores de 2 componentes es $i\theta_i\sigma_i$).

Como ejemplo simple, consideremos una rotación R_{12} alrededor del eje z ,

$$\Lambda_R(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \epsilon & \sin \epsilon & 0 \\ 0 & -\sin \epsilon & \cos \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \approx \mathbf{1}_4 + \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.223)$$

Luego, los únicos $\omega_{\mu\nu}$ no nulos serán en este caso $\omega^{12} = -\omega^{21} = 1$, como era de esperar para una rotación en el plano (x^1, x^2) . Se tiene entonces para T , usando la expresión (6.212)-(6.214) ($T = -\frac{i}{2}\omega^{\mu\nu}\frac{i}{4}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$)

$$T(\Lambda_R) = \frac{1}{2}\gamma^1\gamma^2, \quad (6.224)$$

o, usando la representación de Dirac para las matrices γ^μ ,

$$T(\Lambda_R) = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & \sigma^3 \end{pmatrix} = \frac{i}{2}\Sigma^3. \quad (6.225)$$

Vemos que $T(\Lambda_R)$ es el generador infinitesimal en el caso de rotaciones alrededor del eje z

$$S(R_{12}) \approx 1 + \frac{i\epsilon}{2}\Sigma^3 \quad (6.226)$$

Es importante notar que se trata de una matriz diagonal por bloques de 2×2 y que cada uno de esos bloques coincide con el generador infinitesimal de rotaciones de los espinores de de Pauli 2 componentes alrededor del eje z que estudiamos en el caso de la mecánica cuántica no relativista.

Si la transformación no es la de un ángulo infinitesimalmente pequeño ϵ sino uno finito θ sabemos que se tendrá entonces

$$S(R_{12}) = \exp\left(\frac{i}{2}\theta\Sigma^3\right) \quad (6.227)$$

De tratarse de una rotación general con parámetros θ^i asociados con los tres ejes de coordenadas espaciales podemos escribir

$$S(R) = \exp\left(\frac{i}{2}\theta^i\Sigma^i\right) \quad (6.228)$$

con Σ^i dada por

$$\Sigma^i = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix} \quad (6.229)$$

Si se tratara de una transformación de Lorentz L_{01} (boost) a lo largo del eje x_1 espacial, tendríamos $\lambda^{01} = -\lambda^{10} = 1$ y los demás λ nulos. En este caso se tiene

$$T(L_{01}) = \frac{1}{2}\gamma^0\gamma^1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^1 \\ -\sigma^1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^1 \\ -\sigma^1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\alpha^1 \quad (6.230)$$

que podría haberse obtenido mas simplemente a partir de la definición $\gamma^i = \gamma^0\alpha^i$ y que $(\gamma^0)^2 = 1$. Con esto

$$S(\Lambda_B) \approx 1 + \frac{\epsilon}{2}\alpha^1 \quad (6.231)$$

Para un boost finito con parámetro $\omega = V/c$ se tendrá, desarrollando en serie de potencias el exponencial resultante y usando que $(\alpha^1)^2 = I$

$$S(L_{01}) = \exp\left(\frac{\omega}{2}\alpha^1\right) = \cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) + \alpha^1 \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) \quad (6.232)$$

y análogamente en las otras direcciones. Notemos que estas transformaciones están representadas de manera no-unitaria ya que, siendo las matrices α_i hermíticas, se tiene que $S(L_{01}) = S^\dagger(L_{01}) \neq S^{-1}(L_{01})$.

Notemos que la matriz Σ^i , que genera rotaciones espaciales de ψ , tiene en sus dos bloques no triviales a la matriz σ^i asociada con las rotaciones para los espinores de Pauli de dos componentes con que describíamos a una partícula de spin 1/2. Recalquemos entonces que las dos componentes de arriba (las llamaremos ψ^+) y las de abajo (ψ^-), transforman independientemente una de la otra bajo rotaciones en el espacio de tres dimensiones. Lo mismo sucede para las transformaciones de Lorentz (boosts). Es decir que ψ^+ y ψ^- transforman bajo rotaciones y boosts como los espinores de dos componentes que introdujimos en la mecánica cuántica no-relativista del electrón.

En cuanto a ψ completo, representa un espinor de cuatro componentes que transforma de acuerdo con la representación espinorial del grupo de Lorentz en el espacio-tiempo (pseudo-Euclídeo) de 4 dimensiones. Este espinor se descompone, con respecto al grupo de rotaciones en el espacio de 3 dimensiones en dos partes irreducibles que son espinores en el espacio tridimensional. Es decir que en lo que respecta a rotaciones y boosts, la representación sería reducible. Es solo cuando se incluyen reflexiones espaciales (cambio de paridad) que deviene irreducible.

Algunos autores solo llaman espinor a los objetos de 2 componentes que transforman como vimos y reservan el de biespinor para el espinor del grupo de Lorentz

de 4 componentes. Nosotros adoptamos la terminología del libro de Cartan [7], en la que se habla siempre de espinor y se aclara el número de componentes.

Entonces, necesitamos 4 componentes y no solamente dos porque los espinores de dos componentes y su transformado por inversiones espaciales no se transforman de la misma manera bajo transformaciones de Lorentz.

El requerir que una teoría sea invariante bajo reflexiones espaciales implica la necesidad de usar espinores de 4 componentes. En efecto, una inversión lleva un espinor de dos componentes que pertenece a la representación $(\frac{1}{2}, 0)$ a uno que pertenece a la representación $(0, \frac{1}{2})$. Esto puede verse fácilmente recordando que para el caso de una inversión espacial se tiene que $(\Lambda^\lambda{}_\mu)$ son los elementos de una matriz diagonal,

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.233)$$

Luego, usando la relación (6.203)

$$\Lambda^\lambda{}_\mu \gamma^\mu = S^{-1} \gamma^\lambda S \quad (6.234)$$

para el caso $\lambda = 1$ se tiene

$$\Lambda^1{}_\mu \gamma^\mu = \Lambda^1{}_1 \gamma^1 = -\gamma^1 = S^{-1} \gamma^1 S \quad (6.235)$$

Luego se tiene que $S\gamma^1 + \gamma^1 S = 0$. Lo mismo sucede para $\lambda = 2, 3$ mientras que para el caso de $\lambda = 0$ resulta que debe conmutar. Esto implica que se puede tomar a S proporcional a γ^0 . En la representación quiral (que es la que permite caracterizar a las dos primeras componentes frente a las 2 últimas) γ^0 es una matriz con dos bloques en la antidiagonal (cada uno proporcional a la identidad, ver eq. (6,140),

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{1}_2 \\ -\mathbf{1}_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.236)$$

y por eso se cambian las componentes de arriba respecto de las de abajo e inversamente (más adelante esto quedara más claro).

Para el resto de las transformaciones del grupo de Lorentz, ψ^+ y ψ^- transforman separadamente.

De lo anterior pueden deducirse las propiedades de transformación de cantidades bilineales construidas a partir de ψ y $\bar{\psi}$. Por ejemplo, ya vimos que la corriente $J^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$ transforma como un cuadvectores. Para demostrarlo, usamos que

$$\psi \rightarrow \psi' = S\psi \quad (6.237)$$

$$\bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi}S^{-1} \quad (6.238)$$

(Para escribir (6.238) utilizamos en (6.171) el valor $b = 1$ de manera de tener transformaciones ortocronas). A partir de (6.237)-(6.238) es fácil ver que $\bar{\psi}\psi$ transforma como un escalar invariante,

$$\bar{\psi}\psi \rightarrow \bar{\psi}'\psi' = \bar{\psi}\psi \quad (6.239)$$

6.11. La solución de partícula libre

Buscaremos ahora las soluciones de la ecuación de Dirac para una partícula libre de masa m ,

$$i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial\psi}{\partial x^\mu} - mc\psi = 0 \quad (6.240)$$

Es fácil comprobar que esta ecuación tiene soluciones del tipo onda plana, que describen una partícula cuántica relativista de masa m en ausencia de interacción. Estas soluciones, como es esperable, tienen la forma

$$\psi(\mathbf{x}, t) = u \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_\mu x^\mu\right) \quad (6.241)$$

donde u es un espinor con las 4 componentes constantes y p_μ un cuadvivector constante, asociado al operador p_μ .

$$p_\mu = i\hbar\partial_\mu \quad (6.242)$$

El autovalor p_μ debe ajustarse para que (6.241) sea solución de (6.240), o sea que satisfaga la relación relativista $E^2 = \mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4$. Insertando la solución (6.241) propuesta en la ecuación de Dirac se obtiene la ecuación matricial algebraica

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc\mathbf{1}_4)u = 0 \quad (6.243)$$

De ahora en más obviaremos en notación la matriz identidad de 4×4 $\mathbf{1}_4$.

La fórmula (6.243) representa a 4 ecuaciones homogéneas (una para cada componente de u) que tendrán solución no-trivial si se cumple

$$\det(\gamma^\mu p_\mu - mc) = 0 \quad (6.244)$$

Que se cumpla esta condición implica que la inversa “formal”

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)^{-1} \quad (6.245)$$

no puede existir. Para encontrar los puntos singulares reescribamos esta inversa en la forma

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)^{-1} = \frac{1}{(\gamma^\mu p_\mu - mc)} \frac{(\gamma^\nu p_\nu + mc)}{(\gamma^\nu p_\nu + mc)} \quad (6.246)$$

El producto de denominadores puede reacomodarse de una manera simple:

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)(\gamma^\nu p_\nu + mc) = \gamma^\mu \gamma^\nu p_\mu p_\nu - m^2 c^2 = p^\mu p_\mu - m^2 c^2 \quad (6.247)$$

Luego, la inversa puede escribirse como

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)^{-1} = \frac{(\gamma^\nu p_\nu + mc)}{p^\mu p_\mu - m^2 c^2} \quad (6.248)$$

Establezcimos que esta inversa no debe existir o, lo que es equivalente, el determinante (6.244) debe anularse y la ecuación (6.243) tendrá soluciones no triviales si el denominador de (6.248) se anula,

$$p^\mu p_\mu - m^2 c^2 = 0 \quad (6.249)$$

Si escribimos $(p^\mu) = (E/c, \mathbf{p})$, de manera que

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 \quad (6.250)$$

Con esta notación es claro que podemos identificar a las componentes del cuadvectores p_μ con con la energía E y las 3 componentes del impulso \mathbf{p} de manera que la condición (6.250) deviene la relación entre energía E e impulso \mathbf{p} de una partícula libre de masa m , según la forma clásica de la relatividad restringida,

$$E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4 \quad (6.251)$$

Entonces, dado \mathbf{p} , la energía E de la partícula puede tomar los valores

$$E_\pm = \pm E_p = \pm \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4} \quad (6.252)$$

Vemos que la ecuación de Dirac libre tiene soluciones de partícula libre con energía positiva y ¡negativa!. Volvamos a mencionar que en la ecuación de Dirac la masa puede tener cualquier signo puesto que en la fórmula (6.252) aparece al cuadrado.

Resta determinar las soluciones u del sistema homogéneo (6.243). Aquí resulta útil dividir al espinor de cuatro componentes en dos espinores de dos componentes, φ y χ ,

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (6.253)$$

con

$$\varphi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad y \quad \chi = \begin{pmatrix} u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \quad (6.254)$$

y utilizando nuevamente la representación de Dirac de las matrices γ^μ , la ecuación (6.243) se escribe en forma de dos ecuaciones para φ y χ :

$$(E - mc^2)\varphi - c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \chi = 0, \quad (6.255)$$

$$(E + mc^2)\chi - c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \varphi = 0. \quad (6.256)$$

Dado que el determinante de este sistema es cero, sabemos que las cuatro ecuaciones no pueden ser linealmente independientes. Una de ellas tiene que ser una combinación de las tres restantes. Sin embargo, Mostraremos más tarde que estrictamente sólo dos ecuaciones son linealmente independientes, debido a que existe otra cantidad que conmuta con el Hamiltoniano dando lugar a una degeneración. De manera que podemos tomar sólo la ecuación de arriba o sólo la de abajo. Es usual tomar la de arriba para las soluciones de energía positiva y la de abajo para las negativas. De este modo, si tomamos a φ como arbitrario (y complejo), con la normalización

$$\varphi^\dagger \varphi = u_1^* u_1 + u_2^* u_2 = 1, \quad (6.257)$$

y $E = E_+$, χ resulta

$$\chi = \frac{c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E + mc^2} \varphi. \quad (6.258)$$

y entonces la solución es de la forma

$$u_+ = \mathcal{N}_+ \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_+ + mc^2} \varphi \end{pmatrix} \quad (6.259)$$

Para $E = E_-$, la solución que resulta ortogonal a esta es

$$u_- = \mathcal{N}_- \begin{pmatrix} \frac{c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_- - mc^2} \varphi \\ \varphi \end{pmatrix}. \quad (6.260)$$

La normalización se ajusta de manera que

$$\sum_{\alpha=1}^4 |u^\alpha|^2 = 1, \quad (6.261)$$

y resulta

$$|\mathcal{N}_{\pm}|^2 = \left(1 + \frac{c^2 p^2}{(E_p + mc^2)^2}\right)^{-1} \equiv |\mathcal{N}|^2. \quad (6.262)$$

la misma para las dos energías y φ arbitrario, y normalizado.

El límite no relativista ($v/c \rightarrow 0$) corresponde a $|E_{\pm}| \rightarrow mc^2$, y $\mathcal{N} \sim 1$. En este caso las soluciones toman la forma

$$u_+ = \begin{pmatrix} \varphi \\ \mathcal{O}(v/c) \times \varphi \end{pmatrix}, \quad u_- = \begin{pmatrix} \mathcal{O}(v/c) \times \varphi \\ \varphi \end{pmatrix}. \quad (6.263)$$

Suponiendo que las componentes de φ y χ sean de orden 1 (ambos están normalizados a 1), se distingue así a las “grandes componente”, que son las que sobreviven al límite $v/c \rightarrow 0$, de las “pequeñas componentes” que se anulan en este límite. Se observa entonces que en el límite no relativista, la parte no trivial de los espinores de 4 componentes se reduce a espinores de 2 componentes (espinores de Pauli, φ y χ), que corresponden, para el caso de energía positiva, a la solución de la ecuación no relativista de Schrödinger para una partícula libre con spin 1/2:

$$u = e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et)/\hbar} \times \varphi. \quad (6.264)$$

6.12. El spin en Mecánica Cuántica Relativista

Recordemos que a partir de la ecuación de Dirac,

$$i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial x^\mu} - mc\psi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3) \quad (6.265)$$

pudimos identificar el hamiltoniano relativista de una partícula libre de masa m . En efecto, escribiendo la ec. (6.265) en términos de las matrices α^i, β en lugar de las matrices γ^μ según las relaciones

$$\gamma^0 = \beta \quad (6.266)$$

$$\gamma^i = \beta\alpha^i \quad (6.267)$$

se tiene

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\hbar)\boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2) \psi \equiv H\psi \quad (6.268)$$

Escrita de esta manera señalamos anteriormente una evidente analogía de esta ecuación con la ecuación de Schrödinger no-relativista si identificamos al hamiltoniano en la forma H ,

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\hbar)\boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2 \quad (6.269)$$

Esta identificación es consistente con el hecho de que el lado izquierdo de la ec. (6.268) puede ser asociado a una traslación temporal infinitesimal de la función de onda con lo que el operador H del lado derecho cumple el rol de generador de dicha traslación.

Es fácil ver que H según la definición (6.269) no conmuta con el operador $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, asociado al momento angular orbital según las reglas de cuantificación canónica que aceptamos en la mecánica cuántica no-relativista y que hasta aquí consideramos que son consistentes en el caso relativista. En efecto, si reescribimos (6.269) usando que $(-i\hbar)\boldsymbol{\nabla} = \mathbf{p}$ se tiene

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 \quad (6.270)$$

y se encuentra fácilmente, por ejemplo para $L_x = zp_y - yp_z$

$$[L_x, H] = i\hbar c (\alpha_y p_z - \alpha_z p_y), \quad (6.271)$$

y, en general,

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\mathbf{L}, H] = c\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}. \quad (6.272)$$

Es decir que \mathbf{L} no se conserva, no está asociado a una constante de movimiento: ¡De aquí se podría inferir la ausencia de invarianza bajo rotaciones, y esto aún en el caso de la partícula libre!¹⁹

Por otro lado, en el caso de la partícula libre encontramos 4 soluciones linealmente independientes, dos de energía positiva y dos de energía negativa y que, en lo que respecta a rotaciones, ambos estaban relacionados con los espinores de Pauli que representan a las funciones de onda para partículas de spin 1/2, con las dos componentes distinguiendo a las soluciones con igual energía según el signo de la proyección a lo largo del eje z .

Lo anterior sugiere que debe existir algún otro operador, ligado al spin, tal que sus autovalores distingan a estas soluciones con la misma energía. Ese operador sumado al del momento orbital \mathbf{L} debería conmutar con el hamiltoniano. Es decir que con la experiencia adquirida con

la teoría de Pauli para el electrón no relativista es natural adelantar tal operador debe estar asociado con un operador momento angular total \mathbf{J} , al que deben contribuir el momento angular orbital y el spin. En analogía con el caso no relativista, en que se tiene $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$, es natural definir en el caso relativista

¹⁹Nótese que la cantidad $c\boldsymbol{\alpha}$ jugaba el rol de “velocidad” en la interpretación clásica de la corriente de probabilidad de Dirac. Si la fórmula (6.272) fuera clásica, como los vectores velocidad e impulso son paralelos resultaría que $d\mathbf{L}/dt = 0$.

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma} \quad (6.273)$$

dado que $\boldsymbol{\Sigma}$, como fue definida en la ec. (6.229) tiene la forma

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad (6.274)$$

y es el operador asociado al subgrupo de rotaciones del grupo de Lorentz que, para el caso de ángulos finitos $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$, vimos que actúa sobre los espinores de 4 componentes en la forma

$$\psi \rightarrow \psi^{R(\boldsymbol{\theta}^i)} = \exp\left(i \frac{\boldsymbol{\theta}^i}{2} \boldsymbol{\Sigma}^i\right) \psi \quad (6.275)$$

Hemos propuesto entonces a $\vec{\boldsymbol{\Sigma}}$, que implementa las rotaciones espaciales sobre los espinores, como el operador asociado al spin de la partícula de masa m . No es casual que cada bloque de $\boldsymbol{\Sigma}$ corresponda al operador de spin de la teoría de Pauli.

Calculemos el siguiente conmutador en la representación de Dirac en la que la matriz β es diagonal,

$$\frac{\hbar}{2} [\Sigma_x, H] = \frac{\hbar}{2} [\Sigma_x, (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2)] = \frac{\hbar}{2} [\Sigma_x, c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] \quad (6.276)$$

$$\frac{\hbar}{2} [\Sigma_x, H] = c \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \end{pmatrix} \right] \quad (6.277)$$

Luego de un poco de álgebra, se obtiene

$$\frac{\hbar}{2} [\Sigma_x, H] = -i\hbar c (\alpha_y p_z - \alpha_z p_y) \quad (6.278)$$

que cancela exactamente la contribución del lado derecho de (6.271)

$$[L_x, H] = i\hbar c (\alpha_y p_z - \alpha_z p_y) \quad (6.279)$$

de manera que resulta

$$[\mathbf{J}, H] = \left[\mathbf{L} + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma}, H \right] = 0 \quad (6.280)$$

(por supuesto este resultado vale para cualquier representación de las matrices de Dirac).

Vemos entonces del resultado de la ec. (6.280), para el caso del hamiltoniano de una partícula libre, que \mathbf{J} está asociado con una constante de movimiento del sistema y es por ello natural relacionarlo con un operador de momento angular total.

Contiene al momento angular orbital \mathbf{L} y, en cuanto a Σ , basta asociarlo al spin de la partícula libre de masa m que aparece en la ecuación de Dirac para que todo sea consistente.

Los autovalores de Σ son $\pm 1/2$ (como lo son los de σ por lo que podemos interpretar a las soluciones de la ecuación de Dirac como soluciones con spin $1/2$). Nótese que el hecho de que la ecuación de Dirac describa partículas de spin $1/2$ es una consecuencia de la estructura de la ecuación relativista y no una imposición como la que hizo Pauli en el caso de la teoría no-relativista.

Vimos que en el límite no relativista las soluciones con energía positiva coincidían con las de la teoría de Pauli para proyección del spin $\pm 1/2$. Lo mismo sucede con las de energía negativa. En el caso límite de una partícula en reposo en que las cuatro autofunciones lo son también de Σ_z , podemos afirmar que estas cuatro soluciones linealmente independientes corresponden a energía positiva y spin $\pm 1/2$ y energía negativa y spin $\pm 1/2$. (ver más adelante la discusión sobre helicidad).

6.13. Helicidad

Vimos que el spin de las partículas relativistas no se conserva separadamente del momento angular orbital, en particular Σ_z no lo hace aún en el caso más simple de una partícula libre. Por ello, la proyección del spin sobre un eje dado (al que llamaremos z por analogía con la dirección que suele elegirse en la mecánica cuántica no-relativista) no servirá para caracterizar un estado dado. Sin embargo la proyección del spin en la dirección del movimiento sí se conserva, como veremos ahora. Indicaremos a tal dirección a la dirección del movimiento como el vector unitario \mathbf{n} ,

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \quad (6.281)$$

donde \mathbf{p} es el operador vectorial momento y el denominador indica que cuando se aplique a una función de onda, el resultado $(\mathbf{p}\psi)$ debe normalizarse con el autovalor de manera de que \mathbf{n} sea un versor. Partiendo de la proyección de Σ en la dirección de \mathbf{n} se tiene

$$\frac{\hbar}{2}\Sigma \cdot \mathbf{n} = \frac{\hbar}{2}\Sigma \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} = \left(\frac{\hbar}{2}\Sigma + \mathbf{r} \times \mathbf{p} \right) \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \quad (6.282)$$

Luego, la cantidad

$$\Lambda = \frac{\hbar}{2}\Sigma \cdot \mathbf{n} \quad (6.283)$$

llamada helicidad es un operador que, a diferencia de Σ_z , sí conmuta con el hamiltoniano ya que cada componente de \mathbf{J} lo hace y, por lo tanto, se conserva.

Los estados de una partícula con valores de helicidad determinados se llaman estados de helicidad. Físicamente, la helicidad corresponde al spin de la partícula proyectado sobre la dirección del movimiento.

Ahora bien, es fácil probar que $(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n})^2 = 1$. En efecto, este producto escalar puede escribirse como $\boldsymbol{\Sigma}_i \boldsymbol{\Sigma}_j n_i n_j$. Siendo que $n_i n_j$ es simétrico, al producto solo contribuirá la parte simétrica de $\boldsymbol{\Sigma}_i \boldsymbol{\Sigma}_j$. Recordando que para las matrices de Pauli vale que

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} I + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (6.284)$$

y que eso es lo que resulta en los bloques del producto $\boldsymbol{\Sigma}_i \boldsymbol{\Sigma}_j$ el resultado es una matriz cuya diagonal coincide con la de la identidad, $\text{diag}(\boldsymbol{\Sigma}_i \boldsymbol{\Sigma}_j) = \delta_{ij}$. Luego los autovalores de $(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n})^2 = (\delta_{ij} n_i n_j)^2 = 1$ y por lo tanto los autovalores de $\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n}$ son ± 1 y los de Λ son $\pm \hbar/2$.

Como la helicidad conmuta con el hamiltoniano, pueden buscarse autofunciones comunes a ambos operadores. Ya mostramos que las soluciones de partícula libre (6.259),

$$u_+ = \mathcal{N} \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_p + mc^2} \varphi \end{pmatrix}, \quad u_- = \mathcal{N} \begin{pmatrix} \frac{-c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_p + mc^2} \varphi \\ \varphi \end{pmatrix}, \quad (6.285)$$

por ejemplo, pueden ser clasificadas según su energía (positiva o negativa). Mostremos que estas autofunciones lo son también de la helicidad, y que eso determina a φ y su helicidad (positiva o negativa). Si aplicamos el operador helicidad a u_+ obtenemos

$$\Lambda u_+ = \mathcal{N} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \varphi \\ \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E_p + mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \varphi \end{pmatrix} \quad (6.286)$$

de manera que si tomamos al espinor de dos componentes

$$\varphi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad (6.287)$$

como autoestado de $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$,

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \varphi = \epsilon \varphi \quad (6.288)$$

entonces automáticamente las soluciones de partícula libre son autoestados de helicidad, con autovalor $\epsilon \hbar/2$. Para hallarlas, conviene expresar al versor \mathbf{n} en término de variables angulares (φ, θ) , con $0 \leq \varphi < 2\pi$, $0 \leq \theta \leq \pi$,

$$\mathbf{n} = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta) \quad (6.289)$$

con lo que la ec. (6,288) toma la forma

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \exp(-i\varphi) \sin \theta \\ \exp(i\varphi) \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad (6.290)$$

. Los autovalores de esta ecuación se obtienen de la ecuación

$$\det \begin{pmatrix} \cos \theta - \epsilon & \exp(-i\varphi) \sin \theta \\ \exp(i\varphi) \sin \theta & -\cos \theta - \epsilon \end{pmatrix} = 0, \quad (6.291)$$

o,

$$\epsilon^2 - (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) = 0, \quad (6.292)$$

por lo que se tiene

$$\epsilon = \pm 1 \quad (6.293)$$

En cuanto a los autovectores asociados, se encuentra

$$\begin{aligned} \varphi_+ &= \begin{pmatrix} \exp\left(-i\frac{\varphi}{2}\right) \cos \frac{\theta}{2} \\ \exp\left(i\frac{\varphi}{2}\right) \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ \varphi_- &= \begin{pmatrix} -\exp\left(-i\frac{\varphi}{2}\right) \sin \frac{\theta}{2} \\ \exp\left(i\frac{\varphi}{2}\right) \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.294)$$

De este modo hemos clasificado a las cuatro soluciones de partícula libre de la ecuación de Dirac, de acuerdo a su energía (positiva o negativa) y su helicidad, $\pm\hbar/2$. Lo mismo ocurre para u_- .

6.14. Paridad

Un cambio \mathcal{P} de paridad se define a partir de la transformación de coordenadas

$$\mathbf{x} \xrightarrow{\mathcal{P}} -\mathbf{x} \quad (6.295)$$

$$t \xrightarrow{\mathcal{P}} t \quad (6.296)$$

Es decir, \mathcal{P} corresponde a una reflexión espacial. Vimos que esta transformación de las coordenadas espacio-temporales puede representarse como uno de los elementos del grupo de Lorentz cuando actúa sobre el cuadrivector posición

$$a_\mu^\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad x'^\mu = a_\mu^\nu x^\nu \quad (6.297)$$

No se trata de una transformación de las catalogadas como “propias” del grupo de Lorentz pues $\det(a_\mu^\nu) = -1$.

Dada (a_μ^ν) según (6,297), trataremos de asociarla con la matriz S según la cual transforman los espinores utilizando la fórmula (6.203)

$$\Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu = S_P^{-1} \gamma^\mu S_P \quad (6.298)$$

de manera que para \mathcal{P} se tiene, reemplazando en el lado izquierdo el valor explícito de $\Lambda^\mu{}_\nu$ dado por la ec. (6.297),

$$a_\mu^\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.299)$$

las siguientes ecuaciones

$$\gamma^0 = S_P^{-1} \gamma^0 S_P \quad (6.300)$$

$$\gamma^i = -S_P^{-1} \gamma^i S_P \quad (6.301)$$

o

$$S_P \gamma^0 = \gamma^0 S_P \quad (6.302)$$

$$S_P \gamma^i = -\gamma^i S_P \quad (6.303)$$

Es decir que la matriz que representa una transformación de paridad para los espinores debe conmutar con γ^0 y anticonmutar con las γ^i . Basta entonces una relación de proporcionalidad entre S_P y γ^0 para que esto se cumpla, según vimos al estudiar las propiedades de las matrices de Dirac

$$S_P = \eta_P \gamma^0 \quad (6.304)$$

con η_P por ahora una constante arbitraria.

Con esto, resulta que bajo paridad los espinores transforman según

$$\psi'(x') = S_P \psi(x) = \eta_P \gamma^0 \psi(x) \quad (6.305)$$

Dos transformaciones de paridad (6.295) vuelven las coordenadas a su forma original. Sin embargo, para que los espinores vuelvan a su forma original se necesita aplicar cuatro veces el operador de paridad (Greiner lo postula) dejan invariante a deben dejar invariante a la función de onda a menos de un número complejo de módulo 1 ,

$$\psi''(x'') = S_P \psi'(x') = S_P^2 \psi(x) = \eta_P^2 (\gamma^0)^2 \psi(x) = \eta_P^2 \psi(x) \quad (6.306)$$

Por lo que se puede elegir

$$\eta_P = \pm 1, \pm i \quad (6.307)$$

En caso de elegirse $\pm i$ ello correspondería a una fase $\exp(-i\pi)$ indetectable cuando se trata de transformaciones de cantidades medibles, por lo que el valor de η_P sea imaginario o real no tiene interés físico. Lo que importa es que las componentes ψ^+ y ψ^- cambian con signo opuesto (en general, γ^0 , matriz de 4×4 con traza nula, tiene dos autovalores positivos y dos negativos). Por ejemplo, en la representación de Dirac,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (6.308)$$

La discusión anterior implica que en el caso de partícula libre las componentes de energía positiva y negativa cambian con signos opuestos y por lo tanto tienen paridad opuesta. Esto tendrá una interpretación clara más adelante.

6.15. Partículas de masa cero. Quiralidad

Originariamente la ecuación de Dirac para una partícula de masa m y spin $1/2$ se aplicó al estudio de la dinámica cuántica del electrón. Pero también puede aplicarse al estudio de partículas de masa cero y spin $1/2$. Hasta fines de la década de 1990 se pensaba que el neutrino, propuesto por Fermi para mantener la conservación de energía-impulso en la desintegración beta, era una partícula de masa cero y spin $1/2$. De hecho, en el modelo estándar de las 3 interacciones fundamentales (fuerte, electromagnéticas y débiles) se lo introducía via un lagrangiano de Dirac con masa cero.

Hoy sabemos que el neutrino tiene una masa muy pequeña, pero no nula, del orden de los $< 0,120\text{eV}/c^2 = 2,1410^{-37} \text{ kg}$) (Como comparación, la masa del electrón es $511\text{keV}/c^2 = 9,1093829110^{-31} \text{ kg}$). En realidad el valor consignado para la masa de los neutrinos corresponde a un promedio: los estados de los neutrinos están caracterizados por un número cuántico adicional, llamado de "sabor" (flavor). Resulta entonces que hay 3 estados de neutrinos, el asociado al electrón, al muón y al τ . Al propagarse, los neutrinos oscilan cambiando entre estados de diferentes sabores. Lo que se puede medir son diferencias de cuadrados de sus respectivas masas.

Estudiemos ahora la ecuación de Dirac para partículas de masa cero que, hasta 1990, era utilizada para estudiar al neutrino

$$i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial x^\mu} = 0 \quad (6.309)$$

Recordemos que la matriz γ_5 ,

$$\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \quad (6.310)$$

una de las 16 matrices independientes del conjunto de Γ 's, anticonmuta con las 4 matrices de Dirac por lo que, si ψ es una solución de (6.310), entonces $\psi' = \gamma_5 \psi$ también lo es,

$$\gamma_5 i \hbar \gamma^\mu \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial x^\mu} = -i \hbar \gamma^\mu \frac{\partial \gamma_5 \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial x^\mu} = 0 \quad (6.311)$$

Esto no sucede si $m \neq 0$ pues el término de masa que aparece en la ecuación de Dirac multiplicado por la matriz I que conmuta con γ_5 .

A partir de las soluciones ψ y $\gamma_5 \psi$, pueden construirse soluciones que son autofunciones de γ_5 con autovalores ± 1 . En efecto, sean

$$\psi_\pm = \frac{1}{2} (1 \pm \gamma_5) \psi \quad (6.312)$$

que también son soluciones de la ecuación de Dirac. Dado que $\gamma_5^2 = I$, es fácil ver que

$$\gamma_5 \psi_\pm = \pm \psi_\pm \quad (6.313)$$

Si utilizamos la representación quirral para las matrices de Dirac, resulta que γ_5 es diagonal

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (6.314)$$

de donde

$$\frac{1}{2} (1 + \gamma_5) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} (1 - \gamma_5) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \quad (6.315)$$

de manera que se tiene para cada una de las soluciones

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} \chi_+ \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_- \end{pmatrix} \quad (6.316)$$

con χ_\pm espinores de dos componentes. Es decir que para el caso de la ecuación de Dirac con masa cero, podemos trabajar con espinores de dos componentes.

En la representación quirral, en la que se tiene

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{1}_2 \\ -\mathbf{1}_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (6.317)$$

la ecuaciones devienen

$$\begin{pmatrix} (-i \hbar \frac{\partial}{\partial x^0} - i \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla}) \chi_+ = 0, & \text{quiralidad +} \\ (i \hbar \frac{\partial}{\partial x^0} - i \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla}) \chi_- = 0, & \text{quiralidad -} \end{pmatrix} \quad (6.318)$$

En lugar de estudiar estas dos ecuaciones, busquemos directamente una solución de onda plana para el espinor de 4 componentes,

$$\psi = \exp(ip_\mu x^\mu) u \quad (6.319)$$

Encontramos

$$\gamma^\mu p_\mu u = 0 \quad (6.320)$$

o, multiplicando a izquierda por $\gamma^\nu p_\nu$ y usando $\gamma^\mu p_\mu \gamma^\nu p_\nu = p_\mu p^\mu$ se tendrá

$$p^\mu p_\mu u = \left(\frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 \right) u = 0 \quad (6.321)$$

Luego, para que u sea no trivial se requiere

$$E = \pm c|\mathbf{p}| \quad (6.322)$$

Si se multiplica la ecuación de Dirac para energía positiva por $\gamma_5 \gamma^0$ se tiene

$$\gamma_5 \gamma^0 (\gamma^0 p_0 - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p}) \psi_{E_+} = 0 \quad (6.323)$$

o,

$$E_+ \gamma_5 \psi_{E_+} = c \gamma_5 \gamma^0 \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} \psi_{E_+} \quad (6.324)$$

Ahora bien, puede comprobarse que

$$\gamma_5 \gamma^0 \boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\Sigma} \quad (6.325)$$

por lo que

$$\gamma_5 \psi_{E_\pm} = c \boldsymbol{\Sigma} \cdot \frac{\mathbf{p}}{E_\pm} \psi_{E_\pm} = \pm \boldsymbol{\Sigma} \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \psi_{E_\pm} = \pm \Lambda \psi_{E_\pm} \quad (6.326)$$

(En (6.326) hemos incluido también el resultado para el caso de energías negativas). O sea que para partículas de masa nula, helicidad y quiralidad es una misma cosa (a menos de un signo para el caso de energía negativa).

Volvamos a la ecuación de Dirac para espinores de 4 componentes,

$$i\gamma^\mu \partial_\mu \psi = 0 \quad (6.327)$$

o, en forma Hamiltoniana

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = ic \gamma^0 \boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \psi \quad (6.328)$$

Usando la fórmula (6.325)

$$\gamma_5 \gamma^0 \boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\Sigma} \quad (6.329)$$

y que $\gamma_5^2 = 1$ podemos escribir

$$\gamma_0 \boldsymbol{\gamma} = \gamma_5 \boldsymbol{\Sigma} \quad (6.330)$$

con lo que (6.328) deviene

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = ic \gamma_5 \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p} \psi = H \psi \quad (6.331)$$

de manera que el hamiltoniano H tiene la forma

$$H = ic \gamma_5 \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p} = ic \gamma_5 |\mathbf{p}| \Lambda \quad (6.332)$$

Si ahora planteamos el problema estacionario

$$H u = p_0 u \quad (6.333)$$

conviene elegir el eje z en la dirección de \mathbf{p} de manera que solo nos queda Σ_z en H . Se encuentran fácilmente las cuatro soluciones:

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{Energía} + \text{Helicidad} + 1 \quad (6.334)$$

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \text{Energía} + \text{Helicidad} - 1 \quad (6.335)$$

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{Energía- Helicidad} + 1 \quad (6.336)$$

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{Energía- Helicidad} - 1 \quad (6.337)$$

Experimentalmente, considerando que la masa de los neutrinos es tan pequeña, se ha observado que solo existen neutrinos con quiralidad negativa (o lo que es lo mismo, helicidad negativa, ya que los neutrinos observados tienen energía positiva).

Originariamente Weyl propuso estudiarlos usando espinores de dos componentes (llamados desde entonces espinores de Weyl). Pero esta idea era incompatible con la conservación de la paridad (reflexiones espaciales) ya que un cambio de paridad cambia el signo de la helicidad y los espinores de dos componentes correspondían a una única helicidad. Pero en los años 50 se comprobó que los neutrinos intervenían en las interacciones débiles que violan la paridad por lo que esto dejó de ser un problema.

6.16. Masa de Dirac y masa de Majorana

Como vimos, la ecuación de Dirac puede ser derivada de un Lagrangiano escrito en términos de ψ y $\bar{\psi}$, tomadas estas funciones de onda como independientes

$$\mathcal{L}_D = \bar{\psi} \left(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right) \psi \quad (6.338)$$

ya que las ecuaciones de Euler Lagrange para $\bar{\psi}$ no dependen de $\partial_\mu \bar{\psi}$,

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(\frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial x^\mu \bar{\psi}} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial \bar{\psi}} \Rightarrow 0 = \left(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} - mc \right) \psi \quad (6.339)$$

El término de masa que hemos incluido en el Lagrangiano (6.115) tiene la forma

$$\mathcal{L}_m = -m_D c \bar{\psi} \psi \quad (6.340)$$

A este término se lo suele llamar “masa de Dirac” y de ahí que hayamos adoptado la notación m_D .

En la base quiral (o de Weyl), a los espinores de Dirac podemos escribirlos así:

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi_a \\ \chi^{\dot{a}} \end{pmatrix} \quad (6.341)$$

Por convención a estos dos espinores de Weyl de dos componentes se los anota como ξ_a y $\chi^{\dot{a}}$, ($a, \dot{a} = 1, 2$), y se los conoce como espinores “nopunteado” y “punteado” respectivamente. (Algunos autores utilizan el punto sobre el espinor y no sobre el índice del espinor).

$$\psi^\dagger = (\xi_a^*, \chi^{*\dot{a}}), \quad \bar{\psi} = \psi^\dagger \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix} = (-\chi^{*\dot{a}}, -\xi_a^*) \quad (6.342)$$

Puede verse que bajo transformaciones de Lorentz los espinores de dos componentes ξ y χ transforman según

$$\xi_a \rightarrow \xi'_a = M_a^b \xi_b \quad (6.343)$$

$$\chi^{\dot{a}} \rightarrow \chi'^{\dot{a}} = M^{\dot{a}b} \chi_b \quad (6.344)$$

Las matrices de $2 \times 2M$ y M^* , con $\det M = \det M^* = 1$ dan representaciones inequivalentes del grupo $SL(2, \mathbb{C})$ [ver la discusión luego de la fórmula (??)]. De las fórmulas (6,343) se puede inferir que $\xi_{\dot{a}} \sim \xi_a^*$.

Las proyecciones quirales del fermión de Dirac se obtienen según vimos

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm \gamma_5) \psi \quad (6.345)$$

de manera que los espinores ψ_{\mp} pueden escribirse en términos de ξ y χ como

$$\begin{aligned} \psi_+ &= \frac{1}{2} (1 + \gamma_5) \psi = \begin{pmatrix} \xi_a \\ 0 \end{pmatrix}; & \bar{\psi}_+ &= \bar{\psi} \frac{1}{2} (1 + \gamma_5) = (0 \quad -\xi_a^*) \\ \psi_- &= \frac{1}{2} (1 - \gamma_5) \psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi^{\dot{a}} \end{pmatrix}; & \bar{\psi}_- &= \bar{\psi} \frac{1}{2} (1 - \gamma_5) = (-\chi^{*\dot{a}} \quad 0) \end{aligned} \quad (6.346)$$

El término de masa de Dirac toma entonces la forma

$$\mathcal{L}_{\text{Dirac}} = m_{DC} (\bar{\psi}_+ \psi_- + \bar{\psi}_- \psi_+) = -m_{DC} (\xi_a^* \chi^{\dot{a}} + \chi^{*\dot{a}} \xi_a) \quad (6.347)$$

Ahora bien, la ecuación (6,343) indica que los espinores punteados están ligados a los complejos conjugados de los sin puntear, pudiendo elegirse la fase que los relaciona los conecta de manera que valga que

$$\xi_a^* = -\xi_{\dot{a}}; \quad \chi^{\dot{a}*} = -\chi_a, \quad (6.348)$$

Puede entonces escribirse al término de masa de Dirac en la forma

$$\mathcal{L}_{\text{Dirac}} = -m_{DC} (\xi_{\dot{a}} \chi^{\dot{a}} + \chi^a \xi_a) \quad (6.349)$$

Hay una opción más simple que la de esta ecuación para escribir un término de masa: consiste en no utilizar dos espinores de dos componentes sino un único espinor de 4-componentes, llamado espinor de Majorana en términos de solo un espinor de Weyl, digamos ξ , y su complejo conjugado $\bar{\xi}$:

$$\psi_M = \begin{pmatrix} \xi_a \\ \bar{\xi}^a \end{pmatrix} \quad (6.350)$$

Veremos más adelante, cuando definamos la operación de conjugación de carga eléctrica, que los espinores de Majorana son espinores que coinciden con su conjugado

de carga. El término de masa resultante, que se suele llamar “de Majorana” toma la forma

$$\mathcal{L}_{\text{Majorana}} = -\frac{1}{2}m_M c \overline{\psi}_M \psi_M \quad (6.351)$$

Este término resulta contener el producto de ξ con sí mismo y de $\dot{\xi}$ con sí mismo, como puede verse recordando que $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_0$ y que en la representación quirral se tiene

$$\gamma^0 = -\begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad (6.352)$$

Con esto $\mathcal{L}_{\text{Majorana}}$ toma la forma anunciada

$$\mathcal{L}_{\text{Majorana}} = \frac{1}{2}m_M (\dot{\xi}_a \dot{\xi}^a + \xi^a \xi_a). \quad (6.353)$$

Terminaremos esta discusión distinguiendo los tres contextos en que se utiliza el nombre de Majorana, el genial físico italiano que desapareciera misteriosamente a los 32 años (y que quizás fuera visto en Buenos Aires en la década de 1945 . . .

- representación de Majorana en el espacio de espinores
- término de masa de Majorana vs término de masa de Dirac
- partículas de Majorana vs partículas de Dirac (la de Majorana es su propia antipartícula, ver más adelante)

Al día de hoy no se tiene certeza de que alguna partícula elemental sea un fermión de Majorana lo que haría que fuera su propia antipartícula. Sin embargo, en el caso del neutrino, el asunto no está definitivamente cerrado: puede que sea un fermión de Dirac, puede que sea uno de Majorana. La explicación más aceptable de la pequeña masa de los neutrinos es a través de un mecanismo llamado de “balancín” (seesaw) basado en oscilaciones entre estados de neutrinos livianos y pesados. Para este modelo es necesario que estos hipotéticos neutrinos sean fermiones de Majorana.

6.17. Una interpretación física de las matrices de Dirac

Vimos que las componentes espaciales de la corriente de probabilidad que resulta de la ecuación de Dirac tienen la forma

$$\frac{1}{c} \mathbf{J} = \bar{\psi} \boldsymbol{\gamma} \psi = \psi^\dagger \gamma^0 \boldsymbol{\gamma} \psi = \psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi \quad (6.354)$$

o sea que

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, t)^\dagger c\boldsymbol{\alpha}\psi(\mathbf{x}, t) \quad (6.355)$$

y recordando que $\psi(\mathbf{x}, t)^\dagger\psi(\mathbf{x}, t)$ era la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en el punto \mathbf{x} en el instante t

En cuanto a la corriente, la ecuación (6.355) sugeriría que $c\boldsymbol{\alpha}$ juega el papel de la velocidad clásica con que se mueve la partícula. Esta interpretación se ve reforzada por el siguiente argumento: en el esquema de Heisenberg, la evolución temporal de un operador A está regida por la ecuación

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A] \quad (6.356)$$

con H el hamiltoniano del sistema. Vimos que el hamiltoniano asociado con la ecuación de Dirac esta dado por:

$$H = c(-i\hbar)\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \gamma^0 mc^2 \quad (6.357)$$

con lo que si tomamos $A = \mathbf{x}$ tendremos

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = c[\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla}, \mathbf{x}] = c\boldsymbol{\alpha} \quad (6.358)$$

Por supuesto, esto debe interpretarse en el sentido de valores medios,

$$\frac{d}{dt} \int d^3x \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\mathbf{x}\psi(\mathbf{x}, t) = c \int d^3x \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\boldsymbol{\alpha}\psi(\mathbf{x}, t) \quad (6.359)$$

y confirma la relación entre las matrices $\boldsymbol{\alpha}$ y la velocidad de la partícula.

Ahora bien, como $(\alpha^i)^2 = 1$, los autovalores de α^i son ± 1 y los autovalores de cada componente de la “velocidad”, según la fórmula (6.358) serían $\pm c$, en clara contradicción con el hecho de que en la mecánica relativista una partícula masiva no puede viajar a la velocidad de la luz. Además, dado que $[\alpha^i, \alpha^j] \neq 0$, de hacerse una interpretación ingenua de la ecuación (6,358), se tendría que no es posible medir las tres componentes de la velocidad simultáneamente.

Volvamos a utilizar la ecuación de Heisenberg (6.356) pero ahora tomando $A = \alpha_1 = \alpha_x$. Se tiene

$$\frac{d\alpha_x}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, \alpha_x] = \frac{2}{i\hbar}(cp_x - \alpha_x H) = \frac{2i}{\hbar}(H\alpha_x - cp_x) \quad (6.360)$$

Para escribir esta fórmula hemos utilizado que

$$H\alpha_x = c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha}\alpha_x + \beta\alpha_x mc^2 \quad (6.361)$$

$$= cp_x + cp_y\alpha_y\alpha_x + cp_z\alpha_z\alpha_x + \beta\alpha_x mc^2 \quad (6.362)$$

$$= 2cp_x - c\alpha_x(p_x\alpha_x + p_y\alpha_y + p_z\alpha_z - \beta mc^2) \quad (6.363)$$

de donde

$$H\alpha_x = 2cp_x - \alpha_x H \quad (6.364)$$

y

$$[H, \alpha_x] = 2(cp_x - \alpha_x H) \quad (6.365)$$

Tanto H como p_x son independientes del tiempo por lo que, derivando otra vez se tiene

$$\frac{d^2\alpha_x}{dt^2} = \frac{2}{i\hbar} \frac{d\alpha_x}{dt} H = -\frac{2}{i\hbar} H \frac{d\alpha_x}{dt} \quad (6.366)$$

Aquí hemos usado la fórmula (6.364) y que $d\langle p_x \rangle / dt = 0$. Imponiendo una condición inicial,

$$\left. \frac{d\alpha_x}{dt} \right|_{t=0} = \alpha_x^0 \quad (6.367)$$

se puede integrar (6.366) y se obtiene

$$\frac{d\alpha_x}{dt} = \alpha_x^0 \exp\left(-\frac{2iHt}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{2iHt}{\hbar}\right) \alpha_x^0 \quad (6.368)$$

Luego, usando (6.360),

$$\alpha_x H = \frac{i\hbar}{2} \alpha_x^0 \exp\left(-\frac{2iHt}{\hbar}\right) + cp_x \quad (6.369)$$

Si multiplicamos por $cH^{-1} = H/E^2$ a derecha se tiene

$$\frac{dx}{dt} = \frac{i\hbar c}{2} \alpha_x^0 \exp\left(-\frac{2iHt}{\hbar}\right) \frac{H}{E^2} + c^2 p_x \frac{H}{E^2} \quad (6.370)$$

Vemos que la velocidad corresponde a un movimiento oscilatorio con frecuencia $\omega = 2E/\hbar$, que como mínimo corresponde a $\omega = 2mc^2/\hbar$. Este movimiento, bautizado por Schrödinger [8] como Zitterbewegung (del alemán, zitter, tembloroso, trémulo y bewegung, movimiento), no puede ser observado en la práctica. Hay una manera alternativa de tratar al operador posición que evita este problema [9].

6.18. La ecuación de Dirac en presencia de un campo electromagnético

Hasta aquí hemos considerado la ecuación de Dirac para una partícula de spin 1/2 libre, que cuando se incluye un término de masa describe adecuadamente la

dinámica de un electrón libre. Nos interesa por supuesto estudiar el caso en que electrón cuántico interactúa con un campo electromagnético clásico (\mathbf{E}, \mathbf{B}) .

Sabemos que los campos electromagnéticos [ueden ligarse a los llamados “campos de gauge” ϕ, \mathbf{A} según las relaciones

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (6.371)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (6.372)$$

Ya en el caso de la mecánica cuántica no relativista las reglas de cuantificación canónica se expresaban en términos de los “campos de gauge” que incluyen al potencial vector \mathbf{A} y al escalar ϕ .

A estos cuatro campos se lo puede escribir en términos de un cuadrivector $A_\mu = (\phi, \Lambda_i)$, $\mu = 0, 1, 2, 3$, $i = 1, 2, 3$, de manera que los campos eléctrico E_i y magnético B_i pueden expresarse de forma compacta en términos del “tensor de campo” $F_{\mu\nu}$,

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial \Lambda_\nu}{\partial x^\mu} - \frac{\partial \Lambda_\mu}{\partial x^\nu} = \partial_\mu \Lambda_\nu - \partial_\nu \Lambda_\mu \quad (6.373)$$

tal que

$$B^i = \frac{1}{2} \varepsilon^{ijk} F_{jk} \quad (6.374)$$

$$E^i = F^{0i} \quad (6.375)$$

Las reglas de cuantificación canónica que para una partícula libre no relativista tomaban la forma

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &\rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \\ E &\rightarrow E - e\phi \end{aligned} \quad (6.376)$$

con e la carga eléctrica.

Las reglas de cuantificación (6.376) en presencia de campos electromagnéticos, devienen, en términos del cuadrivector A_μ más compactas:

$$p^\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} \rightarrow p^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \quad (6.377)$$

Notemos que al definir el cuadrivector contravariante p^μ , sus componentes espaciales aparecen con el factor $i\hbar$ y no con el habitual \hbar/i con el que se escribe en el caso no relativista la regla de cuantificación canónica. El cambio de signo implícito

se debe a que hemos adoptado una métrica negativa para las componentes espacio-espacio de $g_{\mu\nu}$ por lo que hay un cambio de signo entre componentes contravariantes y covariantes del (tri)vector impulso.

Partiendo entonces de la ecuación de Dirac para el caso de un electrón de masa m , libre,

$$i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial\psi}{\partial x^\mu} - mc\psi = (\gamma_\mu p^\mu - mc)\psi = 0 \quad (6.378)$$

y aplicando las reglas (6.377) la ecuación de Dirac en presencia de un campo electromagnético toma la forma

$$\left(\gamma_\mu \left(p^\mu - \frac{e}{c}A^\mu\right) - mc\right)\psi = 0 \quad (6.379)$$

Para ver cómo se relaciona esta ecuación con la de Klein-Gordon para una partícula cargada de masa m aplicamos a la ecuación anterior el operador diferencial $\gamma_\nu \left(p^\nu - \frac{e}{c}A^\nu\right) + mc$ y obtenemos

$$\left(\gamma_\nu\gamma_\mu \left(p^\nu - \frac{e}{c}A^\nu\right) \left(p^\mu - \frac{e}{c}A^\mu\right) - m^2c^2\right)\psi = 0 \quad (6.380)$$

$$\left(\gamma_\nu\gamma_\mu \left(p^\nu - \frac{e}{c}A^\nu\right) \left(p^\mu - \frac{e}{c}A^\mu\right) - m^2c^2\right)\psi = 0 \quad (6.381)$$

Podemos descomponer al producto $\gamma^\nu\gamma^\mu$ en sus partes simétrica y antisimétrica,

$$\gamma_\nu\gamma_\mu = g_{\nu\mu} - i\sigma_{\nu\mu} \quad (6.382)$$

donde hemos usado

$$g_{\nu\mu} = \frac{1}{2}(\gamma_\nu\gamma_\mu + \gamma_\mu\gamma_\nu) \quad (6.383)$$

y definido

$$\sigma_{\nu\mu} = \frac{i}{2}(\gamma_\nu\gamma_\mu - \gamma_\mu\gamma_\nu) \equiv 2\Sigma^{\mu\nu} \quad (6.384)$$

con $\Sigma^{\mu\nu}$ los generadores de las transformaciones de Lorentz (rotaciones + boosts). Con esto, y usando que

$$p_\mu\Lambda_\nu f(x) = (-i\hbar)\partial_\mu\Lambda_\nu f(x) + A_\nu p_\mu f(x) \quad (6.385)$$

se obtiene fácilmente

$$\left(p^\mu - \frac{e}{c}A^\mu\right) \left(p_\mu - \frac{e}{c}\Lambda_\mu\right)\psi - \frac{e\hbar}{2c}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}\psi - m^2c^2\psi = 0 \quad (6.386)$$

El primero y tercer término de esta ecuación coinciden con la ecuación de Klein-Gordon para una partícula de masa m y carga e , solo que, en lugar de corresponder a una partícula escalar (compleja, como resulta natural para el caso de campos escalares cargados²⁰), el operador de Klein-Gordon actúa en este caso sobre un espinor de 4 componentes. El segundo término, que es un efecto puramente cuántico (pues se anula cuando $\hbar \rightarrow 0$) es propio de la formulación de Dirac y veremos que da cuenta de la interacción de los campos electromagnéticos con, en particular, el spin. Su aparición se relaciona con el hecho de que la función de onda de Dirac es un espinor de 4 componentes.

Para estudiar los estados estacionarios de la ecuación (6.386), proponemos factorar la dependencia temporal como habitualmente hacemos,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \begin{pmatrix} \psi^1(\mathbf{x}) \\ \psi^2(\mathbf{x}) \\ \psi^3(\mathbf{x}) \\ \psi^4(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \equiv \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \psi(\mathbf{x}) \quad (6.387)$$

Reemplazado este ansatz en (6.386),

$$\left(p^\mu - \frac{e}{c}A^\mu\right) \left(p_\mu - \frac{e}{c}\Lambda_\mu\right) \psi - \frac{e\hbar}{2c}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}\psi - m^2c^2\psi = 0 \quad (6.388)$$

se tiene

$$\left((E - e\phi)^2 - (c\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\hbar c(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} - i\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{E})\right) \psi(\mathbf{x}) = m^2c^4\psi(\mathbf{x}) \quad (6.389)$$

con $\boldsymbol{\Sigma}$ la matriz de spin introducida en la clase anterior (ec. (6.274))

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad (6.390)$$

6.19. El límite no-relativista

Para estudiar el límite no-relativista de la ecuación de Dirac en un campo electromagnético nos quedaremos con el primer orden en v^2/c^2 en la ecuación (6.389) Separaremos ahora la energía en reposo mc^2 de la energía total E escribiendo

$$E = E' + mc^2 \quad (6.391)$$

²⁰Solo si el campo escalar es complejo puede extenderse la invarianza de gauge del electromagnetismo, $A_\mu \rightarrow \Lambda_\mu + \partial_\mu\Lambda$ de manera de incluir a los escalares, definiendo su ley de transformación como $\phi \rightarrow \exp[(ie)/(\hbar c)\Lambda]\phi$. Queda claro que la carga del campo escalar es e , la constante que aparece en los términos de interacción $A_\mu\phi$ y $A_\mu A^\mu\phi$ entre los campos A_μ y ϕ .

con $E' \ll mc^2$. También supondremos un campo ϕ débil, $e\phi \ll mc^2$. Con esto, el primer término en (6.385), desarrollando el cuadrado y despreciando el término E'^2 , toma la forma

$$(E - e\phi)^2 \approx 2mc^2(E' - e\phi) + m^2c^4 \quad (6.392)$$

con lo que la ecuación (6.385) puede escribirse en este límite,

$$\left(\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} + i \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{E} \right) \psi = E' \psi \quad (6.393)$$

Al orden en que trabajamos, se puede despreciar el término proporcional al campo eléctrico \mathbf{E} . En efecto, vimos que $|\boldsymbol{\alpha}|c \approx |\mathbf{v}|$ o sea que $\alpha \approx v/c$. Pero además tenemos

$$e\phi \approx |e\mathbf{E}|a \approx e|\mathbf{E}| \frac{\hbar}{p} \quad (6.394)$$

donde hemos llamado a a una distancia cuántica típica, ligada a p por la relación de incerteza, $a \sim \hbar/p$. O sea que se tiene,

$$\frac{e\hbar}{2mc} \frac{\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{E}}{e\phi} \approx \frac{\hbar}{2mc} \frac{v E p}{c E \hbar} = \frac{v^2}{2c^2} \quad (6.395)$$

Entonces, en la aproximación no relativista tendremos

$$\left(\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} \right) \psi = E' \psi \quad (6.396)$$

que no es otra cosa que la ecuación de Pauli para el electrón norelativista²¹ sólo que el término que había tenido que ajustarse de manera ad hoc en el caso no relativista, por provenir de un análisis semiclásico, aquí aparece automáticamente. Si $\boldsymbol{\mu}_s$ es el momento magnético del electrón y $\beta = e\hbar/(2mc)$ el magnetón de Bohr, se tiene la relación

$$\boldsymbol{\mu}_s = \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} = \beta \boldsymbol{\sigma} \quad (6.397)$$

Si aceptamos por el momento que, como en el caso de la ecuación para la partícula libre las componentes se separan en grandes y pequeñas, tendremos para las grandes exactamente la ecuación de Pauli, con una relación entre momento magnético y spin dada por

$$\frac{\mu_s}{s} = \frac{e}{mc} = 2 \frac{\beta}{\hbar} \quad (6.398)$$

²¹Recordemos que en las soluciones de la ecuación de Dirac para una partícula libre las componentes de energía negativa eran del orden ($\mathcal{O}(v^2/c^2)$)

que es el doble que la que resulta en el análisis clásico de la relación entre momento angular orbital y momento magnético,

$$\frac{\mu_l}{l} = \frac{e}{2mc} = \frac{\beta}{\hbar} \quad (6.399)$$

Pero justamente el factor 2 en (6.398) había debido incluirse manu militari en la formulación de Pauli del electrón no relativista para reproducir los resultados experimentales de la época. En otras palabras, debía postularse un factor llamado giromagnético, que se denota como g , que multiplica la fórmula clásica (6,399),

$$\frac{\mu_s}{s} = g \frac{\beta}{\hbar} \quad (6.400)$$

Se establecía entonces, para lograr acuerdo con la experiencia, que $g = 2$. La formulación de Dirac, en cambio, no necesita postular $g = 2$ sino que tal valor resulta una predicción. Esto fue considerado un triunfo importante de la formulación de Dirac.

Sin embargo, si buscamos hoy en una tabla de valores experimentales, obtenidos con mucha mejor precisión que en los años 30, veremos que se consigna para el factor giromagnético del electrón:

$$g_{ex} = 2 \times (1,001159652193 \pm ,000000000004) \quad (6.401)$$

¿Quiere decir esto que la teoría de Dirac del electrón es incorrecta? La respuesta es que en realidad, la teoría de Dirac es incompleta, en el sentido de que describe la dinámica cuántica del electrón en el campo electromagnético clásico del núcleo (en el caso de la descripción de un átomo).

Es recién cuando se hace un tratamiento completamente cuántico, tanto para el electrón como para el campo electromagnético asociado al campo de gauge A_μ en el que se mueve, que el valor predicho por la ecuación de Dirac recibe correcciones (llamadas radiativas). En lo que se considera uno de los grandes triunfos de la electrodinámica cuántica (la teoría cuántica de los campos electromagnéticos asociados al núcleo y el electrón) el valor teórico que se calcula en teoría de perturbaciones resulta

$$g_{teor} = 2 \times (1,001159652459 \pm ,000000000123) \quad (6.402)$$

Quienes pretendan saber cómo se llega a este valor teórico tienen cita con algún curso de teoría cuántica de campos.

Dejemos ahora a la ecuación de Klein-Gordon que es obedecida por las soluciones de la ecuación de Dirac y analicemos directamente a esta última *ab initio*

$$\left[\gamma_\mu \left(p^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \right) - mc \right] \psi = 0 \quad (6.403)$$

Para estudiar la manera en que las componentes “grandes” (ψ_A) y “pequeñas” (ψ_B) se separan, vamos a considerar una representación explícita para las matrices γ^μ . Conviene elegir la representación de Dirac que lleva a la ecuación (multiplicando por $\gamma^0 = \beta$ y recordando que $\boldsymbol{\gamma} = \beta\boldsymbol{\alpha}$)

$$\left[\begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot (c\mathbf{p} - e\mathbf{A}) + \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} mc^2 \right] \begin{pmatrix} \psi^A \\ \psi^B \end{pmatrix} = (E - e\phi) \begin{pmatrix} \psi^A \\ \psi^B \end{pmatrix} \quad (6.404)$$

Este sistema es equivalente al sistema acoplado para los espinores de dos componentes ψ^A y ψ^B

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot (c\mathbf{p} - e\mathbf{A})\psi^B + mc^2\psi^A &= (E - e\phi)\psi^A \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot (c\mathbf{p} - e\mathbf{A})\psi^A - mc^2\psi^B &= (E - e\phi)\psi^B \end{aligned} \quad (6.405)$$

Despejamos de la segunda ecuación ψ^B ,

$$\psi^B = (E - e\phi + mc^2)^{-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot (c\mathbf{p} - e\mathbf{A})\psi^A \quad (6.406)$$

o, escribiendo nuevamente $E = E' + mc^2$,

$$\psi^B = (E' - e\phi + 2mc^2)^{-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot (c\mathbf{p} - e\mathbf{A})\psi^A. \quad (6.407)$$

Para simplificar los cálculos nos restringiremos al caso puramente eléctrico, $\mathbf{A} = 0$, y denotaremos $e\phi = V$). El límite no relativista corresponde a que

$$E' \ll mc^2 \quad V \ll mc^2 \quad \mathbf{p} \approx m\mathbf{v} \quad (6.408)$$

y por lo tanto,

$$\psi^B \approx \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{2mc^2}\psi^A \sim \mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)\psi^A. \quad (6.409)$$

Es decir que la solución de 4 componentes tiene dos grandes componentes ψ^A y dos pequeñas componentes ψ^B como sucedía para la partícula libre. Notemos además que, si bien ψ está normalizada, esto no implica que cada una de las componentes ψ_A y ψ_B lo esté. En efecto, de la condición de normalización,

$$\psi_A^\dagger \psi_A + \psi_B^\dagger \psi_B = 1, \quad (6.410)$$

insertando (6.409) se desprende, a orden $(v/c)^2$, que

$$\left(1 + \frac{p^2}{4m^2c^2}\right) \psi_A^\dagger \psi_A = 1, \quad (6.411)$$

con lo cual podemos introducir una componente grande con la normalización adecuada, Ψ (spinor de dos componentes), en la forma

$$\psi_A = \left(1 - \frac{p^2}{8m^2c^2}\right) \Psi. \quad (6.412)$$

Además, si reemplazamos la expresión exacta para ψ^B dada por (6.407) en la primera de las ecuaciones (6.405), tendremos, luego de un poco de arreglo,

$$\left[\frac{1}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \left(1 + \frac{E' - V}{2mc^2}\right)^{-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + V \right] \psi^A = E' \psi^A \quad (6.413)$$

Haremos a continuación una expansión en el límite no relativista. Si guardamos sólo el primer término en la expansión en potencias de $(E' - V)/2mc^2$ tendremos

$$\left(1 + \frac{E' - V}{2mc^2}\right)^{-1} \approx 1 - \frac{E' - V}{2mc^2}. \quad (6.414)$$

Si insertamos (6.412), y utilizamos el resultado²²

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = p^2, \quad (6.417)$$

obtenemos una ecuación para la componente grande:

$$\left[\frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \left(\frac{E' - V}{2mc^2}\right) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + V - E' \right] \left(1 - \frac{p^2}{8m^2c^2}\right) \Psi = 0. \quad (6.418)$$

Para simplificar esta ecuación es conveniente multiplicarla a la izquierda por el operador $(1 - p^2/8m^2c^2)$, y conservar términos a orden $(v/c)^2$

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \left(\frac{V}{2mc^2}\right) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - \frac{p^2}{8m^2c^2} V - V \frac{p^2}{8m^2c^2} \right] \Psi = E' \Psi \quad (6.419)$$

Para simplificarla aún más, recordemos el conmutador

$$[p^i, V(x)] = -i\hbar \partial_i V, \quad (6.420)$$

²²De la relación entre matrices de Pauli

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (6.415)$$

obtenemos

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = \sigma_i \sigma_j p^i p^j = \delta_{ij} p^i p^j + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k p^i p^j = p^2. \quad (6.416)$$

El segundo término se anula por ser contracción de un tensor simétrico y uno antisimétrico.

que permite calcular

$$p^2V = p_i p_i V = p_i V p_i + p_i (-i\hbar) \partial_i V = V p^2 - 2i\hbar \nabla V \cdot \mathbf{p} - \hbar^2 \nabla^2 V$$

y

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})V(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) &= \sigma_i \sigma_j p^i V p^j = \delta_{ij} p^i V p^j + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k p^i V p^j \\ &= V p^i p^i - i\hbar \partial_i V p^i + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k V p^i p^j + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k (-i\hbar) \partial_i V p^j \\ &= V p^2 - i\hbar \partial_i V p^i + \hbar \varepsilon_{ijk} \sigma_k \partial_i V p^j \\ &= V p^2 - i\hbar \nabla V \cdot \mathbf{p} + \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \mathbf{p}) \end{aligned}$$

Observamos que el término $V p^2$ se cancela, al igual que el término $-i\hbar \nabla V \cdot \mathbf{p}$. Si además consideramos un potencial central, $V(\mathbf{r}) = V(r)$, entonces,

$$\nabla V = \frac{dV(r)}{dr} \nabla r = \frac{dV(r)}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (6.421)$$

y para el tercer término obtenemos

$$\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \mathbf{p}) = 2 \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

donde $\mathbf{S} = (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$. La ecuación finalmente resulta

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} + \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla^2 V \right] \Psi = E' \Psi \quad (6.422)$$

Por ejemplo, para el potencial Coulombiano,

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi r}$$

tenemos que ($V = e\phi$, $\mathbf{E} = -\nabla\phi$)

$$\nabla^2 V = -e \nabla \cdot \mathbf{E} = -e \rho_n = Ze^2 \delta^{(3)}(r).$$

donde ρ_n es la densidad de carga del núcleo, $\rho_n = Ze$. Esta “ecuación de Schrödinger”, derivada de la ecuación de Dirac, concuerda bien con la que usamos para comprender la estructura fina del átomo de hidrógeno. Los primeros dos términos son los términos de energía cinética y potencial del hamiltoniano usual. El tercer término es la corrección relativista de la energía cinética. El cuarto término es la interacción espín-órbita correcta, incluido el efecto de precesión de Thomas con el adecuado factor $1/2$. El quinto término es el llamado término de Darwin, que da una corrección adicional para los estados s que experimentalmente resulta ser correcta²³.

²³Nótese que este término sólo impacta en las funciones de onda que que son finitas en el origen, típicamente las que tienen $l = 0$.

Si bien no trataremos de resolver esta ecuación, conviene señalar la manera perturbativa de hacerlo: se resuelve la ecuación no relativista en presencia del potencial, sin incluir al término en p^4 ni a los términos que contienen derivadas de V . Obtenidas las dos componentes de ψ^A para este problema, se forman combinaciones lineales que sean autofunción de J^2, J_z, L^2, s^2 y luego se considera a los tres términos no incluidos como perturbaciones.

6.20. Invarianza de gauge

La ecuación de Dirac (6.378) para un electrón en un campo electromagnético asociado a un campo de gauge $A_\mu = (\phi, \mathbf{A})$,

$$\left(\gamma^\mu \left(i\hbar \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) - mc \right) \psi = 0 \quad (6.423)$$

tiene una invarianza muy importante, llamada de gauge, asociada con las transformaciones de gauge que dejan invariante al tensor de campo electromagnético. En efecto, recordemos que $F_{\mu\nu}$,

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (6.424)$$

permanece invariante ante el cambio del campo de gauge A_μ

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu = A_\mu(x) + \partial_\mu \Lambda(x) \quad (6.425)$$

con $\Lambda(x)$ una función real arbitraria. Que $F_{\mu\nu}$ permanezca invariante frente a las transformaciones de gauge (6.425) quiere decir que ni la medida experimental del campo eléctrico ni la del magnético, que son las cantidades físicas justamente medibles detectan si trabajamos con A_μ o con A'_μ : Recordemos que

$$B^i[\mathbf{A}] = \frac{1}{2} \varepsilon^{ijk} F_{jk}[\mathbf{A}] \quad (6.426)$$

$$E^i[\phi, \mathbf{A}] = F^{0i}[\phi, \mathbf{A}] \quad (6.427)$$

La invariancia de estos campos frente a transformaciones de gauge como la (6.425) significa entonces que

$$B[\mathbf{A}'] = B[\mathbf{A}], \quad E[\phi'; \mathbf{A}'] = E[\phi; \mathbf{A}] \quad (6.428)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A} \\ \mathbf{E} &= -\nabla \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \end{aligned} \quad (6.429)$$

Esta invariancia implica que los campos A_μ y sus transformados de gauge son todos admisibles para describir a los campos eléctrico y magnético. Por ello, según el problema que enfrentemos podemos trabajar usando “un dado gauge” u otro. Por ejemplo podemos elegir una función Λ tal que anule la componente A_0 simplemente utilizando un Λ tal que $\partial_0\Lambda$ cancele ese A_0 . Ese gauge se conoce como “gauge de Coulomb”. En otras circunstancias puede convenir elegir Λ tal que $\partial^\mu\Lambda'_\mu = 0$ (gauge de Lorenz²⁴).

Ahora bien, podría suceder que al interactuar estos campos con un electrón descrito por una función de onda que obedece la ecuación de Dirac, la función de onda detectara de una manera medible el cambio. Veremos que en general este no es el caso²⁵.

Para analizar lo anterior, comencemos por notar que al cambiar A_μ por A'_μ en la ecuación de Dirac, se agrega un término (el gradiente de Λ si la transformación (6.425) va acompañada de un cambio adecuado en la fase de la función de onda ψ , la ecuación retoma su forma inicial.

Consideremos entonces el conjunto de transformaciones de gauge

$$\begin{aligned} A_\mu(x) &\rightarrow A'_\mu(x) = A_\mu(x) + \partial_\mu\Lambda(x) \\ \psi(x) &\rightarrow \psi'(x) = \exp\left(-i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(x)\right)\psi(x) \\ \bar{\psi}(x) &\rightarrow \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x)\exp\left(i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(x)\right) \end{aligned} \quad (6.430)$$

Es fácil ver que ante este cambio, la ecuación (6.423) tiene la misma forma cuando es escrita en términos de los campos transformados según (6.430)

que cuando lo es en términos de los campos sin transformar. Es decir, la ecuación de Dirac es invariante frente a las transformaciones de gauge completas (6.430) que incluyen al campo de gauge y a la función de onda $\bar{\psi}$ que describe a la materia.

$$\left[\gamma^\mu\left(i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c}\Lambda_\mu\right) + mc\right]\psi = 0 \rightarrow \left[\gamma^\mu\left(i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c}\Lambda'_\mu\right) + mc\right]\psi' = 0 \quad (6.431)$$

Notemos que en la ec. (6.430) hemos incluido la ley de transformación de $\bar{\psi}$ que por un lado no aparece en la ecuación de Dirac y, por el otro, podría “deducirse” a partir de la fórmula que relaciona $\bar{\psi}$ con ψ , $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$. Sucede que cuando se trata a ψ como un campo cuántico en un pie de igualdad con A_μ (es decir, se entra en el dominio de una de las llamadas “teorías de campos cuánticos”, en este caso la electrodinámica cuántica) resulta que $\bar{\psi}$ debe tomarse como un campo “independiente”

²⁴Este Lorenz no es el Lorentz de las transformaciones relativistas sino Ludvig Lorenz, un físico y matemático danés.

²⁵Véase el experimento de Aharonov-Bohm para una descripción más precisa de este asunto

de ψ . De hecho, esto puede verse ya a nivel de mecánica cuántica, si pretendemos escribir una acción de la cual derive la ecuación de Dirac como ecuación de Euler Lagrange. De manera parecida a lo que sucede con el mismo problema para la ecuación de Schrödinger, es natural tomar como acción (junto con su Lagrangiano)

$$S = \int d^4x \mathcal{L} = \int d^4x \bar{\psi}(x) \left(\gamma^\mu \left(i\hbar \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu(x) \right) + mc \right) \psi(x) \quad (6.432)$$

Tomando a $\bar{\psi}$ y ψ como variables independientes, se tiene como ecuación de Euler-Lagrange para ψ :

$$\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \bar{\psi})} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} \implies \left(\gamma^\mu \left(i\hbar \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu(x) \right) + mc \right) \psi(x) = 0 \quad (6.433)$$

Puede verse que no solo la acción (6.432) sino el Lagrangiano, su integrando, es invariante frente a las transformaciones de gauge (6.430). Es válido entonces recurrir al teorema de Noether que establece que, como pasa con toda invariancia de un Lagrangiano, existe una carga conservada asociada a esa invariancia. Para encontrarla, en el caso de la invariancia de gauge comenzamos por construir la corriente conservada (en el sentido de que su cuatridivergencia es nula) asociada a esta invarianza. Para ello, según el método de Noether, consideramos un cambio infinitesimal del campo de materia ψ

$$\delta\psi = \frac{ie}{\hbar c} \psi \epsilon(x) \quad (6.434)$$

Aquí $\epsilon(x)$ es un parámetro infinitesimal. La corriente de materia asociada a la invarianza viene dada, de acuerdo al teorema de Noether por

$$j_\mu(x) \epsilon(x) = \frac{\delta L}{\delta \partial_\mu \psi} \delta\psi = -\frac{e}{c} \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \epsilon(x) \quad (6.435)$$

¡Es decir que la corriente conservada de Noether asociada con la invarianza de gauge coincide, a menos de un factor constante, con la corriente de probabilidad cuya componente temporal da la densidad de probabilidad! Para ello basta reescribir a la corriente j_μ como

$$j_\mu(x) = -\frac{e}{c} J_\mu(x) \quad (6.436)$$

con

$$J_\mu(x) = \bar{\psi}(x) \gamma^\mu \psi(x), \quad \partial_\mu J^\mu(x) = 0 \quad (6.437)$$

Luego, la carga conservada, la integral de J_0 sobre todo el espacio, $Q = \int d^3x \psi^* \psi$, no es otra cosa que la expresión de que la probabilidad de encontrar a la partícula descrita por la ecuación de Schrödinger es 1.

Volviendo a la transformación de gauge (6,425) con parámetro real arbitraio $\Lambda(x)$

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu = A_\mu(x) + \partial_\mu \Lambda(x) \quad (6.438)$$

podríamos escribirla en una forma en apariencia más complicada,

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu = A_\mu(x) + \frac{1}{i} g^{-1}(x) \partial_\mu g(x) \quad (6.439)$$

con

$$g(x) = \exp(i\Lambda(x)) \quad (6.440)$$

En esta forma, $g(x)$ puede ser identificado como uno de los elementos del grupo unitario $U(1)$ formado por los complejos de módulo 1. Esto

podría pensarse que es un detalle irrelevante para las transformaciones de gauge del electromagnetismo. Pero no es así: La teoría de las interacciones electrodébiles, que unifican a los fenómenos electromagnéticos con los débiles está basado en la extensión de las invarianzas de la teoría agregando otro grupo unitario con determinante 1, el identificado como $SU(2)$ cuya representación fundamental es el de matrices de 2×2 (por ejemplo, dada por las 3 matrices de Pauli). Y para describir las interacciones fuertes, también se utiliza un grupo unitario, el grupo $SU(3)$ cuya representación fundamental es de 8 matrices de 3×3 conocidas como matrices de Gell-Mann.

Para el caso general del grupo de Lie $SU(N)$, la transformación de los campos de gauge (6.441) se complica:

$$A'_\mu = g^{-1} A_\mu(x) g + \frac{1}{i} g^{-1}(x) \partial_\mu g(x) \quad (6.441)$$

Hay que notar que en el primer término a la derecha solo se puede simplificar el g^{-1} con el g para el caso $U(1)$, un grupo abeliano en el que el Λ es una función real de x y lo mismo sucede con las componentes de A_μ . En el caso en que $N \neq 1$ el grupo es no abeliano en el sentido de que Λ y A_μ toma valores en el álgebra de Lie del grupo, que se suele anotar como $su(N)$ y es un álgebra no conmutativa.

El Lagrangiano del Modelo Estándar es el de una teoría de gauge con grupo $g \in SU(3) \times SU(2) \times U(1)$.

La ecuación de Dirac para átomos hidrogenoides

Uno de los problemas en los que se puede poner a prueba a la ecuación de Dirac es en el de la estructura fina de los espectros atómicos. En este asunto, la mecánica cuántica no-relativista había tenido sus primeros y más resonantes éxitos. Ya en ese caso había sido notable el haber podido encontrar una solución exacta de la ecuación de ondas para el electrón en un campo coulombiano. Veremos que lo mismo sucede en el caso de la ecuación relativista de Dirac para el electrón en un potencial de Coulomb. Y que los resultados dan una descripción excelente, superior al de la mecánica cuántica no relativista, de los datos experimentales para átomos hidrogenoides.

Comencemos por hacer, a vuelo de pájaro, una enumeración de los resultados de la mecánica cuántica no relativista para átomos hidrogenoides. Para ello recordemos que la ecuación de Schrödinger para los estados estacionarios de un electrón de masa m_e y carga e en el campo eléctrico Coulombiano producido por un núcleo de número atómico Z toma la forma

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \frac{Ze^2}{4\pi r} + \epsilon_n \right) \psi_{n,l,m} = 0 \quad (6.442)$$

con el Laplaciano escrito como

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \quad (6.443)$$

$$L^2 \psi_{n,l,m} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{n,l,m} \quad (6.444)$$

En (6.442) m es la masa reducida,

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_N} \approx \frac{1}{m_e} \quad (6.445)$$

con m_N la masa del núcleo. La constante fundamental que aparece en la teoría es la constante de estructura fina α

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\hbar c} = \frac{1}{137,037} \quad (6.446)$$

en la que debe notarse que en la ecuación de Schrödinger en un potencial coulombiano las dos constantes fundamentales \hbar y c solo aparecen combinadas en α

Los niveles de energía corresponden a la fórmula de Balmer

$$\epsilon_n = -\frac{m(Z\alpha)^2}{2n^2} \quad (6.447)$$

con

$$\frac{m\alpha^2}{2} = 13,6\text{eV} \quad (6.448)$$

y

$$n \geq 1, \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1, \quad -l \leq m \leq l \quad (6.449)$$

La degeneración $d(n)$ del estado n es

$$d(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (6.450)$$

Veremos que, con el tratamiento relativista, esta degeneración decrece y aparece una estructura fina en el espectro, no prevista por el tratamiento no-relativista.

Pasemos ahora al estudio detallado del mismo problema pero utilizando la ecuación relativista de Dirac. Como se trata del potencial Coulombiano en átomos hidrogenoides (con un número de protones Z) tendremos

$$A_0 = -\frac{Ze}{4\pi r} \quad (6.451)$$

y, como no hay campo magnético, pondremos nuevamente $\mathbf{A} = 0$.

En lo que sigue conviene utilizar la representación de Weyl (quiral) de las matrices de Dirac,

$$\gamma^0 = -\begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.452)$$

En lugar de estudiar directamente la ecuación de Dirac, escribiremos la que resulta de aplicar a esa ecuación el operador de Dirac (con el signo relativo entre derivada y masa opuesto al de la ecuación original) a la misma. Vimos que de esta manera se obtiene una ecuación de segundo orden que en el caso libre coincidía con la de Klein-Gordon actuando sobre una función espinorial de 4 componentes.

Las soluciones de la ecuación resultante con derivadas de segundo orden son por supuesto soluciones de la de Dirac de primer orden. La idea del camino que estamos siguiendo es que, trabajando con una ecuación de segundo orden, nos será más fácil utilizar como guía lo aprendido al estudiar al átomo de Hidrógeno con la ecuación de Schrödinger.

Consideraremos la aproximación en que la masa reducida del sistema se toma igual a la del electrón. Por simplicidad trabajaremos con unidades tales que $\hbar = c = 1$ y al final de los cálculos recuperaremos estas constantes usando el hecho de que la constante de estructura fina cuando \hbar y c aparecen en su valor del sistema métrico con su verdadero valor que es $\alpha = e^2/(4\pi\hbar c)$, eq. (6.446). La ecuación de segundo orden que resulta de lo descrito más arriba es:

$$\left((i\gamma^\mu \partial_\mu - e\gamma^0 \Lambda_0)^2 - m^2 \right) \psi = \left((i\partial_\mu - e\Lambda_0 \delta_{\mu 0})^2 - e\sigma^{0i} F_{0i} - m^2 \right) \psi = 0 \quad (6.453)$$

con

$$\sigma^{0i} = i \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & -\sigma^i \end{pmatrix} \quad (6.454)$$

Con esto, el término ligado al spin que aparece en la ecuación (6.453) puede escribirse según sea el signo con que aparecen las matrices de Pauli de $2 \times 2\sigma^i$ en la matriz σ^{0i} de 4×4 ,

$$-\frac{e}{2}\sigma^{0i}F_{0i} = \pm iZ\alpha \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r^3} \quad (6.455)$$

(tener en cuenta que para escribir el vector contravariante \mathbf{r} a partir de la derivada covariante ∂_i hay que incluir un signo “-” debido a la signatura elegida para la métrica.)

En la ec. (6.455) debe tomarse el signo + cuando se trate de la componente ψ^+ y el signo - cuando se trate de la componente ψ^- en que descomponemos al espinor de 4 componentes. Las componentes ψ^\pm son cada una un espinor de Weyl de 2 componentes,

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi^+ \\ \psi^- \end{pmatrix}, \quad \psi^+ = \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix}, \quad \psi^- = \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix} \quad (6.456)$$

Tenemos entonces un par de ecuaciones que son el análogo de la ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrógeno, para estados estacionarios, pero para el caso relativista,

Ecuación de segundo orden que deriva de la de Dirac: (para estados estacionarios)

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} - \frac{Z^2 \alpha^2}{r^2} \pm i \frac{Z\alpha}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}} - \frac{2Z\alpha\epsilon}{r} - (E^2 - m^2) \right) \psi^\pm = 0 \quad (6.457)$$

donde $E = mc^2 - \epsilon$ (aquí ϵ corresponde a la energía del electrón en los estados ligados).

Los tres primeros términos del lado izquierdo corresponden al Laplaciano en coordenadas esféricas. En cuanto al potencial coulombiano, cuya traza podemos seguir a través de Z , aparece en los tres términos siguientes, en particular aquel multiplicado por la energía ϵ . Finalmente, hay un término con el cuadrado de la energía y el m^2 que corresponde a la energía en reposo (recordar que transitoriamente hemos puesto $c = 1$).

Si no fuera por el término que contiene al operador de spin (*i.e.*, a las matrices de Pauli), esta ecuación es exactamente la que resultaría de plantear la ecuación de Klein-Gordon para una partícula cargada en un campo Coulombiano:

Ecuación de Klein-Gordon (sin spin)

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{r^2} - \frac{Z^2 \alpha^2}{r^2} - \frac{2Z\alpha\epsilon}{r} - (\epsilon^2 - m^2) \right) \phi = 0 \quad (6.458)$$

que puede compararse con la que resulta en el caso no-relativista (ecuación de Schrödinger (6.442))

Ecuación de Schrödinger

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L'^2}{r^2} - \frac{2mZ\alpha}{r} - 2m\epsilon \right) \psi = 0 \quad (6.459)$$

Ahora bien, si comparamos las ecuaciones de Klein-Gordon y la de Schrödinger, vemos que formalmente son idénticas si se hacen las siguientes sustituciones en la de Schrödinger:

- en el término que contiene L^2

$$L^2 \rightarrow L'^2 = L^2 - Z^2 \alpha^2 \quad (6.460)$$

- en el que contiene a α

$$\alpha \rightarrow \alpha' = \alpha \frac{\epsilon}{m} \quad (6.461)$$

- en el que contiene a la energía ϵ

$$\epsilon \rightarrow \epsilon' = \frac{\epsilon^2 - m^2}{2m} \quad (6.462)$$

Si “traducimos” las relaciones anteriores al caso de los autovalores del momento angular orbital tendremos

$$\begin{aligned} l(l+1) &\rightarrow l(l+1) - Z^2 \alpha^2 \equiv l'(l'+1) \\ \alpha &\rightarrow \alpha \frac{\epsilon}{m} = \alpha' \\ \epsilon &\rightarrow \frac{\epsilon^2 - m^2}{2m} = \epsilon' \end{aligned} \quad (6.463)$$

Con esto vemos que al pasar de la ecuación de Schrödinger a la de Klein-Gordon, los autovalores del momento angular orbital se corren en una cantidad que llamaremos δ_l y que se puede calcular a partir de las soluciones de la ecuación cuadrática asociada a la primera línea de la ecuación (6.463) que era

$$l(l+1) \rightarrow l'(l'+1) - Z^2\alpha^2 \equiv l'(l'+1) \quad (6.464)$$

$$l \rightarrow l' = l - \delta_l \quad (6.465)$$

$$\delta_l = l + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2\alpha^2} \quad (6.466)$$

Por los mismos motivos, el número cuántico principal n se corre en la misma cantidad. En efecto, recordemos que en el caso de la ecuación de Schrödinger, para que la función de onda tuviera el comportamiento adecuado en el infinito su parte radial debía ser un polinomio (y no una serie de infinitos términos). De aquí resulta que cierto parámetro n' ligado a l debía ser un entero, $n' = n - (l + 1)$. Luego, al cambiar $l \rightarrow l'$ tiene que cambiarse $n \rightarrow n'$

Usando las relaciones (6.464) vemos entonces que podemos leer la fórmula para los niveles de energía de Klein-Gordon para una partícula de masa m y carga e en un campo coulombiano, a partir de la fórmula de Balmer en término de los parámetros primados:

$$\frac{E_{nl}^2 - m^2}{2m} = -\frac{m(Z\alpha')^2}{2n'^2} \quad (6.467)$$

$$\frac{E_{nl}^2 - m^2}{2m} = -\frac{mZ^2\alpha^2}{2} \frac{E_{nl}^2}{m^2} \frac{1}{(n - \delta_l)^2} \quad (6.468)$$

de donde, finalmente, se tiene

$$E_{nl} = \frac{m}{\sqrt{1 + (Z^2\alpha^2/(n - \delta_l)^2)}} \quad (6.469)$$

Esta expresión se puede desarrollar en potencias de α^2 , obteniéndose (recuperando las constantes \hbar y c)

$$E_{nl} = mc^2 - \frac{mZ^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{mZ^4\alpha^4}{n^3(2l+1)} + \frac{3mZ^4\alpha^4}{8n^4} + O(\alpha^6) \quad (6.470)$$

El primer término corresponde a la energía en reposo, el segundo término corresponde a la energía de ligadura no relativista; el tercero, al depender de l , rompe la degeneración $O(4)$ presente en el caso no-relativista.

No discutiremos las patologías que esconde la fórmula para la energía que resulta de la ecuación de Klein-Gordon. Por ejemplo, la catástrofe que ocurre para $Z > 137/2$, cuando δ_l , y por ello la energía, se vuelven complejas. O la singularidad en el origen que genera en la función de onda el potencial atractivo $-(Z^2\alpha^2/r^2)$. Tampoco nos extenderemos sobre el pobre acuerdo con los resultados experimentales que tiene

la fórmula (6.470). Simplemente concluiremos que los efectos del spin, que no son tenidos en cuenta por la ecuación de Klein-Gordon, tienen que ser importantes por lo que los cálculos en base a la ecuación de Dirac no deberían presentar estos problemas.

En la clase siguiente veremos como hacer contacto entre estos resultados de la ecuación de Klein-Gordon para espinores de 4 componentes con los de la ecuación de Dirac.

6.21. Ecuación de Dirac para potenciales esféricamente simétricos

Consideremos la ecuación relativista para partículas de spin 1/2 en un potencial central, de la forma $V(\mathbf{r}) = V(|\mathbf{r}|)$. Tendremos

$$eA_0 = V(r), \quad \mathbf{A} = 0, \quad (6.471)$$

Es conveniente escribir la ecuación de Dirac en el lenguaje de las matrices $\boldsymbol{\alpha}$ y β , y si buscamos soluciones estacionarias, de la forma, $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$, tenemos la ecuación en la forma $H_D\Psi = E\Psi$, donde el Hamiltoniano de Dirac es

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - \beta mc^2 + V(r). \quad (6.472)$$

Este Hamiltoniano es invariante frente a rotaciones y reflexión espacial,

$$[H, \mathbf{J}] = [H, \mathcal{P}] = 0, \quad (6.473)$$

de manera que buscaremos autofunciones de momento angular y paridad bien definidos.

Para separar la parte radial de la angular el el término de momento $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}$, conviene introducir el momento radial

$$p_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right). \quad (6.474)$$

Para escribir al Hamiltoniano de Dirac en términos de p_r , hagamos lo siguiente: dado que las matrices $\boldsymbol{\alpha}$ satisfacen el álgebra de SU(2), al igual que las $\boldsymbol{\sigma}$,

$$[\alpha_i, \alpha_j] = 2i\epsilon_{ijk}\alpha_k \quad (6.475)$$

y el álgebra de Clifford,

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}, \quad (6.476)$$

verifican la relación

$$\alpha_i\alpha_j = \delta_{ij} + 2i\epsilon_{ijk}\alpha_k. \quad (6.477)$$

De aquí se sigue que para dos vectores arbitrarios \mathbf{a} y \mathbf{b} se cumple que

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (6.478)$$

y por lo tanto, vale para \mathbf{r} y \mathbf{p} :

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) &= \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} = i\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \\ &= \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{L}. \end{aligned} \quad (6.479)$$

Si multiplicamos a izquierda por $(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r})$ entonces obtenemos

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{r^2}(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r})[\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{L}] \quad (6.480)$$

$$= \frac{1}{r^2}(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r})(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) + \frac{i}{r^2}(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{L}) \quad (6.481)$$

$$= \frac{1}{r^2}(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r})(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) + \frac{i}{r^2}[\mathbf{r} \cdot \mathbf{L} + i\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r} \times \mathbf{L})] \quad (6.482)$$

$$= \frac{1}{r^2}(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r})(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) + \frac{i}{r^2}[i\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{L})] \quad (6.483)$$

$$= \frac{1}{r^2}(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r})p_r + i\left(\hbar + \frac{2\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{\hbar}\right) \quad (6.484)$$

donde usamos que $\mathbf{r} \cdot \nabla = r\partial/\partial r$. Además

$$(\mathbf{r} \times \mathbf{L})_i = [\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{p})]_i = r_j r_i p_j - r^2 p_i. \quad (6.485)$$

6.22. Dirac+Coulomb

Pudimos conectar los niveles de energía de átomos hidrogenoides según resultan de la ecuación de Schrödinger con los que se obtienen para la ecuación de Klein-Gordon en el mismo potencial coulombiano. Podemos hacer lo mismo en el caso de la ecuación de Dirac. Para comenzar, notemos que el momento angular total \mathbf{J} ,

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (6.486)$$

donde el operador de spin está representado por

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}, \quad (6.487)$$

conmuta con el hamiltoniano,

$$[H, \mathbf{J}] = 0. \quad (6.488)$$

Conviene entonces trabajar en los subespacios con de estados $|jml\rangle$,

$$J^2 |jml\rangle = j(j+1) |jml\rangle, \quad j = 1/2, 3/2, \dots, \quad (6.489)$$

$$L^2 |jml\rangle = l(l+1) |jml\rangle, \quad l = j \pm 1/2 = l_{\pm}, \quad (6.490)$$

$$S^2 |jml\rangle = \frac{3}{4} \hbar |jml\rangle, \quad (6.491)$$

$$J_z |jml\rangle = m |jml\rangle, \quad -j \leq m \leq j, \quad (6.492)$$

Es decir, calcular $\langle jml|H|jml\rangle$. Ahora bien, dado que estos autoestados tienen una paridad definida, ligada a l^{26} , tendremos que los elementos de matriz del operador hermítico $\boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}}$ (de paridad impar) se anulan entre estados con el mismo l ,

$$\langle jml_{\pm} | \boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}} | jml_{\pm} \rangle = 0 \quad (6.493)$$

Además, se tiene que $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}})^2 = 1$. Usaremos la clausura de la base de estados elegidos

$$\sum_{\pm} |jml_{\pm}\rangle \langle jml_{\pm}| = 1 \quad (6.494)$$

para insertarla en

$$1 = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}})^2 = \sum_{\pm} \boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}} |jml_{\pm}\rangle \langle jml_{\pm}| \boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}} \quad (6.495)$$

Ahora bien, partiendo de la normalización $1 = \langle l_- | l_- \rangle$ y usando lo anterior se tiene

$$1 = \langle l_- | l_- \rangle = \langle l_- | (\boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}})^2 | l_- \rangle = \langle l_- | \boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}} | l_+ \rangle \langle l_+ | \boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}} | l_- \rangle = \langle l_+ | \boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}} | l_- \rangle^2 \quad (6.496)$$

donde hemos usado la eq. (6.493),

$$\langle jml_{\pm} | \boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}} | jml_{\pm} \rangle = 0 \quad (6.497)$$

para cancelar los brackets entre estados $++$ y $--$, además, que las matrices de Pauli son, por supuesto, hermíticas.

De la ecuación (6.496) se tiene finalmente

$$\langle l_+ | \boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}} | l_- \rangle = 1 \quad (6.498)$$

²⁶La parte angular de los kets, proyectados en la representación de coordenadas son armónicos esféricos que, ante un cambio de paridad $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$, que corresponde en coordenadas esféricas a $(r, \theta, \varphi) \rightarrow (r, \pi - \theta, \varphi + \pi)$, satisfacen que $Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi)$.

Dada la ecuación (6.457), para los estados estacionarios de la ecuación de segundo orden que deriva de la de Dirac usando el “truco” $(a + b)(a - b)$

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} - \frac{Z^2 \alpha^2}{r^2} \pm i \frac{Z \alpha}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}} - \frac{2Z \alpha \epsilon}{r} - (E^2 - m^2) \right) \psi^\pm = 0 \quad (6.499)$$

los brackets del tercero, cuarto y quinto término puede escribirse así :

$$\begin{aligned} \langle jml_\pm | (L^2 - Z^2 \alpha^2 \mp i Z \alpha \boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{r}}) | jml_\pm \rangle = \\ \begin{pmatrix} \left(j + \frac{1}{2} \right) \left(j + \frac{3}{2} \right) - Z^2 \alpha^2 & \mp i Z \alpha \\ \mp i Z \alpha & \left(j - \frac{1}{2} \right) \left(j + \frac{1}{2} \right) - Z^2 \alpha^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.500)$$

Es fácil calcular los autovalores Λ de esta matriz. Si escribimos a Λ en la forma habitual de los autovalores de momento angular, $\Lambda = \lambda(\lambda + 1)$, se obtiene

$$\lambda = \left(j \pm \frac{1}{2} \right) - \delta_j \quad (6.501)$$

con δ_j dado por

$$\delta_j = j + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - Z^2 \alpha^2} \approx \frac{Z^2 \alpha^2}{2j + 1} + O(Z^4 \alpha^4) \quad (6.502)$$

Como en el caso de Klein-Gordon, el rol de l en el caso no relativista es aquí jugado por λ , que está corrido en δ_j . Para que el parámetro n' que hacía, al tomar valores enteros, que se cortara la serie infinita de la parte radial de la función de onda en el caso no-relativista siga siendo un entero, ($n' = n + (l + 1)$), como l está corrido en δ_j , así deberá estarlo n :

$$n' = (n - \delta_j) - \lambda - 1 \quad (6.503)$$

Como $n' \geq 0$, se tendrá que

$$\begin{aligned} j \leq n - \frac{3}{2} & \quad \text{si} \quad \lambda = j + \frac{1}{2} - \delta_j \\ j \leq n - \frac{1}{2} & \quad \text{si} \quad \lambda = j - \frac{1}{2} - \delta_j \end{aligned} \quad (6.504)$$

Podemos ahora seguir exactamente el camino que en el caso de Klein-Gordon, nos llevó a la fórmula para la energía de los niveles de los átomos hidrogenoides. Es decir, el mismo corrimiento (6.463) que nos permitía pasar de la ecuación de Schrödinger a la de Klein-Gordon sirve ahora para pasar a la de Dirac siempre que utilicemos la fórmula (6.502) para δ_j , pues en ella está tenido en cuenta el término

de spin adicional en Dirac. Entonces, tomando la fórmula de Balmer y haciendo los reemplazos

$$n \rightarrow n - \delta_j \quad (6.505)$$

$$\alpha \rightarrow \alpha \frac{\epsilon}{m} \quad (6.506)$$

$$\epsilon \rightarrow \frac{\epsilon^2 - m^2}{2m} \quad (6.507)$$

que permitieron escribir la fórmula para los niveles de energía a partir de la modificación de la fórmula de Balmer, tendremos ahora

$$E_{n,j} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(Z^2 \alpha^2 / (n - \delta_j)^2 \right)}} \quad (6.508)$$

que formalmente coincide con la fórmula (6.469) para el caso de Klein-Gordon, pero con δ_j dado en este caso por (6.502)

$$\delta_j = j + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - Z^2 \alpha^2} \quad (6.509)$$

Vemos que la energía no depende de l de manera que en principio habrá una degeneración de los niveles. Para cada valor de j hay dos valores posibles de l , $l = j \pm 1/2$ excepto en el caso en que $j = n - 1/2$ en que $l = n - 1$ (la otra posibilidad llevaría a $n = l$ siendo que $l \leq n - 1$. Salvo para este caso habrá entonces una degeneración doble de los niveles.

Desarrollando en potencias de α^2 tendremos

$$E_{n,j} \approx mc^2 - \frac{mc^2 Z^2 \alpha^2}{2n^2} - \frac{mc^2 Z^4 \alpha^4}{n^3(2j+1)} + \frac{3mc^2 Z^4 \alpha^4}{8n^4} + \dots \quad (6.510)$$

con $n = 1, 2, \dots$ y $j = 1/2, 3/2, \dots, n - 1/2$.

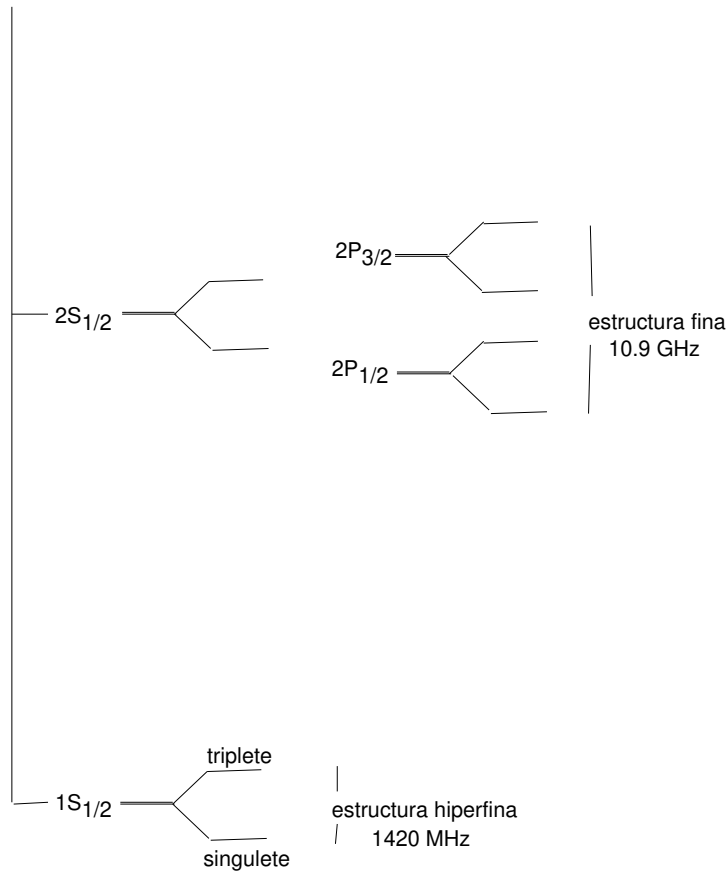
Vemos entonces que, para un dado n , diferentes valores de j implican diferentes valores de la energía de los niveles. Esto produce la llamada estructura fina (por ello a la constante α se la llame constante de estructura fina).

Queda, como vemos, una degeneración de estados que se distinguen por su momento angular orbital l , que puede ser $j \pm 1/2$ excepto para el caso en que $j = n - 1/2$ en el que $l = n - 1$.

Para tener una idea de la magnitud del desdoblamiento en niveles con el mismo n y j diferente, consideremos el caso en que $Z = 1$; $n = 2$; $j = 1/2, 3/2$; $l = 1$ (correspondiendo este valor a la letra P en la notación espectroscópica). Se tiene

$$\epsilon(2P_{3/2}) - \epsilon(2P_{1/2}) \approx \frac{m\alpha^4}{32} = 4,53 \times 10^{-5} \text{eV} \rightarrow 10,9 \text{GHz} \quad (6.511)$$

En la figura que sigue se representan los niveles de energía más bajos, utilizando la notación espectroscópica nl_j .



Estructura hiperfina

La estructura hiperfina resulta de la interacción del momento magnético del núcleo con el del electrón, que no fue tomado en cuenta en lo anterior.

En particular, en el caso del átomo de Hidrógeno que trataremos, dado que el núcleo es un protón, la interacción en cuestión será la del momento magnético μ_p del protón con el electrón.

Consideraremos el efecto cuando el autovalor del momento angular orbital del electrón es $l = 0$ (estado S), que corresponde un estado con simetría esférica.

A una distancia r del protón, su momento magnético genera un campo magnético B_p que se acopla con el spin del electrón. El acoplamiento será entonces

$$H_{hf} = -\frac{e}{2m} \mathbf{S}_e \cdot \mathbf{B}_p \quad (6.512)$$

donde \mathbf{s}_e el spin del electrón y \mathbf{B}_p el campo magnético asociado por el protón (hf se refiere a el desdoblamiento hiperfino que se producirá por esta interacción).

Tenemos que

$$\mathbf{B}_p = \nabla \times \mathbf{A}_p, \quad \mathbf{A}_p = -\frac{1}{4\pi} \boldsymbol{\mu}_p \times \nabla \frac{1}{r} \quad (6.513)$$

donde $\boldsymbol{\mu}_p$ es el momento magnético del protón. Para verificar la fórmula de la derecha se usa que según las ecuaciones de Maxwell

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2} \int d^3x \mathbf{r} \times \mathbf{j}, \quad \nabla^2 \mathbf{A} = \mathbf{j} \quad (6.514)$$

Ahora bien, insertando el valor de \mathbf{A}_p en la ecuación de la derecha se tiene

$$\mathbf{j}_p = -\frac{1}{4\pi} (\nabla \cdot \nabla) \left(\boldsymbol{\mu}_p \times \nabla \frac{1}{r} \right) = -\boldsymbol{\mu}_p \times \nabla \delta^3(\mathbf{x}) \quad (6.515)$$

lo que muestra que el momento magnético del protón está muy localizado, como era de esperar. Con esto, luego de cierto trabajo se llega a la fórmula para la \mathbf{A}_p .

Conocido \mathbf{A}_p , se puede calcular \mathbf{B}_p según la fórmula

$$\mathbf{B}_p = \nabla \times \mathbf{A}_p \quad (6.516)$$

Para calcular el valor de \mathbf{B}_p a partir del de \mathbf{A}_p , notemos que deberemos calcular $\partial_i \partial_j$ de ciertas funciones. Por tratarse de estados con simetría esférica podemos promediar esta fórmula sobre los ángulos y escribir

$$\partial_i \partial_j = \frac{1}{3} \nabla^2 \delta_{ij} \quad (6.517)$$

Con esto, es fácil ver que (6.512),

$$H_{hf} = -\frac{e}{2m} \mathbf{s}_e \cdot \mathbf{B}_p \quad (6.518)$$

toma la forma

$$H_{hf} = -\frac{e}{3m_e} \mathbf{s}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_p \delta^{(3)}(\mathbf{r}) \quad (6.519)$$

El momento magnético del protón puede escribirse siguiendo un análogo clásico como se hizo en el curso pasado con el del electrón. La diferencia vendrá dada por el factor giromagnético g_p que debe ajustarse de manera de reproducir los datos de experiencias diversas. Se tiene

$$\boldsymbol{\mu}_p = -\frac{g_p e}{4m_p} \mathbf{s}_p \quad (6.520)$$

donde $g_p = 5,587$ y m_p es la masa del protón. Usando teoría de perturbaciones se encuentra que a primer orden el corrimiento de energía en el nivel fundamental será

$$\langle H_{hf} \rangle = \frac{e^2}{12m_e m_p} g_p \mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_p |\psi_1(0)|^2 \quad (6.521)$$

Aquí $|\psi_1(0)|^2$ es el módulo cuadrado de la función de onda del fundamental,

$$|\psi_1(0)|^2 = \frac{(m_e \alpha)^3}{\pi} \quad (6.522)$$

Para calcular el producto $\mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_p$ se procede así:

$$\mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_p = \frac{1}{2} (\mathbf{s}_p + \mathbf{s}_e)^2 - \frac{1}{2} \mathbf{s}_p^2 - \frac{1}{2} \mathbf{s}_e^2 \quad (6.523)$$

Los autovalores de \mathbf{s}_e^2 y \mathbf{s}_p^2 son iguales a $3/4$. En cuanto a $(\mathbf{s}_p + \mathbf{s}_e)^2$, como el spin total puede ser 0 (singlete) o 1 (tripleto), $s(s+1) = 0, 2$. Con esto, se tiene

$$\mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_p = -\frac{3}{4} \text{ singlete} \quad (6.524)$$

$$\mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_p = \frac{1}{4} \text{ tripleto} \quad (6.525)$$

Con esto, la diferencia entre los valores de $\langle H_{hf} \rangle$, que corresponde a la diferencia de energía entre los niveles desdoblados será

$$\Delta E_{hf}^{n=1, j=1/2} (\text{tripleto} - \text{singlete}) = 5,89 \times 10^{-6} \text{eV} = 1,42 \times 10^9 \text{ Hz} \quad (6.526)$$

Comparando este valor al de la estructura fina, vemos que se ha producido una reducción proporcional a m_e/m_p .

El acuerdo entre las predicciones de la teoría de Dirac y los espectros obtenidos para átomos hidrogenoides es muy bueno salvo en el caso de los niveles $S_{1/2}$ y $P_{1/2}$ en que la degeneración que debería existir entre dos estados con el mismo j y el mismo n y solo diferir en el l ($l = 1/2 - 1/2 = 0$ y $l = 1/2 + 1/2 = 1$) aparece rota, existiendo entre estos niveles un corrimiento llamado de Lamb, de 1057MHz. Sólo al incluir los efectos de la cuantificación del campo electromagnético y calcular las llamadas correcciones radiativas en el contexto de la teoría cuántica de los campos del electrón y fotón (electrodinámica cuántica), se puede dar cuenta teórica de este hecho experimental.

Interpretaciones de las soluciones de energía negativa

En el final de esta clase abandonaremos la ideología del avestruz y enfrentaremos el problema de explicar cómo pueden existir soluciones de la ecuación de Dirac con energía negativa aún para el caso de partículas libres.

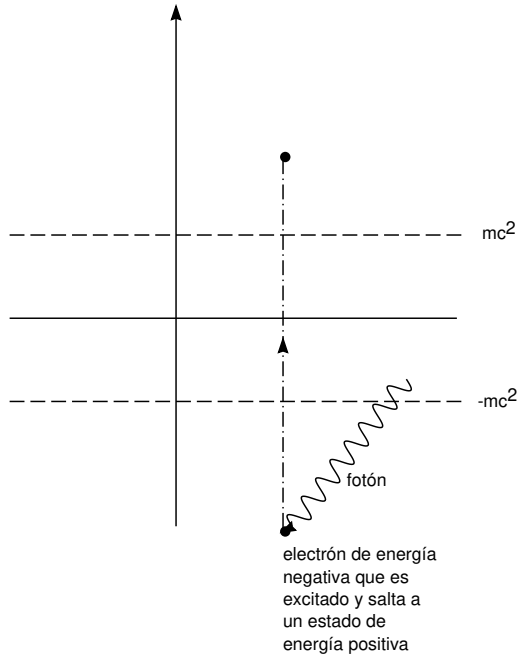
Para ello, nos basaremos en la explicación intuitiva propuesta por Dirac en los años 30, basada en la siguiente

- Suposición: Todos los niveles de energía negativa están ocupados en el estado fundamental, que llamaremos estado de vacío. Si ahora consideramos un electrón libre, no podrá estar en ninguno de los estados de energía negativa porque todos ellos están ocupados y el principio de exclusión de Pauli debe ser respetado también para estos infinitos niveles de energía negativa. Es por ello que el electrón libre deberá necesariamente estar en un estado de energía positiva y, siendo que está libre de toda interacción, será un estado estable. Más precisamente, escribe Dirac que:

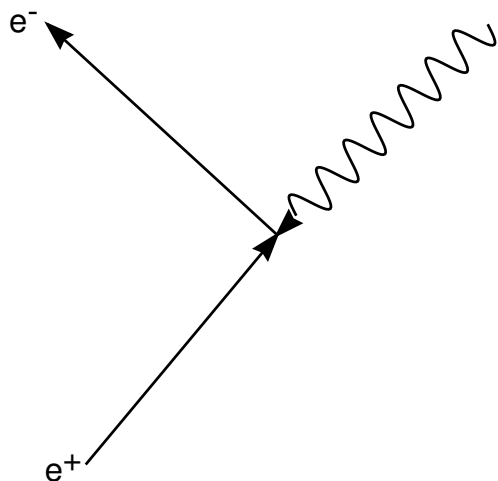
all the states of negative energy are occupied except perhaps a few of small velocity

Por supuesto, esta propuesta enfrentó inmediatamente grandes dificultades: un problema obvio es cómo explicar la infinita densidad de carga implicada por los omnipresentes electrones de energía negativa. Como respuesta Dirac propuso reinterpretar la densidad que aparece en las ecuaciones de Maxwell como el apartamiento del estado de electrificación del universo.

En la interpretación de Dirac, los electrones que “tapan” todos los estados de energía negativa, pueden ser eyectados de ellos si se los excita. La energía de excitación debe ser suficiente como para saltar la brecha (el “gap”) de $2mc^2$. Para que ello suceda se los puede excitar por ejemplo haciendo que absorban la energía de un fotón que choque con uno de ellos. Tal proceso se representa en la figura siguiente:



Al eyectarse un electrón de ese mar de electrones de energía negativa (“mar de Dirac”), queda en éste un agujero (ausencia de una partícula con carga negativa) que puede interpretarse como una partícula de carga positiva. Un proceso tal se puede graficar así:



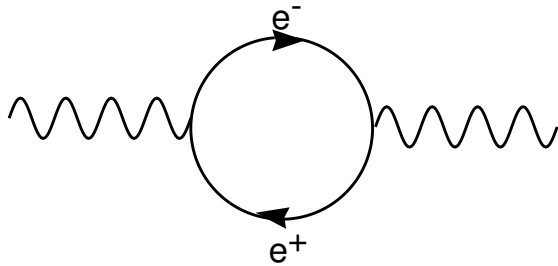
Se puede interpretar entonces al agujero como una verdadera partícula con carga positiva.

Señala Pais [10], físico y biógrafo de Dirac que este, inicialmente, no vio claramente lo que sucedía: a principios de 1928 propuso simplemente descartar la solución con energía negativa. En junio de ese año admitió en una conferencia que no se la podía ignorar y calificó por ello a su ecuación como aproximada. Hacia principios de 1929, junto con Weyl, comenzó a especular que la solución de energía negativa, como podía verse como una partícula con carga positiva, correspondería a un protón y pensó que la masa de su ecuación debía ser un promedio de las masas del electrón y del protón (!!). De hecho, el título de su trabajo en 1930 era *A theory of electrons and protons* [11]. Recién en mayo de 1931 descartó esto y escribió, en lo que él llamó “a small step forward” (!!!) [12]:

A hole, if there were one, would be a new kind of particle, unknown to experimental physics, having the same mass and opposite charge of the electron.

Antes de fin de año (y de que Dirac cumpliera 29 años) Carl Anderson, que aparentemente ignoraba la teoría de Dirac, anunció evidencia experimental para el anti-electrón o positrón sugerido por Dirac. Se trataba de la observación de la traza dejada por rayos cósmicos sometidos a un campo magnético, en una cámara de Wilson. La dirección en que se curvaba la traza correspondía a una partícula con carga positiva y masa mucho menor que un protón.

Una vez creado el agujero, un electrón con energía positiva (el mismo que fuera eyectado, u otro), puede “caer” al estado con energía negativa correspondiente, que se encontraba desocupado. Se aniquilan así el electrón que cae y el positrón asociado con el agujero; la energía disponible al desaparecer el par electrón-positrón se manifiesta como emisión de un fotón. Usando nuevamente un diagrama, tendríamos, para el proceso completo, en el cual un fotón “crea” originalmente un par electrón-positrón, que luego se aniquila dando un fotón:



De hecho, un proceso como el de la figura anterior puede suceder aún si el fotón tiene energía menor que la mínima necesaria ($E_{min} = 2mc^2$) para crear un par electrón-positrón. Esto sucede cuando un campo electromagnético produce un acomodamiento de carga dando origen a una “polarización del vacío”. Esto, que inicialmente fue una predicción teórica, se confirmó experimentalmente a través de la existencia del corrimiento de niveles al que nos referimos más arriba (de Lamb), que puede ser descrito con precisión, en el marco de la teoría cuántica de campos cuando diagramas como el anterior son tenidos en cuenta al estudiar los niveles de energía de un electrón (cuántico) en el campo electromagnético (cuántico) del núcleo.

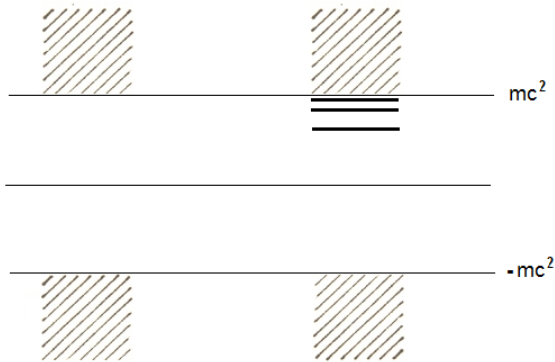
Una vez que se acepta que partículas masivas como el electrón y el positrón se pueden aniquilar, la descripción de las partículas en términos de funciones de

onda pierde consistencia. En efecto, ¿qué se hace por ejemplo con la probabilidad de encontrar a una partícula en algún lugar del espacio en un instante t_2 , expresada en términos de la función de onda, si la partícula fue aniquilada en un instante $t_1 < t_2$? Sucede que en los términos planteados por Dirac al postular la existencia de un mar de infinitas partículas con energía negativa, debe plantearse una teoría de muchas partículas y no de una única en presencia de un potencial. Notemos que con el abandono del concepto de función de onda de una partícula como medio para describir electrones relativistas, la razón por la que se descartaba a la ecuación de Klein-Gordon deja de existir. De hecho, como dijimos, la ecuación de Klein-Gordon describe correctamente, en otro contexto, partículas relativistas de spin cero. Pero la interpretación de Dirac sobre los estados de energía negativa deja de ser válida pues los bosones no obedecen el principio de exclusión de Pauli y no habría razón entonces para que el mar de Dirac de bosones estuviera “lleno”.

Será necesario entonces construir una verdadera teoría de muchas partículas para acomodar a partículas y antipartículas de manera consistente. Esto se logra luego de la llamada “segunda cuantificación”, que lleva a la introducción de campos cuantificados capaces de crear o aniquilar partículas. La formulación de la teoría de campos hace completamente innecesaria la interpretación de las antipartículas como el positrón como agujeros en un mar. Julian Schwinger, uno de los que desarrolló justamente la electrodinámica cuántica, escribió [13]:

La imagen de un mar infinito de electrones de energía negativa es hoy considerada una curiosidad histórica, y olvidada.

Concluimos esta sección representando el espectro de energías que obtuvimos al estudiar la ecuación de Dirac para electrón en el caso de un potencial coulombiano atractivo (sin tener en cuenta las correcciones de la electrodinámica cuántica). En la parte de la izquierda se representan, con rectas inclinadas, los posibles estados de un electrón (la parte inferior corresponde a los electrones de energía negativa del “mar de Dirac” o un electrón de Dirac libre con energía positiva. En la parte de la derecha, cuando actúa el potencial de Coulomb sobre un electrón, vemos que el espectro comprende una franja continua de energía positiva que se extiende desde mc^2 hasta $+\infty$, una serie discreta de energía positiva inferior a mc^2 (el espectro observado en el átomo de hidrógeno) y una franja continua de energía negativa desde $-mc^2$ hasta $-\infty$.



La figura muestra el espectro de energía de un electrón de Dirac: a la izquierda en el caso libre, en el derecho en el caso del potencial Coulombiano atractivo. Nótese que $mc^2 = 511 \text{ keV}$ mientras que el nivel ms bajo del atomo de hidrógeno corresponde a una energía de $13,6\text{eV}$

Conjugación de carga

La teoría de agujeros para explicar el rol de los estados de energía negativa de la teoría relativista de Dirac para el electrón, implica la existencia de partículas con la misma masa, el mismo spin y carga opuesta, los electrones y positrones. La ecuación de Dirac debe entonces admitir una nueva simetría que corresponda al intercambio entre partícula (electrón) y antipartícula (positrón).

Busquemos entonces una transformación que pase de un espinor ψ , que describa una partícula con una dada carga, a otro espinor ψ^C que describe uno con carga opuesta. Estos espinores deben obedecer las siguientes ecuaciones

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - e\gamma^\mu \Lambda_\mu - m) \psi = 0 \quad \text{para el electrón} \quad (6.527)$$

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu + e\gamma^\mu \Lambda_\mu - m) \psi^C = 0 \quad \text{para el positrón} \quad (6.528)$$

Buscamos una transformación

$$\psi \rightarrow \psi^C \quad (6.529)$$

que sea local y que, hecha dos veces sucesivamente deje a ψ sin cambiar, a menos de una fase inobservable. Para obtenerla, tomemos (6.527), conjuguémosla,

$$(\gamma^{\mu*} (i\partial_\mu + e\Lambda_\mu) + m) \psi^* = 0 \quad (6.530)$$

Si logramos encontrar una matriz Q no singular tal que

$$\gamma^{\mu*} = -Q^{-1}\gamma^\mu Q \quad (6.531)$$

y reemplazamos en (6,530) tendremos

$$(-Q^{-1}\gamma^\mu Q (i\partial_\mu + e\Lambda_\mu) + m) \psi^* = 0 \quad (6.532)$$

Luego, multiplicando a izquierda por $-Q$ llegamos a que

$$(\gamma^\mu (i\partial_\mu + e\Lambda_\mu) - m) Q\psi^* = 0 \quad (6.533)$$

que es la ecuación buscada siempre que identifiquemos al espinor conjugado de carga con

$$\psi^C = Q\psi^* \quad (6.534)$$

Conviene escribir a la matriz Q como un producto de dos matrices, C y γ_0 y agreguemos una posible fase η_C inobservable:

$$Q = \eta_C C \gamma^0 \quad (6.535)$$

con lo que

$$\psi^C = \eta_C C \gamma^0 \psi^* = \eta_C C \bar{\psi}^T \quad (6.536)$$

ψ^C correspondería entonces a la función de onda del positrón, si ψ fuera la función de onda del electrón. Para determinar a C a partir de la relación (6.531) trabajemos en una representación conveniente (una vez que la encontremos, podremos cambiar de representación usando el teorema fundamental de Pauli). Elegimos la representación de Dirac,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (6.537)$$

Tendremos entonces, a partir de (6.531)

$$\gamma^{\mu*} = -Q^{-1}\gamma^\mu Q \Rightarrow \gamma^\mu = -Q\gamma^{\mu*}Q^{-1} \Rightarrow \gamma^\mu = -C\gamma^0\gamma^{\mu*}\gamma^0C^{-1} \quad (6.538)$$

Es fácil ver que en esta representación se cumple

$$\gamma^0\gamma^{\mu*}\gamma^0 = \gamma^{\mu T} \quad (6.539)$$

con lo que (6,531) deviene

$$\gamma^\mu = -C\gamma^{\mu T}C^{-1} \quad (6.540)$$

En la representación elegida, γ^1 y γ^3 simplemente cambian de signo al transponer por lo que la ecuación (6.540) implica que C debe conmutar con ellas. Es fácil ver que una posible elección es

$$C = i\gamma^2\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^2 \\ -i\sigma^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.541)$$

Es importante analizar la acción de C sobre una solución con energía negativa, spin hacia abajo y que, por simplicidad, corresponda a una partícula en reposo:

$$\psi = \exp(imt) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.542)$$

El conjugado de carga será, de acuerdo a lo anterior

$$\psi^C = \eta_C C \bar{\psi}^T = \eta_C \exp(-imt) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.543)$$

Luego, el conjugado de carga de un electrón de energía negativa y spin hacia abajo es un electrón de energía positiva y spin hacia arriba.

6.23. Transformada de Fourier discreta

Aunque ya la hemos usado informalmente, dedicaremos aquí unas líneas a definir la transformada de Fourier discreta. Esta transformación nos resultará de gran utilidad a lo largo del libro.

Consideremos una función $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, definida sólo en un número finito n de puntos x_j , $j = 0, \dots, n-1$, tal que $f_j = f(x_j)$. En tal caso es posible definir una transformada discreta de Fourier \tilde{f}_k de la siguiente forma:

$$\tilde{f}_k = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=0}^{n-1} f_j e^{-2\pi i j k / n}, \quad k = 0, \dots, n-1.$$

Conocidos los n valores \tilde{f}_k , los n valores f_j pueden recuperarse exactamente mediante la transformación inversa, dada por

$$f_j = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{f}_k e^{2\pi i j k / n}, \quad j = 0, \dots, n-1$$

Esto puede demostrarse fácilmente, reemplazando \tilde{f}_k por su definición:

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^{n-1} \left[\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j'=1}^{n-1} f_{j'} e^{-2\pi i j' k / n} \right] e^{2\pi i j k / n} = \sum_{j'=0}^{n-1} f_{j'} \left[\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} e^{2\pi i k (j-j')} \right] = f_j$$

donde hemos utilizado el resultado

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} e^{2\pi i k (j-j') / n} = \delta_{jj'} = \begin{cases} 1 & j = j' \\ 0 & j \neq j' \end{cases}$$

válido para j, j' enteros. En efecto, si $j = j'$, $e^{2\pi i k (j-j') / n} = 1$ y

$$\sum_{k=0}^{n-1} e^{2\pi i k (j-j') / n} = n,$$

mientras que si $j \neq j'$ (y $|j - j'| < n$)

$$\sum_{k=0}^{n-1} e^{2\pi i k (j-j') / n} = \frac{1 - e^{2\pi i (j-j')}}{1 - e^{2\pi i (j-j') / n}} = 0$$

para $j - j'$ entero.

Bibliografía

- [1] Gordon Baym. *Lectures on Quantum Mechanics*. CRC Press, 1969.
- [2] James Binney y David Skinner. *The Physics of Quantum Mechanics*. Oxford, 2014.
- [3] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu y Franck Laloë. *Quantum Mechanics*. 2.^a ed. Vol. 1. Wiley, 2020.
- [4] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu y Franck Laloë. *Quantum Mechanics*. 2.^a ed. Vol. 2. Wiley, 2020.
- [5] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu y Franck Laloë. *Quantum Mechanics*. 2.^a ed. Vol. 3. Wiley, 2020.
- [6] W. Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics*. 3.^a ed. Springer, 2000.
- [7] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. 2.^a ed. Pearson Prentice Hall, 2005.
- [8] L. D. Landau y E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics. Non-relativistic Theory*. 3.^a ed. Vol. 3. Course of Theoretical Physics. Pergamon Press, 1977.
- [9] Robert Littlejohn. *Quantum Mechanics*. 2019. URL: <http://bohr.physics.berkeley.edu/classes/221/1112/221.html>.
- [10] Alastair I. M. Rae. *Quantum Mechanics*. 4.^a ed. IOP Publishing, 2002.
- [11] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, 1994.
- [12] Fidel Schaposnik. *Mecánica Cuántica I*. 2001.
- [13] Ramamurti Shankar. *Principles of Quantum Mechanics*. 2.^a ed. Springer, 1994.
- [14] Ben Simons. *Advanced Quantum Physics*. 2009. URL: <http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/~bds10/aqp.html>.
- [15] David Tong. *Kinetic Theory*. 2012. URL: <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/kinetic.html>.
- [16] David Tong. *Topics in Quantum Mechanics*. 2017. URL: <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/topicsinqm.html>.

- [17] Steven Weinberg. *Lectures on Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2013.