

Dof
29

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE CIENCIAS



**DEGENERACION ACCIDENTAL EN EL EFECTO ZEEMAN
Y SU GRUPO DE SIMETRIA EN EL CASO DEL
POTENCIAL COULOMBIANO.**

T E S I S
Que para obtener el Título de
F I S I C A
Presenta

NOELIA MENDEZ ALARCON

1984



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Capítulo I

Simetría y Teoría de Grupos

1.1 Introducción a la Simetría

Básicamente, un problema de Mecánica Cuántica se plantea por medio de la ecuación de Schrödinger, teniéndose en unos casos sistemas estacionarios (ecuación de Schrödinger independiente del tiempo) y en otros sistemas no estacionarios (ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo).

Fijando nuestra atención al primer caso en la resolución de un átomo, una molécula o un sólido, se tiene la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

$$H \Psi_n = E_n \Psi_n \quad (1.1.1)$$

donde hay que encontrar sus eigenvalores E_n y eigenfunciones Ψ_n . Desde el punto de vista matemático, se ha obse-

vado que existe la posibilidad de encontrar soluciones analíticas para los problemas de eigenvalores y eigenfunciones, cuando el sistema físico posee alguna simetría.

La simetría es una atribución fundamental del mundo natural que permite comprender mejor ciertos aspectos de un sistema físico.

La simetría se definió originalmente en la Mecánica Clásica como todas aquellas transformaciones geométricas (como son traslaciones, reflexiones, rotaciones del sistema, etc.) que dejan inalterado el hamiltoniano del problema. Más adelante se consideraron también transformaciones canónicas que dejan invariante el hamiltoniano. En mecánica cuántica, esta definición sigue siendo válida.

Si hay un conjunto de eigenfunciones del hamiltoniano perteneciente al mismo eigenvalor, ante una transformación canónica de simetría, se transforman en combinaciones lineales de ellas mismas.

Se puede mostrar que las transformaciones geométricas y canónicas de simetría forman lo que se conoce como GRUPO. De aquí que se describa la simetría por medio de la Teoría de Grupos.

"Un grupo G es un conjunto de elementos A, B, C, \dots para los cuales está definida una ley de composición, llamada genéricamente 'multiplicación'. Esta multiplicación especifica unívocamente para cada par de elementos del grupo (los factores) un tercer elemento del grupo (su producto). Se postula además que las siguientes propiedades se cumplen:

1) Ley asociativa

$$A(BC) = (AB)C \quad (1.1.2)$$

2) Existe un, y sólo un, elemento llamado identidad o elemento unidad, y que se simboliza con E , el cual tiene la propiedad de que para cualquiera A ,

$$EA = AE = A \quad (1.1.3)$$

3) Para cualquier A existe otro elemento en el grupo, llamado el inverso de A y que se simboliza A^{-1} , tal que

$$A^{-1}A = AA^{-1} = E \quad (1.1.4)$$

El uso de la Teoría de Grupos en la Mecánica Cuántica, se realizó simultáneamente con la aparición de los métodos operacionales en ésta última.

Las simetrías que fueron explotadas primero fueron las simetrías geométricas que son debidas a las propiedades geométricas del sistema físico. Ejemplos de ésta simetría son: la simetría con respecto a rotaciones de una partícula bajo una fuerza central, la simetría cristalográfica de un cuerpo sólido, la simetría polihedral de un sistema molecular, la simetría permutacional de las partículas idénticas, etc.

Dentro de la Teoría de Partículas Elementales las propiedades de simetría han permitido una mejor comprensión de la naturaleza de éstas.

Al principio de esta discusión, nos referímos también a sistemas físicos no estacionarios, siendo descriptos por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} , \quad (1.1.5)$$

la cual se podrá resolver más fácilmente si aprovechamos sus simetrías; - el tratamiento matemático adecuado para estos problemas sigue siendo la Teoría de Supos.

No podemos dejar de referirnos a una propiedad muy importante llamada DEGENERACION de los niveles de energía, i.e. niveles con la misma energía, que se presenta en algunos sistemas físicos; esta propiedad es una consecuencia de las simetrías del sistema físico, en ocasiones aparentes y en otras ocultas. En el último caso se suele denotar esa simetría como "ACCIDENTAL". Ejemplos de sistemas donde aparece este tipo de simetría son: el átomo de hidrógeno y el oscilador armónico.

Las consecuencias que implica para un sistema físico el poseer alguna simetría, en general, tiene que ver con leyes de conservación. Así por ejemplo tenemos que la invian-

cia traslacional conduce a la conservación de la cantidad de movimiento, la invariancia bajo rotación conduce a la conservación del momento angular, la invariancia bajo traslación en el tiempo conduce a la conservación de la energía, la invariancia bajo la inversión espacial conduce a la conservación de la paridad, etc.

De ésta manera, se puede afirmar que las consideraciones de simetría dentro de la física moderna ayudan a una mejor comprensión de la naturaleza de los sistemas físicos.

1.2 La simetría en el contexto de la Teoría de Grupos.

Deseamos formalizar dentro de la Teoría de Grupos, las ideas principales que enunciáramos en la sección anterior. La simetría del operador hamiltoniano la estudiaremos por medio de la Teoría de Grupos.

Utilizaremos el término operación física o transformación física como expresiones sinónimas de transformación geométrica o canónica, con la intención de que el lector se sienta familiarizado con esta nueva terminología.

Cuando a un sistema físico se le aplican una operación o transformación física, como es el de ser rotado, reflejado, trasladado, invertido, etc., desde el punto de vista de la Geometría Analítica la describimos en forma matricial; por ejemplo: al ser rotado un sistema β radianes alrededor del eje Z se tiene:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta & -\sin \beta & 0 \\ \sin \beta & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

(1.2.1)

o cuando el sistema es trasladado en el eje $+X$ una distancia A , se tiene la ecuación matricial:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ A & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x \end{pmatrix}$$

(1.2.2)

Si denotamos por R la matriz asociada a operaciones físicas, se obtiene la ecuación $\underline{x}' = R \underline{x}$, donde \underline{x}' y \underline{x} son matrices columna.

Todas las transformaciones u operaciones físicas R que hemos mencionado satisfacen la definición y propiedades de un grupo, siendo la multiplicación matricial su ley de composición.

Si tratásemos ahora de obtener un grupo de operadores que dejen invariantes al hamiltoniano. Para lograr ésto, es necesario introducir un grupo de operadores de transformación $\{P_R\}$ isomórfico al grupo de transformaciones

físicas $\{R\}$, como discutiremos en seguida.

"Dos grupos $G: \{A_1, A_2, \dots\}$ y $\bar{G}: \{\bar{A}_1, \bar{A}_2, \dots\}$ son isomórficos cuando se puede establecer una correspondencia biunívoca entre sus elementos $A_i \leftrightarrow \bar{A}_j$ tal que se cumple $A_i A_j \leftrightarrow \bar{A}_i \bar{A}_j$ " (1).

Antes de demostrar el isomorfismo entre $\{P_R\}$ y $\{R\}$, vamos a definir P_R . Para cada R hay un P_R siendo éste último un operador que actúa sobre las funciones de onda y no sobre las coordenadas. Mediante éstos operadores seremos capaces de estudiar entonces las propiedades de un sistema físico particular, que estará descrito dentro de la mecánica cuántica por un conjunto de funciones de onda. Para su definición seguiremos la convención de Wigner: P_R actuará sobre una función de onda arbitraria $\Psi(\underline{x})$ en la forma siguiente

$$P_R \Psi(\underline{x}) \equiv \Psi'(\underline{x}) \text{ donde } \frac{\Psi'(\underline{x})}{\underline{x} = \underline{x}_0} = \Psi(\underline{x}) \Big|_{\underline{x} = R^{-1}\underline{x}_0} \quad (1.2.3)$$

La definición (1.2.3) implica que la pro-

piedad física descrita por $\psi(\underline{x})$ en un punto A que se transforma en el punto B por medio de la operación R, es igualmente descrita por el valor de $P_R \psi(\underline{x})$ en el punto B. Damos una ilustración (FIG. 1) de ésto

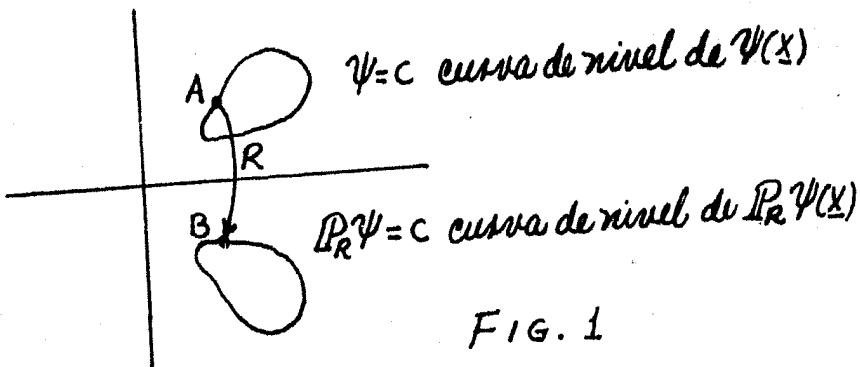


FIG. 1

La demostración del isomorfismo es la siguiente. Por definición

$$P_{SR} \psi(\underline{x}) \equiv \phi(\underline{x}) \text{ donde } \phi(\underline{x}) = \psi(\underline{x}) \quad (1.2.4)$$

$\underline{x} = x_0$ $\underline{x} = (SR)^{-1}x_0$

Por otra parte se tiene

$$P_S P_R \psi(\underline{x}) = P_S \psi'(\underline{x}) \equiv \psi''(\underline{x}); \quad (1.2.5)$$

$$\psi''(\underline{x}) = \psi'(\underline{x}) = \psi(\underline{x}) = \psi(\underline{x})$$

$\underline{x} = x_0$ $\underline{x} = S^{-1}x_0$ $\underline{x} = R(S^{-1}x_0)$ $\underline{x} = (SR)^{-1}x_0$

Haciendo $\psi'(\underline{x}) = \phi(\underline{x})$ se tiene

$$P_S P_R = P_{SR} \quad (1.2.6)$$

Por lo tanto, se ha mostrado que el grupo de operadores de transformación $\{P_R\}$ y el grupo de transformaciones físicas $\{R\}$ son isomórficos.
El operador P_R satisface las siguientes propiedades

$$(\psi, \phi) = (P_R \psi, P_R \phi) \quad (1.2.7)$$

$$P_R \{\alpha \psi(x) + \beta \phi(x)\} = \alpha P_R \psi(x) + \beta P_R \phi(x)$$

por lo que es un operador unitario y lineal⁽²⁾.

A continuación demostraremos como un operador $H(x, p)$, donde x indica coordenadas y p cantidades de movimiento, asociado a una propiedad física observable se transforma bajo la acción del grupo de transformaciones físicas $\{R\}$, utilizando el isomorfismo de $\{R\}$ y $\{P_R\}$.

Si $\psi(x)$ se le aplica $H(x, p)$ donde $p = i\nabla$ se obtendrá una nueva función $\phi(x)$ o sea

$$H(\underline{x}, \underline{P}) \psi(\underline{x}) = \phi(\underline{x}) \quad (1.2.8)$$

y aplicando \underline{P}_R a ésta ecuación se tiene:

$$\underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) \psi(\underline{x}) = \underline{P}_R \phi(\underline{x})$$

$$\underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) \underline{P}_R^{-1} \underline{P}_R \psi(\underline{x}) = \underline{P}_R \phi(\underline{x})$$

$$\underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) \underline{P}_R^{-1} \psi(R^{-1}\underline{x}) = \phi(R^{-1}\underline{x}) \quad (1.2.9)$$

siendo $H(R^{-1}\underline{x}, \tilde{R}\underline{P})\psi(R^{-1}\underline{x}) = \phi(R^{-1}\underline{x})$ y $\psi(\underline{x})$ arbitraria

$$\underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) \underline{P}_R^{-1} = H(R^{-1}\underline{x}, \tilde{R}\underline{P}) \quad (1.2.10)$$

donde \tilde{R} es la matriz transpuesta a R .
Si H es invariante ante la operación con R , esto nos conduce a la CONDICION DE INVARIANCIA.

$$\underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) \underline{P}_R^{-1} = H(\underline{x}, \underline{P}) \quad (1.2.11)$$

De la ecuación (1.2.11), multiplicando \underline{P}_R por la derecha se tiene

$$\underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) = H(\underline{x}, \underline{P}) \underline{P}_R \quad (1.2.12)$$

y utilizando la definición de commutadores en Mecánica Cuántica, derivamos (1.2.12) como

$$[\underline{P}_R, H(\underline{x}, \underline{P})] = 0 \quad (1.2.13)$$

Si $H(X, P)$ commuta con todos los elementos del grupo isomórfico $\{P_R\}$, se dice que $H(X, P)$ es invarianté bajo el grupo de transformaciones físicas $\{R\}$.

El operador $H(X, P)$, llamado operador Hamiltoniano, está asociado a la energía del sistema que describe.

Habíamos mencionado que la invariancia conduce a leyes de conservación, el commutador (1.2.13) establece la condición de invariancia, pero en mecánica cuántica interesa la evolución en el tiempo de una observable física F (cantidad de movimiento, momento angular, energía, etc.). Estando relacionados por

$$\frac{dF}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [F, H] \quad (1.2.14)$$

en el caso de que el commutador sea igual a cero es claro que F es una integral de movimiento y por lo tanto existe una ley de conservación.

Como $[P_R, H(X, P)] = 0$, se tiene de la discusión anterior que P_R es una integral de movimiento, cualquiera que sea el elemento R del grupo. Nos va a interesar en particular lo que sucede cuan-

do el elemento R de un grupo continuo está en la vecindad del origen. En ese caso obtenemos integrales de movimiento con un significado físico preciso como ilustraremos en el caso de la rotación alrededor del eje de las Z .

$$P_\beta f(r, \theta, \psi) = f(r, \theta, \psi - \beta) \quad (1.2.15)$$

Desarrollando $f(r, \theta, \psi - \beta)$ en serie de Taylor tenemos que puede escribirse como

$$f(r, \theta, \psi - \beta) = e^{-i\beta L_z} f(r, \theta, \psi) \quad (1.2.16)$$

donde $L_z = i \frac{\partial}{\partial \psi}$. En el caso de invariancia del sistema ante estas transformaciones,

$$[e^{-i\beta L_z}, H] = 0 \quad (1.2.17)$$

y si β es una rotación infinitesimal, tenemos

$$[L_z, H] = 0 \quad (1.2.18)$$

y L_z es entonces integral de movimiento. El operador L_z corresponde a la componente Z del operador mecánico-cuántico de momento angular y se conoce como el gene-

zador de rotaciones alrededor del eje \hat{z} . La degeneración como consecuencia de una simetría aparente u oculta es conocida por DEGENERACION "NORMAL" o DEGENERACION "ACCIDENTAL" respectivamente, las que a continuación estudiaremos.

Supongamos que el operador hamiltoniano H es invariantes bajo un grupo de simetría $\{P_k\}$ es decir que $P_k H = H P_k$. Aplicando P_k a la ecuación de Schrödinger y seleccionando un conjunto de eigenfunciones linealmente independientes ψ_1, \dots, ψ_n asociadas a un eigenvalor dado E_0 , se tiene

$$P_k E_0 \psi_k = P_k H \psi_k = H (P_k \psi_k) = E_0 (P_k \psi_k) \quad (1.2.19)$$

$k = 1, 2, \dots, n$

Observamos que $P_k \psi_k$ es también eigenfunción con el mismo eigenvalor E_0 original.

Este es un procedimiento mediante el cual generaremos eigenfunciones degeneradas (teniendo la misma energía) al aplicar cada uno de los operadores del grupo $\{P_k\}$, las cuales se expresarán como una combinación lineal de un conjunto

do el elemento R de un grupo continuo está en la vecindad del origen. En ese caso obtenemos integrales de movimiento con un significado físico preciso como ilustraremos en el caso de la rotación alrededor del eje de las Z .

$$P_\beta f(r, \theta, \varphi) = f(r, \theta, \varphi - \beta) \quad (1.2.15)$$

Desarrollando $f(r, \theta, \varphi - \beta)$ en serie de Taylor tenemos que puede escribirse como

$$f(r, \theta, \varphi - \beta) = e^{-i\beta L_z} f(r, \theta, \varphi) \quad (1.2.16)$$

donde $L_z = i \frac{\partial}{\partial \varphi}$. En el caso de invariancia del sistema ante estas transformaciones,

$$[e^{-i\beta L_z}, H] = 0 \quad (1.2.17)$$

y si β es una rotación infinitesimal, tenemos

$$[L_z, H] = 0 \quad (1.2.18)$$

y L_z es entonces integral de movimiento. El operador L_z corresponde a la componente Z del operador mecánico-cuántico de momento angular y se conoce como el gene-

Si $H(\underline{x}, \underline{P})$ commuta con todos los elementos del grupo isomórfico $\{\underline{P}_R\}$, se dice que $H(\underline{x}, \underline{P})$ es invarianta bajo el grupo de transformaciones físicas $\{R\}$.

El operador $H(\underline{x}, \underline{P})$, llamado operador Hamiltoniano, está asociado a la energía del sistema que describe.

Habíamos mencionado que la invariancia conduce a leyes de conservación, el commutador (1.2.13) establece la condición de invariancia, pero en mecánica cuántica interesa la evolución en el tiempo de una observable física F (cantidad de movimiento, momento angular, energía, etc.). Estando relacionados por

$$\frac{dF}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [F, H] \quad (1.2.14)$$

en el caso de que el commutador sea igual a cero es claro que F es una integral de movimiento y por lo tanto existe una ley de conservación.

Como $[\underline{P}_R, H(\underline{x}, \underline{P})] = 0$, se tiene de la discusión anterior que \underline{P}_R es una integral de movimiento, cualquiera que sea el elemento R del grupo. Nos va a interesar en particular lo que sucede cuan-

$$H(\underline{x}, \underline{P}) \Psi(\underline{x}) = \phi(\underline{x}) \quad (1.2.8)$$

y aplicando \underline{P}_R a esta ecuación se tiene:

$$\begin{aligned} \underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) \Psi(\underline{x}) &= \underline{P}_R \phi(\underline{x}) \\ \underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) \underline{P}_R^{-1} \underline{P}_R \Psi(\underline{x}) &= \underline{P}_R \phi(\underline{x}) \\ \underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) \underline{P}_R^{-1} \Psi(R^{-1}\underline{x}) &= \phi(R^{-1}\underline{x}) \quad (1.2.9) \end{aligned}$$

siendo $H(R^{-1}\underline{x}, \tilde{R}\underline{P})\Psi(R^{-1}\underline{x}) = \phi(R^{-1}\underline{x})$ y $\Psi(\underline{x})$ arbitraria

$$\underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) \underline{P}_R^{-1} = H(R^{-1}\underline{x}, \tilde{R}\underline{P}) \quad (1.2.10)$$

donde \tilde{R} es la matriz transpuesta a R .
 Si H es invariante ante la operación con R , esto nos conduce a la CONDICION DE INVARIANCIA.

$$\underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) \underline{P}_R^{-1} = H(\underline{x}, \underline{P}) \quad (1.2.11)$$

De la ecuación (1.2.11), multiplicando \underline{P}_R por la derecha se tiene

$$\underline{P}_R H(\underline{x}, \underline{P}) = H(\underline{x}, \underline{P}) \underline{P}_R \quad (1.2.12)$$

y utilizando la definición de comutadores en Mecánica Cuántica, demostremos (1.2.12) como

$$[\underline{P}_R, H(\underline{x}, \underline{P})] = 0 \quad (1.2.13)$$

$$P_s P_a = P_{sa} \quad (1.2.6)$$

Por lo tanto, se ha mostrado que el grupo de operadores de transformación $\{P_R\}$ y el grupo de transformaciones físicas $\{R\}$ son isomórficos.
El operador P_R satisface las siguientes propiedades

$$(\psi, \phi) = (P_R \psi, P_R \phi) \quad (1.2.7)$$

$$P_R \{\alpha \psi(x) + \beta \phi(x)\} = \alpha P_R \psi(x) + \beta P_R \phi(x)$$

por lo que es un operador unitario y lineal⁽¹⁾.

A continuación demostraremos como un operador $H(x, p)$, donde x indica coordenadas y p cantidades de movimiento, asociado a una propiedad física observable se transforma bajo la acción del grupo de transformaciones físicas $\{R\}$, utilizando el isomorfismo de $\{R\}$ y $\{P_R\}$.

Si $\psi(x)$ se le aplica $H(x, p)$ donde $p = i\nabla$ se obtendrá una nueva función $\phi(x)$ o sea

piedad física descrita por $\Psi(\underline{x})$ en un punto A que se transforma en el punto B por medio de la operación R, es igualmente descrita por el valor de $P_R \Psi(\underline{x})$ en el punto B. Damos una ilustración (FIG. 1) de ésto

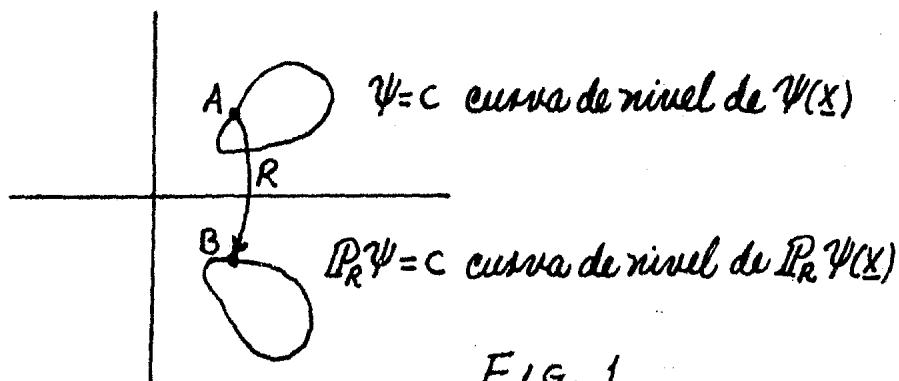


FIG. 1

La demostración del isomorfismo es la siguiente. Por definición

$$P_{SR} \Psi(\underline{x}) \equiv \phi(\underline{x}) \text{ donde } \phi(\underline{x})/\Big|_{\underline{x}=\underline{x}_0} = \Psi(\underline{x})/\Big|_{\underline{x}=(SR)^{-1}\underline{x}_0} \quad (1.2.4)$$

Por otra parte se tiene

$$\begin{aligned} P_S P_R \Psi(\underline{x}) &= P_S \Psi'(\underline{x}) \equiv \Psi''(\underline{x}) ; \\ \Psi''(\underline{x})/\Big|_{\underline{x}=\underline{x}_0} &= \Psi'(\underline{x})/\Big|_{\underline{x}=S^{-1}\underline{x}_0} = \Psi(\underline{x})/\Big|_{\underline{x}=R(S^{-1}\underline{x}_0)} = \Psi(\underline{x})/\Big|_{\underline{x}=(SR)^{-1}\underline{x}_0} \end{aligned} \quad (1.2.5)$$

haciendo $\Psi'(\underline{x}) = \phi(\underline{x})$ se tiene

El objetivo de este trabajo es el estudio de un sistema físico, el del átomo de hidrógeno en presencia de un campo magnético externo, que presenta degeneración de niveles de energía mayores a lo esperado a partir de las simetrías aparentes, i.e., una degeneración accidental, y la identificación del grupo mayor - que da lugar a ésta.

tencial de osciladores armónico) es peculiar en el hecho de que admite un grupo de simetría mayor al usual en potenciales centrales. Como veremos en el siguiente capítulo, ésta simetría adicional se deriva de la existencia de cantidades conservadas (el vector de Runge-Lenz) adicionales a las asociadas con el momento angular, que se conserva para cualquier potencial central.

La degeneración de niveles presente en el átomo de hidrógeno es por tanto mayor a la esperada de la simetría espacial del potencial y las representaciones del grupo $O(3)$ portadas por las eigenfunciones del átomo de hidrógeno asociadas a un valor dado de la energía, son irreducibles. Lo que representaba una degeneración accidental al considerar el grupo $O(3)$ pasa a ser una representación normal al considerar el grupo mayor.

La presencia de degeneración accidental en un problema dado indica entonces la presencia de un grupo de simetrías mayores al supuesto originalmente.

mayor $\{S\} \supset \{R\}$, ante el cual los estados degenerados deben corresponder a una representación irreducible. Mientras no conozcamos este grupo $\{S\}$ se suele decir que la degeneración es ACCIDENTAL.

Sistemas tales como el átomo de hidrógeno presentan esta situación, de la cual hasta 1935 no se tenía idea de su origen o causa, de aquí el nombre de accidental. Al cabo de estudios minuciosos sobre el átomo de hidrógeno, realizados por Pauli, Fock, Bargmann, etc., concluyeron que esta degeneración accidental se debe a una simetría mayor que la ocasional por la invariancia del hamiltoniano ante rotaciones físicas en el espacio, siendo descrita por el grupo de simetría $O(4)$, el grupo de rotaciones en 4 dimensiones. El grupo de rotaciones físicas $O(3)$ es un grupo que permite por lo general explicar la degeneración que presentan sistemas con potenciales centrales, tales como el potencial de pozo cuadrado. El caso del átomo del hidrógeno (y del po-

entonces

$$\begin{aligned} P_R \Psi_i &= P_R \sum_{j=1} \phi_j(M)_{ji} = \sum_{j=1} P_R \phi_j(M)_{ji} = \sum_j \sum_k \phi_k D(R)_{kj} M_{ji} = \\ &= \sum_{j,k,\nu} \Psi_\nu(M^{-1})_{\nu k} D(R)_{kj} (M)_{ji} = \sum_{\nu=1} \Psi_\nu [M^{-1} D(R) M] = \\ &= \sum_{\nu=1}^n \Psi_\nu \bar{D}(R)_{\nu i} \quad . \quad (1.2.23) \end{aligned}$$

Resultando que

$$\bar{D}(R) \equiv M^{-1} D(R) M \quad , \quad (1.2.24)$$

es decir $\bar{D}(R)$ y $D(R)$ se relacionan a través de una transformación de semejanza, por lo que se dice que son EQUIVALENTES.

Resumiendo, se dice que se entiende el origen de la DEGENERACIÓN "NORMAL" de los diferentes eigenvalores E_0 de un hamiltoniano H , si el conjunto de n eigenfunciones degeneradas de energía E_0 forman una base de funciones para una representación irreducible $\{D(R)\}$ de dimensión n del grupo de simetría $\{R\}$ del hamiltoniano H .

Si un grupo de simetría $\{R\}$ actuando sobre una base degenerada E_0 , nos da una representación reducible (representación no irreducible) de dicho grupo, ésto indicaría que debe existir un grupo

to de eigenfunciones asociadas a un eigenvalor son en general IRREDUCIBLES si el grupo de R es el máximo grupo de simetría que admite el problema. Una representación es irreducible siempre que no existe alguna transformación de similitud que dé a todas las $D(R)$ una forma diagonal en bloques, p. ej:

$$D(R) = \begin{pmatrix} D_1(R) & 0 \\ 0 & D_2(R) \end{pmatrix} \text{ REG} \quad (1.2.21)$$

Es posible entonces considerar a las representaciones irreducibles como elementos básicos para la construcción de otras representaciones. Las matrices de la representación serán UNITARIAS, al tener como base funciones orthonormales.

El efecto de escoger un conjunto diferente de funciones linealmente independientes ϕ_1, \dots, ϕ_n que sean combinaciones lineales del conjunto original ψ_1, \dots, ψ_n , produce una representación equivalente a la primera.

Sea

$$\phi_i = \sum_{j=1}^n \psi_j (M^{-1})_{ji} \quad \text{o} \quad \psi_i = \sum_{j=1}^n \phi_j (M)_{ji} \quad (1.2.22)$$

completo de funciones degeneradas.

El efecto de cada P_R sobre cualquier eigenfunción Ψ_k puede ser representado por una matriz. Estas matrices están definidas por

$$P_R \Psi_i = \sum_{k=1}^n \Psi_k D(R)_{ki}; \quad i=1,2,\dots,n \quad (1.2.20)$$

donde Ψ_k tiene la misma energía E_0 que Ψ_i y siendo la dimensión de la matriz $\|D(R)_{ki}\|$ de $n \times n$. De este modo, el conjunto de estas matrices formarán una REPRESENTACION $\{D(R)\}$ de dimensión n del grupo de simetría $\{R\}$ del hamiltoniano H . Una representación de un grupo abstracto la entendemos en general como cualquier grupo compuesto de matrices, el cual es homomórfico al grupo original. Cuunque pasa los ejemplos que vamos a discutir aquí basta que sea isomórfico según la definición dada anteriormente.

Las n eigenfunciones linealmente independientes asociadas a E_0 , se dice constituyen una BASE para la representación. Las representaciones obtenidas al aplicar un operador P_R al conjun-

$$\underline{L} \cdot \underline{A}' = \underline{A}' \cdot \underline{L} = 0, \quad A'^2 = 2H(L^2 + 1) + 1 \quad (2.1.12abc)$$

y además las siguientes reglas de commutación⁽³⁾

$$[L_i, L_j] = i \in_{ijk} L_K, \quad [L_i, A'_j] = i \in_{ijk} A'_K, \quad (2.1.13abc)$$

$$[A'_i, A'_j] = -2iH \in_{ijk} L_K. \quad (2.1.13abc)$$

Estas relaciones de commutación, aún no representan un álgebra de Lie, para lo-
grarlo introducimos la definición⁽³⁾

$$\underline{A} = \frac{\underline{A}'}{(-2H)^{\frac{1}{2}}} \quad (2.1.14)$$

no importando si colocamos $(-2H)^{\frac{1}{2}}$ a la
izquierda o a la derecha de \underline{A}' , ya que
 $[A'_i, H'] = 0$. De (2.1.13abc) se obtiene las re-
glas de commutación⁽³⁾

$$[L_i, L_j] = i \in_{ijk} L_K, \quad [L_i, A_j] = i \in_{ijk} A_K, \quad (2.1.15abc)$$

$$[A_i, A_j] = i \in_{ijk} L_K \quad (2.1.15abc)$$

que corresponde al álgebra de Lie o⁽⁴⁾,
el cual explica la degeneración accidental
en el átomo de hidrógeno sin campo
magnético externo.

$$l = 0, 1, \dots, n. \quad , \quad (2.1.8)$$

de tal manera que la degeneración de los niveles en el átomo de hidrógeno es

$$\sum_{l=0}^n (2l+1) = (n+1) + \frac{2n(n+1)}{2} = (n+1)^2 \quad (2.1.9)$$

Esta degeneración no es explicada por (1.3), ya que, para una dada causalidad una degeneración de $(2l+1)$.

Esta degeneración accidental demanda una explicación, la cual fue investigada por Pauli, Fock y Bargmann.⁽²⁾ El primero de ellos hizo notar la relevancia del vector Runge-Lenz⁽³⁾

$$\underline{A}' = (\frac{1}{2})(\underline{P} \times \underline{L} - \underline{L} \times \underline{P}) - \frac{\underline{r}}{r} \quad (2.1.10)$$

en el problema, ya que representa una integral de movimiento, desde el punto de vista clásico caracteriza la orientación del eje mayor de la órbita elíptica.

Se observa que

$$[A'_i, H'] = 0 \quad (2.1.11)$$

con la definición (2.1.10) se obtiene⁽³⁾

tomando el hamiltoniano, en unidades atómicas la siguiente forma

(2.1.4)

$$H' = \frac{P'^2}{2} - \frac{1}{r'}$$

En coordenadas esféricas (r', θ, φ) , las funciones de H' son:

$$\Psi_{nlm}(r', \theta, \varphi) = R_{nl}(r') Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2.1.5)$$

donde $R_{nl}(r')$ satisface la ecuación radial

$$\left\{ -\left(\frac{1}{r'^2} \frac{d}{dr'} r'^2 \frac{d}{dr'} \right) + \frac{l(l+1)}{r'^2} - \frac{1}{r'} \right\} R_{nl} = E_n R_{nl}(r') \quad (2.1.6)$$

y $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ son los armónicos esféricos.
La energía para estados ligados ($E < 0$) está dada por:

$$E_n = -\frac{1}{2(n+1)^2}; \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (2.1.7)$$

donde hemos denotado por $n+1$, lo que comúnmente se designa en la literatura como n , con el objeto de que ésta nueva n tenga el rango de valores señalados en (2.1.7).

Advertimos que para una n dada, la l toma los siguientes valores

Lapítulo II

Degeneración en el átomo de hidrógeno.

2.1 El átomo de hidrógeno en ausencia de campo magnético externo

El hamiltoniano para el átomo de hidrógeno expresado en términos de las coordenadas x_i'' y momentos $P_i'' = i\hbar \partial/\partial x_i''$ $i=1,2,3$, en unidades normales, es

$$H'' = \frac{P''^2}{2m_0} - \frac{e^2}{r''} \quad (2.1.1)$$

donde m_0 y e son la masa y carga del electrón.
En unidades atómicas

$$\hbar = e = m_0 = 1 \quad (2.1.2)$$

y designaremos las coordenadas por x'_i y los momentos por P'_i , definidos por

$$x'_i = \left(\frac{m_0 e^2}{\hbar^2}\right) x''_i, P'_i = \left(\frac{\hbar}{m_0 e^2}\right) P''_i, \quad i=1,2,3 \quad (2.1.3 \text{ ab})$$

El álgebra de Lie está relacionada con operaciones infinitesimales y el grupo de Lie integra éstas operaciones. En los casos a) y c) se determinan operadores de ascenso y descenso J_+, J_-, J_0 , los cuales no modifican la energía del sistema, obteniéndose sus reglas de commutación para identificar el álgebra de Lie $SU(2)$.

Por el respecto al inciso b) o sea en el límite clásico, se determina la transformación canónica que lleva de un hamiltoniano de una partícula en un potencial coulombiano más un campo magnético externo, a un hamiltoniano de un oscilador armónico en dos dimensiones más un rotor en el plano asociado con la observable \bar{P}_3 , admitiéndose de ésta forma más obvia un grupo de simetría de Lie $SU(2)$.

En conclusión, el grupo $SU(2)$ es el origen de la degeneración de nuestro sistema en el efecto Zeman.

Antes de iniciar formalmente el tema de esta tesis, discutámos en el siguiente capítulo la degeneración en el átomo de hidrógeno con y sí campo mag. externo.

Lapítulo II

Degeneración en el átomo de hidrógeno.

2.1 El átomo de hidrógeno en ausencia de campo magnético externo

El hamiltoniano para el átomo de hidrógeno expresado en términos de las coordenadas x''_i y momentos $P''_i = i\hbar \partial/\partial x''_i$ $i=1,2,3$, en unidades normales, es

$$H'' = \frac{P''^2}{2m_0} - \frac{e^2}{r''} \quad (2.1.1)$$

donde m_0 y e son la masa y carga del electrón.
En unidades atómicas

$$\hbar = e = m_0 = 1 \quad (2.1.2)$$

y designaremos las coordenadas por x'_i y los momentos por P'_i , definidos por

$$x'_i = \left(\frac{m_0 e^2}{\hbar^2}\right) x''_i, P'_i = \left(\frac{\hbar}{m_0 e^2}\right) P''_i, \quad i=1,2,3 \quad (2.1.3ab)$$

tomando el hamiltoniano, en unidades atómicas la siguiente forma

$$H' = \frac{p'^2}{2} - \frac{1}{r'} \quad (2.1.4)$$

En coordenadas esféricas (r', θ, φ) , las eigenfunciones de H' son:

$$\psi_{n\ell m}(r', \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r') Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (2.1.5)$$

donde $R_{n\ell}(r')$ satisface la ecuación radial

$$\left\{ -\left(\frac{1}{r'^2} \frac{d}{dr'} r'^2 \frac{d}{dr'} \right) + \frac{\ell(\ell+1)}{r'^2} - \frac{1}{r'} \right\} R_{n\ell} = E_n R_{n\ell}(r') \quad (2.1.6)$$

y $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ son los armónicos esféricos.

La energía para estados ligados ($E < 0$) está dada por:

$$E_n = -\frac{1}{2(n+1)^2}; \quad n=0, 1, 2, \dots, \quad (2.1.7)$$

donde hemos denotado por $n+1$, lo que comúnmente se designa en la literatura como n , con el objeto de que esta nueva n tenga el rango de valores señalados en (2.1.7).

Advertimos que para una n dada, la ℓ toma los siguientes valores

$$l = 0, 1, \dots, n. \quad , \quad (2.1.8)$$

de tal manera que la degeneración de los niveles en el átomo de hidrógeno es

$$\sum_{l=0}^n (2l+1) = (n+1) + \frac{2n(n+1)}{2} = (n+1)^2 \quad (2.1.9)$$

Esta degeneración no es explicada por $\psi(3)$, ya que, para una dada causalidad una degeneración de $(2l+1)$.

Esta degeneración accidental demanda una explicación, la cual fue investigada por Pauli, Fock y Bargmann.⁽²⁾ El primero de ellos hizo notar la relevancia del vector Runge - Lenz⁽³⁾

$$\underline{A}' = (\frac{1}{2})(\underline{P} \times \underline{L} - \underline{L} \times \underline{P}) - \frac{\underline{r}}{r} \quad (2.1.10)$$

en el problema, ya que representa una integral de movimiento, desde el punto de vista clásico caracteriza la orientación del eje mayor de la órbita elíptica.

Se observa que

$$[A'_i, H'] = 0 \quad (2.1.11)$$

con la definición (2.1.10) se obtiene⁽³⁾

$$\underline{L} \cdot \underline{A}' = \underline{A}' \cdot \underline{L} = 0, \quad A'^2 = 2H(L^2 + 1) + 1 \quad (2.1.12ab)$$

y además las siguientes reglas de commutación⁽³⁾

$$[L_i, L_j] = i \epsilon_{ijk} L_k, \quad [L_i, A'_j] = i \epsilon_{ijk} A'_k, \\ [A'_i, A'_j] = -2iH \epsilon_{ijk} L_k. \quad (2.1.13abc)$$

Estas relaciones de commutación, aún no representan un álgebra de Lie, para lograrlo introducimos la definición⁽³⁾

$$\underline{A} = \frac{\underline{A}'}{(-2H)^{1/2}}, \quad (2.1.14)$$

no importando si colocamos $(-2H)^{1/2}$ a la izquierda o a la derecha de \underline{A}' , ya que $[-[A'_i, H]] = 0$. De (2.1.13abc) se obtiene las reglas de commutación⁽³⁾

$$[L_i, L_j] = i \epsilon_{ijk} L_k, \quad [L_i, A_j] = i \epsilon_{ijk} A_k,$$

$$[A_i, A_j] = i \epsilon_{ijk} L_k \quad (2.1.15abc)$$

que corresponde al álgebra de Lie $o(4)$, el cual explica la degeneración accidental en el átomo de hidrógeno sin campo magnético externo.

Existe una forma alternativa para visualizar este problema y es el de transformar el hamiltoniano coulombiano (2.1.4), a lo que se conoce como el hamiltoniano pseudocoulombiano a través de consideraciones que en la ecuación de Schrödinger⁽⁴⁾

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla'^2 - \frac{1}{r_i}\right)\psi = -\frac{1}{2(n+1)^2}\psi \quad (2.1.16)$$

se efectúa el siguiente cambio de variable

$$x'_i = (n+1)x_i \quad (2.1.17)$$

conduciendo a

$$H\psi \equiv \left(\frac{1}{2}\right)r(-\nabla^2 + 1)\psi = (n+1)\psi \quad (2.1.18)$$

El hamiltoniano pseudocoulombiano⁽⁴⁾ está dado por

$$H = \left(\frac{1}{2}\right)r(P^2 + 1); \text{ donde } P = -i\nabla \quad (2.1.19)$$

el cual commuta con las componentes del momento angular

$$\underline{\underline{\mathcal{L}}} = \underline{r} \times \underline{P} \quad (2.1.20)$$

y también con las componentes del vector Runge-Lenz, ahora definido como⁽⁴⁾

$$\underline{A} = (\frac{1}{2}) (\underline{L} \times \underline{P} - \underline{P} \times \underline{L}) + (\frac{1}{2}) r (\underline{P}^2 + 1). \quad (2.1.21)$$

Teniendo como reglas de commutación de L_i, A_j

$$[L_i, L_j] = i \epsilon_{ijk} L_k, \quad [L_i, A_j] = i \epsilon_{ijk} A_k,$$

$$[A_i, A_j] = i \epsilon_{ijk} L_k. \quad (2.1.22)$$

Comparando estas relaciones con (2.1.15abc), se tiene que corresponden al álgebra de Lie o⁽⁴⁾.

La formulación del problema en el esquema de pseudocoulomb va a resultar más conveniente en la discusión posterior.

2.2 El átomo de hidrógeno en presencia de campo magnético externo.

El hamiltoniano (2.1.1) en un campo magnético externo se modifica reemplazando

$$\underline{P}'' - \frac{e}{c} \underline{A}'' , \underline{A}'' = (\frac{1}{2}) (\underline{\nabla} \times \underline{r}'') , \quad (2.2.1)$$

tomando el campo magnético en la dirección del eje X_3'' , de ésta manera se llega al hamiltoniano

$$H'' = \left(\frac{\hbar^2}{m_0} \right) \left[-\frac{1}{2} \nabla''^2 + \left(\frac{\beta^2}{\hbar} \right) L_3'' + \frac{1}{2} \beta^4 p''^2 \right] - \frac{e^2}{r''} , \quad (2.2.2)$$

$$\text{donde } \beta^2 = \left(\frac{e \pi}{2 \hbar c} \right) , \quad p''^2 = X_1''^2 + X_2''^2 , \quad r''^2 = p''^2 + X_3''^2 , \quad (2.2.3abc)$$

y ∇''^2 es el laplaciano en coordenadas X_i'' , $i=1,2,3$

En unidades atómicas el hamiltoniano toma la siguiente forma

$$H' = -\frac{1}{2} \nabla'^2 + b^2 L'_3 + \frac{1}{4} b^4 p'^2 - \frac{1}{r'} , \quad (2.2.4)$$

donde ∇'^2 es el laplaciano en X'_i , $i=1,2,3$,

$$L'_3 = i \left(x'_1 \frac{\partial}{\partial x'_2} - x'_2 \frac{\partial}{\partial x'_1} \right), \quad p'^2 = x'^2_1 + x'^2_2, \quad r'^2 = p'^2 + x'^2_3 \quad (2.2.5 \text{ abc})$$

y $b^2 = \left(\frac{\hbar^2 \pi}{2 m_0 c e^3} \right)$ siendo una constante adimensional. Si designamos por b_0^2 el valor de b^2 correspondiente a $\mathcal{H}_0 = 1$ kilogauss, se obtiene que $b_0^2 = 0.2 \times 10^{-6}$, de aquí que

$$b^2 = \left(\frac{\mathcal{H}}{\mathcal{H}_0} \right) b_0^2 = 0.2 \times 10^{-6} \left(\frac{\mathcal{H}}{\mathcal{H}_0} \right). \quad (2.2.6)$$

Esto facilita comparar los términos $(\frac{1}{2}) b^4 p'^2$ y $b^2 L'_3$ que aparecen en (2.2.4). Notamos primero que el hamiltoniano en ausencia de campo magnético, el cual devotaremos por H' (2.1.4) tiene eigenvalores $-[2(n+1)]^{-2}$ que son del orden de la unidad para los primeros valores $n = 0, 1, 2, \dots$. En cambio los campos magnéticos que se pueden obtener en la práctica son del orden de kilogauss, y para valores también pequeños de $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $b^2 L'_3$ es del orden de 10^{-6} mientras que el término $(\frac{1}{2}) b^4 p'^2$ es del orden de 10^{-12} de aquí que podemos despreciar este término y quedando expresado el hamiltoniano en la siguiente forma

$$H' = -\frac{1}{2} \nabla'^2 - \frac{1}{r_1} + b^2 L'_3 , \quad (2.2.7)$$

cuyos eigenvalores son

$$- \frac{1}{2}(n+1)^2 + b^2 m$$

$$(2.2.8)$$

siendo caracterizados por n y por m . Es facil ver, que si el momento angular satisface la desigualdad

$$|m| \leq l \leq n$$

$$(2.2.9)$$

persiste una degeneración

$$n-|m|+1$$

$$(2.2.10)$$

para los niveles de energía de un átomo de hidrógeno en un campo magnético externo. La explicación de esta degeneración es el objetivo de esta tesis.

Con la intención de facilitar la discusión de los aspectos de Teoría de Grupos vamos a volver al esquema pseudocoulombiano pero con la restricción de fijar el valor de m . En este caso primero se trata de determinar operadores que contienen estados ψ con n y m fijas, y ésto es lo que se procede a examinar en el siguiente capítulo.

Capítulo III

Degeneración del átomo de hidrógeno en el efecto Zeeman y su grupo de simetría.

3.1 Problema pseudocoulombiano en coordenadas parabólicas.

Para encontrar los operadores que conecten estados Ψ con n y m fijas, en el problema de pseudocoulomb, vamos a estudiar los eigenestados que le corresponden a H (2.1.18) en coordenadas parabólicas⁽⁴⁾, a través de la definición

$$u_1 = r + x_3 = r(1 + \cos\theta), \quad u_2 = r - x_3 = r(1 - \cos\theta), \quad \Psi = \arg \tan(x_3/x_1)$$

(3.1.1 a b c)

se tiene que H y las componentes del momento angular L_3 y del vector Runge-Lenz A_3 son

$$H = \bar{H}_1 + \bar{H}_2 , \quad (3.1.2)$$

$$A_3 = \bar{H}_1 - \bar{H}_2 \quad , \quad (3.1.3)$$

$$L_3 = -i \frac{\partial}{\partial \psi} \quad , \quad (3.1.4)$$

donde \bar{H}_α , $\alpha=1,2$ está dado por

$$\bar{H}_\alpha = -\frac{\partial}{\partial u_\alpha} u_\alpha \frac{\partial}{\partial u_\alpha} - \frac{1}{4u_\alpha} \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} + \frac{u_\alpha}{4} \quad (3.1.5)$$

Para manejar más fácilmente estos hamiltonianos \bar{H}_α , suprimimos el índice α y solo escribimos

$$\bar{H} = -\frac{\partial}{\partial u} u \frac{\partial}{\partial u} - \frac{1}{4u} \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} + \frac{u}{4} \quad (3.1.6)$$

sin perder de vista que son dos hamiltonianos.

El hamiltoniano (3.1.6) lo podemos transformar a un hamiltoniano de un oscilador armónico bidimensional, sustituyendo

$$u = p^2 \quad (3.1.7)$$

y obteniendo

$$\bar{H} = \frac{1}{4} \left(-\frac{1}{p} \frac{\partial}{\partial p} p \frac{\partial}{\partial p} - \frac{1}{p^2} \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} + p^2 \right), \quad (3.1.8)$$

$$H' = -\frac{1}{2} \nabla'^2 - \frac{1}{r^1} + b^2 L'_3 , \quad (2.2.7)$$

cuyos eigenvalores son

$$- \frac{1}{2}(n+1)^2 + b^2 m \quad (2.2.8)$$

siendo caracterizados por n y por m . Es fácil ver, que si el momento angular satisface la desigualdad

$$|m| \leq l \leq n \quad (2.2.9)$$

persiste una degeneración

$$n - |m| + 1 \quad (2.2.10)$$

para los niveles de energía de un átomo de hidrógeno en un campo magnético externo. La explicación de esta degeneración es el objetivo de esta tesis.

Con la intención de facilitar la discusión de los aspectos de teoría de grupos vamos a volver al esquema pseudocoulombiano pero con la restricción de fijar el valor de m . En este caso primero se trata de determinar operadores que contienen estados ψ con n y m fijas, y esto es lo que se procede a examinar en el siguiente capítulo.

$$|\psi_{\nu_1 m} \rangle = \Psi_{\nu_1 m}(u_1, \varphi) \Psi_{\nu_2 m}(u_2, \varphi). \quad (3.1.14)$$

Para el caso de n y m fijas, ad-
vertimos una degeneración acciden-
tal asociada a ν_1, ν_2 expresada como

$$\nu_1 + \nu_2 = n - |m| \quad (3.1.15)$$

cuando las ν 's toman valores ente-
ros no negativos.

Una vez discutido los eigenva-
lores y eigenestados de H en coordena-
das parabólicas, que es una infor-
mación importante, pasemos a la
siguiente sección 3.2.

3.2 Generadores del álgebra de Loile .

Para la construcción de operadores del álgebra de Loile que relaciona los estados Ψ con n y m fijas, se tomará las combinaciones lineales de las componentes del momento angular \underline{L} y del vector Runge-Lenz \underline{A} de la siguiente forma

$$\underline{S} = (\frac{1}{2})(\underline{L} + \underline{A}), \quad \underline{T} = (\frac{1}{2})(\underline{L} - \underline{A}), \quad (3.2.1)$$

siendo éstas también integrales de movimiento de H (2.1.18).

De las relaciones de commutación^(2,4) (2.1.22) entre L_i y A_j , se obtienen para S_i y T_j las siguientes:

$$[S_i, S_j] = i \epsilon_{ijk} S_k, \quad [T_i, T_j] = i \epsilon_{ijk} T_k,$$

$$[S_i, T_j] = 0 \quad (3.2.2 \text{ abc})$$

donde ϵ_{ijk} es un tensor antisimétrico con índices de 1 a 3, correspondiendo su valor de 0 para índices repetidos, de +1 para permutación par y de -1 para per-

mutación impar.

Además, H tiene la siguiente propiedad ^(2,4)

$$H^2 = (4S^2 + 1) = (4T^2 + 1). \quad (3.2.3)$$

Los S_i, T_j son generadores de un álgebra de Lie $\sigma(4)$ de H , en cuanto es expresado $\sigma(4)$ como el producto directo

$$\sigma(4) = \sigma(3) \times \sigma(3). \quad (3.2.4)$$

Indicamos los eigenvalores de $S^2 = T^2$ por $s(s+1)$ y los de S_3 y T_3 por σ, τ respectivamente con rangos $-s \leq \sigma, \tau \leq s$.

Del hecho, que L_3, A_3 comunitan (2.1.22) y son integrales de movimiento de H , lo es también para S_3 y T_3 , entonces se procede a caracterizar los eigenestados $\{s\sigma\tau\}$ para H_0, A_3 , y L_3 por

$$H/\{s\sigma\tau\} = (2s+1)/\{s\sigma\tau\}, \quad (3.2.5)$$

$$A_3/\{s\sigma\tau\} = (\sigma - \tau)/\{s\sigma\tau\}, \quad (3.2.6)$$

$$L_3/\{s\sigma\tau\} = (\sigma + \tau)/\{s\sigma\tau\}, \quad (3.2.7)$$

Por otra parte se tiene de la relación (3.1.3) para A_3 en consideraciones parabólicas, que su eigenvalor está dado por $(\gamma_1 - \gamma_2)$, mientras que para λ_3 es m . De este modo, relacionando lo anterior con (3.2.6), (3.2.7), y que el eigenvalor de H_0 es $(n+1)$, se tiene que

$$s = n/2, \quad s - \gamma = \gamma_1 - \gamma_2 \equiv 2\mu, \quad s + \gamma = m. \quad (3.2.8abc)$$

En (3.2.8b) denotaremos el eigenvalor de A_3 por 2μ donde μ es entero o semientero. De manera que el eigenestado

$$|\gamma_1, \gamma_2, m\rangle = |s \gamma \bar{\gamma}\rangle, \quad (3.2.9)$$

en el cual los números cuánticos están relacionados por (3.1.13), (3.2.8abc).

Definamos S_{\pm} y T_{\pm}

$$S_{\pm} \equiv S_1 \pm iS_2, \quad T_{\pm} \equiv T_1 \pm iT_2 \quad (3.2.10)$$

ahora, aplicando $|s \gamma \bar{\gamma}\rangle$ al producto de operadores $S_{\pm} T_{\mp}$, se tiene

$$S_{\pm} T_{\mp} |s \gamma \bar{\gamma}\rangle = [(s \mp \gamma)(s \pm \gamma + 1)(s \pm \bar{\gamma})(s \mp \bar{\gamma} + 1)]^{\frac{1}{2}} |s, \gamma \pm 1, \bar{\gamma} \mp 1\rangle \quad (3.2.11)$$

notando que en el ket $|s, \sigma \pm 1, \gamma \mp 1\rangle$ tiene el mismo eigenvalor n, m de H_0, L_3 que $|s, \sigma, \gamma\rangle$, y que se cambia a $\mu \pm 1$, según la definición (3.2.8b). Advertimos que S^{\pm}, T_{\mp} sugieren operadores de ascenso y descenso de un álgebra de $Lie su(2)$.

Hasta ésta etapa éstos operadores no se tienen en una forma explícita, para conseguirlo, se reemplazan V_1, V_2, m o s, σ, γ por j, μ, m , definiendo los nuevos eigenvalores como

$$j = (\frac{1}{2})(V_1 + V_2) \quad (3.2.12a)$$

y de (3.1.15) se tiene

$$j = (\frac{1}{2})(V_1 + V_2) = (\frac{1}{2})(n - |m|). \quad (3.2.12b)$$

El eigenvalor μ está dada por (3.2.8b), de tal manera que toma los siguientes valores $\mu = j, j-1, \dots, -j$. De aquí que j, μ, m sean eigenvalores de los siguientes operadores

$$j \rightarrow (\frac{1}{2})(H_0 - 1 - |L_3|) \quad , \quad (3.2.13)$$

$$\mu \rightarrow (\frac{1}{2})(A_3) , \quad (3.2.14)$$

$$m \rightarrow L_3 . \quad (3.2.15)$$

Entonces podemos escribir la igualdad de Kets

$$|\psi, \psi_2 m\rangle = |s\sigma_2\rangle = |j\mu m\rangle . \quad (3.2.16)$$

A continuación deseamos obtener operadores $J_{\pm} = J_1 \pm i J_2$ y $J_0 = J_3$ que actúen sobre los eigenestados $|j\mu m\rangle$ con las siguientes propiedades

$$J_{\pm}|j\mu m\rangle = [(j\mp\mu)(j\pm\mu+1)]^{\frac{1}{2}}|j\mu\pm 1 m\rangle \quad (3.2.17)$$

$$J_0|j\mu m\rangle = \mu|j\mu m\rangle . \quad (3.2.18)$$

De (3.2.11) se ve que estos operadores deben tener la forma

$$J_+ = (\frac{1}{2})S_+T_- (H_0 - 1 - |L_3| - A_3)^{\frac{1}{2}} (H_0 + 1 - |L_3| + A_3)^{\frac{1}{2}} (S_- S_+)^{\frac{1}{2}} (T_+ T_-)^{-\frac{1}{2}} \quad (3.2.19)$$

$$J_- = (\frac{1}{2})S_-T_+ (H_0 - 1 - |L_3| + A_3)^{\frac{1}{2}} (H_0 + 1 - |L_3| + A_3)^{\frac{1}{2}} (S_+ S_-)^{\frac{1}{2}} (T_- T_+)^{-\frac{1}{2}}, \quad (3.2.20)$$

$$J_0 = (\frac{1}{2})(A_3) . \quad (3.2.21)$$

Además, como los estados $|j\mu m\rangle$

de (3.2.16), (3.1.14) son ortogonales en los números cuánticos j, μ, m , se tiene que las matrices

$$(j' \mu' m' | J_q | j \mu m); q = +1, 0, -1, \quad (3.2.22)$$

son diagonales para j, μ y en su dependencia de μ tienen la forma (3.2.17), (3.2.18).

Los operadores $J_q; q = +1, 0, -1$, satisfacen las reglas de commutación

$$[J_0, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}, \quad [J_+, J_-] = 2J_0 \quad (3.2.23ab)$$

que se verifican con ayuda de las reglas (3.2.2abc). Siendo éstos operadores los que conectan estados $|q\rangle$ con nym fijos.

De manera que hemos encontrado operadores J_{\pm}, J_0 que actúan sobre los estados $|j \mu m\rangle$, y que son generadores del álgebra de $su(2)$ para el problema de pseudocoulomb en el efecto Zeeman en consideradas pasobólicas.

En la siguiente sección mostraremos que existe una transformación

canónica que lleva a nuestro problema a otro en que tenemos un oscilador armónico de dos dimensiones más un rotor en el plano. Como es bien conocido el oscilador armónico bidimensional tiene un grupo de simetría $SU(2)$. De esta manera podemos llegar en forma independiente a encontrar la explicación de la degeneración en el efecto Zeeman para el átomo de hidrógeno.

3.3 Transformaciones canónicas en el límite clásico.

Para lograr el objetivo que se menciona al final de la sección 3.2, necesitamos encontrar operadores de ascenso y descenso asociados con el número cuántico γ que aparece en (3.1.12).

Comenzamos considerando el hamiltoniano H (3.1.6), cuyas eigenfunciones son (3.1.11) con (3.1.12). Para la construcción de operadores de ascenso y descenso, introducimos los operadores ⁽⁵⁾

$$I_1 = \left(-\frac{\partial}{\partial u} u \frac{\partial}{\partial u} - \frac{1}{4u} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{u}{4} \right) , \quad (3.3.1)$$

$$I_2 = \frac{1}{i} \left(u \frac{\partial}{\partial u} + \frac{1}{2u} \right) , \quad (3.3.2)$$

$$I_3 = \left(-\frac{\partial}{\partial u} u \frac{\partial}{\partial u} - \frac{1}{4u} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{u}{4} \right) , \quad (3.3.3)$$

que satisfacen las reglas de commutación⁽⁶⁾

$$[I_1, I_2] = -i I_3 , \quad [I_3, I_1] = i I_2 ,$$

$$[I_2, I_3] = i I_1 . \quad (3.3.4abc)$$

siendo generadores de un grupo simplectico

en dos dimensiones $S.p(2) = SU(1,1)$.

Estos operadores son de tal forma que

$$I_3 = \left(-\frac{2}{\partial u} u \frac{\partial}{\partial u} - \frac{1}{4u} \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{u}{4} \right) = \bar{H}. \quad (3.3.5)$$

Las funciones $R_{v,lm}(u^k) e^{im\varphi}$ son eigenestados de I_3 , es decir

$$I_3 R_{v,lm}(u^k) e^{im\varphi} = [v + (lm + 1/2)] R_{v,lm}(u^k) e^{im\varphi} \quad (3.3.6)$$

donde el eigenvalor viene de considerar (3.1.9).

Ahora, si definimos $I_{\pm} = I_1 \pm i I_2$ y le aplicamos $R_{v,lm}(u^k) e^{im\varphi}$, la cual tiene - implícito los polinomios de Laguerre, y usando las propiedades de éstos últimas, se tiene⁽⁸⁾

$$I_{\pm} R_{v,lm}(u^k) e^{im\varphi} = \{[v + lm + (\pm k) \mp (\pm k)] [v + (k_0) \mp (\pm k)]\}^{\frac{1}{2}} R_{v,lm}(u^k) e^{im\varphi}. \quad (3.3.7)$$

Los operadores I_{\pm} son los que corresponden a operadores de ascenso y descenso para el índice v en $R_{v,lm}(u^k) e^{im\varphi}$, con los cuales deseamos construir operadores de creación y aniquilación $\eta, \bar{\xi}$ para éste índice, es decir, que su efecto sea

$$\bar{\xi} R_{v,lm}(u^k) e^{im\varphi} = (v+1)^{\frac{1}{2}} R_{v+1,lm}(u^k) e^{im\varphi}, \quad (3.3.8)$$

$$\sum_{\gamma, |m|} R(\omega_{\gamma}) e^{im\varphi} = \gamma^{\frac{1}{2}} R(\omega_{\gamma}) e^{im\varphi}. \quad (3.3.9)$$

Por ayuda de (3.3.7) se tiene en forma explícita los operadores $\bar{\eta}$ y $\bar{\xi}^{(6)}$ es

$$\bar{\eta} = [\bar{H} + (1_{k_3} - 1)/2]^{1/2} I_+, \quad \bar{\xi} = I_- [\bar{H} + (1_{k_3} - 1)/2]^{1/2}. \quad (3.3.10ab)$$

Por lo tanto hemos conseguido operadores que tengan la propiedad de que

$$\bar{\eta} \psi_{v,m}^{(u,\varphi)} = (\gamma + 1)^{1/2} \psi_{v+1,m}^{(u,\varphi)}, \quad \bar{\xi} \psi_{v,m}^{(u,\varphi)} = \gamma^{1/2} \psi_{v,m}^{(u,\varphi)}, \quad (3.3.11ab)$$

donde $\psi_{v,m}^{(u,\varphi)}$ son las eigenfunciones — (3.1.10), y no hay problema en aplicar los operadores bajo las raíces cuadradas inversas, ya que ellos son diagonales en la base $\psi_{v,m}^{(u,\varphi)}$.

Así que $\bar{\eta}$ y $\bar{\xi}$ actúan como operadores de creación y aniquilación en el índice v . A partir de estos operadores se construyen nuevos operadores coordenada \bar{x} y momento \bar{p} , a través de la definición

$$\bar{x} = (1/\sqrt{2})(\bar{\eta} + \bar{\xi}), \quad \bar{p} = (1/\sqrt{2})(\bar{\eta} - \bar{\xi}). \quad (3.3.12ab)$$

Para pasar al límite clásico, con

reservamos u, ψ pero reemplazamos

$$-i \frac{\partial}{\partial u} \rightarrow P_u ; \quad -i \frac{\partial}{\partial \psi} \rightarrow P_\psi , \quad (3.3.13ab)$$

donde P_u, P_ψ son las variables conjugadas canónicas de u y ψ .

Empezamos considerando (3.3.10a), en la que sustituimos $I_+ = I_1 + iI_2$, (3.3.1), (3.3.2) resultando que

$$\bar{\eta} = [\bar{H} + (|L_3| - 1)/2]^{1/2} [I_1 + iI_2] , \quad (3.3.14)$$

y de (3.3.13ab) se obtienen

$$\bar{\eta} = (\sqrt{2})(\bar{x} - i\bar{p}) , \quad \bar{\xi} = (\sqrt{2})(\bar{x} + i\bar{p}) . \quad (3.3.15ab)$$

Igualando (3.3.14) con (3.3.15a), y despreciando términos como $(1/2), 1$, etc., en base al Principio de Correspondencia, ya que serán pequeños comparados con los eigenvalores de los operadores $|L_3|$ y \bar{H} , tenemos las expresiones para \bar{x} y \bar{p} (observables clásicas).

$$\bar{x} = \sqrt{2} \left(u P_u^2 + \frac{P_\psi^2}{4u} + \frac{u}{4} + \frac{|P_\psi|}{2} \right)^{1/2} \left(u P_u^2 + \frac{P_\psi^2}{4u} - \frac{u}{4} \right) , \quad (3.3.16)$$

$$\bar{p} = -\sqrt{2} \left(u P_u^2 + \frac{P_\psi^2}{4u} + \frac{u}{4} + \frac{|P_\psi|}{2} \right)^{1/2} (u P_u) . \quad (3.3.17)$$

Vamos ahora a considerar el problema auxiliar en donde además de \bar{x}, \bar{P} que son canónicamente conjugadas o sea $\{\bar{x}, \bar{P}\} = 1$, tenemos también variables \bar{X}_3, \bar{P}_3 definidas por

$$\bar{X}_3 = \psi + W(u, P_u, |P_\psi|), \quad \bar{P}_3 = P_\psi, \quad (3.3.18ab)$$

que deben satisfacer los paréntesis de Poisson

$$\{\bar{X}, \bar{X}_3\} = \{\bar{P}, \bar{X}_3\} = \{\bar{X}, \bar{P}_3\} = \{\bar{P}, \bar{P}_3\} = 0, \quad (3.3.19)$$

y además

$$\{\bar{X}_3, \bar{P}_3\} = 1. \quad . \quad (3.3.20)$$

De (3.3.18ab) vemos que (3.3.20) se satisface automáticamente porque aquí el paréntesis de Poisson es

$$\{F, G\} = \frac{\partial F}{\partial u} \frac{\partial G}{\partial P_u} - \frac{\partial F}{\partial P_u} \frac{\partial G}{\partial u} + \frac{\partial F}{\partial \psi} \frac{\partial G}{\partial R_\psi} - \frac{\partial F}{\partial R_\psi} \frac{\partial G}{\partial \psi}. \quad (3.3.21)$$

Pero por otro lado las ecuaciones (3.3.19) nos deben determinar la W . Lásamente

$$\{\bar{X}, \bar{P}_3\} = \{\bar{P}_3, \bar{P}\} = 0, \quad (3.3.22)$$

y las otras dos ecuaciones de (3.3.19) nos

llevan, cuando hacemos el cambio de variable

$$p = U^{1/2}, \quad P_p = 2U^{1/2}P_u \quad (3.3.23ab)$$

a las ecuaciones

$$\frac{\partial W}{\partial p} \frac{\partial \bar{x}}{\partial P_p} - \frac{\partial W}{\partial P_p} \frac{\partial \bar{x}}{\partial p} = - \frac{\partial \bar{x}}{\partial P_q}, \quad (3.3.24)$$

$$\frac{\partial W}{\partial p} \frac{\partial \bar{p}}{\partial P_p} - \frac{\partial W}{\partial P_p} \frac{\partial \bar{p}}{\partial p} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial P_q}. \quad (3.3.25)$$

De las expresiones para \bar{x}, \bar{p} con el cambio de variable (3.3.23ab) obtendremos, en el Apéndice A que

$$\frac{\partial W}{\partial P_p} = \mp \frac{1}{Q} \left(\frac{|P_q|}{p} + p \right), \quad (3.3.26)$$

$$\frac{\partial W}{\partial p} = \mp \frac{P_p}{Q} \left(\frac{|P_q|}{p^2} - 1 \right), \quad (3.3.27)$$

donde \mp depende de si P_q es positivo o negativo y en el que

$$Q = P_p^2 + \left(p^{-1}/|P_q| + p \right)^2. \quad (3.3.28)$$

También se demuestra en el Apéndice A

que

$$\frac{\partial^2 W}{\partial p \partial P_p} = \frac{\partial^2 W}{\partial P_p \partial p} \quad (3.3.29)$$

de modo que se tiene la diferencial exacta

$$dW = \mp Q' P_p (\rho^{-2}/P_y - 1) d\rho \mp Q'' (\rho'/P_y + \rho) dP_p.$$

$$(3.3.30)$$

Para la resolución de ésta, se considera un desplazamiento en la dirección P_p del plano ρ - P_p , aunque ρ , P_y tienen valores fijos, teniéndose el valor de W

$$W = \mp \int \frac{(\rho'/P_y + \rho) dP_p}{P_p^2 + (\rho'/P_y + \rho)^2} = \pm \arg \tan \left[(1/P_y + \rho^2/P_p^2) \right], \quad (3.3.31)$$

y se puede checar que el valor de W satisface las ecuaciones (3.3.26) y (3.3.27).

Finalmente para escribir explícitamente la transformación canónica, regresaremos al sistema original ($u, P_u, \bar{u}, \bar{P}_u$) por (3.3.23ab), de modo que la transformación canónica en el problema de pseudocírculo lleva de las variables

$u_1, u_2, \bar{u}; P_{u_1}, P_{u_2}, \bar{P}_{\bar{u}}$ a \bar{x}_i, \bar{P}_i $i=1,2,3$. Observamos que de (3.3.23ab) la $W(\rho, P_p, |P_y|)$ (3.3.31) toma la forma

$$W(u, P_u, |P_\varphi|) = \pm \arg \tan [(|P_\varphi| + u)/2u P_u]. \quad (3.3.32)$$

Ahora pasamos al problema que nos interesa en que las variables u y P_u toman los índices 1 y 2, de manera que buscamos la transformación canónica entre $u_1, u_2, \varphi; P_{u_1}, P_{u_2}, P_\varphi$ a $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3; \bar{P}_1, \bar{P}_2, \bar{P}_3$. De la discusión anterior se concluye que esta transformación canónica está dada por

$$\bar{x}_i = (\sqrt{2}) (4u_i P_{u_i}^2 + u_i'' P_\varphi^2 + u_i + 2|P_\varphi|)^{-\frac{1}{2}} (4u_i P_{u_i}^2 + u_i'' P_\varphi^2 - u_i), \quad (3.3.33a)$$

$$\bar{P}_i = (-2\sqrt{2}) (4u_i P_{u_i}^2 + u_i'' P_\varphi^2 + u_i + 2|P_\varphi|)^{\frac{1}{2}} (u_i P_{u_i}) \quad (3.3.33b)$$

donde $i=1, 2$ y

$$\bar{x}_3 = \varphi \pm \arg \tan [(|P_\varphi| + u_3)/2u_3 P_{u_3}] \pm \arg \tan [(|P_\varphi| + u_2)/2u_2 P_{u_2}], \quad (3.3.33c)$$

$$\bar{P}_3 = P_\varphi \quad (3.3.33d)$$

y donde el hamiltoniano toma la forma

$$H = \sum_{i=1}^2 [u_i P_{u_i}^2 + (\frac{1}{4}) u_i'' P_\varphi^2 + (\frac{1}{4}) u_i], \quad (3.3.34)$$

el cual es el equivalente clásico de (3.1.2), (3.1.8). El hamiltoniano (3.3.34) en términos de \bar{x}_i, \bar{P}_i $i=1, 2, 3$ se expresa como

$$H_0 = (\frac{1}{2})(\bar{P}_1^2 + \bar{X}_1^2) + (\frac{1}{2})(\bar{P}_2^2 + \bar{X}_2^2) + |\bar{F}_3| \quad (3.3.35)$$

lo cual se puede checar sustituyendo (3.3.33abcd) en (3.3.35) para dar (3.3.34). El hamiltoniano (3.3.35) corresponde a un oscilador armónico bidimensional⁽⁷⁾ más un rotor en el plano asociado - con la observable \bar{P}_3 , admitiéndose de esta forma más clara un grupo de simetría $SU(2)$.

3.4 Problema pseudocoulombiano en coordenadas esféricas.

En las secciones anteriores analizamos el problema de pseudocoulomb en presencia de un campo magnético externo en coordenadas parabólicas, las cuales fue muy conveniente no sólo para determinar el álgebra de simetría de Lie sino que también nos permitió obtener una transformación canónica que mapea el hamiltoniano H (3.1.2) en el de un oscilador armónico de dos dimensiones más un rotor en un plano, haciendo inmediata la aparición del grupo de simetría $SU(2)$.

Este problema también puede ser discutido en coordenadas esféricas, en el cual tomamos como integrales de movimiento el cuadrado del momento angular L^2 y su proyección L_3 , y donde el efecto del campo magnético se visualiza mejor.

También para este caso se desea construir operadores análogos a J_{\pm}, J_0 de (3.2.19), (3.2.20), (3.2.21).

El hamiltoniano que corresponde al problema pseudocoulombiano se indicó en (2.1.18), ésto es

$$H = (\frac{1}{2}) r (-\nabla^2 + 1), \quad \omega_3 = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (3.4.1ab)$$

con ∇^2 el laplaciano en coordenadas esféricas (r, θ, φ) .

Los eigenestados de H están dados por

$$|\nu l m\rangle = R_{\nu l}^{(r)} Y_{lm}^{(\theta, \varphi)}, \quad (3.4.2)$$

siendo $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ los armónicos esféricos

$y^{(5)}$

$$R_{\nu l}^{(r)} = 2^{\nu+\frac{l}{2}} [2(\nu!)/\Gamma(\nu+2l+2)]^{\frac{1}{2}} r^l e^{-r} L_{\nu}^{2\nu+l}(2r), \quad (3.4.3)$$

donde $L_{\nu}^{2\nu+l}(2r)$ son polinomios de Laguerre.

Los eigenvalores de H son

$$E_{\nu l} = (n+1) \quad ; \quad n = \nu + l. \quad (3.4.4ab)$$

Advertimos una degeneración accidental si

$$\nu \rightarrow \nu \pm 1, \quad l \rightarrow l \pm 1 \quad (3.4.5ab)$$

ya que de (3.3.4 b) se ve que el valor del número cuántico total no cambia. Si que persistiendo ésta degeneración en presencia de un campo magnético externo, aunque se fije el valor del número cuántico m de ω_3 , siendo éste nuestro

caso, de manera que el momento angular queda restringido al intervalo

$$|m| \leq l \leq n . \quad (3.4.6)$$

Conocemos ya de la sección 3.2 que el álgebra de Lie $\text{su}(2)$ es el responsable de la degeneración accidental, ahora queremos encontrar su realización en coordenadas esféricas. Para lograr este propósito, convengamos por ejemplo los números cuánticos ν, l, m en (3.4.2) por j, μ, m donde los generadores del álgebra de Lie $\text{su}(2)$ actúan sobre la parte de j, μ . Se tiene que definir j y μ , las cuales ahora son

$$j = (\frac{1}{2})(n - |m|), \quad \mu = (l - |m|) - (\frac{1}{2})(n - |m|), \quad (3.4.7ab)$$

donde j coincide con la definición (3.2.12b) para coordenadas parabolicas mientras que μ es diferente de (3.2.14), pero sigue tomando los valores $\mu = j, j-1, \dots, -j$.

El ket $| \nu l m \rangle$ puede también ser expresado en la forma

$$| \nu l m \rangle = | n l m \rangle = | j \mu m \rangle \quad (3.4.8)$$

con la relación entre los números cuánticos dadas por (3.4.4b) y (3.4.7a b). Ahora denotaremos los generadores del álgebra de Lie su(2) por J_q , $q = +1, 0, -1$, los cuales serán dados en componentes esféricas, es decir

$$J_{\pm 1} = (\mp 1/\sqrt{2}) J_{\pm} = (\mp 1/\sqrt{2})(J_1 \pm iJ_2), \quad J_0 = J_3. \quad (3.4.9)$$

Para que éstos operadores no cambien n, m , deben satisfacer las reglas de comutación

$$[J_q, H_0] = 0, \quad [J_q, L_3] = 0. \quad (3.4.10)$$

Como J_q son generadores de un álgebra de Lie su(2) en la base $|j\mu m\rangle$, tenemos que⁽⁸⁾

$$\langle j\mu' m' | J_q | j\mu m \rangle = [j(j+1)]^{1/2} \langle j\mu, 1q | j\mu' \rangle \quad (3.4.11)$$

donde $\langle j\mu, 1q | j\mu' \rangle$ es un coeficiente --- Clebsch-Gordan.

Estos operadores J_q actúan sobre un subconjunto de eigenestados $|n\mu m\rangle$ con n y m fijos, por lo que suponemos que serán funciones de los ge-

resadores del grupo de simetría $O(4)$ de H , que sus componentes esféricas son designados por L_q, A_q con $q = +1, 0, -1$, esto es

$$L_{\pm i} = (\mp 1/\sqrt{2})(L_1 \pm i L_2), \quad L_0 = L_3, \quad (3.4.12a)$$

$$A_{\pm i} = (\mp 1/\sqrt{2})(A_1 \pm i A_2), \quad A_0 = A_3, \quad (3.4.12b)$$

donde $L_i, i=1,2,3$ es el momento angular y $A_i, i=1,2,3$ el vector Rugg-Lenz definido en (2.1.20) y (2.1.21). Además, definimos un tensor de Racah de orden uno por el siguiente producto vectorial

$$(\underline{\underline{L}} \times \underline{\underline{A}})_q = (i/2)[L^2, A_q] + i A_q. \quad (3.4.13c)$$

Esta relación la podemos checar, si desarrollamos

$$[L^2, A_q] = L_i [L_i, A_q] + [L_i, A_q] L_i \quad (3.4.14a)$$

y usamos (2.1.22), al igual que

$$\epsilon_{ijk} L_i A_k = (\underline{\underline{L}} \times \underline{\underline{A}})_j. \quad (3.4.14b)$$

Para que $\bar{J}_q, q = +1, 0, -1$, satisfaga las

relaciones de commutación (3.4.10), debe tener la siguiente forma

$$J_q = \alpha_q L_0 + \beta_q A_0 + \gamma_q (\underline{L} \times \underline{A})_q ; \quad q=+1,0,-1 \quad (3.4.15)$$

y de la ecuación (3.4.11) se determinan los coeficientes α_q , β_q y γ_q .

Notamos que L_q , A_q y $(\underline{L} \times \underline{A})_q$ son tensores de Racah de orden uno, por lo cual se obtiene su regla de selección

$$l' = l \pm 1 , \quad l' = l . \quad (3.4.16)$$

Se obtiene de (3.4.11), por ejemplo para $q=+1$, un sistema de tres ecuaciones lineales cuando sustituimos en ella a la (3.4.15) y consideramos $l'=l+1, l$. Como el coeficiente Clebsch-Gordan en (3.4.11) cuando $l'=l+1$, está dado por $[-\frac{1}{\sqrt{2}}][(j-\mu)(j+\mu+1)]^{\frac{1}{2}}$, y en cambio es cero cuando es $l'=l, l-1$, obtenemos las ecuaciones

$$\begin{aligned} & \alpha_l \{ n l+1 m | L_0 | n l m \} + \beta_l \{ n l+1 m | A_0 | n l m \} + \\ & \gamma_l \{ n l+1 m | (\underline{L} \times \underline{A})_0 | n l m \} = [-\frac{1}{\sqrt{2}}] [(n-1)(l-1)m+1]^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (3.4.17a)$$

$$\alpha_1 \{n l' m | L_0 | n l m\} + \beta_1 \{n l' m | A_0 | n l m\} + \gamma_1 \{n l' m | (\underline{L} \times \underline{A})_0 | n l m\} = 0 \quad (3.4.17b)$$

$$\alpha_1 \{n l m | L_0 | n l m\} + \beta_1 \{n l m | A_0 | n l m\} + \gamma_1 \{n l m | (\underline{L} \times \underline{A})_0 | n l m\} = 0 \quad (3.4.17c)$$

Para su resolución se necesita los elementos matriciales

$$\{n l' m | L_0 | n l m\} = m S_{l' l}, \quad (3.4.18)$$

$$\{n l' m | A_0 | n l m\} \quad , \quad (3.4.19a)$$

$$\{n l' m | (\underline{L} \times \underline{A})_0 | n l m\} \quad , \quad (3.4.19b)$$

ésta última es función de (3.4.19a) debida a (3.4.13c). En el Apéndice B se determinan (3.4.19a b).

De esta manera, se obtienen los coeficientes α_1, β_1 y γ_1 .

En forma similar, se determinan $\alpha_q, \beta_q, \gamma_q$ para $q = 0, -1$.

Las ecuaciones lineales para $q=0$ son

$$\alpha_0 \{n l+1 m | L_0 | n l m\} + \beta_0 \{n l+1 m | A_0 | n l m\} + \gamma_0 \{n l+1 m | (\underline{L} \times \underline{A})_0 | n l m\} = 0, \quad (3.4.20a)$$

$$\alpha_0 \{ n l-1 m | L_0 | n l m \} + \beta_0 \{ n l-1 m | A_0 | n l m \} \\ + \gamma_0 \{ n l-1 m | (\underline{\Delta} \times A)_0 | n l m \} = 0 \quad , \quad (3.4.20b)$$

$$\alpha_0 \{ n l m | L_0 | n l m \} + \beta_0 \{ n l m | A_0 | n l m \} \\ + \gamma_0 \{ n l m | (\underline{\Delta} \times A)_0 | n l m \} = \mu \quad , \quad (3.4.20c)$$

y para $q = -1$ son

$$\alpha_1 \{ n l+1 m | L_0 | n l m \} + \beta_1 \{ n l+1 m | A_0 | n l m \} \\ + \gamma_1 \{ n l+1 m | (\underline{\Delta} \times A)_0 | n l m \} = 0 \quad , \quad (3.4.21a)$$

$$\alpha_{-1} \{ n l-1 m | L_0 | n l m \} + \beta_{-1} \{ n l-1 m | A_0 | n l m \} \\ + \gamma_{-1} \{ n l-1 m | (\underline{\Delta} \times A)_0 | n l m \} = [\frac{X}{\sqrt{2}}] [(n-l+1)(l-1m)]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.4.21b)$$

$$\alpha_{-1} \{ n l m | L_0 | n l m \} + \beta_{-1} \{ n l m | A_0 | n l m \} \\ + \gamma_{-1} \{ n l m | (\underline{\Delta} \times A)_0 | n l m \} = 0 \quad , \quad (3.4.21c)$$

Enseguida se dan explícitamente todos estos coeficientes

$$(3.4.22a)$$

$$\alpha_1 = 0$$

$$\beta_1 = -(l-1) \left[\frac{(2l+3)(l-1m+1)}{2(n+l+2)(2l+1)[(l+1)^2 - m^2]} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.4.22b)$$

$$\gamma_1 = i \left[\frac{(2l+3)(l-1m+1)}{2(n+l+2)(2l+1)[(l+1)^2 - m^2]} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.4.22c)$$

$$\alpha_0 = (2m)^{-1}(2\ell - n - 1|m|), \beta_0 = \gamma_0 = 0, \quad (3.4.22 d)$$

$$(3.4.22 e)$$

$$\alpha_{-1} = 0 \quad) \quad (3.4.22 f)$$

$$\beta_{-1} = (\ell+2) \left[\frac{(2\ell-1)(\ell-1|m|)}{2(n+\ell+1)(2\ell+1)(\ell^2-m^2)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.4.22 g)$$

$$\gamma_{-1} = i \left[\frac{(2\ell-1)(\ell-1|m|)}{2(n+\ell+1)(2\ell+1)(\ell^2-m^2)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad) \quad (3.4.22 h)$$

Como $J_q, q = +1, 0, -1$ son generadores de un álgebra de Lie $su(2)$, se deben escribir como

$$J_q = L_0 \hat{\alpha}_q + A_0 \hat{\beta}_q + (L \times A)_q \hat{\gamma}_q, \quad (3.4.23)$$

donde $\hat{\alpha}_q, \hat{\beta}_q$ y $\hat{\gamma}_q$ están dados por (3.4.22), en los cuales se efectúan los siguientes reemplazos

$$(3.4.24 a)$$

$$n \rightarrow H_0 - 1 \quad \dots$$

$$\ell \rightarrow L_0 = (L^2 + \frac{1}{4})^{\frac{1}{2}} - (\frac{1}{2}), \quad (3.4.24 b)$$

$$(3.4.24 c)$$

$$m \rightarrow L_3 \quad .$$

Finalmente se han construido los generadores del álgebra de Lie $su(2)$ para el caso de pseudocoulomb en el efecto Zeeman en coordenadas esféricas.

Lapítulo IV

Conclusiones

Se analiza en ésta tesis el problema pseudocoulombiano en presencia de un campo magnético externo en coordenadas parabólicas, las cuales son convenientes no solo para determinar el álgebra de simetría de L_{pl} ie. sino que también nos permiten obtener una transformación canónica que mapea el hamiltoniano (3.1.2) en el de un oscilador armónico bidimensional más un rotor en un plano, haciendo inmediata la aparición del grupo de simetría $SU(2)$.

Este problema también se discutió en coordenadas esféricas, determinándose los generadores del álgebra de L_{pl} ie. $su(2)$ para este sistema coordinado.

La degeneración en nuestro problema en presencia de un campo magnético externo fijo, es explicada por un grupo de simetría $SU(2)$ con un número de generadores más pequeño que el $O(4)$ que describe al sistema sin cam-

po magnético externo, pero la restricción a un eigenvalor fijo m de b_3 , hace que la realización explícita del álgebra de Lie $su(2)$ sea mucho más complicada.

El análisis expuesto en este trabajo tiene relevancia aún en campos muy alejados del efecto Zeeman. En efecto ideas muy similares han sido aplicadas por Gershinsky al problema de la apasición de bosones s y d en estados colectivos de los núcleos. En este último problema los estados del oscilador de $3n$ dimensiones, asociados con n nucleones en un potencial de oscilador armónico están restringidos a una representación irreducible del subgrupo $O(n)$ del grupo de simetría $U(3n)$. En el problema que discutimos en esta tesis los estados del problema de pseudocoulomb están restringidos a una representación irreducible del subgrupo $O(2)$ del grupo de simetría $O(4)$.

Por otro lado es factible discutir el problema de coulomb en campos magnéticos muy intensos donde el término en H^2 es incluso más importante

que el de H. Estas ideas tendrían aplicación en el aspecto del átomo de hidrógeno en campos magnéticos (10^3 gauss) en la vecindad de las estrellas de neutrones.

Finalmente, como lo importante en relación con el efecto del campo magnético es su razón con la energía electrostática, aún para campos magnéticos del orden 10^3 gauss, se puede observar efectos interesantes en átomos gigantes, para los cuales el número cuántico radial es del orden de $n=10^3$. En tal caso la energía electrostática del electrón es del orden de 10^{-5} eV., y puede ser comparable con la energía de un campo de intensidad del orden 10^3 gauss. De allí que el efecto Zeeman en átomos gigantes presenta problemas interesantes que vale la pena explorar, ya que no está ni en el límite de campos magnéticos muy intensos ni tampoco en el de campos magnéticos débiles. Por otro lado gracias a los láseres los átomos gigantes, ésto es $n \gg 1$, han sido observados experimentalmente y por ello es interesante analizar sus propiedades.

De todo lo anterior se concluye que es importante comprender los problemas de degeneración en el caso de pseudocoulomb en presencia de campos magnéticos externos.

Apéndice A

Determinación de los paréntesis de Poisson y las derivadas de w .

En éste apéndice queremos demostrar que \bar{x} , \bar{p} definidas por

$$\bar{x} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) (P_p^2 + p^{-2} P_{\bar{p}}^2 + p^2 + 2/P_{\bar{p}}) \frac{1}{\sqrt{2}} (P_p^2 + p^{-2} P_{\bar{p}}^2 - p^2), \quad (A.1.a)$$

$$\bar{p} = \left(-\sqrt{2} \right) (P_p^2 + p^{-2} P_{\bar{p}}^2 + p^2 + 2/P_{\bar{p}}) \frac{1}{\sqrt{2}} (P_p P_{\bar{p}}), \quad (A.1.b)$$

son canónicamente conjugadas y queremos determinar también las derivadas de la función w que son soluciones de las ecuaciones (3.3.24), (3.3.25).

Para nuestro propósito es conveniente escribir

$$\bar{x} = (2Q)^{\frac{1}{4}} U, \quad \bar{p} = -(2/Q)^{\frac{1}{4}} V, \quad (A.2)$$

donde

$$U = (P_p^2 + p^{-2} P_{\bar{p}}^2 - p^2), \quad (A.3.a)$$

$$V = (P_p P_{\bar{p}}), \quad (A.3.b)$$

$$Q = (P_p^2 + \bar{p}^2 P_{\bar{p}}^2 + p^2 + 2|P_q|) . \quad (A.3.c)$$

Del hecho de que \bar{X}, \bar{P} es función solo de $f, P_p, |P_q|$ y de la definición de pasión tesis de Poisson, tenemos

$$\begin{aligned} \{\bar{X}, \bar{P}\} &= \frac{\partial \bar{X}}{\partial p} \frac{\partial \bar{P}}{\partial P_p} - \frac{\partial \bar{X}}{\partial P_p} \frac{\partial \bar{P}}{\partial p} \\ &= Q^3 [Q^2 \{V, U\} - (\frac{1}{2}) V Q \{Q, U\} - (\frac{1}{2}) U Q \{V, Q\}] \end{aligned} \quad (A.4)$$

De las relaciones (A.3abc) se obtiene

$$\{V, U\} = 2Q - 4|P_q| , \quad (A.5.a)$$

$$\{Q, U\} = 8V , \quad (A.5.b)$$

$$\{V, Q\} = 2Q - 4|P_q| - 4p^2 , \quad (A.5.c)$$

y sustituyendo en (A.4) se tiene

$$\{\bar{X}, \bar{P}\} = 1 . \quad (A.6)$$

Volviendo al sistema de ecuaciones (3.3.24), (3.3.25), notamos que $(\frac{\partial w}{\partial P_p}), (\frac{\partial w}{\partial p})$ satisfacen un sistema de dos ecuaciones lineales inhomogéneas cuyo determinante es precisamente dado por la expresión (A.6),

siendo uno sus valores. Entonces escribimos

$$\frac{\partial W}{\partial P} = \frac{\partial \bar{X}}{\partial P_4} \frac{\partial \bar{P}}{\partial \rho} - \frac{\partial \bar{X}}{\partial \rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial P_4}, \quad (\text{A.7.a})$$

$$\frac{\partial W}{\partial P_4} = \frac{\partial \bar{X}}{\partial P_4} \frac{\partial \bar{P}}{\partial P} - \frac{\partial \bar{X}}{\partial P} \frac{\partial \bar{P}}{\partial P_4}. \quad (\text{A.7.b})$$

Construimos una tabla de las derivadas correspondientes

$$\frac{\partial \bar{X}}{\partial P_4} = (2Q^3)^{\frac{1}{2}} [\pm 2Q\rho^{-2}/P_4] \mp U(\rho^{-2}/P_4 + 1), \quad (\text{A.8.a})$$

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial \rho} = -(2)^{\frac{1}{2}} Q^{\frac{3}{2}} [Q P_\rho + P_\rho (\rho^{-2} P_4^2 - \rho^2)], \quad (\text{A.8.b})$$

$$\frac{\partial \bar{X}}{\partial \rho} = (2Q^3)^{\frac{1}{2}} (U - 2Q)(\rho^{-3} P_4^2 - \rho), \quad (\text{A.8.c})$$

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial P_4} = (\pm) [(2Q^3)^{\frac{1}{2}} V(\rho^{-2}/P_4 + 1)], \quad (\text{A.8.d})$$

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial P} = -(2Q^{-3})^{\frac{1}{2}} [\rho(Q - P_\rho^2)], \quad (\text{A.8.e})$$

$$\frac{\partial \bar{X}}{\partial P} = (2Q^3)^{\frac{1}{2}} [P_\rho(2Q - U)], \quad (\text{A.8.f})$$

y sustituyendo en (A.7ab), se obtienen las derivadas de W (3.3.24), (3.3.25).

Para satisfacer la relación (3.3.29) debe ser w una función integrable, - esto es, efectuaremos la diferencia de las siguientes derivadas

$$\frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{\partial w}{\partial p} \right) = (\mp) \left(p^{-2} |P_p| - 1 \right) (-2Q^{-2} P_p^2) \mp Q^2 (p^{-2} |P_p| - 1), \quad (A.9.a)$$

$$\frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{\partial w}{\partial P_p} \right) = (\mp) \left(-p^{-2} |P_p| + 1 \right) \pm Q^2 (|P_p| \tilde{p}^2 + 1) (-2\tilde{p}^{-2} P_p^2 + 2p^2) \quad (A.9.b)$$

de la cual, obtenemos eso como resultado y por lo tanto se satisface (3.3.29).

Apéndice B

Determinación de los elementos matriciales de A_0 y $(\Sigma \times A)_0$.

Del hecho que $\Sigma = S + I$, se obtiene

$$\{n' l' m'\} = \sum_{s, s'} \langle s\sigma, s\tau | l'm \rangle [s\sigma s'] \quad (B.1)$$

donde $\{n' l' m'\}$ está definido en (3.4.8),
 $\{s\sigma s'\}$ en (3.2.5), (3.2.6), (3.2.7) y $\langle s\sigma, s\tau | l'm \rangle$

es un coeficiente Clebsch-Gordan.

Aquí, el elemento de matriz $\{n' l' m' | A_0 | n l m\}$
 con $A_0 = S_0 - T_0$, usando el teorema de
 Wigner-Eckart y la definición de coefi-
 ciente de Racah⁽⁵⁾

$$\begin{aligned} \{n' l' m' | A_0 | n l m\} &= \sum_{s, s'} \sum_{s''} \langle s\sigma, s\tau' | l'm \rangle [\langle s\sigma' | S_0 | s\sigma \rangle \delta_{s's''} - \\ &\quad \langle s\sigma' | T_0 | s\tau' \rangle \delta_{s's}] \langle s\sigma, s\tau' | l'm \rangle = \\ &= [s(s+1)]^{1/2} \left[\sum_{s'', s'''} \langle s\sigma, s\tau' | l'm \rangle \langle s\sigma', 10 | s\sigma'' \rangle \langle s\sigma', s\tau' | l'm \rangle \right] = \\ &= - \sum_{s'', s'''} \langle s\sigma, s\tau' | l'm \rangle \langle s\tau, 10 | s\sigma' \rangle \langle s\sigma, s\tau' | l'm \rangle \\ \{n' l' m' | A_0 | n l m\} &= [s(s+1)(2s+1)(2l+1)]^{1/2} [(-1)^l - (-1)^{s''}] W(10; s, s; 1s) \times \\ &\quad \langle l'm, 10 | l'm \rangle \quad (B.2) \end{aligned}$$

donde l' toma los valores $l \pm 1$, l y sustituyendo el valor explícito del coeficiente de Racah tenemos

$$\{n l' m / A_0 / n l m\} = \left[\frac{(n+l+2)(n-l)[(l+1)^2 - m^2]}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (B.3.a)$$

$$\{n l-1 m / A_0 / n l m\} = \left[\frac{(n+l+1)(n-l+1)(l^2 - m^2)}{(2l-1)(2l+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (B.3.b)$$

$$\{n l m / A_0 / n l m\} = 0 \quad (B.3.c)$$

Para el caso de $\{n l' m / (\Sigma x A) / n l m\}$, utilizamos la relación (3.4.13c)

$$\{n l' m / (\Sigma x A)_0 / n l m\} = \{n l' m / \frac{i}{2}(L^2 A_0 - A_0 L^2) / n l m\} + \{n l' m / i A_0 / n l m\} \quad (B.4.a)$$

$$\{n l' m / (\Sigma x A)_0 / n l m\} = [i_2[l'(l'+1) - l(l+1)] + i] \{n l' m / A_0 / n l m\} \quad (B.4.b)$$

y como $l' = l \pm 1$, se tiene

$$\{n l' m / (\Sigma x A)_0 / n l m\} = i(l+2) \{n l' m / A_0 / n l m\} \quad (B.5)$$

$$\{n l' m / (\Sigma x A)_0 / n l m\} = -i(l-1) \{n l' m / A_0 / n l m\} \quad (B.6)$$

quedando en función $\{n l' m / A_0 / n l m\}$.

Referencias

1. E. Chacón, "Teoría de Grupos"
2. V. Fock, Z. Phys. 98, 145 (1935)
V. Bargmann, Z. Phys. 99, 576 (1936)
3. B. S. Wybourne, "Classical Groups for Physicists", (Wiley & Sons, New York 1974)
4. E. Chacón, M. Moshinsky y V. Vanagas, J. Math. Phys. 22, 605 (1981)
5. M. Moshinsky, F. H. Seligman y K. B. Wolf, J. Math. Phys. 13, 901 (1972)
6. P. A. Mello y M. Moshinsky, J. Math. Phys. 16, 2017 (1975)
7. J. D. Jauch y E. L. Hill, Phys. Rev. 57, 641 (1940)
8. M. E. Rose, "Elementary theory of angular momentum",

(Wiley & Sons, New York 1957)

9. M. Tinkham, "Group theory and quantum mechanics",
(McGraw-Hill, Inc. 1964)

Capítulo I

Simetría y Teoría de Grupos

1.1 Introducción a la simetría.	1
1.2 La simetría en el contexto de la Teoría de Grupos.	7
1.3 Resumen de la tesis.	22

Capítulo II

Degeneración en el átomo de hidrógeno

2.1 El átomo de hidrógeno en ausencia de campo magnético externo.	24
2.2 El átomo de hidrógeno en presencia de campo magnético externo.	30

Capítulo III

Degeneración en el átomo de hidrógeno en el efecto Zeeman y su grupo de simetría

3.1 Problema pseudocoulombiano en coordenadas parabólicas.	33
3.2 Generadores del álgebra de Lie.	37
3.3 Transformaciones canónicas en el límite clásico.	44
3.4 Problema pseudocoulombiano en coordenadas esféricas.	53

Capítulo IV

Conclusiones.

62