Capítulo 8

Inversión temporal

8.1. Inversión temporal en mecánica clásica

Sean $\vec{x}(t)$ y $\vec{p}(t)$ la posición y el momento lineal de una partícula en función del tiempo. La operación de inversión temporal, además de cambiar el signo de t, se define tal que:

$$\begin{aligned} t &\rightarrow -t \ , \\ \vec{r}\,'(-t) &= \vec{r}(t) \ . \end{aligned} \tag{8.1}$$

Como consecuencia,

$$\vec{p}\,'(-t) = -\vec{p}(t) \ , \tag{8.2}$$

puesto que,

$$\vec{v}\,'(t) = \frac{d\vec{r}\,'(t)}{dt} = \frac{d\vec{r}(-t)}{dt} = -\vec{v}(-t) \ . \tag{8.3}$$

La figura 8.1 representa pictóricamente la ley de transformación (8.1). La curva que se indica con (I) corresponde a la trayectoria original mientras que la curva indicada por (II) corresponde a la transformada de acuerdo a (8.1). En el caso en que $\vec{x}$ y $\vec{p}$ no sean funciones del tiempo sino variables dinámicas independientes, se tomarán igualmente las expresiones (8.1) y (8.2) como definiciones de la operación de inversión temporal. Por ejemplo, desde el punto de vista del formalismo canónico, si $H(q,p,t)$ es invariante bajo inversión temporal, esto es, si cumple,

$$H(q,p,t) = H(q,-p,-t) \ , \tag{8.4}$$

entonces la transformación $q(t) \rightarrow q(-t)$, $p(t) \rightarrow -p(-t)$, $t \rightarrow -t$ deja invariante las ecuaciones canónicas, de modo que las variables transformadas cumplen,

$$\dot{q}_i'(t) = \frac{\partial H(q'(t),p'(t),t)}{\partial p_i'(t)} \ , \ \dot{p}_i'(t) = -\frac{\partial H(q'(t),p'(t),t)}{\partial q_i'(t)} \ , \tag{8.5}$$

donde el punto sobre las variables dinámicas indica que se ha tomado la derivada temporal. Para su demostración, si $q(t)$ y $p(t)$ son solución a las ecuaciones de movimiento, entonces,

$$\begin{aligned} \dot{q}_i'(t) &= -\frac{dq_i(-t)}{d(-t)} = -\frac{\partial H(q'(t),p'(t),t)}{\partial p_i(-t)} = \frac{\partial H(q',p',t)}{\partial p_i'(t)} \ , \\ \dot{p}_i'(t) &= \frac{dp_i(-t)}{d(-t)} = -\frac{\partial H(q'(t),p'(t),t)}{\partial q'(t)} \ . \end{aligned} \tag{8.6}$$

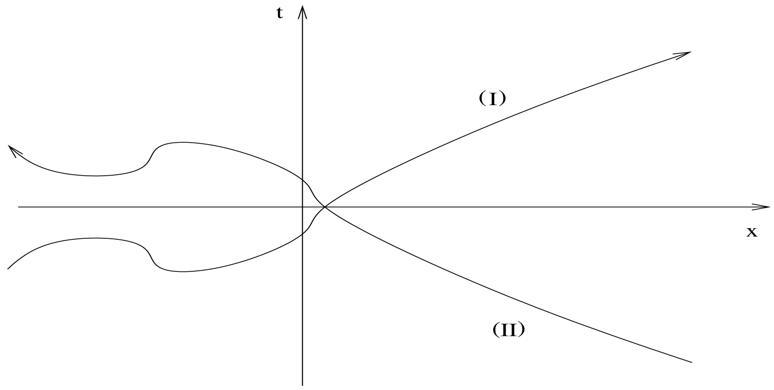

Figura 8.1: Representación gráfica de la ley de transformación (8.1). La curva (II) es la transformada por inversión temporal de la curva (I).

Por lo tanto, las variables dinámicas $q' = q$ y $p' = -p$ son de hecho variables canónicas con el mismo Hamiltoniano original $H(q', p', t)$. Para llegar a esta conclusión hemos hecho uso de que se cumple (8.4).

Un ejemplo sencillo que viola invarianza bajo inversión temporal, es decir, que la transformada de la solución no es solución a su vez de las ecuaciones de movimiento, es el caso del movimiento de una partícula en un campo magnético externo dado. Dicha partícula satisface la ley de movimiento de Newton,

$$m\frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} = \frac{e}{m}\vec{p}(t) \times \vec{B} \ . \tag{8.7}$$

Veamos que $\vec{r}\,'(t) = \vec{r}(-t)$ y $\vec{p}\,'(t) = -\vec{p}(-t)$ no satisfacen,

$$m\frac{d^2\vec{r}\,'(t)}{dt^2} = \frac{e}{m}\vec{p}\,'(t) \times \vec{B}(t) \ . \tag{8.8}$$

En efecto,

$$m\frac{d^2\vec{r}\,'(t)}{dt^2} = m\frac{d^2\vec{r}(-t)}{dt^2} = m\frac{d^2\vec{r}(-t)}{d(-t)^2} = \frac{e}{m}\vec{p}(-t) \times \vec{B}(-t) = -\frac{e}{m}\vec{p}\,'(t) \times \vec{B}(-t) \ . \tag{8.9}$$

Que no es (8.8). Sólo se cumpliría en el supuesto que $\vec{B}(t) \to -\vec{B}(-t)$, que es de hecho el caso cuando el campo magnético esté generado por el propio sistema, pues entonces las corrientes electromagnéticas asociadas cambian de signo, $\vec{j}(t) \to -\vec{j}(-t)$. Pero esto no ocurre para un campo magnético externo.

8.2. Inversión temporal en mecánica cuántica

Consideremos la ecuación de Schrödinger para un potencial $V(\vec{x})$,

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x},t) \ . \tag{8.10}$$

Si pasamos de t a $-t$ en la ecuación anterior tenemos:

$$i\hbar\frac{\psi(\vec{x},-t)}{\partial(-t)} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x},-t)\ , \tag{8.11}$$

con lo que $\psi(\vec{x},-t)$ no satisface la ecuación de Schrödinger dada la presencia de $-t$ en la derivada temporal, que implica un signo menos delante de $i\hbar$. Sin embargo, si a continuación tomamos el complejo conjugado de (8.11) sí que volvemos a recuperar la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar\frac{\partial\psi^*(\vec{x},-t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\psi^*(\vec{x},-t)\ . \tag{8.12}$$

Por lo tanto, si $\psi(\vec{x},t)$ es solución de la ecuación de Schrödinger entonces $\psi^*(\vec{x},-t)$ también lo es y decimos que $\psi^*(\vec{x},-t)$ es la función de onda transformada por inversión temporal de la función de onda inicial. El hecho de que haya sido necesario tomar el complejo conjugado en la función de onda transformada claramente indica que el operador de inversión temporal será un operador antiunitario.

Por el teorema de Wigner sabemos que el operador de inversión temporal θ será unitario o antiunitario. Supongamos un sistema cerrado para el que las ecuaciones de movimiento sean invariantes bajo inversión temporal. Entonces se tiene:

$$U(-t)\theta|\alpha\rangle = \theta U(t)|\alpha\rangle\ , \tag{8.13}$$

siendo $|\alpha\rangle$ un vector arbitrario. Esta expresión simplemente afirma lo que se puede ver directamente en la figura 8.1, esto es, que si dejamos evolucionar el sistema invertido temporalmente hacia tiempos menores se obtiene el mismo estado que si invertimos temporalmente el sistema original evolucionado hacia tiempos mayores. Si consideramos un t infinitesimal y manteniendo términos hasta primero orden en t, tenemos de (8.13) la condición:

$$iH\theta = -\theta H i\ . \tag{8.14}$$

Si θ fuese unitario, tenemos pues que $H\theta = -\theta H$, con lo que si $|n\rangle$ es un autoestado de H con energía E_n entonces $\theta|n\rangle$ es un autoestado con energía $-E_n$ y, por lo tanto, el espectro de energía no estaría acotado inferiormente. Pensemos sencillamente en una partícula libre. En el caso en que θ fuese unitario tendríamos un espectro que iría desde $-\infty$ hasta $+\infty$ que no es permitido. Por el contrario, para θ antiunitario de (8.14) se tiene que $[H,\theta]=0$ y $\theta|n\rangle$ tiene también como autovalor E_n y no se llega a contradicción.

Estudiemos a continuación las reglas de conmutación de θ con los operadores de posición, momento lineal y momento angular. Los transformados por inversión temporal de los operadores de posición y momento lineal son:

$$\begin{aligned} \theta\vec{x}\theta^{-1} &= \vec{x}\ , \\ \theta\vec{p}\theta^{-1} &= -\vec{p}\ , \end{aligned} \tag{8.15}$$

de forma que dados dos autovectores $|\vec{x}\,'\rangle$ y $|\vec{p}\,'\rangle$ de posición y momento lineal sus transformados bajo inversión temporal pasan a ser autoestados con los autovalores $\vec{x}\,'$ y $-\vec{p}\,'$, respectivamente.

De hecho de (8.15) se sigue, al igual que en paridad, que para llegar a un tratamiento consistente de las relaciones de conmutación canónicas se requiere que θ sea antiunitario.

$$\begin{aligned} \theta[x_i,p_j]\theta^{-1} &= \theta i\hbar\delta_{ij}\theta^{-1} = \pm i\hbar\delta_{ij} \ , \\ [x_i,-p_j] &= -i\hbar\delta_{ij} \ , \end{aligned} \tag{8.16}$$

donde el signo $+$ se aplica para el caso de operador unitario mientras que el signo $-$ se aplica para el caso de operador antiunitario. Sólo para θ antiunitario no se llega a contradicción.

La ley de transformación $\theta\vec{p}\theta^{-1} = -\vec{p}$ se sigue también del hecho bien conocido de que una inversión temporal y una traslación espacial conmutan,

$$U(\vec{a})\theta = \theta U(\vec{a}) \ , \tag{8.17}$$

y entonces considerando una traslación infinitesimal se llega por tanto a,

$$\begin{aligned} \vec{p}\theta &= -\theta\vec{p} \ , \\ \theta\vec{p}\theta^{-1} &= -\vec{p} \ , \end{aligned} \tag{8.18}$$

teniendo en cuenta que θ es antiunitario.

Análogamente sucede con las rotaciones pues éstas conmutan con una inversión temporal. De este modo, considerando una rotación infinitesimal se llega a,

$$\begin{aligned} \left(1 - i\alpha\frac{\vec{J}\hat{n}}{\hbar}\right)\theta &= \theta\left(1 - i\alpha\frac{\vec{J}\hat{n}}{\hbar}\right) \ , \\ \theta\vec{J}\theta^{-1} &= -\vec{J} \ . \end{aligned} \tag{8.19}$$

Al igual que ocurre con paridad, la aplicación sucesiva de la operación de inversión temporal (8.1) conduce a la operación identidad. A nivel cuántico tendremos, por lo tanto, que $\theta^2 = \epsilon_T\,\mathbb{I}$, con ϵ_T un número complejo de módulo unidad. Sin embargo, a diferencia de P, y porque θ es un operador antiunitario, se sigue que ϵ_T no puede ser reabsorbido en una redefinición de θ tal que $\theta \to \theta' = \eta\theta$, con $|\eta| = 1$. De hecho, si calculamos $\theta'^{\,2}$ tenemos,

$$\theta'^{\,2} = \eta\theta\eta\theta = \eta\eta^*\theta^2 = \theta^2 = \epsilon_T \ . \tag{8.20}$$

Estudiemos a continuación la actuación de θ sobre estados de partículas sin espín. Procederemos de forma análoga a como lo hicimos para el caso de paridad P haciendo uso de (8.15).

De la definición (4.29) tenemos:

$$\theta|\vec{x}\,'\rangle = \theta e^{-i\vec{p}\vec{x}\,'/\hbar}|0_X\rangle = e^{-i\vec{p}\vec{x}\,'/\hbar}\theta|0_X\rangle = \xi e^{-i\vec{p}\vec{x}\,'/\hbar}|0_X\rangle = \xi|\vec{x}\,'\rangle \ , \tag{8.21}$$

donde ξ es un número complejo de módulo unidad. Dado el carácter antiunitario de θ dicho factor puede reabsorberse en una redefinición del estado $|0_X\rangle$,

$$\begin{aligned} |0_X\rangle' &= \lambda|0_X\rangle \ , \\ \theta|0_X\rangle' &= \lambda^*\theta|0_X\rangle = (\lambda^*)^2\xi|0_X\rangle' \ , \end{aligned} \tag{8.22}$$

con la solución $\lambda = \sqrt{\xi^*}$. En lo que sigue supondremos que dicha redefinición se ha realizado y tomaremos $\xi = 1$.

Utilizando la base de posiciones podemos determinar fácilmente $\theta|\vec{p}\,'\rangle$,

$$\theta|\vec{p}\,'\rangle = \int d^3x'|\vec{x}\,'\rangle\langle\vec{x}\,'|(\theta|\vec{p}\,'\rangle) = \int d^3x'|\vec{x}\,'\rangle(2\pi\hbar)^{-3/2}e^{-i\vec{p}\,'\vec{x}\,'/\hbar} = |-\vec{p}\,'\rangle \ , \tag{8.23}$$

donde hemos empleado en virtud de (8.21) que,

$$\langle\vec{x}\,'|(\theta|\vec{p}\,'\rangle) = \langle\theta\vec{x}\,'|\theta\vec{p}\,'\rangle = \langle\vec{x}\,'|\vec{p}\,'\rangle^* \ , \tag{8.24}$$

al ser θ antiunitario.

La ley de transformación de una función de onda se obtiene de forma directa dado que,

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x},t) &= \langle\vec{x}|\psi_t\rangle \ , \\ \langle\vec{x}|(\theta|\psi_t\rangle) &= \langle\vec{x}|(\theta e^{-iHt/\hbar}|\psi\rangle) = \langle\vec{x}|e^{iHt/\hbar}(\theta|\psi\rangle) = e^{iHt/\hbar}\psi^*(\vec{x},0) = \psi^*(\vec{x},-t) \ , \end{aligned} \tag{8.25}$$

tal y como establecimos al principio de esta sección.

Ahora generalizamos nuestras consideraciones anteriores para el caso de partículas con espín. La relación fundamental es (8.19),

$$\theta J_i \theta^{-1} = -J_i \ , \tag{8.26}$$

que establece como el momento angular se transforma bajo inversión temporal. Como consecuencia,

$$\theta|jm\rangle = \xi_m|j-m\rangle \ , \tag{8.27}$$

donde ξ_m es un número complejo de módulo unidad. La expresión (8.27) se deduce de,

$$J_3\theta|jm\rangle = -\theta J_3|jm\rangle = -\hbar m\theta|jm\rangle \ . \tag{8.28}$$

Para fijar ξ_m hagamos uso de J_+,

$$\theta J_+|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\theta|jm+1\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\xi_m|j-(m+1)\rangle \ . \tag{8.29}$$

Haciendo uso de (8.26) y de que θ es antiunitario tenemos también:

$$\theta J_+|jm\rangle = -J_-\theta|jm\rangle = -J_-\xi_m|j-m\rangle = -\xi_m\hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j-(m+1)\rangle \ , \tag{8.30}$$

y por lo tanto, de la comparación entre (8.29) y (8.30), se tiene,

$$\xi_{m+1} = -\xi_m \ . \tag{8.31}$$

Ésta constituye una relación de recurrencia cuya solución es:

$$\xi_m = \xi_j(-1)^{j-m} \ , \tag{8.32}$$

con lo que

$$\theta|jm\rangle = \xi_j(-1)^{j-m}|j-m\rangle \ . \tag{8.33}$$

Como ya discutimos en torno a (8.22), dado el carácter antiunitario de θ sabemos que el número complejo de norma unidad ξ_j no tiene implicaciones físicas ya que puede ser reabsorbido en una fase global en el conjunto de estados $|jm\rangle$. Sin embargo, vimos también que éste no era el caso para ϵ_T. Si a partir de (8.33) calculamos,

$$\theta^2|jm\rangle = \theta\xi_j(-1)^{j-m}|j-m\rangle = \xi_j^*(-1)^{j-m}\theta|j-m\rangle = (-1)^{2j}|jm\rangle \ , \tag{8.34}$$

dado que este resultado es independiente del estado $|jm\rangle$, resulta,

$$\theta^2 = (-1)^{2j} \ , \tag{8.35}$$

y en efecto ξ_j no aparece como debe ser.

Si particularizamos (8.33) para el caso de momento angular orbital,

$$\theta|\ell m\rangle = \xi_\ell(-1)^{\ell-m}|\ell-m\rangle \ . \tag{8.36}$$

Por otra parte, también sabemos,

$$\begin{aligned}\theta|\ell m\rangle &= \int d\Omega\,|\hat{n}\rangle\langle\hat{n}|(\theta|\ell m\rangle) = \int d\Omega\,|\hat{n}\rangle Y_\ell^m(\hat{n})^*|\hat{n}\rangle \\ &= \int d\Omega\,|\hat{n}\rangle(-1)^m Y_\ell^{-m}(\hat{n}) = (-1)^m|\ell-m\rangle = (i)^{2m}|\ell-m\rangle \ .\end{aligned} \tag{8.37}$$

Ambas leyes de transformación son iguales si tomamos $\xi_\ell = (-1)^\ell = (i)^{2\ell}$.

La regla de transformación (8.37) se puede generalizar a cualquier espín, como es usual, sin más que definir $\xi_j = (i)^{2j}$, dado que,

$$\theta|jm\rangle = (i)^{2j}(-1)^{j-m}|j-m\rangle = (i)^{2j-2j+2m}|j-m\rangle = (i)^{2m}|j-m\rangle \ . \tag{8.38}$$

8.3. Operadores antiunitarios

Como vimos en (2.93) las transformaciones antiunitarias se caracterizan por:

1. Si $|\psi_1'\rangle = \theta|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2'\rangle = \theta|\psi_2\rangle$ entonces

$$\langle\psi_2'|\psi_1'\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^* = \langle\psi_1|\psi_2\rangle \ . \tag{8.39}$$

2. Antilinealidad,

$$\theta(\lambda_1|\alpha\rangle + \lambda_2|\beta\rangle) = \lambda_1^*\theta|\alpha\rangle + \lambda_2^*\theta|\beta\rangle \ . \tag{8.40}$$

Consideremos a continuación la actuación de un operador antiunitario θ en una base dada $\{|a_m'\rangle\}$. Por supuesto, el vector transformado por θ es independiente de base, pero la forma matricial del operador no. Designemos por $|\widetilde{a}_m'\rangle = \theta|a_m'\rangle$, el transformado del vector $|a_m'\rangle$ perteneciente a la base. Entonces, para un vector arbitrario $|\psi_1\rangle = \sum_m C_m|a_m'\rangle$, su transformado viene dado por:

$$\theta|\psi_1\rangle = \sum_m C_m^*|\widetilde{a}_m'\rangle. \tag{8.41}$$

Por lo tanto, podemos escribir:

$$\theta = \left(\sum_m |\widetilde{a}'_m\rangle\langle a'_m| \right) K \ , \tag{8.42}$$

siendo $K : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$, el operador de conjugación de los números complejos,

$$K(a + ib) = a - ib \ , \tag{8.43}$$

con a y b reales. Dado que $\sum_m |\widetilde{a}'_m\rangle\langle a'_m|$ representa a un operador unitario, puesto que transforma una base ortonormal en otra, resulta por tanto que en una base dada,

$$\theta = U\,K \ , \tag{8.44}$$

siendo U un operador unitario. Tanto K como U en (8.44) dependen de la base elegida, sin embargo su actuación conjunta es independiente de base.

Por ejemplo, particularizando (8.38) para $j = 1/2$,

$$\theta|\frac{1}{2}m\rangle = (i)^{2m}|\frac{1}{2} - m\rangle \ . \tag{8.45}$$

Tomando los vectores $\{|\frac{1}{2}m\rangle\}$ como base, la ley de transformación anterior corresponde a la matriz de Pauli σ_y que es unitaria. Por lo tanto, tenemos que $\theta = \sigma_y K$, en la base de estados $\{|\frac{1}{2}m\rangle\}$.

Si $\theta|\psi_1\rangle = |\psi'_1\rangle$, se define la actuación de θ sobre el espacio dual como,

$$\langle\psi_1|\theta = \langle\psi'_1| \ , \tag{8.46}$$

es decir, θ actuando sobre un bra es el dual del ket transformado por θ.

De este modo, $(\langle\psi_1|\lambda_1 + \langle\psi_2|\lambda_2)\theta$ es el dual de $\theta(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1^*|\psi'_1\rangle + \lambda_2^*|\psi'_2\rangle$, por lo tanto,

$$(\langle\psi_1|\lambda_1 + \langle\psi_2|\lambda_2)\theta = \lambda_1^*\langle\psi'_1| + \lambda_2^*\langle\psi'_2| \ , \tag{8.47}$$

dando lugar a un operador antilineal en el espacio dual.

Por otra parte,

$$\langle\psi|(\theta|\psi\rangle) = \langle\psi|\psi'\rangle = \langle\psi'|\psi\rangle^* = (\langle\psi|\theta)|\psi\rangle^* \ . \tag{8.48}$$

Vemos aquí una clara limitación de la notación de Dirac cuando se trata de manipulaciones con operadores antiunitarios puesto que, dependiendo de si dicho operador actúa sobre el bra o el ket, se obtiene un resultado u otro. En lo que sigue, a no ser que se especifique mediante un paréntesis, dado un operador antiunitario se supondrá siempre que actúa sobre el ket.

8.4. Degeneración de Kramers y otras consecuencias de inversión temporal

1) Sea H un Hamiltoniano invariante bajo inversión temporal, $\theta H \theta^{-1} = H$. Si $|n\rangle$ es un autoestado de H entonces los estados $\theta|n\rangle$ y $|n\rangle$ tienen la misma energía y son distintos para espín semientero.

Dado que $\theta H \theta^{-1} = H$, es evidente que $\theta|n\rangle$ tiene la misma energía que $|n\rangle$,

$$H\theta|n\rangle = \theta H|n\rangle = E_n\theta|n\rangle \ . \tag{8.49}$$

El punto está en demostrar si en efecto se tiene que $\theta|n\rangle$ y $|n\rangle$ son dos estados distintos. Supongamos lo contrario, es decir, que $\theta|n\rangle = e^{i\gamma}|n\rangle$, entonces:

$$\theta^2|n\rangle = \theta e^{i\gamma}|n\rangle = |n\rangle \ . \tag{8.50}$$

Sin embargo de (8.35) sabemos que $\theta^2 = (-1)^{2j}$ y por lo tanto para j semientero llegamos a una contradicción porque $(-1)^{2j} = -1$. Por lo tanto, para j semientero $\theta|n\rangle \neq e^{i\gamma}|n\rangle$ y el nivel de energía $|E_n\rangle$ presenta al menos una degeneración doble.

Si el Hamiltoniano se modifica de forma que deja de ser invariante bajo inversión temporal, entonces la degeneración de Kramers desaparece y, salvo accidente, $|n\rangle$ y $\theta|n\rangle$ dejan de tener la misma energía. Esto ocurre por ejemplo en presencia de un campo magnético externo, tal y como indicamos en la sección 8.1 a nivel clásico. Si H_0 es invariante bajo inversión temporal, entonces,

$$H' = H_0 - \mu_0\vec{S}\vec{B} \ . \tag{8.51}$$

deja de serlo ya que,

$$\theta H'\theta^{-1} = \theta H_0\theta^{-1} - \theta\vec{S}\vec{B}\mu_0\theta^{-1} = H_0 - \theta\vec{S}\theta^{-1}\theta\vec{B}\theta^{-1}\mu_0 = H_0 + \mu_0\vec{S}\vec{B} \neq H' \ , \tag{8.52}$$

y los estados $|jm\rangle$ y $|j-m\rangle$ no tienen la misma energía. En este ejemplo, la proyección del momento angular de los estados $|jm\rangle$ se ha tomado según el vector axial $\vec{B}$.

2) Como consecuencia de la ley de transformación de la función de onda (8.25), se sigue que la función de onda de un estado no degenerado de energía sin espín, siempre se puede elegir real para Hamiltonianos invariantes bajo inversión temporal.

   Designemos por $|n\rangle$ el autovector de energía E_n. Entonces, $\theta|n\rangle$ tiene la misma energía dado que $\theta H\theta^{-1} = H$. Pero, como el autovalor E_n es no degnerado, entonces $\theta|n\rangle = e^{i\gamma}|n\rangle$, $\gamma \in \mathbb{R}$. A nivel de función de onda resulta por lo tanto que, $\psi^*(\vec{x}) = e^{i\gamma}\psi(\vec{x})$. Redefiniendo la fase global arbitraria en $\psi(\vec{x})$, siempre se puede reabsorber el número complejo $e^{i\gamma}$ y, por tanto, $\psi^*(\vec{x}) = \psi(\vec{x})$.

3) Sea $\mathcal{O}$ un operador arbitrario, entonces sus elementos de matriz satisfacen

$$\langle\beta|\mathcal{O}|\alpha\rangle = \langle\widetilde{\alpha}|\theta\mathcal{O}^\dagger\theta^{-1}|\widetilde{\beta}\rangle \ , \tag{8.53}$$

   donde $|\widetilde{\alpha}\rangle = \theta|\alpha\rangle$ y $|\widetilde{\beta}\rangle = \theta|\beta\rangle$.

   La demostración sigue así,

$$\langle\beta|\mathcal{O}|\alpha\rangle = \langle\mathcal{O}^\dagger\beta|\alpha\rangle = \langle\widetilde{\alpha}|\theta\mathcal{O}^\dagger|\beta\rangle = \langle\widetilde{\alpha}|\theta\mathcal{O}^\dagger\theta^{-1}|\widetilde{\beta}\rangle \ . \tag{8.54}$$

   Un observable, $\mathcal{O}^\dagger = \mathcal{O}$, se dice que es par o impar bajo inversión temporal si satisface,

$$\theta\mathcal{O}\theta^{-1} = \pm\mathcal{O} \ , \tag{8.55}$$

respectivamente. Por ejemplo, $\vec{p}$ es impar, mientras que $\vec{x}$ es par.

Como aplicación de (8.53) y (8.55), supongamos que el observable par/impar $\mathcal{O}$ es un tensor irreducible de rango k, $T_q^{(k)}$, y consideremos los elementos de matriz,

$$\langle jm', \alpha | T_q^{(k)} | jm, \alpha \rangle \ , \tag{8.56}$$

donde los estados en la expresión anterior tienen el mismo momento angular j y números cuánticos adicionales invariantes bajo rotaciones α e inversión temporal. Por el teorema de Wigner-Eckart, sólo hace falta conocer un elemento de matriz, que tomaremos $\langle jm, \alpha | T_0^{(k)} | jm, \alpha \rangle$. Teniendo en cuenta que $T_0^{(k)\,\dagger} = T_0^{(k)}$ y que $\theta T_0^{(k)} \theta^{-1} = \pm T_0^{(k)}$, se sigue de (8.53),

$$\langle jm, \alpha | T_0^{(k)} | jm, \alpha \rangle = \pm \langle \widetilde{jm, \alpha} | T_0^{(k)} | \widetilde{jm, \alpha} \rangle \ . \tag{8.57}$$

Aplicando (8.38) a la expresión anterior tenemos,

$$\langle jm, \alpha | T_0^{(k)} | jm, \alpha \rangle = \pm \langle j - m, \alpha | T_0^{(k)} | j - m, \alpha \rangle \ . \tag{8.58}$$

Por otra parte,

$$| j - m, \alpha \rangle \propto \mathcal{D}(0, \pi, 0)^{(j)} | jm, \alpha \rangle \ , \tag{8.59}$$

salvo una fase, que ya fijamos en (6.157), que aquí no es relevante puesto que al calcular el valor esperado anterior desaparece. Por lo tanto,

$$\langle jm, \alpha | T_0^{(k)} | jm, \alpha \rangle = \pm \langle jm, \alpha | \mathcal{D}^\dagger(0, \pi, 0) T_0^{(k)} \mathcal{D}(0, \pi, 0) | jm, \alpha \rangle = \pm (-1)^k \langle jm, \alpha | T_0^{(k)} | jm, \alpha \rangle \ . \tag{8.60}$$

Para deducir la expresión anterior hemos hecho uso de la propiedad de transformación de un tensor irreducible de rango k, (6.166). En nuestro caso tenemos,

$$\mathcal{D}^\dagger(0, \pi, 0) T_0^{(k)} \mathcal{D}(0, \pi, 0) = \sum_{m'} d_{m'0}^{(k)}(-\pi) T_{m'}^{(k)} = d_{00}^{(k)}(-\pi) T_0^{(k)} = (-1)^k T_0^{(k)} \ , \tag{8.61}$$

empleando (6.114) para obtener las matrices de rotación $d_{m0}^{(j)}(\beta)$. No obstante, es trivial reconocer que bajo una rotación de 180^o alrededor del eje y actuando sobre $T_0^{(k)}$ se volverá a tener $T_0^{(k)}$, excepto quizás por un número complejo de módulo unidad, en este caso $(-1)^k$.

Por lo tanto, si $T^{(k)}$ es impar sólo tendrá elementos de matriz no nulos en el espacio de momento angular total j si k es impar. Por el contrario, si $T^{(k)}$ es par sólo tendrá elementos de matriz no nulos para k par, entre estados con el mismo momento angular total.

Por ejemplo, tomemos $T_0^{(1)} = \cos\theta$, tenemos que $k = 1$ y $\cos\theta$ es par, con lo que $\langle \cos\theta \rangle_j = 0$ de (8.61) y con ello todos los elementos de matriz,

$$\langle jm', \alpha | T_q^{(1)} | jm, \alpha \rangle = 0 \ . \tag{8.62}$$

Este resultado es muy potente, dado que ni siquiera se requiere que $|jm, \alpha\rangle$ tenga paridad bien definida. Si éste fuera el caso, es obvio que los elementos de matriz anteriores serían nulos puesto que $\cos\theta$ es impar. Pero ésto no es requerido. Pensemos por ejemplo en un estado del átomo de hidrógeno $|jm, \ell s\rangle$ que tiene momento angular total bien definido obtenido a partir de la combinación del momento angular orbital y del espín del electrón. Para fijar ideas, consideremos en concreto el estado $|\frac{1}{2}m\rangle$. Este estado se puede obtener bien de combinar $\ell = 0$ (onda S) con $s = 1/2$ (éste último es fijo) o bien de combinar $\ell = 1$ (onda P) con $s = 1/2$. Por lo tanto,

$$|\frac{1}{2}m\rangle = C_S|\frac{1}{2}m, S\frac{1}{2}\rangle + C_P|\frac{1}{2}m, P\frac{1}{2}\rangle \ , \tag{8.63}$$

con $|C_S|^2 + |C_P|^2 = 1$. El estado anterior no tiene paridad bien definida puesto que la onda S al tener $\ell = 0$ tiene paridad $+1$, mientras que la onda P, al tener $\ell = 1$ tiene paridad -1. Recuérdese la expresión (7.22) que establece el comportamiento de los armónicos esféricos bajo paridad.