

## MECANICA CUANTICA 2

### LECTURA #16

### INVARIANZA GAUGE EN LA MECANICA CUANTICA

En mecánica Clásica la trayectoria que sigue una partícula entre el punto  $\vec{r}_1$  en el instante  $t_1$  y el punto  $\vec{r}_2$  en el instante  $t_2$  es aquella que minimiza la acción

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt \quad \mathcal{L} = K - V = \frac{1}{2}mv^2 - V(\vec{r}, t)$$

La respuesta a este problema variacional se reduce a resolver las ecuaciones de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} \right)$$

Cuando tenemos múltiples grados de libertad de diversa índole podemos encontrar un conjunto de variables generalizadas  $\{q_i\}$  y velocidades generalizadas  $\{\dot{q}_i\}$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ) donde  $N$  es el número de grados de libertad del sistema.

Para sistemas conservativos la energía del sistema está dada por:  $E = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \mathcal{L}$

El momentum generalizado está dado por  $p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \Rightarrow \dot{p}_i = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}$

$\Rightarrow p_i = p_i(q_j, \dot{q}_j, t) \rightarrow$  Invertiendo estas relaciones podemos obtener

$$\dot{q}_i = \dot{q}_i(q_j, p_j, t)$$

$$E = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i, t)$$

Si expresamos las  $\dot{q}_i$  en función de  $q_i$  y  $p_i \Rightarrow E = \sum_i p_i \dot{q}_i(q_j, p_j, t) - \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i(q_j, p_j, t)) = \mathcal{H}(q_i, p_i, t)$

Esta energía expresada en función de  $q_i, p_i$  la denominamos Hamiltoniano

A partir del Hamiltoniano podemos obtener ecuaciones de movimiento:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad ; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \quad \leftarrow \text{Ecuaciones de Hamilton-Jacobi}$$

### Corchetes de Poisson:

Si tenemos dos funciones de las variables dinámicas  $q_i, p_i$   $f(q_i, p_i), g(q_i, p_i) \Rightarrow$

$$\{f, g\} \equiv \sum_i \left[ \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right]$$

$$\Rightarrow \{f, g\} = -\{g, f\} \quad ; \quad \{q, p\} = \frac{\partial q}{\partial q} \frac{\partial p}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial q} = 1 \Rightarrow \{q, p\} = 1$$

en general  $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$

$$\{q, f\} = \frac{\partial f}{\partial p} \quad ; \quad \{p, f\} = -\frac{\partial f}{\partial q}$$



$$\dot{f} = \frac{\partial f}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial f}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

$$\Rightarrow \frac{df}{dt} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad \leftarrow \text{Evoluci3n temporal de la cantidad } f(q, p) \text{ en un sistema "gobernado" por } H(q, p, t).$$

$$\dot{q} = \{q, H\} ; \quad \dot{p} = \{p, H\}$$

$$\text{Si } \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \Rightarrow \frac{df}{dt} = \{f, H\} \Rightarrow \text{si } \{f, H\} = 0 \Rightarrow f = \text{cte} \quad \leftarrow \text{Constante de movimiento.}$$

### MECANICA ANALITICA Y MECANICA CUANTICA

$$\{x_i, p_j\} = \delta_{ij}$$

$$\{x, f(p)\} = \frac{\partial f}{\partial p}$$

$$\{p, g(x)\} = -\frac{\partial g}{\partial x}$$

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

$\Rightarrow$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

$$[\hat{x}, F(\hat{p})] = i\hbar F'(\hat{p})$$

$$[\hat{p}, G(\hat{x})] = -i\hbar G'(\hat{x})$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_\psi + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle_\psi$$

$\downarrow$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \langle \hat{R} \rangle_\psi = \frac{1}{m} \langle \hat{P} \rangle_\psi \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{P} \rangle_\psi = - \langle \nabla V(\hat{R}) \rangle_\psi \end{cases}$$

$\leftarrow$  Teorema de Ehrenfest.

Regla de cuantizaci3n de Dirac:

$$f \rightarrow \hat{f}$$

$$g \rightarrow \hat{g}$$

$$\{f, g\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{f}, \hat{g}]$$

### PARTICULA CARGADA EN UN CAMPO ELECTROMAGNETICO

$$\text{Fuerza de Lorentz: } \vec{F} = q \{ \vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \} \quad (\text{unidades naturales})$$

Esta fuerza esta expresada en terminos de  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$ . Expresemosla en terminos de  $\phi$  y  $\vec{A}$   $\leftarrow$  Potenciales Electromagneticos

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} ; \quad \vec{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

$$\vec{F} = q \{ \vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \} = q \left\{ -\nabla \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \vec{v} \times (\nabla \times \vec{A}) \right\}$$

que se puede escribir como:

$$\vec{F} = q \left\{ -\nabla \phi + \nabla (\vec{v} \cdot \vec{A}) - \frac{d}{dt} (\nabla_{\vec{v}} (\vec{A} \cdot \vec{v})) \right\}$$

$$\text{donde } \nabla_{\vec{v}} = \hat{i} \frac{\partial}{\partial v_x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial v_y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial v_z}$$

$$\vec{F} = q \left\{ -\nabla (\phi - \vec{v} \cdot \vec{A}) + \frac{d}{dt} (\nabla_{\vec{v}} (\phi - \vec{v} \cdot \vec{A})) \right\}$$

$\leftarrow$  Ver Goldstein, Classical Mechanics.



Cuando en mecánica clásica una fuerza depende de  $\vec{v} \Rightarrow \vec{F} \neq -\nabla U(\vec{r})$

$$\vec{F} = -\nabla_{\vec{r}} U + \frac{d}{dt} (\nabla_{\vec{v}} U) \quad U = U(\vec{r}, \vec{v}) \quad \leftarrow \text{Ver Goldstein.}$$

En el caso electromagnético  $\Rightarrow U = q\phi - q\vec{v} \cdot \vec{A} \quad \leftarrow$  Energía potencial asociada a una carga eléctrica en un campo electromagnético.

$$\Rightarrow \mathcal{L} = K - U = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 - q\phi + q\vec{v} \cdot \vec{A}$$

$$\vec{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + q\vec{A} \quad \Rightarrow \quad \vec{v} = \frac{1}{m} \{ \vec{p} - q\vec{A} \}$$

$$\begin{aligned} H = \vec{p} \cdot \vec{v} - \mathcal{L} &= \frac{1}{m} \{ \vec{p} - q\vec{A} \} \cdot \vec{p} - \frac{1}{2m} \{ \vec{p} - q\vec{A} \}^2 + q\phi - \frac{q}{m} \{ \vec{p} - q\vec{A} \} \cdot \vec{A} \\ &= \frac{\vec{p}^2}{m} - \frac{q}{m} \vec{A} \cdot \vec{p} - \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{q}{m} \vec{p} \cdot \vec{A} - \frac{q^2}{2m} \vec{A}^2 + q\phi - \frac{q}{m} \vec{p} \cdot \vec{A} + \frac{q^2}{m} \vec{A}^2 \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m} 2\vec{p} \cdot \vec{A} + \frac{q^2}{2m} \vec{A}^2 + q\phi \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{H = \frac{1}{2m} \{ \vec{p} - q\vec{A} \}^2 + q\phi} \quad \leftarrow \text{Hamiltoniano de una partícula cargada, en un campo electromagnético.}$$

Haciendo primera cuantización tenemos:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \{ \hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\hat{\vec{r}}, t) \}^2 + q\phi(\hat{\vec{r}}, t) \quad \leftarrow \text{Hamiltoniano cuantizado.}$$

### INVARIANZA GAUGE DEL CAMPO ELECTROMAGNETICO

$$\left. \begin{aligned} \vec{E} &= -\nabla\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \\ \vec{B} &= \nabla \times \vec{A} \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi \\ \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Transformación Gauge del electromagnetismo} \\ \chi = \chi(\vec{r}, t) \quad \leftarrow \text{Arbitraria} \end{array}$$

$$\nabla \times \vec{A}' = \nabla \times (\vec{A} + \nabla\chi) = \nabla \times \vec{A} + \cancel{\nabla \times \nabla\chi} = \nabla \times \vec{A} \Rightarrow \vec{B}' = \nabla \times \vec{A}' = \nabla \times \vec{A} = \vec{B} \rightarrow \vec{B}' = \vec{B}$$

$$\vec{E}' = -\nabla\phi' - \frac{\partial \vec{A}'}{\partial t} = -\nabla\phi + \frac{\partial}{\partial t} \nabla\chi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} \nabla\chi = -\nabla\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \vec{E} \Rightarrow \vec{E}' = \vec{E}$$

$$\vec{F}' = q(\vec{E}' + \vec{v} \times \vec{B}') = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) = \vec{F} \Rightarrow \vec{F}' = \vec{F}$$

El electromagnetismo es invariante bajo la transformación gauge  $\rightarrow \chi(\vec{r}, t)$  arbitrario.

$\hookrightarrow$  A nivel clásico.

Veamos que sucede a nivel cuántico:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \{ \hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\hat{\vec{r}}, t) \}^2 + q\phi(\hat{\vec{r}}, t) \quad \rightarrow \quad \hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad \rightarrow \quad \{E, |\psi\rangle\} \quad \leftarrow \text{Estados y valores propios de Energía.}$$



Ante una transformación gauge  $\Rightarrow$

$$\hat{H} \rightarrow \hat{H}' = \frac{1}{2m} \left\{ \hat{\vec{p}} - q(\vec{A}(\vec{r}, t) - \nabla \chi(\vec{r}, t)) \right\}^2 + q\phi(\vec{r}, t) - q \frac{\partial \chi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

En general  $\hat{H}'|\psi'\rangle = E'|\psi'\rangle$  es tal que  $\{E', |\psi'\rangle\} \neq \{E, |\psi\rangle\}$

La invarianza gauge del electromagnetismo no es invariante bajo una transformación gauge. Esto no es aceptable ya que implica diferencias significativas entre el electromagnetismo a nivel microscópico y el electromagnetismo a nivel macroscópico.

Para reestablecer la invarianza gauge la función de onda  $\psi(\vec{r}, t)$  también debe transformarse de la mano con  $\phi$  y  $\vec{A}$ .

La regla de transformación para  $\psi(\vec{r}, t)$  es:  $\psi(\vec{r}, t) \rightarrow \psi'(\vec{r}, t) = e^{iq\chi(\vec{r}, t)/\hbar} \psi(\vec{r}, t)$

$$\Rightarrow \hat{H}'|\psi'\rangle = E'|\psi'\rangle \quad E' = E$$

En resumen, en mecánica cuántica la transformación gauge para el electromagnetismo es:

$$\left. \begin{aligned} \vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla \chi \\ \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \\ \psi &\rightarrow \psi' = e^{iq\chi} \psi \end{aligned} \right\} \text{ Demostrarlo.}$$

Cuando transformamos  $\psi \rightarrow \psi' = e^{i\alpha} \psi$ ,  $\alpha = \text{cte}$  (cambio de fase)  $\rightarrow$  La mecánica cuántica permanece invariante  $\rightarrow$  transformación global del grupo  $U(1)$ .

Cuando cambiamos  $\alpha \rightarrow q\chi(\vec{r}, t)/\hbar$   $\chi(\vec{r}, t)$  arbitrario  $\Rightarrow$  transformación local del grupo  $U(1)$

Para que la mecánica cuántica permanezca invariante ante transformaciones locales de  $U(1)$  debemos introducir el campo electromagnético.

$$\hat{\vec{p}} \rightarrow \hat{\vec{p}} - q\vec{A} \quad \hat{\vec{p}} = i\hbar \nabla \Rightarrow i\hbar \nabla \rightarrow i\hbar \nabla - q\vec{A} \Rightarrow \nabla \rightarrow \nabla + i \frac{q}{\hbar} \vec{A} \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{Redefinición de la derivada} \\ \text{Derivada covariante.} \end{array}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \rightarrow (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\phi) \psi = \frac{1}{2m} \{ \hat{\vec{p}} - q\vec{A} \}^2 \psi = \frac{1}{2m} \{ i\hbar \nabla - q\vec{A} \}^2 \psi$$

$$\downarrow$$
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\phi \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + i \frac{q}{\hbar} \phi \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{Redefinición de la derivada} \\ \text{Derivada covariante.} \end{array}$$