Mecánica Cuántica. Tarea 5[*†]

José Emmanuel Flores Calderón

Fecha: 05/05/2021.

1. Muestra que las componentes del momento cinético $\overrightarrow{\Pi} = \mathbf{p} - (e/c)\,\mathbf{A}$, satisfacen las propiedades de conmutación

$$\left[\Pi_i, \Pi_j\right] = \frac{i\hbar e}{c}\epsilon_{ijk}B_k$$

donde $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Verifica también la versión cuántica de la fuerza de Lorentz

$$m\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = e\left[\mathbf{E} + \frac{1}{2c}\left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \frac{d\mathbf{x}}{dt}\right)\right]. \tag{0.1}$$

Solución.

Calculemos el conmutador $\left[\Pi_i, \Pi_j\right]$,

$$\left[\Pi_i, \Pi_j\right] = \left[p_i - \frac{e}{c}A_i, p_j - \frac{e}{c}A_j\right] = \left[p_i - \frac{e}{c}A_i, p_j\right] + \left[p_i - \frac{e}{c}A_i, -\frac{e}{c}A_j\right],$$

$$\implies \left[\Pi_i, \Pi_j\right] = \left[p_i, p_j\right] - \frac{e}{c}\left[A_i, p_j\right] - \frac{e}{c}\left[p_i, A_j\right] + \left(\frac{e}{c}\right)\left[A_i, A_j\right],$$

pero recordemos que las componentes de $\mathbf{p}$conmutan entre sí. Por otra parte, las componentes de $\mathbf{A}$ son funciones de $\mathbf{x}$ y por lo tanto, conmutan entre sí. Por lo tanto

$$\left[\Pi_i, \Pi_j\right] = -\frac{e}{c}\left[A_i, p_j\right] - \frac{e}{c}\left[p_i, A_j\right] = \frac{e}{c}\left(\left[p_j, A_i\right] - \left[p_i, A_j\right]\right),$$

$$\implies \left[\Pi_i, \Pi_j\right] = \frac{e}{c}\left(-i\hbar\frac{\partial A_i}{\partial x_j} + i\hbar\frac{\partial A_j}{\partial x_i}\right) = \frac{i\hbar e}{c}\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right).$$

Notemos en la expresión anterior que si $i = j$, entonces el conmutador es cero, mientras que si cambiamos los índices, aparece un signo menos, de manera que podemos introducir un objeto que capture estas observaciones, sin afectar la expresión, éste objeto es el símbolo de Levi-Civita. Entonces

$$\left[\Pi_i, \Pi_j\right] = \frac{i\hbar e}{c}\epsilon_{ijk}\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right),$$

por otra parte, sabemos que

$$B_k = \epsilon_{kij}\partial_i A_j = \partial_i A_j - \partial_j A_i,$$

que es justamente el término dentro del parentesis en la expresión anterior. Por lo tanto, tenemo

$$\left[\Pi_i, \Pi_j\right] = \frac{i\hbar e}{c}\epsilon_{ijk}B_k.$$

justo como se quería demostrar.

[*]Grupo C011 | Trimestre 21-1

[†]Profesor: Miguel Angel Bastarrachea Magnani | Ayudante: Yoshua Chávez Bolaños

Ahora verifiquemos la relación dada en (0.1). Por definición, tenemos que

$$m\frac{d^2\overrightarrow{x}}{dt^2} = \frac{d\Pi}{dt},$$

pero en la ecuación de Heisenberg para operadores nos dice que

$$\frac{d\Pi}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\Pi, H\right].$$

Donde H viene dado por

$$H = \frac{\Pi^2}{2m} + e\phi.$$

En lo sucesivo hare los calculos componente a componente, en notación de índices, con lo cual las ecuaciones quedan escritas como

$$\frac{d\Pi_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\Pi_i, H\right] \quad \& \quad H = \frac{\Pi_j\Pi_j}{2m} + e\phi,$$

con lo cual, tenemos que

$$\frac{d\Pi_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\Pi_i, \frac{\Pi_j\Pi_j}{2m} + e\phi\right] = \frac{1}{2i\hbar m}\left[\Pi_i, \Pi_j\Pi_j\right] + \frac{1}{i\hbar}\left[\Pi_i, e\phi\right],$$

$$\implies \frac{d\Pi_i}{dt} = \frac{1}{2i\hbar m}\left[\Pi_i, \Pi_j\right]\Pi_j + \frac{1}{2i\hbar m}\Pi_j\left[\Pi_i, \Pi_j\right] + \frac{1}{i\hbar}\left[\Pi_i, e\phi\right],$$

pero hemos mostrado que $\left[\Pi_i, \Pi_j\right] = \frac{i\hbar e}{c}\epsilon_{ijk}B_k$, entonces

$$\frac{d\Pi_i}{dt} = \frac{1}{2i\hbar m}\frac{i\hbar e}{c}\epsilon_{ijk}B_k\Pi_j + \frac{1}{2i\hbar m}\Pi_j\frac{i\hbar e}{c}\epsilon_{ijk}B_k + \frac{1}{i\hbar}\left[\Pi_i, e\phi\right],$$

$$\implies \frac{d\Pi_i}{dt} = \frac{e}{2mc}\epsilon_{ijk}B_k\Pi_j + \frac{e}{2mc}\Pi_j\epsilon_{ijk}B_k + \frac{1}{i\hbar}\left[\Pi_i, e\phi\right],$$

pero $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{ikj}$, de modo que

$$\frac{d\Pi_i}{dt} = \frac{e}{2mc}\left(\epsilon_{ijk}\Pi_jB_k - \epsilon_{ikj}B_k\Pi_j\right) + \frac{1}{i\hbar}\left[\Pi_i, e\phi\right]. \tag{0.2}$$

Ahora bien, para el conmutador $[\Pi_i, e\phi]$, usemos que

$$\Pi_i = p_i - \frac{e}{c}A_i,$$

con lo cual, tenemos que

$$\left[\Pi_i, e\phi\right] = \left[p_i - \frac{e}{c}A_i, e\phi\right] = e\left[p_i, \phi\right] - \frac{e}{c}\left[A_i, e\phi\right].$$

Recordemos que tanto $\mathbf{A}$ como ϕ son funciones de $\mathbf{x}$, de modo que estás cantidades conmutan entre sí. Entonces

$$\left[\Pi_i, e\phi\right] = e\left[p_i, \phi\left(\mathbf{x}\right)\right] = -i\hbar e\frac{\partial\phi}{\partial x_i}.$$

Por lo tanto la ecuación (0.2) queda escrita como

$$\frac{d\Pi_i}{dt} = \frac{e}{2mc}\left(\epsilon_{ijk}\Pi_jB_k - \epsilon_{ikj}B_k\Pi_j\right) - \frac{1}{i\hbar}i\hbar e\frac{\partial\phi}{\partial x_i},$$

$$\implies \frac{d\Pi_i}{dt} = \frac{e}{2mc}\left(\epsilon_{ijk}\Pi_jB_k - \epsilon_{ikj}B_k\Pi_j\right) - e\frac{\partial\phi}{\partial x_i}.$$

Si recordamos que $E_i = -\frac{\partial\phi}{\partial x_i}$, junto con $\Pi_j/m = \frac{dx_j}{dt}$, tenemos que

$$\frac{d\Pi_i}{dt} = e\left[E_i + \frac{1}{2c}\left(\epsilon_{ijk}\frac{dx_j}{dt}B_k - \epsilon_{ikj}B_k\frac{dx_j}{dt}\right)\right],$$

y además recordamos que $(R \times S)_i = \epsilon_{ijk} R_j S_k$, tenemos

$$\frac{d\Pi_i}{dt} = e\left[E_i + \frac{1}{2c}\left(\left(\frac{dx_j}{dt} \times B_k\right)_i - \left(B_k \times \frac{dx_j}{dt}\right)_i\right)\right],$$

con lo cual

$$\frac{d\Pi}{dt} = m\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = e\left[\mathbf{E} + \frac{1}{2c}\left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \frac{d\mathbf{x}}{dt}\right)\right]. \tag{0.3}$$

2. Muestre que la ecuación de Schrödinger en presencia de un campo electromagnético origina la ecuación de continuidad $\partial\rho/\partial t + \nabla' \cdot \mathbf{j} = 0$, donde $\rho = |\psi|^2$ pero la corriente de probabilidad está dada por

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} Im\left(\psi^* \nabla' \psi\right) - \frac{e}{mc}\mathbf{A}\,|\psi|^2 .$$

Muestra también que si escribimos $\psi = \sqrt{\rho}\exp\left[iS/\hbar\right]$, podemos escribir la corriente de probabilidad en la forma alternativa

$$\mathbf{j} = \frac{\rho}{m}\left(\nabla S - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right),$$

y que la integral espacial de $\mathbf{j}$ es el valor esperado del momento cinético.

Solución.

La ecuación de Schrödinger para un ket de estado arbitrario $|\alpha, t_0 = 0\rangle = |\alpha, t_0\rangle$, esta dada por

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\alpha, t_0; t\rangle = H\,|\alpha, t_0; t\rangle\,, \tag{0.4}$$

donde H está dado por

$$H = \frac{1}{2m}\Pi \cdot \Pi + e\phi = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + e\phi,$$

de manera que de la ecuación dada en (0.4), tenemos que

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t\right\rangle = \left\langle \mathbf{x}' \right| H \left|\alpha, t_0; t\right\rangle .$$

Ahora, calculemos $\left\langle \mathbf{x}' \right| H$

$$\left\langle \mathbf{x}' \right| H = \left\langle \mathbf{x}' \right| \left(\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + e\phi\right),$$

es importante recordar que tanto $\mathbf{A}$ como ϕ son funciones reales del operador de posición, entonces

$$\left\langle \mathbf{x}' \right| H = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{x}'\right)\right) \cdot \left\langle \mathbf{x}' \right| \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + e\phi\left(\mathbf{x}'\right)\left\langle \mathbf{x}' \right|,$$

$$\Longrightarrow \left\langle \mathbf{x}' \right| H = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{x}'\right)\right) \cdot \left(-i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{x}'\right)\right)\left\langle \mathbf{x}' \right| + e\phi\left(\mathbf{x}'\right)\left\langle \mathbf{x}' \right|,$$

con lo cual, tenemos que

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t\right\rangle = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{x}'\right)\right) \cdot \left(-i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{x}'\right)\right)\left\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t\right\rangle + e\phi\left(\mathbf{x}'\right)\left\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t\right\rangle .$$

Si ahora, hacemos que $\left\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t\right\rangle = \psi\left(\mathbf{x}', t\right) = \psi$, tenemos que

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{x}'\right)\right) \cdot \left(-i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{x}'\right)\right)\psi + e\phi\left(\mathbf{x}'\right)\psi.$$

Antes de seguir con la discusión, desarollemos el producto $\left(-i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{x}'\right)\right) \cdot \left(-i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{x}'\right)\right)$

$$\left(-i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{x}'\right)\right) \cdot \left(-i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{x}'\right)\right) = -\hbar^2\nabla'^2 + i\frac{e\hbar}{c}\nabla' \cdot \mathbf{A} + i\frac{e\hbar}{c}\mathbf{A} \cdot \nabla' - \left(\frac{e}{c}\right)^2\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$$

De manera que

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\nabla'^2 + i\frac{e\hbar}{c}\nabla'\cdot\mathbf{A} + i\frac{e\hbar}{c}\mathbf{A}\cdot\nabla' - \left(\frac{e}{c}\right)^2\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}\right)\psi + e\phi\psi \tag{0.5}$$

Si ahora tomamos el complejo conjugado de la expresión anterior, tenemos que

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^* = \frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\nabla'^2 - i\frac{e\hbar}{c}\nabla'\cdot\mathbf{A} - i\frac{e\hbar}{c}\mathbf{A}\cdot\nabla' - \left(\frac{e}{c}\right)^2\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}\right)\psi^* + e\phi\psi^*. \tag{0.6}$$

Si ahora multiplicamos la expresión dada en (0.5) por ψ^* y la expresión dada en (0.6) por ψ, tenemos que

$$i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)\psi^* = \frac{1}{2m}\left(\left(-\hbar^2\nabla'^2 + i\frac{e\hbar}{c}\nabla'\cdot\mathbf{A} + i\frac{e\hbar}{c}\mathbf{A}\cdot\nabla' - \left(\frac{e}{c}\right)^2\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}\right)\psi\right)\psi^* + e\phi\psi\psi^*, \tag{0.7}$$

junto con

$$-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)\psi = \frac{1}{2m}\left(\left(-\hbar^2\nabla'^2 - i\frac{e\hbar}{c}\nabla'\cdot\mathbf{A} - i\frac{e\hbar}{c}\mathbf{A}\cdot\nabla' - \left(\frac{e}{c}\right)^2\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}\right)\psi^*\right)\psi + e\phi\psi^*\psi. \tag{0.8}$$

Si ahora a la ecuación dada en (0.7) le restamos la ecuación dada en (0.8), tenemos, para el lado izquierdo, que

$$i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)\psi^* + i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)\psi = i\hbar\left(\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)\psi^* + \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)\psi\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi\psi^*\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right|^2,$$

mientras que para el miembro derecho, tenemos

$$\frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\left(\nabla'^2\psi\right)\psi^* + \hbar^2\left(\nabla'^2\psi^*\right)\psi\right) + i\frac{e\hbar}{2mc}\left(\nabla'\cdot\mathbf{A}\psi\psi^* + \nabla'\cdot\mathbf{A}\psi^*\psi\right) + i\frac{e\hbar}{2mc}\left(\mathbf{A}\cdot\left(\nabla'\psi\right)\psi^* + \mathbf{A}\cdot\left(\nabla'\psi^*\right)\psi\right),$$

que lo podemos reescribir como

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(\nabla'^2\psi^*\right)\psi - \left(\nabla'^2\psi\right)\psi^*\right) + i\frac{e\hbar}{2mc}\left(\mathbf{A}\cdot\left(\nabla'\psi\right)\psi^* + \mathbf{A}\cdot\left(\nabla'\psi^*\right)\psi\right) + i\frac{2e\hbar}{2mc}\nabla'\cdot\mathbf{A}\left|\psi\right|^2,$$

o bien como

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(\nabla'^2\psi^*\right)\psi - \left(\nabla'^2\psi\right)\psi^*\right) + i\frac{e\hbar}{2mc}\left(\mathbf{A}\cdot\left(\nabla'\psi\right)\psi^* + \mathbf{A}\cdot\left(\nabla'\psi^*\right)\psi + 2\nabla'\cdot\mathbf{A}\left|\psi\right|^2\right).$$

Usando la identidad $\nabla\cdot(\phi\mathbf{U}) = \phi\nabla\cdot\mathbf{U} + \mathbf{U}\cdot\nabla\phi$, tenemos que la expresion anterior se convierten en

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left(\psi\nabla'\psi^* - \psi^*\nabla'\psi\right) + i\frac{e\hbar}{mc}\nabla'\cdot\left(\mathbf{A}\left|\psi\right|^2\right).$$

Combinando ambos lados, tenemos que

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right|^2 &= \frac{\hbar^2}{2m}\nabla'\cdot\left(\psi\nabla'\psi^* - \psi^*\nabla'\psi\right) + i\frac{e\hbar}{mc}\nabla'\cdot\left(\mathbf{A}\left|\psi\right|^2\right),\\
\Longrightarrow\ \frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right|^2 &= -\frac{i\hbar}{2m}\nabla'\cdot\left(\psi\nabla'\psi^* - \psi^*\nabla'\psi\right) + \frac{e}{mc}\nabla'\cdot\left(\mathbf{A}\left|\psi\right|^2\right),\\
\Longrightarrow\ \frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right|^2 &- \frac{i\hbar}{2m}\nabla'\cdot\left(\psi^*\nabla'\psi - \psi\nabla'\psi^*\right) - \frac{e}{mc}\nabla'\cdot\left(\mathbf{A}\left|\psi\right|^2\right) = 0,\\
\Longrightarrow\ \frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right|^2 &+ \nabla'\cdot\left(-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla'\psi - \psi\nabla'\psi^*\right) - \frac{e}{mc}\left(\mathbf{A}\left|\psi\right|^2\right)\right) = 0.
\end{aligned}$$

Si ahora usamos que

$$-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla'\psi - \psi\nabla'\psi^*\right) = \left(\frac{\hbar}{m}\right)Im\left(\psi^*\nabla'\psi\right),$$

tenemos
$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2+\nabla'\cdot\left(\left(\frac{\hbar}{m}\right)Im\left(\psi^*\nabla'\psi\right)-\frac{e}{mc}\left(\mathbf{A}|\psi|^2\right)\right)=0,$$
y definimos
$$\mathbf{j}=\left(\frac{\hbar}{m}\right)Im\left(\psi^*\nabla'\psi\right)-\frac{e}{mc}\left(\mathbf{A}|\psi|^2\right)\quad\&\quad\rho=|\psi|^2,$$
tenemos la siguiente ecuación
$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla'\cdot\mathbf{j}=0,$$
justo como queriamos demostrar.

Ahora bien, si escribimos a ψ como $\psi=\sqrt{\rho}\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]$, tenemos que
$$\psi^*\nabla'\psi=\psi^*\nabla'\left(\sqrt{\rho}\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]\right)=\psi^*\left(\frac{1}{\sqrt{\rho}}\left(\nabla'\rho\right)\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]+\sqrt{\rho}\nabla'\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]\right),$$
$$\implies\psi^*\nabla'\psi=\psi^*\left(\frac{1}{\sqrt{\rho}}\left(\nabla'\rho\right)\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]+\frac{i}{\hbar}\sqrt{\rho}\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]\nabla'S\right),$$
de manera que
$$Im\left(\psi^*\nabla'\psi\right)=\frac{1}{\hbar}\psi^*\sqrt{\rho}\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]\nabla'S$$
pero $\psi^*=\sqrt{\rho}\exp\left[\frac{-i}{\hbar}S\right]$, con lo cual
$$Im\left(\psi^*\nabla'\psi\right)=\frac{1}{\hbar}\sqrt{\rho}\exp\left[\frac{-i}{\hbar}S\right]\sqrt{\rho}\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]\nabla'S=\rho\nabla'S,$$
$$\implies Im\left(\psi^*\nabla'\psi\right)=\frac{1}{\hbar}\rho\nabla'S,$$
de manera que
$$\mathbf{j}=\left(\frac{\hbar}{m}\right)Im\left(\psi^*\nabla'\psi\right)-\frac{e}{mc}\left(\mathbf{A}|\psi|^2\right)=\frac{\hbar}{m}\frac{1}{\hbar}\rho\nabla'S-\frac{e}{mc}\mathbf{A}\rho,$$
$$\therefore\mathbf{j}=\frac{\rho}{m}\left(\nabla'S-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right).$$
Por último, integremos espacialmente a $\mathbf{j}$
$$\int d^3x'\mathbf{j}=\int d^3x'\left(\frac{\hbar}{m}\right)Im\left(\psi^*\nabla'\psi\right)-\frac{e}{mc}\left(\mathbf{A}|\psi|^2\right),$$
$$\implies\int d^3x'\mathbf{j}=\frac{1}{m}\int d^3x'\hbar Im\left(\psi^*\nabla'\psi\right)-\frac{e}{mc}\int d^3x'\left(\mathbf{A}|\psi|^2\right),$$
pero sabemos que la primer integral es justamente el valor esperado del operador momento $\mathbf{p}$, de manera que
$$\int d^3x'\mathbf{j}=\frac{1}{m}\langle\mathbf{p}\rangle-\frac{e}{mc}\int d^3x'\psi^*\mathbf{A}\psi.$$
Ahora bien, por la forma en que se ha puesto a la segunda integral, es claro que es el valor esperado de $\mathbf{A}$, con lo cual
$$\int d^3x'\mathbf{j}=\frac{1}{m}\langle\mathbf{p}\rangle-\frac{e}{mc}\langle A\rangle=\frac{1}{m}\left(\langle\mathbf{p}\rangle-\frac{e}{c}\langle\mathbf{A}\rangle\right)=\frac{1}{m}\left\langle\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right\rangle=\frac{1}{m}\langle\Pi\rangle,$$
por lo tanto
$$\int d^3x'\mathbf{j}=\frac{1}{m}\langle\Pi\rangle,$$
es decir, la integral espacial de $\mathbf{j}$ es el valor esperado del momento cinemático.

3. Calcula los tres niveles de energía más bajos junto con sus degeneraciones para los siguientes sistemas (asuma partículas distinguibles de masas iguales):

   (a) Tres partículas no interactuantes de espín $\frac{1}{2}$en una caja de longitud L.

   (b) Cuatro partículas no interactuantes de espín $\frac{1}{2}$ en una caja de longitud L.

   Solución.

   (a) Dado que las partículas no interaccionan, tenemos que el Hamiltoniano esta dado por

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_3}\nabla_3^2 + V\left(x_1, x_2 x_2\right),$$

donde $V\left(x_1, x_2 x_2\right)$ cumple con

$$V\left(x_1, x_2 x_2\right) = \begin{cases} 0 & x_1, x_2 x_3 \in [0, L] \times [0, L] \times [0, L] \\ \infty & x_1, x_2 x_3 \notin [0, L] \times [0, L] \times [0, L] \end{cases}.$$

Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger para este sistema esta dada por

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_3}\nabla_3^2\right]\psi\left(x_1, x_2 x_2\right) = E\psi\left(x_1, x_2 x_2\right).$$

La ecuación anterior la podemos resolver usando separación de variables, haciendo

$$\psi\left(x_1, x_2 x_2\right) = u_1\left(x_1\right) u_2\left(x_2\right) u_3\left(x_3\right)$$

con lo cual obtendremos tres ecuaciones diferenciales ordinarias, cada una de ellas correspondiendo al caso de una partícula en una caja, cuyas soluciones vienen dadas por

$$u_i = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x_i}{L}\right),$$

junto con sus respectivas eigenenergías

$$E_i = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\sum_{j=1}^{3}\left(n_j^i\right)^2,$$

de manera que la energía del sistema esta dada por

$$E = \sum_{i=1}^{3} E_i = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\left(n_j^i\right)^2.$$

Ahora bien, para el primer nivel todas las n_j^i son 1, para el segundo nivel, hay una n_j^i que es 2 y para el tercero, hay dos n_j^i cuyo valor es 2, de manera que para el primer nivel tenemos que

$$\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\left(n_j^i\right)^2 = 9,$$

para el segundo

$$\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\left(n_j^i\right)^2 = 12,$$

y para el tercero

$$\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\left(n_j^i\right)^2 = 15.$$

Ahora bien,si ahora definimos $E_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$, tenemos que las energías de los niveles estan dadas por

$$E_1 = 9E_0, \;\; E_2 = 12E_0, \;\; E_3 = 15E_0.$$

Dado que los sistemas de espín $1/2$ tienen dimensionalidad 2 y en nuestro caso tenemos tres partículas, la degeneración esta dada por $2^3 = 8$. Para el primer nivel hay solamente una función de onda, pero puede ser cualquiera de las 9 posibilidades, de manera que su degeneración esta dada por 9. Por otra parte, para el segundo nivel, hay 9 funciones de onda, ya cualquiera de ellas nos puede dar $n_j^i = 2$, de manera que la degeneración para este nivel esta dada por $9 \times 8 = 72$. Finalmente, para el tercer nivel, tenemos que el número de funciones de onda viene dado por $9!/7!2! = 36$, de modo que la degeneración esta dada por $36 \times 8 = 288$.

(b) Ahora bien, para el caso de 4 partículas indistingibles tenemos que proceder de la misma forma; es decir añadir un término extra al Hamiltoniano del sistema anterior, el cual corresponde al Hamiltoniano de la cuarta partícula, proponer una solución que sea separable, lo cual nos conduce a un sistema de 4 ecuaciones diferenciales ordinarias desacopladas. Sin embargo, como en el caso anterior, las energías estan relacionadas por

$$E = \sum_{i=1}^{4} E_i = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{4} \left(n_j^i\right)^2,$$

y justamente como el caso anterior, tenemos que para el primer nivel

$$\sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{4} \left(n_j^i\right)^2 = 12.$$

Para el segundo nivel una de las $n_j^i = 2$, con lo cual

$$\sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{4} \left(n_j^i\right)^2 = 15,$$

mientras que para el tercer nivel hay dos $n_j^i = 2$, con lo cual

$$\sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{4} \left(n_j^i\right)^2 = 18.$$

De manera que las energías para los respectivos niveles 1, 2 y 3 están dadas por

$$E_1 = 12E_0, \;\; E_2 = 15E_0, \;\; E_3 = 18E_0$$

4. Un estado cuántico Ψ es conocido por ser un eigenestado de dos operadores Hermitianos A y B los cuales anticonmutan

$$AB + BA = 0$$

¿Qué puedes decir de los eigenvalores de A y B para el estado Ψ? Ilustra tu punto usando el operador de paridad (que se puede escoger que satisfaga $\pi = \pi^{-1} = \pi^\dagger$) y el operador momento.

Solución.

Si $|\Psi\rangle$ es un eigenestado de A y de B, entonces existen constantes $a, b \in \mathbb{C}$, tales que

$$A\,|\Psi\rangle = a\,|\Psi\rangle \;\;\&\;\; B\,|\Psi\rangle = b\,|\Psi\rangle\,,$$

como A y B anticonmutan, tenemos que

$$(AB+BA)\,|\Psi\rangle = 0 \iff AB\,|\Psi\rangle + BA\,|\Psi\rangle = ab\,|\Psi\rangle + ba\,|\Psi\rangle = 0,$$

$$\iff (ab+ba)\,|\Psi\rangle = 0 \iff ab - ba = 0 \implies ab = -ba \iff a = 0 \text{ o } b = 0.$$

Ahora bien, si hacemos que $A = \pi$ y $B = \mathbf{p}$, los cuales sabemos que en efecto, anticonmutan, tenemos que

$$\{\pi, \mathbf{p}\} = 0 \implies \pi\mathbf{p} = -\mathbf{p}\pi \implies \pi\mathbf{p}\pi^{-1} = -\mathbf{p},$$

de manera que solo cuando $\mathbf{p} = 0$, el estado puede ser un eigenestado de paridad.

5. El Hamiltoniano para un sistema de espín 1 está dado por

$$H = AS_z^2 + B\left(S_x^2 - S_y^2\right).$$

Resuelve este problema exactamente para encontrar los eigenestados de energía normalizados y sus eigenvalores. ¿Es este Hamiltoniano invariante bajo inversión temporal? ¿Cómo transforman los eigenestados que obtuviste bajo inversión temporal?.

Solución.

Para sistemas de espín 1, las representaciones matriciales de los operadores S_x, S_y y S_z están dados por

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \; S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \; S_x = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Ahora bien, hagamos la construcción matricial del Hamiltoniano

$$S_x^2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$S_y^2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} -i^2 & 0 & i^2 \\ 0 & -2i^2 & 0 \\ i^2 & 0 & -i^2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$S_y^2 = \hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

De manera que parael Hamiltoniano, tenemos que

$$H = AS_z^2 + B\left(S_x^2 - S_y^2\right) = A\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + B\frac{\hbar^2}{2}\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}\right),$$

$$\Longrightarrow \; H = A\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + B\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix} = A\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + B\hbar^2\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\Longrightarrow \; H = \hbar^2\begin{pmatrix} A & 0 & B \\ 0 & 0 & 0 \\ B & 0 & A \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto, para obtener los eigenestados, debemos resolver el problema de valores propios dado por $H\mathbf{x} = E\mathbf{x}$, lo cual, para los valores propios, nos conduce a

$$\det\left(H - \lambda \mathbb{I}\right) = 0 \iff \det\begin{pmatrix} \hbar^2 A - \lambda & 0 & \hbar^2 B \\ 0 & -\lambda & 0 \\ \hbar^2 B & 0 & \hbar^2 A - \lambda \end{pmatrix} = 0,$$

$$\iff -\lambda\left(\hbar^2 A - \lambda\right)^2 + \lambda\left(\hbar^2 B\right)^2 = 0 \implies \lambda_1 = 0.$$

Si ahora suponemos que $\lambda \neq 0$, tenemos que

$$\left(\hbar^2 A - \lambda\right)^2 - \left(\hbar^2 B\right)^2 = 0 \implies \lambda^2 - 2\hbar^2 A\lambda + \left(\hbar^2 A\right)^2 - \left(\hbar^2 B\right)^2 = 0,$$

cuya solución esta dada por

$$\lambda = \frac{2\hbar^2 A}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{4\hbar^4 A^2 - 4\hbar^4 A^2 + 4\hbar^4 B^2} = \hbar^2 A \pm \frac{1}{2}\sqrt{4\hbar^4 B^2},$$

por lo tanto, los eigenvalores están dados por

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = \hbar^2 \left(A + B\right), \quad \lambda_3 = \hbar^2 \left(A - B\right).$$

Ahora bien, para el eigenvector asociado a $\lambda = 0$, tenemos

$$\left(H - \lambda \mathbb{I}\right) \mathbf{x} = 0 \iff \begin{pmatrix} \hbar^2 A & 0 & \hbar^2 B \\ 0 & 0 & 0 \\ \hbar^2 B & 0 & \hbar^2 A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\iff Ax + Bz = 0 \;\&\; Bx + Az = 0 \implies z = -\frac{A}{B}x \;\&\; z = -\frac{B}{A}x \implies x = z = 0 \;\&\; y = y.$$

Mientras que para el eigenvector asociado a $\lambda = \hbar^2 \left(A + B\right)$, tenemos

$$\left(H - \lambda \mathbb{I}\right) \mathbf{x} = 0 \iff \begin{pmatrix} -\hbar^2 B & 0 & \hbar^2 B \\ 0 & -\hbar^2 \left(A + B\right) & 0 \\ \hbar^2 B & 0 & -\hbar^2 B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\implies -\hbar^2 Bx + \hbar^2 Bz = 0 \;\&\; \hbar^2 \left(A + B\right) y = 0 \implies z = x \;\&\; y = 0.$$

Finalmente, para el eigenvector asociado a $\lambda = \hbar^2 \left(A - B\right)$, se tiene

$$\left(H - \lambda \mathbb{I}\right) \mathbf{x} = 0 \iff \begin{pmatrix} \hbar^2 B & 0 & \hbar^2 B \\ 0 & -\hbar^2 \left(A - B\right) & 0 \\ \hbar^2 B & 0 & \hbar^2 B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\implies \hbar^2 Bx + \hbar^2 Bz = 0 \;\&\; \hbar^2 \left(A - B\right) y = 0 \implies z = -x \;\&\; y = 0.$$

Por lo tanto, los eigenvectores normalizados están dados por

$$\lambda_1 \to |E_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \lambda_2 \to |E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \lambda_3 \to |E_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Para ver si H es invariante ante inversion temporal, veámos lo que sucede con los elementos que lo constituyen

$$\Theta S_i^2 \Theta^{-1} = \Theta S_i S_i \Theta^{-1} = \Theta S_i \Theta^{-1} \Theta S_i \Theta^{-1} = \left(-S_i\right)\left(-S_i\right) = S_i^2 \;\; \forall i = x, y, z,$$

por lo tanto, H es invariante ante inversiones temporales. Por otra parte, para los eigenkets, tenemos que

$$\Theta |E_1\rangle = \Theta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |E_1\rangle \implies \Theta |E_1\rangle = |E_1\rangle,$$

por otra parte

$$\Theta |E_{2,3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Theta \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \Theta \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \right) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \pm 1 \end{pmatrix} = -|E_{2,3}\rangle \implies \Theta |E_{2,3}\rangle = |E_{2,3}\rangle.$$