UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
http://fisica.ciens.ucv.ve/felix/postgrado/

03 / marzo / 2010
Prof. Félix Marín
TAREA[1] N° 0

Tópicos en la Teoría de Muchos Cuerpos (**REPASO**)

1. Derive una solución variacional, de la forma $\Psi_0(x) \equiv A/(x^2+\Lambda^2)$, para el estado fundamental del oscilador armónico unidimensional ($H = p_x^2/2m + m\omega^2 x^2/2$). $\Lambda \in \mathbf{R}$. Compárela con la solución exacta.

   SOLUCIÓN:

   La condición de normalización de $\Psi_0(x)$ permite determinar A en términos de Λ:

$$|A|^{-2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{(x^2+\Lambda^2)^2} = \frac{1}{\Lambda^3} \overbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{(x^2+1)^2}}^{\pi/2} \qquad \Longrightarrow \qquad |A|^2 = \frac{2\Lambda^3}{\pi}$$

   donde hemos escogido $\Lambda > 0$. La energía media $E(\Lambda)$ que corresponde a la función de onda variacional $\Psi_0(x)$ viene dada por

$$\begin{aligned} E(\Lambda) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{\partial \Psi_0(x)}{\partial x} \right|^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 |\Psi_0(x)|^2 \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left[\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \frac{4x^2}{(x^2+\Lambda^2)^4} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 |A|^2 \frac{1}{(x^2+\Lambda^2)^2} \right] \\ &= |A|^2 \frac{2\hbar^2}{m\Lambda^5} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \frac{x^2}{(x^2+1)^4}}_{\pi/16} + |A|^2 \frac{m\omega^2}{2\Lambda} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \frac{x^2}{(x^2+1)^2}}_{\pi/2} \\ &= \frac{2\Lambda^3}{\pi} \frac{2\hbar^2}{m\Lambda^5} \frac{\pi}{16} + \frac{2\Lambda^3}{\pi} \frac{m\omega^2}{2\Lambda} \frac{\pi}{2} = \frac{\hbar^2}{4m\Lambda^2} + \frac{m\omega^2\Lambda^2}{2} = \left(\frac{1}{4\overline{\Lambda}^2} + \frac{\overline{\Lambda}^2}{2} \right) \hbar\omega \end{aligned}$$

   donde $\overline{\Lambda} \equiv \Lambda/\sqrt{\hbar/m\omega}$. El valor mínimo de $E(\Lambda)$ se obtiene con:

$$0 = \frac{\mathrm{d}E(\Lambda)}{\mathrm{d}\left(\overline{\Lambda}^2\right)} = \left(-\frac{1}{4\overline{\Lambda}^4} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad \Longrightarrow \quad \overline{\Lambda}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \Longrightarrow \quad E(\Lambda) = \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar\omega$$

   Note que $\mathrm{d}^2 E(\Lambda)/\mathrm{d}\left(\overline{\Lambda}^2\right)^2 = 1/2\overline{\Lambda}^6 > 0$. El *error relativo porcentual* en el cálculo de la energía viene dado por

$$\left| \frac{\sqrt{2}\,\hbar\omega/2 - \hbar\omega/2}{\hbar\omega/2} \right| \times 100\,\% \approx 41{,}42\,\%$$

[1] FECHA DE ENTREGA: **miércoles 17 de marzo de 2010 ($\leq$ 5 p.m.)**
No se aceptarán tareas realizadas en computador.

lo cual muestra que la solución *“ tipo Lorentziana ”* $\Psi_0(x)$ es una aproximación no recomendable para el estado fundamental del oscilador armónico. Físicamente, esta solución no decae lo suficientemente *“ rápido ”*, a partir del origen de coordenadas, como puede deducirse a partir de la conducta de $\Psi_0(x)$ cuando $|x| \ll \Lambda$:

$$\frac{1}{x^2+\Lambda^2} = \frac{\Lambda^{-2}}{1+(x/\Lambda)^2} \approx \Lambda^{-2}\left[1-(x/\Lambda)^2\right] \approx \Lambda^{-2}\,\mathrm{e}^{-x^2/\Lambda^2}$$

2. Escriba, en términos de *operadores de creación* y *destrucción* ($a^\dagger$ y a, respectivamente) del oscilador armónico, el hamiltoniano

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2 + g x^4\,, \qquad\qquad g>0$$

y evalue la corrección, hasta orden g, al autoestado $|3\rangle$ del oscilador armónico.

SOLUCIÓN[1]:

Los operadores

$$a = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,(m\omega x + \mathrm{i}p_x) \qquad \text{y} \qquad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,(m\omega x - \mathrm{i}p_x)$$

satisfacen reglas de conmutación bosónicas $\left(\ \left[a, a^\dagger\right] = 1\ \right)$. Algunas de sus propiedades son enumeradas a continuación:

$$\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2 = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,, \qquad \begin{cases} a\,|0\rangle = 0 \\ |s\rangle = \dfrac{a^{\dagger s}}{\sqrt{s!}}\,|0\rangle\,,\ s=0,1,2,\ldots \\ a\,|s\rangle = \sqrt{s}\ |s-1\rangle\ ,\ a^\dagger\,|s\rangle = \sqrt{s+1}\ |s+1\rangle \\ a^\dagger a\,|s\rangle = s\,|s\rangle\ , \qquad \langle s\,|s'\rangle = \delta_{ss'} \\ |0\rangle = \text{Estado Fundamental} \end{cases}$$

y

$$\left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2\right)|s\rangle = \left(s+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,|s\rangle\ , \qquad s=0,1,2,\ldots$$

x puede escribirse en la forma

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\ \left(a^\dagger + a\right)$$

La corrección $|3\rangle^{(1)}$, de primer orden en g, al autoestado $|3\rangle$ del oscilador armónico viene dada por

$$|3\rangle^{(1)} = \sum_{s\neq 3} \frac{\langle s\,|g x^4|\,3\rangle}{(3+1/2)\,\hbar\omega - (s+1/2)\,\hbar\omega}\ |s\rangle = -g\,\frac{\hbar}{4m^2\omega^3}\sum_{s\neq 3}\frac{\left\langle s\left|\left(a^\dagger + a\right)^4\right| 3\right\rangle}{s-3}\ |s\rangle \tag{0.1}$$

[1]Ver, por ejm..., `Quantum Mechanics`, A. S. Davydov, Pergamon Press 2ª ed. 1976.

Desarrollemos el binomio $\left(a^\dagger + a\right)^4 = \left({a^\dagger}^2 + a^2 + 2n + 1\right)^2$ donde $n = a^\dagger a$:

$$
\begin{aligned}
\left(a^\dagger + a\right)^4 &= {a^\dagger}^4 + {a^\dagger}^2 a^2 + {a^\dagger}^2 (2n+1) + a^2 {a^\dagger}^2 + a^4 + a^2 (2n+1) \\
&\quad + \\
&\quad (2n+1)\, {a^\dagger}^2 + (2n+1)\, a^2 + (2n+1)^2 \\
&= {a^\dagger}^4 + {a^\dagger}^2 a^2 + a^2 {a^\dagger}^2 + a^4 \\
&\quad + \\
&\quad \left({a^\dagger}^2 + a^2\right)(2n+1) + (2n+1)\left({a^\dagger}^2 + a^2\right) + (2n+1)^2
\end{aligned}
$$

El hamiltoniano, en términos de los operadores a y $a^\dagger$ viene dado por

$$
\boxed{
\begin{aligned}
H &= \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \\
&\quad + \\
&\quad \Big[{a^\dagger}^4 + {a^\dagger}^2 a^2 + a^2 {a^\dagger}^2 + a^4 + \left({a^\dagger}^2 + a^2\right)(2n+1) + (2n+1)\left({a^\dagger}^2 + a^2\right) \\
&\quad + \\
&\quad (2n+1)^2\Big]\, g\, \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}
\end{aligned}
}
\tag{0.2}
$$

Así mismo

$$
\begin{aligned}
\left\langle s \left| \left(a^\dagger + a\right)^4 \right| 3 \right\rangle_{s\neq 3} &= \left\langle s \left| {a^\dagger}^4 + \left({a^\dagger}^2 + a^2\right)(2n+1) + (2n+1)\left({a^\dagger}^2 + a^2\right) \right| 3 \right\rangle \\
&= \left\langle s \left| {a^\dagger}^4 \right| 3 \right\rangle + (2s+8) \left\langle s \left| {a^\dagger}^2 + a^2 \right| 3 \right\rangle \\
&= \left\langle s \left| {a^\dagger}^4 \right| 3 \right\rangle + (2s+8) \left(\left\langle s \left| {a^\dagger}^2 \right| 3 \right\rangle + \left\langle 3 \left| {a^\dagger}^2 \right| s \right\rangle^* \right)
\end{aligned}
$$

De acuerdo a este resultado solo necesitamos la evaluación explícita de $\left\langle \ell \left| {a^\dagger}^i \right| \ell' \right\rangle$:

$$
\begin{aligned}
\left\langle \ell \left| {a^\dagger}^i \right| \ell' \right\rangle &= \left\langle \ell \left| {a^\dagger}^i \frac{{a^\dagger}^{\ell'}}{\sqrt{\ell'!}} \right| 0 \right\rangle = \sqrt{\frac{(\ell'+i)!}{\ell'!}} \left\langle \ell \left| \frac{{a^\dagger}^{\ell'+i}}{\sqrt{(\ell'+i)!}} \right| 0 \right\rangle \\
&= \sqrt{\frac{(\ell'+i)!}{\ell'!}} \left\langle \ell \,|\, \ell'+i \right\rangle = \sqrt{\frac{(\ell'+i)!}{\ell'!}}\, \delta_{\ell,\ell'+i}
\end{aligned}
$$

Por tanto

$$
\begin{aligned}
\left\langle s \left| \left(a^\dagger + a\right)^4 \right| 3 \right\rangle_{s\neq 3} &= \delta_{s,7}\sqrt{\frac{7!}{3!}} + (2s+8)\left[\delta_{s,5}\sqrt{\frac{5!}{3!}} + \delta_{s,1}\sqrt{\frac{(s+2)!}{s!}}\right] \\
&= 10\sqrt{6}\,\delta_{s,1} + 36\sqrt{5}\,\delta_{s,5} + 2\sqrt{210}\,\delta_{s,7}
\end{aligned}
$$

Haciendo uso de este resultado podemos evaluar explícitamente la expresión (0.1):

$$|3\rangle^{(1)} = -g\,\frac{\hbar}{4m^2\omega^3}\left(\frac{10\sqrt{6}}{1-3}\;|1\rangle + \frac{36\sqrt{5}}{5-3}\;|5\rangle + \frac{2\sqrt{210}}{7-3}\;|7\rangle\right)$$

$$\boxed{|3\rangle^{(1)} = g\,\frac{\hbar}{8m^2\omega^3}\left(10\sqrt{6}\;|1\rangle - 36\sqrt{5}\;|5\rangle - \sqrt{210}\;|7\rangle\right)} \tag{0.3}$$

3. Considere el hamiltoniano de Dirac $H = H_0 + V$ donde $H_0 = \beta\, mc^2$ y $V = c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p}$. m es la *masa en reposo*. c es la *velocidad de la luz*. β y $\vec{\alpha}_i$ son *matrices de Dirac*. $i = x, y, z$. Realize una transformación unitaria $H_c \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}S} H\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}S}$ de H tal que el término lineal en $\vec{p}$ " *resulte eliminado* ". Interprete los resultados y el propósito general de tal transformación.

SOLUCIÓN:

Debemos desarrollar H_c en potencias de $\vec{p}$ (o/y potencias de V) de tal manera que el coeficiente del término lineal se anule idénticamente. Para ello *basta suponer que S es de orden V* y expresar H_c en potencias de S. Definamos $H_c(\lambda) \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda S} H\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda S}$ tal que $H_c(0) = H$ y $H_c(1) = H_c$. $H_c(\lambda)$ satisface

$$\frac{\partial H_c(\lambda)}{\partial\lambda} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda S}\mathrm{i}SH\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda S} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda S}H\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda S}(-\mathrm{i}S) = \mathrm{i}\,[S, H_c(\lambda)]$$

la cual equivale a

$$\begin{aligned} H_c(\lambda) &= H + \mathrm{i}\int_0^{\lambda}\mathrm{d}\lambda'\;[S, H_c(\lambda')] = H + \mathrm{i}\,[S,H]\,\lambda - \int_0^{\lambda}\mathrm{d}\lambda'\int_0^{\lambda'}\mathrm{d}\lambda''\;[S,[S,H_c(\lambda'')]] \\ &= H + \mathrm{i}\,[S,H]\,\lambda - \frac{1}{2}\;[S,[S,H]]\,\lambda^2 \\ &- \\ &\mathrm{i}\int_0^{\lambda}\mathrm{d}\lambda'\int_0^{\lambda'}\mathrm{d}\lambda''\int_0^{\lambda''}\mathrm{d}\lambda'''\;[S,[S,[S,H_c(\lambda''')]]] \end{aligned}$$

Hasta segundo orden en S (o/y V) es suficiente el desarrollo " a tres términos ":

$$H_c \approx H + \mathrm{i}\,[S,H] - \frac{1}{2}\;[S,[S,H]]$$

Reemplazando $H = H_0 + V$ y agrupando términos del mismo orden:

$$H_c \approx H_0 + \{V + \mathrm{i}\,[S,H_0]\} + \left\{\mathrm{i}\,[S,V] - \frac{1}{2}\;[S,[S,H_0]]\right\}$$

Para eliminar el término lineal en V escogemos S de manera tal que $[S,H_0] = \mathrm{i}V$. En tal caso, H_c se reduce a

$$H_c \approx H_0 + \frac{1}{2}\,\mathrm{i}\,[S,V]$$

Introduzcamos la dependencia temporal $A(t) \equiv \mathrm{e}^{0^+ t}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t/\hbar} A\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t/\hbar}$ de un operador dado A. $A(t)$ satisface la ecuación de movimiento $\mathrm{i}\hbar\dot{A}(t) = [A(t), H_0]$. En consecuencia

$$\dot{S}(t) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[S(t), H_0] = \frac{1}{\hbar}V(t) \quad\Longrightarrow\quad S = \frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}t\,V(t) = \frac{c}{\hbar}\left[\int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}t\,\vec{\alpha}(t)\right]\cdot\vec{p}$$

Note que β y $\vec{p}$ son constantes de movimimiento. A su vez, $\vec{\alpha}(t)$ satisface $\dot{\vec{\alpha}}(t) = -\mathrm{i}\,[\vec{\alpha}(t), H_0]/\hbar$. $\vec{\alpha}$ yβ satisfacen $\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}$, $\{\alpha_i, \beta\} = 0$ y $\beta^2 = 1$ con $i, j = x, y, z$. Por tanto

$$[\alpha_i, H_0] = mc^2(\alpha_i\beta - \beta\alpha_i) = -2mc^2\beta\alpha_i \quad\Longrightarrow\quad \left|\begin{array}{c} \dot{\alpha}_i(t) = \mathrm{i}\,\dfrac{2mc^2}{\hbar}\,\beta\alpha_i(t) \\ \Downarrow \\ \alpha_i(t) = \mathrm{e}^{0^+ t}\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}mc^2\beta t/\hbar}\alpha_i \end{array}\right.$$

$$S = \frac{c}{\hbar}\left(\int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{0^+ t}\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}mc^2\beta t/\hbar}\right)\vec{\alpha}\cdot\vec{p} = \frac{c}{\hbar}\,\frac{1}{0^+ + 2\mathrm{i}mc^2\beta/\hbar}\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p} = -\,\frac{\mathrm{i}}{2mc}\,\beta\vec{\alpha}\cdot\vec{p}$$

Con este resultado, H_c se reduce a

$$H_c \approx \beta mc^2 + \frac{1}{2}\,\mathrm{i}\left[-\,\frac{\mathrm{i}}{2mc}\,\beta\vec{\alpha}\cdot\vec{p}, c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\right] = \beta mc^2 + \frac{1}{4m}\,\overbrace{[\beta, \vec{\alpha}\cdot\vec{p}]}^{2\beta\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p} = \beta mc^2 + \beta\,\frac{(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})^2}{2m}$$

y, puesto que $(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})^2 = \sum_i \alpha_i^2 p_i^2 + \sum_{i<j}(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i)\,p_i p_j = \vec{p}^{\,2}$,

$$\boxed{H_c \approx \beta mc^2 + \beta\,\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}} \qquad (0.4)$$

el cual es el resultado en el *límite no relativista* ‘ $pc \ll mc^2$ ’ tal que el propósito de esta transformación es precisamente mostrar que tal límite reduce el hamiltoniano a su versión clásica (no relativista) aparte del término adicional βmc^2 (energía en reposo). Sin embargo, β es la matriz 4×4

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \left(\begin{array}{l} \text{Note que cada elemento de matriz de } \beta \text{ es} \\ \text{una matriz } 2\times 2 \end{array}\right)$$

H_c puede reescribirse en la forma

$$H_c = \begin{pmatrix} mc^2 + \dfrac{\vec{p}^{\,2}}{2m} & 0 \\ 0 & -mc^2 - \dfrac{\vec{p}^{\,2}}{2m} \end{pmatrix}$$

que corresponde a dos ramas del espectro de energía. En realidad, la versión clásica (no relativista) corresponde a teoría de perturbación hasta *segundo orden*:

$$\sim \frac{(cp)^2}{\pm mc^2 - (\mp mc^2)} = \pm\,\frac{p^2}{2m}$$

4. Construya el hamiltoniano mecánico-cuántico H de una partícula de masa m y carga q en presencia de un campo eléctrico homogeneo y uniforme $\vec{E}$ descrito por un potencial eléctrico nulo. Demuestre que cualquier dependencia temporal explícita, en H, puede ser *“ eliminada ”* y, en tal caso, construya el *vector densidad de corriente eléctrica*. Comente sus resultados.

<u>SOLUCIÓN</u>:

El campo eléctrico puede ser derivado de un potencial vector $\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t)$ el cual satisface

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t)}{\partial t} \qquad \text{tal que} \qquad \vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t) = -c\vec{E}t + \vec{\mathrm{a}}(\vec{r})$$

En ausencia del campo magnético, $\vec{\mathrm{a}}(\vec{r})$ satisface $\nabla\times\vec{\mathrm{a}}(\vec{r}) = \vec{0}$. Por tanto, $\vec{\mathrm{a}}(\vec{r})$ es derivable de un potencial escalar $\Lambda(\vec{r})$: $\vec{\mathrm{a}}(\vec{r}) = -\nabla\Lambda(\vec{r})$ y en consecuencia

$$\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t) = -c\vec{E}t - \nabla\Lambda(\vec{r})$$

La ecuación de Schrödinger viene dada por

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} &= \frac{1}{2m}\left\{-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{q}{c}\left[-c\vec{E}t - \nabla\Lambda(\vec{r})\right]\right\}^2\Psi(\vec{r},t)\\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla + \mathrm{i}\,\frac{q\vec{E}t}{\hbar} + \mathrm{i}\,\frac{q\nabla\Lambda(\vec{r})}{\hbar}\right]^2\Psi(\vec{r},t)
\end{aligned}$$

Así mismo

$$\begin{aligned}
&\left[\nabla + \mathrm{i}\,\frac{q\vec{E}t}{\hbar} + \mathrm{i}\,\frac{q\nabla\Lambda(\vec{r})}{\hbar}\right]\Psi(\vec{r},t)\\
&=\\
&\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar-\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar+\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar}\nabla + \mathrm{e}^{\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar+\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar}\left[\mathrm{i}\,\frac{q\vec{E}t}{\hbar} + \mathrm{i}\,\frac{q\nabla\Lambda(\vec{r})}{\hbar}\right]\right\}\Psi(\vec{r},t)\\
&=\\
&\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar-\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar}\nabla\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar+\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar}\Psi(\vec{r},t)\right] = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar-\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar}\nabla\varphi(\vec{r},t)
\end{aligned}$$

donde

$$\varphi(\vec{r},t) \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar+\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar}\Psi(\vec{r},t) \qquad \Longleftrightarrow \qquad \Psi(\vec{r},t) \equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar-\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar}\varphi(\vec{r},t)$$

Con estos resultados la ecuación de Schrdödinger se reduce a

$$\begin{aligned}
&\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar-\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar}\varphi(\vec{r},t)\right]}{\partial t}\\
&=\\
&-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla + \mathrm{i}\,\frac{q\vec{E}t}{\hbar} + \mathrm{i}\,\frac{q\nabla\Lambda(\vec{r})}{\hbar}\right]\cdot\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar-\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar}\nabla\varphi(\vec{r},t)\right] \qquad (0.5)
\end{aligned}$$

Evaluemos cada miembro de esta ecuación *por separado*:

$$
\begin{aligned}
& \mathrm{i}\hbar \, \frac{\partial \left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar - \mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar} \varphi\left(\vec{r}, t\right) \right]}{\partial t} \\
& = \\
& \mathrm{i}\hbar \left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar - \mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar} \, \frac{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}}{\hbar} \, \varphi\left(\vec{r}, t\right) + \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar - \mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar} \, \frac{\partial \varphi\left(\vec{r}, t\right)}{\partial t} \right] \\
& = \\
& \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar - \mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar} \left[q\vec{E}\cdot\vec{r}\,\varphi\left(\vec{r}, t\right) + \mathrm{i}\hbar \, \frac{\partial \varphi\left(\vec{r}, t\right)}{\partial t} \right]
\end{aligned} \tag{0.6}
$$

$$
\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla + \mathrm{i}\, \frac{q\vec{E}t}{\hbar} + \mathrm{i}\, \frac{q\nabla\Lambda\left(\vec{r}\right)}{\hbar} \right] \cdot \left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar - \mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar} \nabla\varphi\left(\vec{r}, t\right) \right] \\
& = \\
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar - \mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar} \left[\frac{-\mathrm{i}q\vec{E}t}{\hbar} - \frac{\mathrm{i}q\nabla\Lambda\left(\vec{r}\right)}{\hbar} \right] \cdot \nabla\varphi\left(\vec{r}, t\right) \right. \\
& \qquad + \\
& \left. \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar - \mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar} \nabla^2\varphi\left(\vec{r}, t\right) + \left[\frac{\mathrm{i}q\vec{E}t}{\hbar} + \frac{\mathrm{i}q\nabla\Lambda\left(\vec{r}\right)}{\hbar} \right] \cdot \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar - \mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar} \nabla\varphi\left(\vec{r}, t\right) \right\} \\
& = \\
& \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar - \mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \, \nabla^2\varphi\left(\vec{r}, t\right) \right]
\end{aligned} \tag{0.7}
$$

Reemplazando los resultados (0.6) y (0.7) en la Ec. (0.5) se obtiene la ecuación de Schrödinger

$$
\boxed{\mathrm{i}\hbar \, \frac{\partial \varphi\left(\vec{r}, t\right)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - q\vec{E}\cdot\vec{r} \right) \varphi\left(\vec{r}, t\right)} \tag{0.8}
$$

la cual describe el comportamiento de una partícula (de masa m y carga q) en presencia de un potencial eléctrico $-\vec{E}\cdot\vec{r}$ y un potencial vector nulo. Note que la dependencia temporal explícita del hamiltoniano ha sido *“ eliminada ”*.

El *vector densidad de corriente eléctrica* viene dado por

$$
\begin{aligned}
\vec{\mathrm{J}}\left(\vec{r}, t\right) &= q\, \frac{\hbar}{m} \, \Im \left[\varphi^*\left(\vec{r}, t\right) \nabla\varphi\left(\vec{r}, t\right) \right] \\
&= q\, \frac{\hbar}{m} \, \Im \left\{ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar - \mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar} \, \Psi^*\left(\vec{r}, t\right) \nabla \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}q\vec{E}\cdot\vec{r}t/\hbar + \mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar} \, \Psi\left(\vec{r}, t\right) \right] \right\}
\end{aligned}
$$

$$
\boxed{\vec{\mathrm{J}}\left(\vec{r},t\right)=q\,\frac{\hbar}{m}\,\Im\left[\Psi^{*}\left(\vec{r},t\right)\nabla\Psi\left(\vec{r},t\right)\right]+\frac{\left|\Psi\left(\vec{r},t\right)\right|^{2}q^{2}t}{m}\,\vec{E}+q^{2}\left|\Psi\left(\vec{r},t\right)\right|^{2}\,\frac{\nabla\Lambda\left(\vec{r}\right)}{m}} \tag{0.9}
$$

En esta expresión:

1) El primer término corresponde al caso usual (en ausencia de campos externos) aunque depende obviamente, en principio, de $\vec{E}$ y $\Lambda\left(\vec{r}\right)$.
2) El segundo término describe el efecto de traslación debido al campo eléctrico. Por ejm..., en un sistema macroscópico podría conducir a una ley de Ohm cuando se incluye “ difusión (*scattering*) por impurezas ”.
3) El último término muestra el efecto de un potencial vector no nulo (con campo magnético nulo) y es importante en el estudio del efecto Aharonov-Bohm.

5. Demuestre que elementos de matriz $\langle n\,|\vec{p}\,|n'\,\rangle$ del operador momento $\vec{p}$ pueden ser expresados en términos de elementos de matriz $\langle n\,|\vec{r}\,|n'\,\rangle$ del operador de posición $\vec{r}$. $\{|n\rangle\}$ es el conjunto de autoestados de un hamiltoniano $H=\vec{p}^{\,2}/2m+V$ con $\langle\vec{r}\,|V\,|\vec{r}\,'\,\rangle=\mathrm{V}\left(\vec{r}\right)\delta\left(\vec{r}-\vec{r}\,'\right)$ y $H\,|n\rangle=E_n\,|n\rangle$. Establezca explícitamente la relación mencionada arriba.

SOLUCIÓN:

Evaluemos el conmutador $[\vec{r},H]=\left[\vec{r},\vec{p}^{\,2}\right]/2m+[\vec{r},V]$:

$$
\left[\vec{r},\vec{p}^{\,2}\right]=\left[\sum_i\hat{e}_ix_i,\sum_j p_j^2\right]=\sum_{i,j}\hat{e}_i\left(p_j\,\overbrace{[x_i,p_j]}^{\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}}+\overbrace{[x_i,p_j]}^{\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}}\,p_j\right)=2\mathrm{i}\hbar\sum_i\hat{e}_ip_i=2\mathrm{i}\hbar\vec{p}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle\vec{r}_0\,|[\vec{r},V]|\,\vec{r}_1\rangle &= \int\mathrm{d}^3_{\vec{r}\,'}\,\langle\vec{r}_0\,|\vec{r}\,|\vec{r}\,'\,\rangle\,\langle\vec{r}\,'|\,V\,|\,\vec{r}_1\rangle-\int\mathrm{d}^3_{\vec{r}\,'}\,\langle\vec{r}_0\,|V\,|\vec{r}\,'\,\rangle\,\langle\vec{r}\,'|\,\vec{r}|\,\vec{r}_1\rangle\\
&= \langle\vec{r}_0|\,\vec{r}|\,\vec{r}_1\rangle\,V\left(\vec{r}_1\right)-V\left(\vec{r}_0\right)\,\langle\vec{r}_0|\,\vec{r}|\,\vec{r}_1\rangle\\
&= \left[V\left(\vec{r}_1\right)-V\left(\vec{r}_0\right)\right]\,\overbrace{\langle\vec{r}_0|\,\vec{r}|\,\vec{r}_1\rangle}^{\delta(\vec{r}_0-\vec{r}_1)\vec{r}_1}=0\,,\qquad\forall\;\vec{r}_0,\vec{r}_1\\
\Longrightarrow&\quad[\vec{r},V]=0
\end{aligned}
$$

En consecuencia

$$
[\vec{r},H]=\mathrm{i}\,\frac{\hbar}{m}\,\vec{p}
$$

Para un par de autoestados dados $|n\rangle$ y $|n'\rangle$ de H se obtiene

$$
\begin{aligned}
\langle n\,|\vec{p}\,|n'\,\rangle &= -\mathrm{i}\,\frac{m}{\hbar}\,\langle n\,|[\vec{r},H]|\,n'\rangle=-\mathrm{i}\,\frac{m}{\hbar}\,\left(\langle n\,|\vec{r}H\,|n'\,\rangle-\langle n\,|H\vec{r}\,|n'\,\rangle\right)\\
&= -\mathrm{i}\,\frac{m}{\hbar}\,\left(\langle n\,|\vec{r}E_{n'}\,|n'\,\rangle-\langle n\,|E_n\vec{r}\,|n'\,\rangle\right)
\end{aligned}
$$

$$\boxed{\langle n\,|\vec{p}\,|n'\,\rangle = \mathrm{i}\,\frac{m}{\hbar}\,(E_n - E_{n'})\,\langle n\,|\vec{r}\,|n'\,\rangle} \tag{0.10}$$

Esta relación es útil en el cálculo de absorción y emisión de radiación las cuales resultan ser $\propto \omega^2\,|\langle n\,|\vec{p}\,|n'\,\rangle|^2 \propto \omega^2\,(E_n - E_{n'})^2 \propto \omega^4$ donde $\hbar\omega$ es la energía de un fotón. Por tanto, radiación con pequeñas longitudes de onda son *mas dispersadas* que aquellas con grandes longitudes de onda (*Ley de Rayleigh*).

6. Demuestre que la ecuación de evolución $H\,|\Psi\,(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\,\partial_t\,|\Psi\,(t)\rangle$ (con el hamiltoniano del problema anterior), conduce a la ecuación de Schrödinger

$$-\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\Psi\,(\vec{r},t) + \mathrm{V}\,(\vec{r})\,\Psi\,(\vec{r},t) = \mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi\,(\vec{r},t)}{\partial t} \quad \text{donde} \quad \Psi\,(\vec{r},t) \equiv \langle\vec{r}\,|\Psi\,(t)\,\rangle$$

<u>SOLUCIÓN</u>:

Proyectando ambos miembros de $\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\,|\Psi\,(t)\rangle = H\,|\Psi\,(t)\rangle$ *sobre* $|\vec{r}\,\rangle$ se obtiene

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\,\langle\vec{r}\,|\Psi\,(t)\,\rangle}{\partial t} = \langle\vec{r}\,|H\,|\Psi\,(t)\,\rangle = \int \mathrm{d}^3_{\vec{r}\,'}\,\langle\vec{r}\,|H\,|\vec{r}\,'\,\rangle\,\langle\vec{r}\,'\,|\Psi\,(t)\,\rangle$$

la cual es equivalente a

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi\,(\vec{r},t)}{\partial t} &= \int \mathrm{d}^3_{\vec{r}\,'}\left[\frac{1}{2m}\left\langle\vec{r}\left|\vec{p}^{\,2}\right|\vec{r}\,'\right\rangle + V\,(\vec{r})\,\delta\,(\vec{r}-\vec{r}\,')\right]\Psi\,(\vec{r}\,',t) \\
&= \frac{1}{2m}\int \mathrm{d}^3_{\vec{r}\,'}\left\langle\vec{r}\left|\vec{p}^{\,2}\right|\vec{r}\,'\right\rangle\Psi\,(\vec{r}\,',t) + V\,(\vec{r})\,\Psi\,(\vec{r},t)
\end{aligned} \tag{0.11}$$

Usando los autokets $\left\{\left|\vec{P}\right\rangle\right\}$, con autovalores $\left\{\vec{P}\right\}$, del operador momento $\left(\ \vec{p}\left|\vec{P}\right\rangle = \vec{P}\left|\vec{P}\right\rangle\ \right)$ $\left(\ \left\langle\vec{r}\left|\vec{P}\right\rangle = h^{-3/2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{P}\cdot\vec{r}/\hbar}\ \right)$, podemos evaluar $\langle\vec{r}\,|\vec{p}^{\,2}|\,\vec{r}\,'\rangle$:

$$\begin{aligned}
\left\langle\vec{r}\left|\vec{p}^{\,2}\right|\vec{r}\,'\right\rangle &= \int \mathrm{d}^3_{\vec{P}}\left\langle\vec{r}\left|\vec{p}^{\,2}\right|\vec{P}\right\rangle\left\langle\vec{P}\right|\vec{r}\,'\right\rangle = \int \mathrm{d}^3_{\vec{P}}\,\vec{P}^{\,2}\left\langle\vec{r}\left|\vec{P}\right\rangle\left\langle\vec{P}\right|\vec{r}\,'\right\rangle \\
&= \int \mathrm{d}^3_{\vec{P}}\,\vec{P}^{\,2}\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{P}\cdot\vec{r}/\hbar}}{h^{3/2}}\,\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{P}\cdot\vec{r}\,'/\hbar}}{h^{3/2}} = \int \frac{\mathrm{d}^3_{\vec{P}}}{h^3}\,\vec{P}^{\,2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{P}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')/\hbar} \\
&= \hbar^2\int\frac{\mathrm{d}^3_{\vec{P}}}{(2\pi)^3}\,\vec{P}^{\,2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{P}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')} = -\hbar^2\nabla^2_{\vec{r}}\int\frac{\mathrm{d}^3_{\vec{P}}}{(2\pi)^3}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{P}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')} = -\hbar^2\nabla^2_{\vec{r}}\,\delta\,(\vec{r}-\vec{r}\,')
\end{aligned}$$

Con este resultado, la expresión (0.11) se reduce a

$$\boxed{-\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\Psi\,(\vec{r},t) + \mathrm{V}\,(\vec{r})\,\Psi\,(\vec{r},t) = \mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi\,(\vec{r},t)}{\partial t}} \tag{0.12}$$