Regla de la suma i la partícula en la caixa

Josep Planelles,
Departament de Química Física i Analítica, Universitat Jaume I, E-12080, Castelló

1 La regla

Presentarem la versió més simple de la regla (la podeu trobar generalitzada en S. Wang[1]). Considerem el commutador $[\hat{H}, x] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{p}$ i calculem el seu valor de transició entre dos autoestats $|m\rangle, |n\rangle$ de l'Hamiltonià $\hat{H}$:

$$\langle m|[\hat{H}, x]|n\rangle = \langle m|\hat{H}x - x\hat{H}|n\rangle = (E_m - E_n)\langle m|x|n\rangle = (E_m - E_n)\, x_{mn} \tag{1}$$

però també,

$$\langle m|[\hat{H}, x]|n\rangle = \langle m| - \frac{i\hbar}{m}\hat{p}|n\rangle = -\frac{i\hbar}{m}p_{mn} \tag{2}$$

Per tant,

$$x_{mn} = -\frac{i\hbar}{m}\frac{p_{mn}}{(E_m - E_n)} \tag{3}$$

Per una altra banda, el commutador $[\hat{p}, x] = -i\,\hbar$. Per tant, $-i\,\hbar = \langle n|\hat{p}\,x - x\,\hat{p}|n\rangle$. Fent ús ara de la identitat $1 = \sum_k |k\rangle\langle k|$ trobem que:

$$-i\,\hbar = \sum_k \langle n|\hat{p}|k\rangle\langle k|x|n\rangle - \langle n|x|k\rangle\langle k|\hat{p}|n\rangle = \sum_{k\neq n} p_{nk}x_{kn} - p_{kn}x_{nk} \tag{4}$$

notem que el terme $k = n$ és zero i per això el podem eliminar. Substituint x_{nk} en (4) per la seua expressió, eq. (3), tenim:

$$-i\,\hbar = -2\frac{i\,\hbar}{m}\sum_{k\neq n}\frac{|p_{nk}|^2}{E_k - E_n} \to \sum_{k\neq n} -\frac{2}{m}\frac{|p_{nk}|^2}{E_n - E_k} \equiv \sum_{k\neq n} f_{nk} = 1 \tag{5}$$

on $f_{nk} = -\frac{2}{m}\frac{|p_{nk}|^2}{E_n - E_k}$.

1.1 Aplicació al cas de la partícula en una caixa

A partir de l'energia (a.u.) $E_n = \frac{\pi^2\,n^2}{2mL^2}$ i funcions d'ona $\phi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}$, el terme f_{nk} resulta:

$$f_{nk} = -\frac{2}{m}\frac{|p_{nk}|^2}{E_n - E_k} = \frac{16k^2n^2[(-1)^{k+n} - 1]^2}{(k^2 - n^2)^3\pi^2} \tag{6}$$

Si fixem $n = 1$ (estat fonamental), la suma des de $k = 2$ fins $k = 2, 4, 10, 20, 100, 150$ dóna lloc a 0.960675, 0.991417, 0.999189, 0.999883, 0.999999 i 1.00000, respectivament.

2 La regla en termes de la coordenada

Podem reescriure l'eq. (3) en la forma

$$p_{mn} = \frac{im}{\hbar}(E_m - E_n)x_{mn} \tag{7}$$

i substituir aquest valor, eq.(7), en l'eq. (4) trobant que

$$-i\,\hbar = 2\sum_{k\neq n}\frac{im}{\hbar}(E_n - E_k)|x_{nk}|^2 \to \sum_{k\neq n}\frac{2m}{\hbar^2}(E_k - E_n)|x_{nk}|^2 \equiv \sum_{k\neq n} f_{nk} = 1 \tag{8}$$

on ara $f_{nk} = \frac{2m}{\hbar^2}(E_k - E_n)|x_{nk}|^2$.

En el cas 3D tenim que sumar les tres components. Aleshores, des de l'eq. (8) tenim

$$1+1+1 = 3 = \sum_{k\neq n}\frac{2m}{\hbar^2}(E_k - E_n)\sum_{\alpha=x,y,z}|\alpha_{nk}|^2 \to \sum_{k\neq n}\frac{2m}{3\hbar^2}(E_k - E_n)\sum_{\alpha=x,y,z}|\alpha_{nk}|^2 = 1 \tag{9}$$

on ara $f_{nk} = \frac{2m}{3\hbar^2}(E_k - E_n)\sum_{\alpha=x,y,z}|\alpha_{nk}|^2$ (que és la definició usual de força d'oscil·lador, vegeu e.g. pag 28 en ref.[2]).

2.1 Aplicació al cas de la partícula en una caixa

Desde l'eq. (8), amb l'energia i funcions d'ona de la partícula en la caixa 1D trobem que:

$$f_{nk} = \frac{2m}{\hbar^2}(E_k - E_n)|x_{nk}|^2 = \frac{16k^2n^2[(-1)^{k+n} - 1]^2}{(k^2 - n^2)^3\pi^2} \tag{10}$$

que coincideix amb la definició de f_{nk} en termes de moment, eq. (6). Per tant, també les sumes parcials (des de $k = 2$ fins a k') coincideixen.

References

[1] S. Wang, Phys. Rev. A 60 (1999) 262

[2] J. Planelles, I. Climente and J.G. Díaz
Espectroscòpia, Publicacions de la Universitat Jaume I, 2002