

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
IZTAPALAPA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA
AREA DE MECÁNICA CLÁSICA
POSGRADO EN FÍSICA

LÍMITE SEMICLÁSICO DE LA
MECÁNICA CUÁNTICA

CANDIDATO:

Fís. Edgar Soto Aguirre

PARA OBTENER EL GRADO DE:

Maestro en Ciencias

ASESOR

Dr. Eduardo Piña Garza

México, D.F., Enero 2004

Índice general

INTRODUCCIÓN	1
I MÉTODO WKB	3
1. TEORÍA WKB.	4
1.1. La aproximación exponencial	5
1.2. Expansión formal WKB	5
1.3. Condición para la validez de la aproximación WKB	7
2. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER.	9
2.1. Ecuación de Schrödinger y la teoría WKB.	10
3. POZO DE POTENCIAL.	16
3.1. Soluciones en los puntos de retorno para el problema de pozo de potencial.	16
3.2. Conexión de soluciones	24
4. BARRERA DE POTENCIAL.	29
4.1. Soluciones en los puntos de retorno para el problema de ba- rreira de potencial.	29
4.2. Conexión de soluciones	36
II CUANTIZACIÓN DE SUPERFICIES LAGRAN- GIANAS Y ÓRBITAS PERIÓDICAS	40
5. FUNCIÓN DE ONDA SEMICLÁSICA.	41

5.1. Onda semiclásica (primer método).	42
5.2. Onda semiclásica (segundo método).	47
6. CÁUSTICAS.	53
6.1. Cáusticas \mathbf{q}	53
7. ÓRBITAS PERIÓDICAS.	59
7.1. Estados estacionarios y el propagador.	59
8. CONCLUSIÓN	65
A. ECUACIÓN DE AIRY	69
B. EL PROPAGADOR SEMICLÁSICO	79
C. EL MÉTODO DE FASE ESTACIONARIA.	82
C.1. Definición de una expansión asintótica.	82
C.2. Método de fase estacionaria para integrales simples	83
C.3. Contribución de puntos críticos de la primera clase.	85
C.4. Evaluación de integrales por el método de fase estacionaria. . .	87
Referencias	91

Índice de figuras

3.1. Pozo de potencial	16
3.2. Punto de retorno x_1 del pozo de potencial	18
3.3. Punto de retorno x_2 del pozo de potencial	23
4.1. Barrera de potencial	29
4.2. Punto de retorno x_1 de la barrera de potencial	31
4.3. Punto de retorno x_2 de la barrera de potencial	34
5.1. Familia de curvas parametrizadas	48
5.2. Evolución de curvas parametrizadas	50
5.3. Pendientes y cambios de curvas parametrizadas	52
6.1. Multivaluación de \mathcal{P}	54
6.2. Cáusticas	55
6.3. Construcción gráfica de la acción	56
A.1. Regiones	76
B.1. Propagador para un sistema con un grado de libertad	80

AGRADECIMIENTOS.

No recuerdo el instante en el que decidí dedicar mi vida al estudio de la física. Quizás todo es el resultado de las vicisitudes a las que me vi sumergido. Es claro que esta vocación por la física la desarrolle ya en vida. Pero lo que sí recuerdo, es a muchas personas que, desde el primer momento de mi decisión, me apoyaron y que hasta la fecha recibo el afecto amistoso de sus palabras. A todos ellos va un agradecimiento.

Ya en la universidad, me vi rodeado de gente que tenía las mismas inquietudes, por la ciencia, y no dudé un instante en empezar la tarea de hacerlos amigos. En muchos casos no lo logre, supongo que eso es normal. De aquella empresa hoy puedo contar con amistades como las de: Benjamín, Claudia, Damaris, Gustavo, Javier, Rodolfo, Ramón, Sofía, entre otros.

Amén del comportamiento humano, parece que el orden es el estado preferente en la naturaleza. Muchos han sido, y lo sigue siendo, los esfuerzos del hombre por penetrar ese orden - talvez buscando el orden que dentro de sí no se ha podido encontrar. Lo que no se puede negar, es el encanto que esta misión procura. Encanto que se desborda en sutiles alegrías. Pero no se puede esperar profanar ese orden sin verse atrapado en catastróficas consecuencias. Así se recorre el abanico caprichoso que va de la efímera alegría a la melancólica tristeza (imponente soledad). Pero eso es la ciencia y eso es lo que elegí.

Quiero en éste punto, dar mi gratitud a todos y cada uno de mis profesores por sus enseñanzas, sin las cuales difícilmente habría alcanzado éste momento: Lidia Lara Jiménez, Eliécer Braun, Jose Luis Jiménez, Enrique Díaz,...

Al Dr. Manuel Fernández Guasti a quien me une una estrecha amistad.

De manera especial quiero agradecer al Dr. Eduardo Piña Garza, por haber aceptado ser mi asesor de tesis y soportarme estoicamente.

A José Antonio, por su entusiasta ayuda. A mis primos Luis y Carlos García.

INTRODUCCIÓN. ¹

En la mecánica cuántica el desarrollo de un sistema dinámico requiere la discusión de los operadores relevantes y sus valores de expectación. Por su parte, la mecánica clásica sólo envuelve una transformación de coordenadas. Resulta, por lo tanto, más fácil entender acerca del movimiento clásico, que acerca del correspondiente sistema cuántico.

Surge la pregunta: ¿Hay una regla que permite atribuir un Hamiltoniano cuántico a un sistema clásico conocido? La respuesta es no. Sin embargo el problema inverso está perfectamente bien definido: Considérese un Hamiltoniano cuántico $\hat{H} = H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}})$, como función del operador de posición $\hat{\mathbf{q}} \equiv (\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_L)$ y el operador momento $\hat{\mathbf{p}} \equiv (\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_L) = -i\hbar\partial/\partial\mathbf{q}$, donde \hbar es la constante de Planck; entonces, el correspondiente Hamiltoniano clásico es simplemente $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$. Por lo tanto, en el límite semiclásico $\hbar \rightarrow 0$ (es decir, donde la razón de \hbar con otro parámetro relevante de movimiento es pequeña), se puede aplicar el conocimiento de la dinámica clásica al estudio de funciones de onda, niveles de energía y otros parámetros de la mecánica cuántica.

Una herramienta poderosa, para estudiar el límite semiclásico, la proporciona la teoría WKB [1]. En esencia es un método perturbativo que puede ser usado para resolver una ecuación diferencial, donde la derivada de orden superior es multiplicada por un parámetro pequeño (\hbar). Es necesario mencionar aquí que WKB proporciona sólo una aproximación asintótica a la solución $y(x)$ de la ecuación diferencial. Sin embargo resulta una aproximación extremadamente correcta a $y(x)$. Otra virtud del método, es la estructura simple de la solución. Es así que la primera parte de la tesis está destinada al estudio de la teoría WKB. Dándole un sentido físico, se aplica a la ecuación de Schrödinger (ecuación diferencial lineal) y se construye así, para un sistema en una dimensión, la función de onda semiclásica con ayuda de la mecánica

¹[1]

clásica. Se verá que el método proporciona condiciones de validez poniéndose de manifiesto los puntos de retorno clásicos. Todo esto se aborda en los dos primeros capítulos. Posteriormente en los capítulos 3 y 4 se afrontan los problemas de pozo y barrera de potencial en una dimensión, cerrando así la primera parte de la tesis.

Los siguientes tres capítulos (que conforman la segunda y última parte de la tesis), están dedicados al estudio de sistemas Hamiltonianos autónomos.

Incluso en una dimensión está lejos de ser trivial la imagen del desarrollo temporal de estados cuánticos, especialmente si el Hamiltoniano no es estacionario. Entonces en el capítulo 5 se muestra que bajo condiciones semiclásicas un marco de referencia para tales problemas es el espacio fase del movimiento clásico, en el que es más fácil de visualizar. Se presenta así, la teoría semiclásica de la cuantización de superficies Lagrangianas.

Aquí se establece que el estado inicial $\psi(\mathbf{q}, 0; \mathcal{P}^*)$ corresponde a una curva inicial $\mathcal{C}_0(\mathcal{P}^*)$ (toro invariante) de puntos en el espacio fase \mathbf{p}, \mathbf{q} , etiquetado por el valor \mathcal{P}^* de un parámetro \mathcal{P} . En otras palabras, se considera una familia de estados cuánticos, cada uno de los cuales corresponde a una familia de órbitas clásicas.

La evolución de la función de onda $\psi(\mathbf{q}, t; \mathcal{P}^*)$ se expresa en términos de la curva $\mathcal{C}_t(\mathcal{P}^*)$ (superficie Lagrangiana abierta) que se desarrolla en el espacio de fase a partir de $\mathcal{C}_0(\mathcal{P}^*)$ bajo la dinámica clásica. Esta aproximación para ψ tiene la deficiencia de que se destruye en las cústicas (puntos de retorno) del movimiento clásico, donde \mathcal{C} es perpendicular a la dirección de \mathbf{q} en el espacio fase. En el capítulo 6 se muestra un método sencillo para resolver estas dificultades de la función de onda debido a Maslov.

En el capítulo 7, se encuentra la contribución de órbitas periódicas clásicas y se introducen usando el propagador semiclásico.

Al final se incluyen tres apéndices: La ecuación de Airy, el propagador semiclásico y el método de fase estacionaria; necesarios para apoyar el desarrollo de resultados en la tesis.

Parte I
MÉTODO WKB

Capítulo 1

TEORÍA WKB.

Existen métodos perturbativos que pueden ser usados para resolver una ecuación diferencial donde la derivada de orden superior está multiplicada por un parámetro pequeño ε .

La teoría de la capa límite y la teoría WKB, son una colección de métodos perturbativos para obtener una aproximación asintótica a la solución $y(x)$ de una ecuación diferencial como la mencionada arriba. La solución de tales ecuaciones, usualmente desarrollan regiones de variaciones rápidas cuando $\varepsilon \rightarrow 0$. Si el ancho de estas regiones se aproxima a 0 cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, es llamado capa límite, y la teoría de la capa límite puede usarse para aproximar $y(x)$. Si la extensión de dicha región permanece finita cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, se puede usar WKB.

La solución aproximada WKB de una ecuación diferencial tiene una estructura simple. Las aproximaciones WKB consisten de exponenciales, de integrales elementales, de funciones algebraicas y funciones especiales muy conocidas, tales como: la función de Airy o funciones cilíndricas parabólicas. WKB es adecuado para ecuaciones diferenciales lineales de cualquier orden, para problemas de valor inicial o valor límite, y para problemas de eigenvalores. También puede ser usado para evaluar integrales de la solución de una ecuación diferencial. La limitación convencional de la teoría WKB es que sólo puede ser usado para ecuaciones lineales. Entonces, proporciona un método aproximado simple y general para ecuaciones diferenciales lineales que tratan fenómenos disipativos y dispersivos y en cualquiera de los casos resulta adecuado.

1.1. La aproximación exponencial

Los fenómenos disipativos y dispersivos son caracterizados por un comportamiento exponencial, donde el exponente es real en el primer caso e imaginario para el segundo. Entonces, para una ecuación diferencial que expone cualquiera de los dos tipos de comportamiento, es natural buscar una solución aproximada de la forma

$$y(x) \sim A(x) \exp \frac{1}{\delta} s(x), \quad \delta \rightarrow 0. \quad (1.1)$$

La fase $s(x)$ se asume como no constante y con variaciones lentas en una región de ruptura. Cuando $s(x)$ es real, se trata de una capa límite de ancho δ ; cuando $s(x)$ es imaginario, es una región de oscilaciones rápidas caracterizada por ondas con longitud de onda del orden de δ . Cuando $s(x)$ es constante, el comportamiento de $y(x)$ se expresa por una función de amplitud $A(x)$ que varía lentamente.

La aproximación exponencial en 1.1 es convencionalmente conocida como una aproximación WKB (Wentzel, Kramers y Brillouin).

1.2. Expansión formal WKB

La aproximación esponencial en 1.1 no es la forma más adecuada para derivar aproximaciones asintóticas porque las funciones de amplitud $A(x)$ y fase $s(x)$ dependen implícitamente de δ . Es mejor representar la dependencia de estas funciones sobre δ explícitamente expandiendo $A(x)$ y $s(x)$ en serie de potencias de δ . Combinando estas series en una sola serie de potencias

$$y(x) \sim \exp \left[\frac{1}{\delta} \sum_{n=0}^{\infty} \delta^n S_n(x) \right], \quad \delta \rightarrow 0. \quad (1.2)$$

Esta expresión es la fórmula inicial de la cual se derivan todas las aproximaciones WKB.

Para mostrar el método, considérese la siguiente ecuación diferencial

$$\varepsilon^2 \frac{d^2 y(x)}{dx^2} - Q(x) y(x) = 0, \quad Q(x) \neq 0. \quad (1.3)$$

Primero se deriva 1.2 dos veces

$$\frac{dy(x)}{dx} \sim \left(\frac{1}{\delta} \sum_{n=0}^{\infty} \delta^n \frac{dS_n(x)}{dx} \right) \exp \left[\frac{1}{\delta} \sum_{n=0}^{\infty} \delta^n S_n(x) \right], \quad \delta \rightarrow 0, \quad (1.4)$$

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} \sim \left\{ \frac{1}{\delta^2} \left[\frac{1}{\delta} \sum_{n=0}^{\infty} \delta^n \frac{dS_n(x)}{dx} \right]^2 + \frac{1}{\delta} \sum_{n=0}^{\infty} \delta^n \frac{d^2S_n(x)}{dx^2} \right\} \exp \left[\frac{1}{\delta} \sum_{n=0}^{\infty} \delta^n S_n(x) \right]. \quad (1.5)$$

Despues se sustituye a las ecs. 1.2 y 1.5 en 1.3

$$\epsilon^2 \left\{ \frac{1}{\delta^2} \left[\frac{1}{\delta} \sum_{n=0}^{\infty} \delta^n \frac{dS_n(x)}{dx} \right]^2 + \frac{1}{\delta} \sum_{n=0}^{\infty} \delta^n \frac{d^2S_n(x)}{dx^2} \right\} - Q(x) = 0 \quad (1.6)$$

donde se eliminó el exponente. Los primeros términos de la ec. 1.6 son

$$\frac{\epsilon^2}{\delta^2} \left(\frac{dS_0(x)}{dx} \right)^2 + \frac{2\epsilon^2}{\delta} \frac{dS_0(x)}{dx} \frac{dS_1(x)}{dx} + \frac{\epsilon^2}{\delta} \frac{d^2S_0(x)}{dx^2} + \dots = Q(x). \quad (1.7)$$

El término más grande del lado izquierdo de 1.7 es

$$\frac{\epsilon^2}{\delta^2} \left(\frac{dS_0(x)}{dx} \right)^2. \quad (1.8)$$

Por balance este término tiene que ser del mismo orden de magnitud de $Q(x)$ (bajo la suposición de que $Q(x) \neq 0$). Entonces, δ es proporcional a ϵ y por simplicidad se escoge $\delta = \epsilon$.

Estableciendo $\delta = \epsilon$ en la ec. 1.7 y comparando potencias de ϵ da una secuencia de ecuaciones que determinan S_0, S_1, S_2, \dots :

$$\left[\frac{dS_0(x)}{dx} \right]^2 = Q(x), \quad (1.9)$$

$$\frac{dS_0(x)}{dx} \frac{dS_1(x)}{dx} + \frac{d^2S_0(x)}{dx^2} = 0, \quad (1.10)$$

$$2 \frac{dS_0(x)}{dx} \frac{dS_n(x)}{dx} + \frac{d^2S_{n-1}(x)}{dx^2} + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{dS_j(x)}{dx} \frac{dS_{n-j}(x)}{dx} = 0, \quad n \geq 2. \quad (1.11)$$

1.3. Condición para la validez de la aproximación WKB

La teoría WKB es una teoría de perturbación singular porque es usada para resolver una ecuación diferencial donde la derivada de orden superior está multiplicada por un parámetro pequeño (cuando este parámetro tiende a cero el orden de la ecuación diferencial cambia abruptamente). La naturaleza singular de la teoría WKB es evidente en el término $1/\delta$ en la aproximación exponencial 1.2:

$$y(x) \sim \exp \left[\frac{1}{\delta} \sum_{n=0}^{\infty} \delta^n S_n(x) \right], \quad \delta \rightarrow 0. \quad (1.12)$$

A menos que $S_0(x) \equiv 0$, la aproximación deja de existir cuando $\delta = 0$. La naturaleza singular de esta aproximación también aparece en una manera sutil -la serie WKB $\sum_{n=0}^{\infty} \delta^n S_n(x)$ usualmente diverge. (La serie converge si se trunca, pero esto es raro). Es por ello que se usa la notación asintótica \sim en vez de $=$. Sin embargo, aunque la serie WKB diverge, da una aproximación extremadamente correcta a $y(x)$.

Para que la aproximación WKB 1.12 sea válida en un intervalo, es necesario que la serie $\sum \delta^{n-1} S_n(x)$ sea una serie asintótica en δ cuando $\delta \rightarrow 0$ uniformemente para toda x en el intervalo. Esto requiere que las relaciones asintóticas

$$\begin{aligned} S_1(x) &\ll \frac{1}{\delta} S_0(x), & \delta \rightarrow 0, & (1.13) \\ \delta S_2(x) &\ll S_1(x), & \delta \rightarrow 0, & \\ &\cdot & & \\ &\cdot & & \\ &\cdot & & \\ \delta^n S_{n+1}(x) &\ll \delta^{n-1} S_n(x), & \delta \rightarrow 0, & \end{aligned}$$

se mantengan uniformes en x . Si la serie $\sum \delta^{n-1} S_n(x)$ es asintóticamente uniforme en x cuando $\delta \rightarrow 0$, la regla de truncación óptima sugiere que truncar la serie después del término $\delta^N S_{N+1}(x)$ da una aproximación a $\ln y$ con error relativo uniformemente pequeño a lo largo del intervalo x .

Sin embargo dado que la serie WKB aparece en el exponente en 1.12, las condiciones asintóticas en (1.13) no son suficientes para asegurar que

$\exp \left[\sum \delta^{n-1} S_n(x) \right]$ es una buena aproximación a $y(x)$. Para que la serie trunca-
WKB en el término $\delta^{N-1} S_N(x)$ sea una buena aproximación a $y(x)$,
el siguiente término debe ser pequeño comparado con 1 para toda x en el
intervalo de aproximación:

$$\delta^N S_{N+1}(x) \ll 1, \quad \delta \rightarrow 0. \quad (1.14)$$

Si se sostiene esta relación, entonces
 $\exp \left[\sum \delta^N S_{N+1}(x) \right] = 1 + O \left[\delta^N S_{N+1}(x) \right] (\delta \rightarrow 0)$. Por ello, el error relativo
entre $y(x)$ y la aproximación WKB es pequeño:

$$\frac{y(x) - \exp \left[\frac{1}{\delta} \sum_{n=0}^N \delta^n S_n(x) \right]}{y(x)} \sim \delta^N S_{N+1}(x), \quad \delta \rightarrow 0.$$

Por lo tanto, las condiciones 1.13 y 1.14 que satisface WKB serán útiles.

Capítulo 2

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER.

¹ La mecánica cuántica incluye en sí la mecánica clásica como un cierto caso límite. Surge la cuestión de cómo llevar a cabo este paso límite.

En mecánica cuántica el electrón se describe mediante una función de onda que determina los diferentes valores de sus coordenadas; de esta función sólo se sabe que es solución de una ecuación lineal entre derivadas parciales. En mecánica clásica, en cambio, el electrón se considera como una partícula material que se mueve a lo largo de una trayectoria determinada por completo por las ecuaciones de movimiento. En general, el movimiento descrito por la función de onda no se reduce, en modo alguno, al movimiento siguiendo una determinada trayectoria. El vínculo con el movimiento clásico consiste en que si en un cierto instante inicial se da la función de onda, y con ella también la distribución de probabilidades de las coordenadas, esta distribución se desplazará en instantes ulteriores como suponen las leyes de la mecánica clásica.

Para obtener el movimiento a lo largo de una trayectoria determinada, hay que partir de una función de onda de tipo especial (el llamado paquete de ondas), que es apreciablemente distinta de cero tan solo en una pequeña región del espacio; las dimensiones de esta región se pueden hacer tender a cero junto con h . Cabe entonces afirmar que, en el caso cuasiclásico, el paquete de ondas se desplazará en el espacio siguiendo la trayectoria clásica de una partícula.

¹[1, 2, 3, 4]

Esta función de onda del tipo especial, la proporciona el método WKB (ver capítulo anterior). En este sentido, se aplica a continuación la herramienta del método a la ecuación diferencial lineal de Schrödinger. Como resultado se obtendrán soluciones correspondientes a ciertas regiones separadas por los puntos de retorno clásicos, es decir, aquellos donde la energía total de la partícula E se iguala a la energía potencial $V(x)$ de la misma. Surge en este punto la pregunta: ¿Cómo resulta la continuidad de la función de onda entre las distintas regiones? Con este objetivo se abordan en los siguientes dos capítulos los problemas de pozo de potencial y barrera de potencial en una dimensión, que permiten ilustrar la forma de proceder para conseguir dicha continuidad.

2.1. Ecuación de Schrödinger y la teoría WKB.

Sea la ecuación de Schrödinger en una dimensión

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H(\hat{p}, x) \psi(x, t) \quad (2.1)$$

donde $\hat{p} = -i\hbar \partial/\partial x$ es el operador de momento. $H(\hat{p}, x)$ es el operador Hamiltoniano independiente del tiempo y sea de la forma

$$H(\hat{p}, x) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (2.2)$$

Por otra parte, considérese una onda estacionaria, entonces $\psi(x, t)$ se puede escribir en la forma

$$\psi(x, t) = \exp(-i\hbar^{-1}Et) \psi(x). \quad (2.3)$$

Sustituyendo las ecs. 2.2 y 2.3 en la ecuación de Schrödinger 2.1 se encuentra:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\exp(-i\hbar^{-1}Et) \psi(x)] = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) [\exp(-i\hbar^{-1}Et) \psi(x)] \quad (2.4)$$

y operando se convierte en

$$E\psi(x) \exp(-i\hbar^{-1}Et) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) \right] \exp(-i\hbar^{-1}Et) \quad (2.5)$$

o equivalentemente

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x). \quad (2.6)$$

Puesto que $\psi(x)$ sólo depende de la coordenada x , se tiene que

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} \quad (2.7)$$

por lo que la ec. 2.6 adopta la forma

$$\hbar^2 \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + 2m[E - V(x)]\psi(x) = 0 \quad (2.8)$$

que es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la elección del Hamiltoniano 2.2.

Interesa de esta ecuación el límite $\hbar \rightarrow 0$ (límite semiclásico). El parámetro \hbar multiplica a la derivada de orden superior de la ecuación diferencial lineal 2.8. Entonces, por lo visto en el capítulo anterior, se puede aplicar la teoría WKB. La idea, como se exhibió, es proponer una solución de la forma 1.2, es decir

$$\psi(x) \sim \exp \left[\frac{1}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n S_n(x) \right], \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (2.9)$$

Las dos primeras derivadas son

$$\frac{d\psi(x)}{dx} \sim \left(\frac{1}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n \frac{dS_n(x)}{dx} \right) \exp \left[\frac{1}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n S_n(x) \right], \quad \hbar \rightarrow 0 \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} \sim & \left\{ \frac{1}{\hbar^2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n \frac{dS_n(x)}{dx} \right]^2 + \frac{1}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n \frac{d^2 S_n(x)}{dx^2} \right\} \\ & \exp \left[\frac{1}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n S_n(x) \right], \quad \hbar \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Sustituyendo estos resultados 2.9 y 2.11 en la ec. 2.8 resulta

$$\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\hbar^2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n \frac{dS_n(x)}{dx} \right]^2 + \frac{1}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n \frac{d^2 S_n(x)}{dx^2} \right\} + 2m[E - V(x)] = 0 \quad (2.12)$$

donde se eliminó el exponente. Desarrollando 2.12, se encuentran los términos

$$\left[\frac{dS_0(x)}{dx} \right]^2 + 2\hbar \frac{dS_0(x)}{dx} \frac{dS_1(x)}{dx} + \frac{d^2 S_0(x)}{dx^2} + \dots = -2m[E - V(x)] \quad (2.13)$$

Comparando potencias de \hbar da la secuencia

$$\left[\frac{dS_0(x)}{dx} \right]^2 = -2m[E - V(x)], \quad (2.14)$$

$$2 \frac{dS_0(x)}{dx} \frac{dS_1(x)}{dx} + \frac{d^2 S_0(x)}{dx^2} = 0, \quad (2.15)$$

$$\left[\frac{dS_1(x)}{dx} \right]^2 + 2 \frac{dS_0(x)}{dx} \frac{dS_2(x)}{dx} + \frac{d^2 S_1(x)}{dx^2} = 0, \quad (2.16)$$

que son el orden $O(\hbar^0)$, $O(\hbar)$ y $O(\hbar^2)$ del desarrollo 2.12. Estas ecuaciones permiten determinar S_0, S_1, S_2, \dots . Por ejemplo, de la ec. 2.14

$$\frac{dS_0(x)}{dx} = \pm i \sqrt{2m[E - V(x)]} \quad (2.17)$$

e integrando

$$S_0(x) = \pm i \int^x \sqrt{2m[E - V(x')]} dx' + C_1 \quad (2.18)$$

donde C_1 es una constante de integración. También de la ec. 2.15 se obtiene

$$\frac{dS_1(x)}{dx} = -\frac{\frac{d^2 S_0(x)}{dx^2}}{2 \frac{dS_0(x)}{dx}} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \ln \frac{dS_0(x)}{dx} = -\frac{1}{4} \frac{d}{dx} \ln \{i2m[E - V(x)]\} \quad (2.19)$$

la cual, integrando respecto a x , proporciona

$$S_1(x) = -\frac{1}{4} \ln \{i2m[E - V(x)]\} + C_2 \quad (2.20)$$

con C_2 otra constante de integración.

Por lo tanto, a primer orden en \hbar , la solución aproximada WKB de la ec. 2.8 tiene la forma:

$$\psi(x) \sim \exp \left(\pm \frac{i}{\hbar} \int^x \sqrt{2m[E - V(x')]} dx' - \frac{1}{4} \ln \{i2m[E - V(x)]\} + \ln C \right) \quad (2.21)$$

donde $\ln C = C_1 + C_2$. Equivalentemente (2.21) tiene la forma

$$\psi(x) \sim \frac{C}{(2m[E - V(x)])^{1/4}} \exp \left\{ \pm i \hbar^{-1} \int^x \sqrt{2m[E - V(x')]} dx' \right\}, \quad \hbar \rightarrow 0 \quad (2.22)$$

Resulta evidente que cuando $E = V(x)$, la función de onda $\psi(x)$ deja de ser válida. También se ve que cuando la partícula se acerca a ese punto (punto de retorno clásico), la función de onda empieza a oscilar fuertemente. Por lo tanto 2.22 es una solución buena lejos de estos puntos de retorno. En el capítulo anterior se encontró la condición de validez de la aproximación WKB dada por 2.13:

$$\hbar S_1(x) \ll S_0(x), \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (2.23)$$

De aquí resulta

$$\hbar \left| \frac{dS_1(x)}{dx} \right| \ll \left| \frac{dS_0(x)}{dx} \right|, \quad \hbar \rightarrow 0 \quad (2.24)$$

donde se toma el valor absoluto para mantener el sentido de la desigualdad. De la ec. 2.15 se tiene

$$\frac{dS_1(x)}{dx} = -\frac{\frac{d^2 S_0(x)}{dx^2}}{2 \frac{dS_0(x)}{dx}}, \quad (2.25)$$

por lo que 2.24 es

$$\frac{\hbar}{2} \frac{\left| \frac{d^2 S_0(x)}{dx^2} \right|}{\left| \frac{dS_0(x)}{dx} \right|} \ll \left| \frac{dS_0(x)}{dx} \right|, \quad \hbar \rightarrow 0 \quad (2.26)$$

luego resulta

$$\frac{\hbar}{2} \left| \frac{d^2 S_0(x)}{dx^2} \right| \ll \left| \frac{dS_0(x)}{dx} \right|^2, \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (2.27)$$

De la sustitución de 2.17, se encuentra que 2.27 es igual a

$$\frac{\hbar}{2} \frac{m \left| \frac{dV(x)}{dx} \right|}{\sqrt{2m[E - V(x)]}} \ll 2m[E - V(x)] \quad (2.28)$$

por lo tanto

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2m[E - V(x)]}} \ll \frac{4[E - V(x)]}{\left| \frac{dV(x)}{dx} \right|}. \quad (2.29)$$

Por otro lado, de la mecánica clásica se tiene

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (2.30)$$

entonces

$$p = \sqrt{2m[E - V(x)]} \quad (2.31)$$

por lo que la condición de validez 2.29 se convierte en

$$\frac{\lambda}{2\pi} = \frac{\hbar}{p} \ll \frac{4[E - V(x)]}{\left| \frac{dV(x)}{dx} \right|}. \quad (2.32)$$

En otras palabras, λ debe ser pequeño comparado con la distancia característica sobre la que el potencial varía apreciablemente. Entonces, la situación semiclassical es confiable en el límite de longitudes de onda pequeñas. Equivalentemente, la condición 2.32 es

$$\left| \frac{m\hbar F}{2p^3} \right| \ll 1. \quad (2.33)$$

Se sigue de aquí que la aproximación deja de ser aplicable cuando el impulso de la partícula es demasiado pequeño. En particular, es claramente inaplicable cerca de los puntos de retorno, es decir, de aquellos puntos en los que la partícula, según la mecánica clásica, se pararía para empezar luego a moverse en sentido opuesto.

Finalmente se ponen a continuación las soluciones aproximadas WKB de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo 2.8. Se muestran por separado las soluciones para los casos $E > V(x)$ y $E < V(x)$:

1) Si $E > V(x)$

$$\psi_{WKB}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \pm i\hbar^{-1} \int^x p(x') dx' \right\} \quad \hbar \rightarrow 0, \quad (2.34)$$

2) Si $E < V(x)$

$$\psi_{WKB}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \pm \hbar^{-1} \int^x |p(x')| dx' \right\} \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (2.35)$$

Por último, si se considera la parte temporal las funciones de onda son:

1) Si $E > V(x)$

$$\psi_{WKB}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ i\hbar^{-1} \left(\pm \int^x p(x') dx' - Et \right) \right\} \quad \hbar \rightarrow 0, \quad (2.36)$$

2) Si $E < V(x)$

$$\psi_{WKB}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \pm \hbar^{-1} \int^x |p(x')| dx' - i\hbar^{-1} Et \right\} \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (2.37)$$

Capítulo 3

POZO DE POTENCIAL.

3.1. Soluciones en los puntos de retorno para el problema de pozo de potencial.

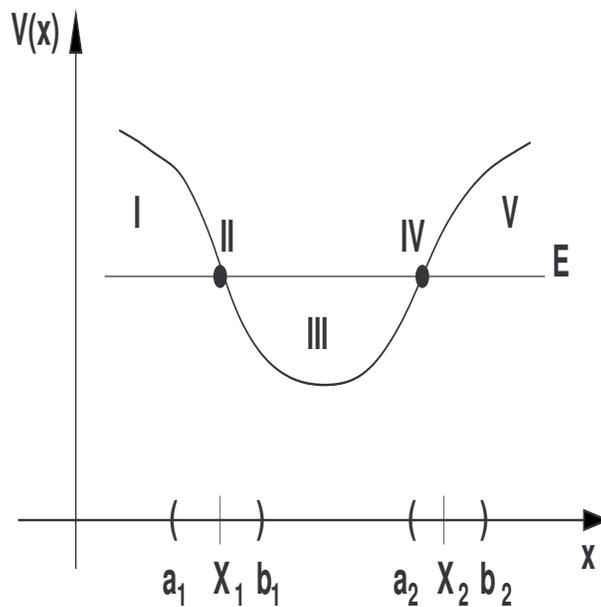


Figura 3.1: Pozo de potencial

¹ Se considera ahora el problema de encontrar la función de onda para la

¹[1, 2, 3, 4]

partícula bajo la acción de un potencial dado. Supóngase $V(x)$ en la forma de la figura 3.1. En la región I , la función de onda decrece exponencialmente para $x \rightarrow \infty$, y, puesto que $V(x) > E$ y $p^2(x) = 2m[E - V(x)]$, entonces $p(x)$ es imaginario. Por lo tanto $\psi(x)$ es aproximadamente

$$\psi_I(x) = K_1 |p(x)|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'\right) \quad (x < x_1). \quad (3.1)$$

En la región III ($x_1 < x < x_2$), $\psi(x)$ es oscilatoria:

$$\begin{aligned} \psi_{III}(x) &= K_{III} p(x)^{-1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx'\right) \\ &+ K'_{III} p(x)^{-1/2} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx'\right). \end{aligned} \quad (3.2)$$

En la región V , la función de onda decrece exponencialmente para $x \rightarrow \infty$:

$$\psi_V(x) = K_V |p(x)|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx'\right) \quad (x_2 < x). \quad (3.3)$$

Las regiones de validez de estas funciones de onda -ecs. 3.1, 3.2 y 3.3- están separadas por los puntos de retorno clásico, en los cuales la aproximación falla. Sin embargo, dado que ψ_I , ψ_{III} y ψ_V , son aproximaciones a la misma función de onda ψ , las constantes K_I , K_{III} , K'_{III} y K_V no pueden ser arbitrarias. Para evaluar las constantes y conectar las soluciones entre regiones, se asume que la función de energía potencial es aproximadamente lineal en la vecindad de x_1 y x_2 - ver figura 3.2 que corresponde al punto de retorno x_1 .

Considerando la figura 3.2, es claro que en la vecindad inmediata de x_1 se puede hacer la aproximación

$$V(x) \sim E - A(x - x_1) \quad (3.4)$$

donde A es el valor absoluto de la pendiente $A = \left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x=x_1}$. Por otro lado

$$p^2(x) = 2m[E - V(x)]$$

con la sustitución de 3.4 se transforma en

$$p^2(x) = 2mA(x - x_1). \quad (3.5)$$

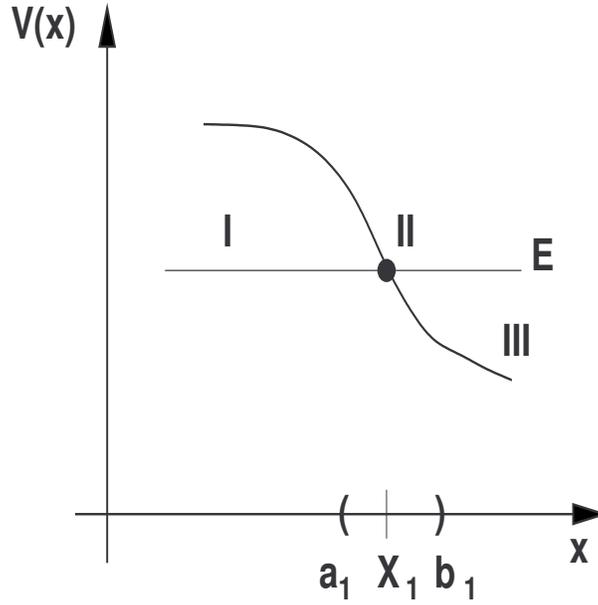


Figura 3.2: Amplificación del punto de retorno x_1 del pozo de potencial

Por otra parte se tiene la ecuación de Schrödinger

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{p^2(x)}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad (3.6)$$

que se transforma, usando la ec. 3.5, en

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mA}{\hbar^2}(x - x_1)\psi(x) = 0. \quad (3.7)$$

Conviene hacer el cambio de variable

$$z_1 = - \left(\frac{2mA}{\hbar^2} \right)^{1/3} (x - x_1) \quad (3.8)$$

por lo que la ec. 3.7 es

$$\frac{d^2\psi(z_1)}{dz_1^2} - z_1\psi(z_1) = 0. \quad (3.9)$$

Se identifica ésta como la ecuación de Airy, la cual tiene dos soluciones linealmente independientes: $Ai(z)$ y $Bi(z)$, llamadas la primera y segunda función

de Airy. Se requiere una función que decaiga asintóticamente para grandes valores positivos de z ($z > 0$ corresponde a $x < x_1$ y $x > x_2$). Supóngase la transformada de Fourier de la función de onda $\psi(z_1)$

$$\psi(z_1) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) \exp(ikz_1) \quad (3.10)$$

la cuál se sustituye en 3.9 para obtener

$$\begin{aligned} & \frac{d^2}{dz_1^2} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) \exp(ikz_1) \right) - \\ & z_1 \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) \exp(ikz_1) \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Operando resulta

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) \frac{d^2}{dz_1^2} \exp(ikz_1) - \frac{z_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) \exp(ikz_1) = 0 \quad (3.12)$$

de aquí

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) (ik)^2 \exp(ikz_1) - \frac{z_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) \exp(ikz_1) = 0 \quad (3.13)$$

que se escribe como

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) (-k^2 - z_1) \exp(ikz_1) = 0. \quad (3.14)$$

Luego

$$-i \frac{\partial}{\partial k} \exp(ikz_1) = -i^2 z_1 \exp(ikz_1) = z_1 \exp(ikz_1) \quad (3.15)$$

que eliminando el exponente es

$$-i \frac{\partial}{\partial k} = z_1. \quad (3.16)$$

Este resultado transforma 3.14 en

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) \left(-k^2 + i \frac{\partial}{\partial k} \right) \exp(ikz_1) = 0 \quad (3.17)$$

y dado que el operador entre paréntesis es hermitiano se tiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \left[\left\{ i \frac{\partial}{\partial k} - k^2 \right\} f^*(k) \right]^* \exp(ikz_1) = 0. \quad (3.18)$$

Por lo tanto

$$\left[\left(i \frac{\partial}{\partial k} - k^2 \right) f^*(k) \right]^* = 0, \quad f(k) \equiv \exp\left(i \frac{k^3}{3}\right). \quad (3.19)$$

De la sustitución de $f(k)$ en la ec. 3.10 resulta

$$\psi(z_1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\left(i \frac{k^3}{3}\right) \exp(ikz_1) \quad (3.20)$$

o equivalentemente

$$\psi(z_1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp i \left(kz_1 + \frac{k^3}{3} \right). \quad (3.21)$$

En término de funciones trigonométricas

$$\psi(z_1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[\cos\left(kz_1 + \frac{k^3}{3}\right) + i \operatorname{sen}\left(kz_1 + \frac{k^3}{3}\right) \right], \quad (3.22)$$

es decir,

$$\psi(z_1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \cos\left(kz_1 + \frac{k^3}{3}\right) + \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \operatorname{sen}\left(kz_1 + \frac{k^3}{3}\right). \quad (3.23)$$

Dado que la función seno es impar, el segundo término resulta ser

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \operatorname{sen}\left(kz_1 + \frac{k^3}{3}\right) = 0,$$

y por lo tanto

$$\psi(z_1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \cos\left(kz_1 + \frac{k^3}{3}\right)$$

o, usando el hecho de que la función coseno es par

$$\psi(z_1) = Ai(z_1) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dk \cos\left(kz_1 + \frac{k^3}{3}\right). \quad (3.24)$$

Existen varios métodos para obtener el comportamiento asintótico cuando $z \rightarrow +\infty$ de integrales en que un parámetro grande z aparece en una exponencial. Es evidente que la ec. 3.24 se puede representar en forma de exponencial. Algunos de éstos métodos son: el método de Laplace, el método de fase estacionaria, el método de punto silla, etc. Usando alguno de éstos métodos², se encuentra las formas asintóticas de 3.24

$$\psi(z_1) = \begin{cases} Ai(z_1) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}z_1^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z_1^{3/2}\right) & (z_1 > 0) \\ Ai(z_1) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z_1)^{1/4}} \operatorname{sen}\left[\frac{2}{3}(-z_1)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] & (z_1 < 0) \end{cases} \quad (3.25)$$

Por otro lado, combinando la condición de aplicabilidad de la aproximación WKB

$$p^3(x) \gg m\hbar \left| \frac{dV(x)}{dx} \right| = m\hbar A \quad (3.26)$$

alrededor de x_1 y considerando la ec. 3.5 junto con la longitud de onda de De Broglie $\lambda = \frac{\hbar}{p}$ se encuentra que 3.26 es

$$p^2(x) \gg mA \frac{\hbar}{p(x)} = mA \frac{\lambda}{2\pi}$$

$$\frac{p^2(x)}{2mA} \gg \frac{1}{2} \frac{\lambda}{2\pi},$$

finalmente

$$|x - x_1| \gg \frac{1}{2} \frac{\lambda}{2\pi}. \quad (3.27)$$

Luego, usando la igualdad 3.5, se tiene

$$\frac{1}{\hbar^2} p^2(x) = \frac{2mA}{\hbar^2} |x - x_1|$$

de aquí, manipulando

$$\left(\frac{\hbar^2}{2mA} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{p^2(x)}{\hbar^2} = \left(\frac{2mA}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} |x - x_1| = |z_1|$$

²Ver apéndice A.

donde se usó el valor absoluto de la ec. 3.8. Ésta se expresa como

$$\left[\left(\frac{\hbar^2}{2mA} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{p(x)}{\hbar} \right]^2 = |z_1|$$

de lo que se sigue

$$\left(\frac{2mA}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{\sqrt{|z_1|}}. \quad (3.28)$$

Ahora, multiplicando 3.27 por $\left(\frac{2mA}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}}$ se obtiene

$$|z_1| \gg \frac{1}{2} \left(\frac{2mA}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\lambda}{2\pi}$$

y usando la ec.3.28

$$|z_1| \gg \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{|z_1|}}$$

o equivalentemente

$$2^{\frac{2}{3}} |z_1| \gg 1. \quad (3.29)$$

La condición 3.29 permite, en efecto, usar la forma asintótica de la función de Airy $Ai(z_1)$. El mismo procedimiento se sigue para encontrar $Bi(z_1)$, pero ésta diverge para $z \rightarrow \infty$ y, por lo tanto, no es necesario examinarla por ahora. Por lo tanto se tiene que la función de onda en la vecindad del punto de retorno clásico x_1 tiene la forma

$$\psi_{II}(z_1) = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}z_1^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z_1^{3/2}\right) & (z_1 > 0) \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z_1)^{1/4}} \operatorname{sen}\left[\frac{2}{3}(-z_1)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] & (z_1 < 0). \end{cases} \quad (3.30)$$

El procedimiento seguido hasta aquí para x_1 , es válido para el otro punto de retorno clásico x_2 . Entonces, considerando la figura 3.3 y siguiendo lo que se hizo para el punto x_1 , se aproxima

$$V(x) \sim E + B(x - x_2) \quad (3.31)$$

donde B es el valor absoluto de la pendiente $B = \left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x=x_2}$. La ecuación de Schrödinger es

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2mB}{\hbar^2} (x - x_2) \psi(x) = 0. \quad (3.32)$$

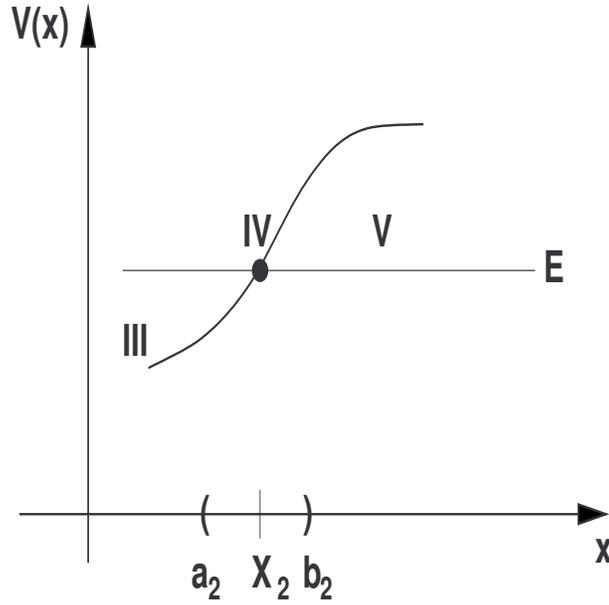


Figura 3.3: Amplificación del punto de retorno x_2 del pozo de potencial

Luego se propone el cambio de variable

$$z_2 = \left(\frac{2mB}{\hbar^2} \right)^{1/3} (x - x_2) \quad (3.33)$$

por lo que la ec. 3.32 se transforma en

$$\frac{d^2 \psi(z_2)}{dz_2^2} - z_2 \psi(z_2) = 0, \quad (3.34)$$

que es la ecuación de Airy. Por las mismas consideraciones que para el caso x_1 , se encuentra que la vecindad de x_2 la función de onda tiene la forma

$$\psi_{IV}(z_2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z_2)^{1/4}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} (-z_2)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] & (z_2 < 0) \\ \frac{1}{2\sqrt{\pi}z_2^{1/4}} \exp \left(-\frac{2}{3} z_2^{3/2} \right) & (z_2 > 0). \end{cases} \quad (3.35)$$

Finalmente se reúnen las funciones de onda encontradas para este problema:
Región I: ($x < x_1$)

$$\psi_I(x) = K_1 |p(x)|^{-1/2} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx' \right) \quad (3.36)$$

Región II: ($a_1 < x < b_1$)

$$\psi_{II}(z_1) = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}z_1^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z_1^{3/2}\right) & (z_1 > 0) \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z_1)^{1/4}} \operatorname{sen}\left[\frac{2}{3}(-z_1)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] & (z_1 < 0) \end{cases} \quad (3.37)$$

Región III: ($x_1 < x < x_2$)

$$\begin{aligned} \psi_{III}(x) &= K_{III} p(x)^{-1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'\right) \\ &+ K'_{III} p(x)^{-1/2} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'\right) \end{aligned} \quad (3.38)$$

Región IV: ($a_2 < x < b_2$)

$$\psi_{IV}(z_2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z_2)^{1/4}} \operatorname{sen}\left[\frac{2}{3}(-z_2)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] & (z_2 < 0) \\ \frac{1}{2\sqrt{\pi}z_2^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z_2^{3/2}\right) & (z_2 > 0). \end{cases} \quad (3.39)$$

Región V: ($x_2 < x$)

$$\psi_V(x) = K_V |p(x)|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx'\right) \quad (3.40)$$

3.2. Conexión de soluciones

A continuación se hacen las conexiones de las funciones de onda entre regiones, es decir, $\psi_I \leftrightarrow \psi_{II}$, $\psi_{II} \leftrightarrow \psi_{III}$, $\psi_{III} \leftrightarrow \psi_{IV}$ y $\psi_{IV} \leftrightarrow \psi_V$. Para lograrlo primero se expresan las ecuaciones 3.36, 3.38 y 3.40 en la variable z . Entonces, se considera la función de onda

$$\psi_I(x) = \frac{K_1}{|p(x)|^{1/2}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'\right).$$

Luego, en la vecindad de x_1 se encontró en la ec. 3.5 que

$$p^2(x) = 2mA(x - x_1)$$

y manipulando

$$\begin{aligned}
p^2(x) &= 2mA(x - x_1) & (3.41) \\
&= 2mA \frac{\left(\frac{2mA}{\hbar^2}\right)^{1/3}}{\left(\frac{2mA}{\hbar^2}\right)^{1/3}} (x - x_1) \\
&= (2mA\hbar)^{2/3} \left[\left(\frac{2mA}{\hbar^2}\right)^{1/3} (x - x_1) \right] \\
&= -(2mA\hbar)^{2/3} z_1
\end{aligned}$$

donde se usó la definición 3.8. Con este resultado se evalúa la integral

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx' = \left(\frac{2mA}{\hbar^2}\right)^{1/3} \int_{x_1}^x \sqrt{z_1} dx'. \quad (3.42)$$

Usando nuevamente la ec. 3.8 se tiene que

$$dz_1 = - \left(\frac{2mA}{\hbar^2}\right)^{1/3} dx' \quad (3.43)$$

lo que se sustituye en la expresión 3.42 para obtener

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx' = - \int_0^{z_1} \sqrt{z_1} dz_1 = -\frac{2}{3} z_1^{3/2}. \quad (3.44)$$

Por lo tanto ψ_I , ahora como función de z_1 , es

$$\psi_I(z_1) = \frac{K_1}{\sqrt{(2m\hbar A)^{1/3} z_1^{1/4}}} \exp\left(-\frac{2}{3} z_1^{3/2}\right) \quad (z_1 > 0) \quad (3.45)$$

o equivalentemente

$$\psi_I(z_1) = \frac{C}{z_1^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} z_1^{3/2}\right) \quad (z_1 > 0). \quad (3.46)$$

Otra integral que hay que evaluar es la que aparece en 3.38, esto es

$$\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx'.$$

Considerando la ec. 3.33 y que en la vecindad de x_2 se tiene

$$p^2(x) = -2mB(x - x_2), \quad (3.47)$$

resulta

$$p^2(x) = -(2m\hbar B)^{2/3} z_2 \quad (3.48)$$

por lo que la integral es

$$\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' = \pm \left(\frac{2mB}{\hbar^2} \right)^{1/3} \int_x^{x_2} \sqrt{-z_2} dx'. \quad (3.49)$$

Luego, diferenciando 3.33

$$dz_2 = \left(\frac{2mB}{\hbar^2} \right)^{1/3} dx' \quad (3.50)$$

con lo que 3.49 se transforma en

$$\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' = \pm \int_{z_2}^0 \sqrt{-z_2} dz_2 = \pm \int_{z_2}^0 \sqrt{-z_2} dz_2$$

y por lo tanto

$$\pm \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' = \frac{2}{3} (-z_2)^{3/2}. \quad (3.51)$$

Con este resultado la solución 3.38 se transforma en

$$\psi_{III}(z_2) = \frac{[E_{III} + E'_{III}]}{(-z_2)^{1/4}} \exp\left(i \frac{2}{3} (-z_2)^{3/2}\right) \quad (z_2 < 0), \quad (3.52)$$

o redefiniendo constantes y usando propiedades trigonométricas

$$\psi_{III}(z_2) = \frac{D}{(-z_2)^{1/4}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} (-z_2)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \quad (z_2 < 0) \quad (3.53)$$

Finalmente se encuentra

$$\psi_V(z_2) = \frac{C_V}{z_2^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} z_2^{3/2}\right) \quad (z_2 > 0). \quad (3.54)$$

Ahora es posible comparar las funciones de onda y así, por ejemplo, se compara 3.46 con 3.37 para el caso $z_1 > 0$. Es decir, se compara

$$\psi_I(z_1) = \frac{C}{z_1^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} z_1^{3/2}\right)$$

con

$$\psi_{II}(z_1) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}z_1^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z_1^{3/2}\right)$$

de lo que resulta

$$2C = \frac{1}{\sqrt{\pi}}. \quad (3.55)$$

En seguida se comparan las soluciones 3.37 con 3.53 que corresponden, respectivamente, al caso $z_1 < 0$ y $z_2 < 0$. Entonces

$$\psi_{II}(z_1) = \frac{2C}{(-z_2)^{1/4}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3}(-z_1)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right]$$

y

$$\psi_{III}(z_2) = \frac{D}{(-z_2)^{1/4}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3}(-z_2)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right]$$

de lo que resulta

$$2C \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3}(-z_1)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] = D \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \quad (3.56)$$

o equivalentemente, en la variable original x

$$\operatorname{sen} \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] = \frac{D}{2C} \operatorname{sen} \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] \quad (3.57)$$

y tomando

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' - \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' \quad (3.58)$$

resulta

$$\operatorname{sen} \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' - \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] = \frac{D}{2C} \operatorname{sen} \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] \quad (3.59)$$

que es una identidad en x . La condición se satisface sólo si

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (n \text{ un entero}); \quad (3.60)$$

y por lo tanto

$$\frac{D}{2C} = (-1)^n$$

o desprjando D,

$$D = (-1)^n 2C. \quad (3.61)$$

Así se encuentra

$$\psi_{III}(z_2) = \frac{(-1)^n 2C}{(-z_2)^{1/4}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} (-z_2)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \quad (z_2 < 0). \quad (3.62)$$

Finalmente, comparando las funciones 3.39 con 3.54 para $z_2 > 0$, se obtiene

$$\psi_V(z_2) = \frac{(-1)^n C}{z_2^{1/4}} \exp \left(-\frac{2}{3} z_2^{3/2} \right) \quad (3.63)$$

Por lo tanto se tiene que la solución al pozo de potencial es

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{C}{z_1^{1/4}} \exp \left(-\frac{2}{3} z_1^{3/2} \right) & (z_1 > 0) \\ \frac{(-1)^n 2C}{(-z_2)^{1/4}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} (-z_2)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] & (z_2 < 0) \\ \frac{(-1)^n C}{z_2^{1/4}} \exp \left(-\frac{2}{3} z_2^{3/2} \right) & (z_2 > 0) \end{cases} \quad (3.64)$$

o en las variables originales

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{(-)^n}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x)| dx \right) & (x < x_1) \\ \frac{(-1)^n 2C}{\sqrt{p(x)}} \operatorname{sen} \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right] & (x_1 < x < x_2) \\ \frac{(-1)^n C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x)| dx \right) & (x_2 < x). \end{cases} \quad (3.65)$$

Capítulo 4

BARRERA DE POTENCIAL.

4.1. Soluciones en los puntos de retorno para el problema de barrera de potencial.

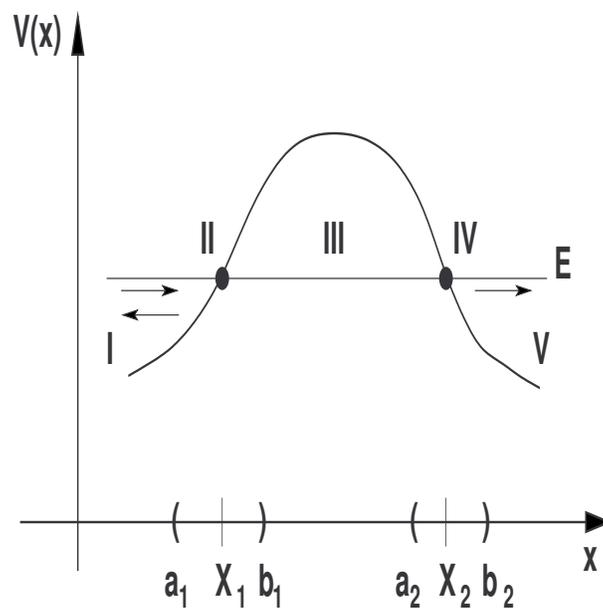


Figura 4.1: Barrera de potencial

¹ Se considera ahora el problema de la barrera de potencial, ilustrado en

¹[1, 2, 3, 4]

la figura 4.1, y se asume que un haz de partículas incide desde la izquierda y que la zona no clásica es de anchura finita. WKB proporciona soluciones en las regiones I, III y V (las regiones I y V son clásicamente permitidas) para las regiones lejanas a los puntos de retorno clásicos x_1 y x_2 y están dadas por:

Región I: ($x < x_1$)

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp i \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \\ &+ \frac{A'}{\sqrt{p(x)}} \exp i \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right).\end{aligned}\quad (4.1)$$

Región III: ($x_1 < x < x_2$)

$$\begin{aligned}\psi_{III}(x) &= \frac{B}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx' + \frac{\pi}{4} \right) \\ &+ \frac{B'}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx' + \frac{\pi}{4} \right).\end{aligned}\quad (4.2)$$

Región V: ($x_2 < x$)

$$\psi_V(x) = \frac{A_V}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right).\quad (4.3)$$

Ahora, resta determinar las soluciones en la vecindad de los puntos de retorno clásico x_1 y x_2 . Se analiza, a continuación, la vecindad de x_1 y para ello se considera el siguiente diagrama (fig. 4.2). En esta vecindad $a_1 < x_1 < b_1$ se supone que se puede aproximar la energía potencial por la expresión

$$V(x) \sim E + b(x - x_1),\quad (4.4)$$

donde b es el valor absoluto de la pendiente, $b = \left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x=x_1}$. Luego, recordando que

$$p^2(x) = 2m[E - V(x)]\quad (4.5)$$

se encuentra, sustituyendo la aproximación de la ec. 4.4 en esta última

$$p^2(x) = -2mb(x - x_1).\quad (4.6)$$

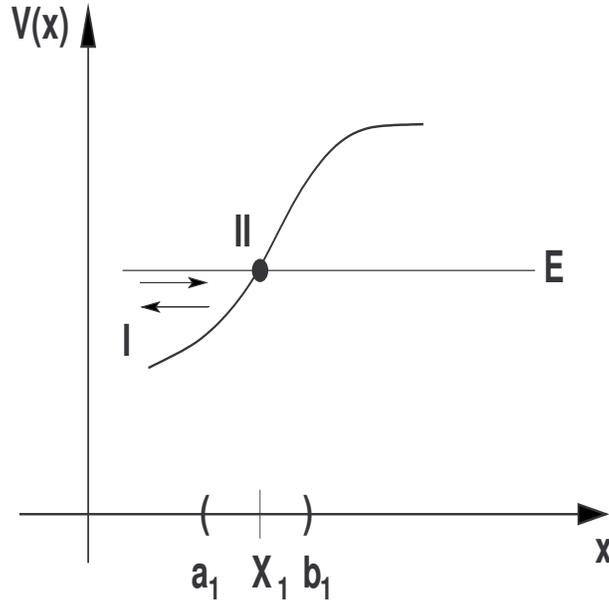


Figura 4.2: Amplificación del punto de retorno x_1 de la barrera de potencial

Ahora, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{p^2(x)}{\hbar^2}\psi(x) = 0, \quad (4.7)$$

la cuál se transforma, sustituyendo $p^2(x)$ dado por la ec. 4.6, en

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2mb}{\hbar^2}(x - x_1)\psi(x) = 0. \quad (4.8)$$

Si se propone el cambio de variable

$$z_1 = \left(\frac{2mb}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(x - x_1) \quad (4.9)$$

se tiene que la ec. 4.8 se transforma en

$$\frac{d^2\psi(z_1)}{dz_1^2} - z_1\psi(z_1) = 0 \quad (4.10)$$

que es la ecuación de Airy y sus soluciones son conocidas.

Por otro lado, se considera la condición de aplicabilidad de la aproximación WKB

$$p^3(x) \gg m\hbar \left| \frac{dV(x)}{dx} \right| = m\hbar b. \quad (4.11)$$

A continuación, considerando la ec. 4.6 y la longitud de onda de De Broglie $\lambda = \frac{\hbar}{p}$, la condición de aplicabilidad WKB se puede expresar como

$$\begin{aligned} p^2(x) &\gg mb \frac{\hbar}{p} = mb \frac{\lambda}{2\pi} \\ \frac{p^2(x)}{2mb} &\gg \frac{1}{2} \frac{\lambda}{2\pi} \\ |x - x_1| &\gg \frac{1}{2} \frac{\lambda}{2\pi}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Luego, usando nuevamente 4.6 se tiene

$$\frac{1}{\hbar} p^2(x) = \frac{2mb}{\hbar^2} |x - x_1|$$

y tomando la inversa

$$\frac{\hbar^2}{p^2(x)} = \frac{\hbar^2}{2mb} \frac{1}{|x - x_1|}$$

por lo que

$$\left(\frac{2mb}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{p^2(x)} = \left(\frac{\hbar^2}{2mb} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{|x - x_1|}.$$

Usando la igualdad 4.9 se obtiene

$$\left(\frac{2mb}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{p^2(x)} = \frac{1}{|z_1|}$$

o equivalentemente

$$\left[\left(\frac{2mb}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\lambda}{2\pi} \right]^2 = \frac{1}{|z_1|}.$$

Por lo tanto

$$\left(\frac{2mb}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{\sqrt{|z_1|}}. \quad (4.13)$$

Luego, multiplicando la desigualdad 4.12 por $\left(\frac{2mb}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}$ se encuentra

$$|z_1| \gg \frac{1}{2} \left(\frac{2mb}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\lambda}{2\pi} \quad (4.14)$$

y si se considera el resultado 4.13

$$|z_1| \gg \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{|z_1|}}$$

y de aquí

$$2|z_1|^{\frac{3}{2}} \gg 1$$

o equivalentemente

$$2^{\frac{2}{3}} |z_1| \gg 1. \quad (4.15)$$

Esto permite usar las formas asintóticas de la función de Airy para encontrar que en la región II se tiene la solución

$$\psi_{II}(z_1) = \begin{cases} Ai(z_1) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi(-z_1)^{1/4}}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} (-z_1)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] & (z_1 < 0) \\ Bi(z_1) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi(-z_1)^{1/4}}} \cos \left[\frac{2}{3} (-z_1)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] & (z_1 < 0) \\ Ai(z_1) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi z_1^{1/4}}} \exp\left(-\frac{2}{3} z_1^{\frac{3}{2}}\right) & (z_1 > 0) \\ Bi(z_1) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi z_1^{1/4}}} \exp\left(\frac{2}{3} z_1^{\frac{3}{2}}\right) & (z_1 > 0) \end{cases} \quad (4.16)$$

es decir, se incluyen las dos soluciones de Airy, ya que la región no clásica es de anchura finita. A continuación se buscan soluciones para la región IV que corresponde a la siguiente fig. 4.3. De forma análoga a lo realizado para la vecindad de x_1 , se supone que en ésta región ($a_2 < x_2 < b_2$) el potencial $V(x)$ se puede aproximar por la recta

$$V(x) \sim E - d(x - x_2) \quad (4.17)$$

con $d = \left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x=x_2}$ el valor absoluto de la pendiente. Luego se tiene

$$p^2(x) = 2md(x - x_2) \quad (4.18)$$

por lo tanto, la ecuación de Schrödinger es

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2md}{\hbar^2} (x - x_2) \psi(x) = 0. \quad (4.19)$$

que con el cambio de variable

$$z_2 = - \left(\frac{2md}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} (x - x_2) \quad (4.20)$$

se transforma en

$$\frac{d^2 \psi(z_2)}{dz_2^2} - z_2 \psi(z_2) = 0. \quad (4.21)$$

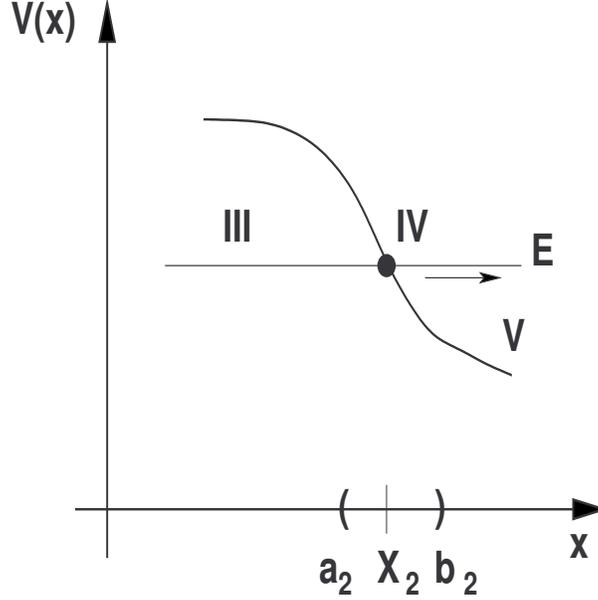


Figura 4.3: Amplificación del punto de retorno x_2 de la barrera de potencial

Nuevamente, de la condición de aplicabilidad de la aproximación WKB junto con las ecs. 4.18 y 4.20 se puede usar las formas asintóticas de las funciones de Airy ($Ai(z)$ y $Bi(z)$) que dan la solución a la ecuación 4.21. Entonces, en la región IV se tiene

$$\psi_{IV}(z_2) = \begin{cases} Ai(z_2) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}z_2^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z_2^{3/2}\right) & (z_2 > 0) \\ Bi(z_2) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}z_2^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}z_2^{3/2}\right) & (z_2 > 0) \\ Ai(z_2) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z_2)^{1/4}} \operatorname{sen}\left[\frac{2}{3}(-z_2)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] & (z_2 < 0) \\ Bi(z_2) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z_2)^{1/4}} \cos\left[\frac{2}{3}(-z_2)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] & (z_2 < 0) \end{cases} \quad (4.22)$$

como era de esperar. En seguida se reunen las soluciones para las cinco regiones en las que se ha dividido el problema de la barrera de potencial. Entonces se tiene:

Región I: ($x < x_1$)

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp i \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \\ &+ \frac{A'}{\sqrt{p(x)}} \exp i \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right). \end{aligned} \quad (4.23)$$

RegiónII: ($a_1 < x_1 < b_1$)

$$\psi_{II}(z_1) = \begin{cases} Ai(z_1) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi(-z_1)^{1/4}}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} (-z_1)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] & (z_1 < 0) \\ Bi(z_1) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi(-z_1)^{1/4}}} \cos \left[\frac{2}{3} (-z_1)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] & (z_1 < 0) \\ Ai(z_1) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi z_1^{1/4}}} \exp \left(-\frac{2}{3} z_1^{\frac{3}{2}} \right) & (z_1 > 0) \\ Bi(z_1) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi z_1^{1/4}}} \exp \left(\frac{2}{3} z_1^{\frac{3}{2}} \right) & (z_1 > 0) \end{cases}. \quad (4.24)$$

Región III: ($x_1 < x < x_2$)

$$\begin{aligned} \psi_{III}(x) &= \frac{B}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx' + \frac{\pi}{4} \right) \\ &+ \frac{B'}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx' + \frac{\pi}{4} \right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

RegiónIV: ($a_2 < x_2 < b_2$)

$$\psi_{IV}(z_2) = \begin{cases} Ai(z_2) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi z_2^{1/4}}} \exp \left(-\frac{2}{3} z_2^{\frac{3}{2}} \right) & (z_2 > 0) \\ Bi(z_2) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi z_2^{1/4}}} \exp \left(\frac{2}{3} z_2^{\frac{3}{2}} \right) & (z_2 > 0) \\ Ai(z_2) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi(-z_2)^{1/4}}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} (-z_2)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] & (z_2 < 0) \\ Bi(z_2) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi(-z_2)^{1/4}}} \cos \left[\frac{2}{3} (-z_2)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] & (z_2 < 0) \end{cases}. \quad (4.26)$$

Región V: ($x_2 < x$)

$$\psi_V(x) = \frac{A_V}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right). \quad (4.27)$$

4.2. Conexión de soluciones

A continuación se hacen las uniones de las soluciones entre las regiones, es decir, $\psi_I \longleftrightarrow \psi_{II}$, $\psi_{II} \longleftrightarrow \psi_{III}$, $\psi_{III} \longleftrightarrow \psi_{IV}$ y $\psi_{IV} \longleftrightarrow \psi_V$. Para ello, primero se expresan las ecuaciones 4.23, 4.25, y 4.27 en la variable z . Por lo tanto, considerando las ecs. 4.6, 4.9, 4.18 y 4.20 se encuentra

$$\psi_I(z_1) = \frac{C_I}{(-z_1)^{1/4}} \exp i \left(\frac{2}{3} (-z_1)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right) \quad (z_1 < 0) \quad (4.28)$$

$$\psi_{III}(z_2) = \frac{D}{z_2^{1/4}} \exp \left(-\frac{2}{3} z_2^{\frac{3}{2}} \right) + \frac{D'}{z_1^{1/4}} \exp \left(\frac{2}{3} z_2^{\frac{3}{2}} \right) \quad (z_2 > 0) \quad (4.29)$$

y

$$\psi_V(z_2) = \frac{C_V}{(-z_2)^{1/4}} \exp i \left(\frac{2}{3} (-z_2)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right) \quad (z_2 < 0). \quad (4.30)$$

De esta manera las ecs. 4.28, 4.29 y 4.30 en la variable z , sustituyen las expresiones 4.23, 4.25 y 4.27 en la variable x . Ahora se compara la solución 4.30 con las fórmulas de conexión 4.26 las cuales corresponden, según la ec. 4.20, a la situación $z_2 < 0$. Usando las propiedades de una función exponencial con argumento complejo, es posible expresar 4.30 como

$$\psi_V(z_2) = \frac{C_V}{(-z_2)^{1/4}} \left\{ \cos \left[\frac{2}{3} (-z_2)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] + i \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} (-z_2)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] \right\} \quad (4.31)$$

que se compara con la combinación 4.26 para $z_2 < 0$

$$\begin{aligned} \psi_{IV}(z_2) &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi} (-z_2)^{1/4}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} (-z_2)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] \\ &+ \frac{\beta}{\sqrt{\pi} (-z_2)^{1/4}} \cos \left[\frac{2}{3} (-z_2)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] \end{aligned} \quad (4.32)$$

y se consiguen los resultados

$$\alpha = i\sqrt{\pi}C_V \quad (4.33)$$

$$\beta = \sqrt{\pi}C_V. \quad (4.34)$$

Luego, comparando la solución 4.29 con la combinación 4.26, que corresponde al caso $z_2 > 0$ segun 4.20, es decir

$$\psi_{III}(z_2) = \frac{D}{z_2^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z_2^{3/2}\right) + \frac{D'}{z_2^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}z_2^{3/2}\right)$$

con

$$\psi_{IV}(z_2) = \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}z_2^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z_2^{3/2}\right) + \frac{\beta}{\sqrt{\pi}z_2^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}z_2^{3/2}\right)$$

resulta

$$D = \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \quad \text{y} \quad D' = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}}.$$

Luego, considerando las ecs. 4.33 y 4.34, estas últimas se convierten respectivamente en

$$D = \frac{iC_V}{2} \tag{4.35}$$

y

$$D' = C_V. \tag{4.36}$$

De esta forma en la región III la solución, tomando en cuenta 4.35 y 4.36, se ve como

$$\psi_{III}(z_2) = \frac{C_V}{z_2^{1/4}} \left[\exp\left(\frac{2}{3}z_2^{3/2}\right) + \frac{i}{2} \exp\left(-\frac{2}{3}z_2^{3/2}\right) \right], \tag{4.37}$$

o en la variable original x

$$\psi_{III}(x) = \frac{C_V}{\sqrt{|p(x)|}} \left\{ \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx'\right) + \frac{i}{2} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx'\right) \right\} \tag{4.38}$$

La integral en el exponente se puede expresar como

$$\int_x^{x_2} |p(x')| dx' = \int_{x_1}^{x_2} |p(x')| dx' - \int_{x_1}^x |p(x')| dx'$$

y se introduce la definición

$$T \equiv \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x')| dx'\right) = \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[V(x') - E]} dx'\right) \tag{4.39}$$

que resulta una constante. Entonces es posible escribir la solución 4.38 como

$$\psi_{III}(x) = \frac{C_V}{\sqrt{|p(x)|}} \left[T^{-1} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'\right) + \frac{i}{2} T \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'\right) \right] \quad (4.40)$$

que en la variable z es

$$\psi_{III}(z_1) = \frac{C_V}{z_1^{1/4}} \left[T^{-1} \exp\left(-\frac{2}{3} z_1^{3/2}\right) + \frac{i}{2} T \exp\left(\frac{2}{3} z_1^{3/2}\right) \right]. \quad (4.41)$$

En seguida, se compara esta ec. 4.41 con la combinación 4.24 para $z_1 > 0$, esto es, se comparan

$$\begin{aligned} \psi_{II}(z_1) &= \frac{\alpha'}{2\sqrt{\pi} z_1^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} z_1^{3/2}\right) + \frac{\beta'}{\sqrt{\pi} z_1^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3} z_1^{3/2}\right) \\ \psi_{III}(z_1) &= \frac{C_V}{z_1^{1/4}} \left[T^{-1} \exp\left(-\frac{2}{3} z_1^{3/2}\right) + \frac{i}{2} T \exp\left(\frac{2}{3} z_1^{3/2}\right) \right] \end{aligned}$$

de lo que resulta

$$\alpha' = 2\sqrt{\pi} T^{-1} C_V \quad (4.42)$$

y

$$\beta' = i \frac{\sqrt{\pi}}{2} T C_V. \quad (4.43)$$

Finalmente se hace la comparación 4.28 con la combinación 4.24 para $z_1 < 0$, esto es,

$$\begin{aligned} \psi_I(z_1) &= \frac{C_I}{(-z_1)^{1/4}} \exp i \left(\frac{2}{3} (-z_1)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{C_I}{(-z_1)^{1/4}} \cos \left[\frac{2}{3} (-z_1)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] + i \frac{C_I}{(-z_1)^{1/4}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} (-z_1)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} \psi_{II}(z_1) &= \frac{\alpha'}{\sqrt{\pi} (-z_1)^{1/4}} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} (-z_1)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \\ &+ \frac{\beta'}{\sqrt{\pi} (-z_1)^{1/4}} \cos \left[\frac{2}{3} (-z_1)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \end{aligned}$$

para obtener

$$C_I = \frac{\beta'}{\sqrt{\pi}} \quad \text{y} \quad iC_I = \frac{\alpha'}{\sqrt{\pi}}.$$

Usando las expresiones para α' y β' dados por las ecs. 4.42 y 4.43 se encuentra

$$C_I = \frac{i}{2}TC_V \quad (4.44)$$

$$iC_I = 2T^{-1}C_V. \quad (4.45)$$

Por lo tanto, la función de onda para la región I es

$$\psi_I(z_1) = \frac{C_V}{(-z_1)^{1/4}} \left\{ 2T^{-1} \sin \left[\frac{2}{3}(-z_1)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] + \frac{i}{2}T \cos \left[\frac{2}{3}(-z_1)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] \right\} \quad (4.46)$$

Es conveniente volver a escribir 4.46 en forma de exponenciales

$$\begin{aligned} \psi_I(z_1) = \frac{C_V}{i(-z_1)^{1/4}} & \left\{ \left(T^{-1} - \frac{1}{4}T \right) \exp i \left[-\frac{2}{3}(-z_1)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] \right. \\ & \left. - \left(T^{-1} + \frac{1}{4}T \right) \exp i \left[\frac{2}{3}(-z_1)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

El primer término en 4.47 es una onda que viaja hacia la izquierda y por lo tanto representa la onda reflejada, mientras el segundo término representa la onda incidente, que viaja hacia la derecha.

Por otro lado, el coeficiente de reflexión R se define como la razón de la amplitud de onda reflejada e incidente:

$$|R| = \frac{1 - \frac{T^2}{4}}{1 + \frac{T^2}{4}}. \quad (4.48)$$

El coeficiente de transmisión es la razón de la amplitud de onda transmitida e incidente, entonces de los resultados 4.30 y 4.47 se encuentra

$$|\text{Coef. de Trans.}| = \frac{T}{1 + \frac{T^2}{4}} \quad (4.49)$$

Esto es consistente con el error de la aproximación WKB -ecuación 4.39 - si se desprecian potencias de T superiores a la primera, así que

$$|\text{Coef. de Trans.}| \sim T = \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[V(x') - E]} dx' \right) \quad (T \ll 1). \quad (4.50)$$

Parte II

CUANTIZACIÓN DE SUPERFICIES LAGRANGIANAS Y ÓRBITAS PERIÓDICAS

Capítulo 5

FUNCIÓN DE ONDA SEMICLÁSICA.

¹ En este capítulo, se obtiene la función de onda en el límite semiclásico (función de onda semiclásica) y se introduce siguiendo dos caminos, uno de los cuales resulta bastante ilustrativo. Por un lado se deduce la función de onda general en la representación coordenada, en la que se supone una amplitud función de la posición y del tiempo y una fase (función) con dependencia explícita de la posición y del tiempo [5]. A continuación se considera su desarrollo temporal, dado por la ecuación de Schrödinger.

Por otro lado, siguiendo un camino geométrico que permite visualizar el desarrollo temporal de estados cuánticos bajo condiciones semiclásicas [6]. Aquí se supone que el estado cuántico inicial corresponde a una curva de puntos en el espacio fase. En otras palabras, se considera una familia de estados cuánticos, cada uno correspondiendo a una familia de órbitas clásicas. Después se considera la evolución de estas superficies que se mueven de acuerdo a la dinámica gobernada por los sistemas Hamiltonianos [7]. En cualesquiera de los dos casos se encontrará que los estados estacionarios cuánticos corresponden a un toro invariante de sistemas integrables clásicos y la evolución temporal de una superficie lagrangiana corresponde a un estado no estacionario.

¹[5, 6, 7, 8, 2, 3]

5.1. Onda semiclásica (primer método).

Se supone la función de onda en la representación de las coordenadas $\langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle$ generada por el Hamiltoniano $\widehat{H}(\widehat{\mathbf{p}}, \mathbf{q})$. La evolución de esta función de onda la determina la ecuación de Schrödinger, es decir

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle = \widehat{H}(\widehat{\mathbf{p}}, \mathbf{q}) \langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle \quad (5.1)$$

donde $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}$ es el operador de momento. El caso más simple es el de una partícula libre, para la cual

$$\widehat{H}(\widehat{\mathbf{p}}, \mathbf{q}) = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m}. \quad (5.2)$$

Con este Hamiltoniano la ecuación de Schrödinger 5.1 toma la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle = i\hbar \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{q}^2} \langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle. \quad (5.3)$$

Las soluciones son ondas planas tales que

$$\langle \mathbf{q} | \psi_{\mathbf{p}}(t) \rangle = \exp \{ i\hbar^{-1} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} - Et) \}, \quad (5.4)$$

donde $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$, es la energía de la partícula. Esta función de onda de la partícula libre es eigenestado del operador momento, es decir

$$\widehat{\mathbf{p}} \langle \mathbf{q} | \psi_{\mathbf{p}}(t) \rangle = \mathbf{p} \langle \mathbf{q} | \psi_{\mathbf{p}}(t) \rangle, \quad (5.5)$$

y la longitud de onda $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{|\mathbf{p}|} \rightarrow 0$, cuando $\hbar \rightarrow 0$ para \mathbf{p} fijo.

En seguida se considera una Hamiltoniana clásica general $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ en la vecindad de la coordenada $\mathbf{q} = \mathbf{q}_0$. El error por aproximar esta Hamiltoniana por $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}_0)$ se hace arbitrariamente pequeño cuando esta vecindad se reduce. Sin embargo, ésta contiene muchas longitudes de onda de las correspondientes soluciones de onda plana de la ecuación de Schrödinger en el límite $\hbar \rightarrow 0$. De esta forma, para obtener el límite semiclásico de una función de onda general se divide la hamiltoniana en j pasos, centrado en la coordenada \mathbf{q}_j donde $H = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}_j)$. Las soluciones a la ecuación de Schrödinger correspondientes serán ondas planas con $\mathbf{p} = \mathbf{p}_j$, tal que $H(\mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j) = E$, es una constante. En el límite $j \rightarrow \infty$, se obtiene una función de onda donde el

exponente no es mucho tiempo lineal en \mathbf{q} y en el que la amplitud es ahora función de \mathbf{q} . De esta forma se introduce la solución de prueba

$$\langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle = A(\mathbf{q}, t) \exp [i\hbar^{-1} \sigma(\mathbf{q}, t)] \quad (5.6)$$

dentro de la ecuación de Schrödinger 5.1. Entonces resulta

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A(\mathbf{q}, t) \exp [i\hbar^{-1} \sigma(\mathbf{q}, t)] = \hat{H}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{q}) A(\mathbf{q}, t) \exp [i\hbar^{-1} \sigma(\mathbf{q}, t)]$$

de lo que se sigue

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{\partial A(\mathbf{q}, t)}{\partial t} - A(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \sigma(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \\ & \exp [-i\hbar^{-1} \sigma(\mathbf{q}, t)] \hat{H}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{q}) \exp [i\hbar^{-1} \sigma(\mathbf{q}, t)] A(\mathbf{q}, t) \end{aligned} \quad (5.7)$$

Conviene, para seguir el cálculo, analizar por separado el lado derecho de la ec. 5.7, es decir el término

$$\exp [-i\hbar^{-1} \sigma(\mathbf{q}, t)] \left\{ \hat{H}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{q}) A(\mathbf{q}, t) \exp [i\hbar^{-1} \sigma(\mathbf{q}, t)] \right\}. \quad (5.8)$$

El Hamiltoniano \hat{H} es función del operador $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}$ y las variables \mathbf{q} y opera sobre A y σ que dependen a su vez de \mathbf{q} y no involucran a la constante \hbar . Para una situación como la presente, J. H. Van Vleck en 1928 [8] encuentra y demuestra el siguiente resultado:

Lemma 1 Si $f\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{q}}}, \hat{\mathbf{q}}\right)$ es alguna función del operador $i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{q}}}$ y las variables q_k ($k = 1, \dots, n$) que tienen simetría hermitiana, y si S y G son dos funciones de las q 's que no envuelven a la constante \hbar , entonces

$$\begin{aligned} & f\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{q}}}, \hat{\mathbf{q}}\right) \left(G \exp\left(\frac{-iS}{\hbar}\right) \right) = \\ & \exp\left(\frac{-iS}{\hbar}\right) \left\{ G f\left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}}, \mathbf{q}\right) + i\hbar \sum_{k=1}^n \left(f'_k \frac{\partial G}{\partial q_k} + \frac{1}{2} G \frac{\partial f'_k}{\partial q_k} \right) \right\} + \dots \end{aligned} \quad (5.9)$$

donde los términos que se desprecian son proporcionales a la segunda potencia y potencias superiores de \hbar , y donde f'_k es la abreviación de la derivada $\partial f / \partial (\partial S / \partial q_k)$ de $f(\partial S / \partial \mathbf{q}; \mathbf{q})$ con respecto al argumento $\partial S / \partial q_k$.

Ahora, si en 5.9 se toma $f = H$, $G = A$ y $S = -\sigma$ se encuentra que

$$H\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{\mathbf{q}}},\hat{\mathbf{q}}\right)\left\{Ae^{[\frac{i}{\hbar}\sigma(\mathbf{q},t)]}\right\}=e^{[\frac{i}{\hbar}\sigma(\mathbf{q},t)]}\left\{A(\mathbf{q},t)H\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\hat{\mathbf{q}}},\hat{\mathbf{q}}\right)-i\hbar\sum_{k=1}^n\left(H'_k\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)\frac{\partial A(\mathbf{q},t)}{\partial q_k}+\frac{A(\mathbf{q},t)}{2}\frac{\partial H'_k\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)}{\partial q_k}\right)\right\}+\dots\quad(5.10)$$

Si ahora se sustituye 5.10 en 5.8 se encuentra, a primer orden en \hbar ,

$$A(\mathbf{q},t)H\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)-i\hbar\sum_{k=1}^n\left(H'_k\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)\frac{\partial A(\mathbf{q},t)}{\partial q_k}+\frac{1}{2}A(\mathbf{q},t)\frac{\partial H'_k\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)}{\partial q_k}\right)\quad(5.11)$$

la cual se sustituye en 5.7 para obtener

$$-A(\mathbf{q},t)\frac{\partial\sigma(\mathbf{q},t)}{\partial t}+i\hbar\frac{\partial A(\mathbf{q},t)}{\partial t}=A(\mathbf{q},t)H\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)-i\hbar\sum_{k=1}^n\left(H'_k\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)\frac{\partial A(\mathbf{q},t)}{\partial q_k}+\frac{1}{2}A(\mathbf{q},t)\frac{\partial H'_k\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)}{\partial q_k}\right).\quad(5.12)$$

Igualando parte real con parte real resulta la ecuación

$$-A(\mathbf{q},t)\frac{\partial\sigma(\mathbf{q},t)}{\partial t}=A(\mathbf{q},t)H\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)$$

o equivalentemente

$$H\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)+\frac{\partial\sigma(\mathbf{q},t)}{\partial t}=0\quad(5.13)$$

que es la ecuación de Hamilton-Jacobi de la mecánica clásica [7]. Por otro lado, de igualar las partes imaginarias de la ec. 5.12 se encuentra

$$\frac{\partial A(\mathbf{q},t)}{\partial t}=-\sum_{k=1}^n\left[H'_k\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)\frac{\partial A(\mathbf{q},t)}{\partial q_k}+\frac{1}{2}A(\mathbf{q},t)\frac{\partial H'_k\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{q}},\mathbf{q}\right)}{\partial q_k}\right].\quad(5.14)$$

Al resolver las ecuaciones 5.13 y 5.14 se obtienen las expresiones para σ y A . Una vez que se cuenta con ellas, se sustituyen en 5.6 que es la función de onda semiclásica buscada. Para esto, se regresa a la ec. 5.13. Como se dijo antes, ésta es la ecuación clásica de Hamilton-Jacobi. La solución de ésta suele representarse por S y recibe el nombre de función principal de Hamilton, entonces

$$\sigma \equiv S = S(\mathbf{q}, t).$$

Tomando la derivada total respecto al tiempo de S se encuentra

$$\frac{dS(\mathbf{q}, t)}{dt} = \frac{\partial S(\mathbf{q}, t)}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial S(\mathbf{q}, t)}{\partial t}. \quad (5.15)$$

Considerando 5.13 y la transformación canónica

$$\mathbf{p}(\mathbf{q}, t) = \frac{\partial S(\mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{q}}, \quad (5.16)$$

$\frac{dS(\mathbf{q}, t)}{dt}$ se puede escribir como

$$\frac{dS(\mathbf{q}, t)}{dt} = \mathbf{p}(\mathbf{q}, t) \cdot \dot{\mathbf{q}} - H = L, \quad (5.17)$$

por lo que la función principal de Hamilton diferirá a lo más en una constante de la integral definida de la Lagrangiana según el tiempo;

$$S = \int L dt + \text{constante}. \quad (5.18)$$

Estas soluciones S son superficies (superficies Lagrangianas) cuya evolución, en el espacio fase, está dada por la ec. 5.16. Pero se definió $\sigma \equiv S$, entonces se encuentra que la evolución en el espacio fase corresponde a la evolución semiclásica de $\langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle$.

Para determinar la amplitud de la función de onda se usa la ec. 5.14 y se resuelve para $A(\mathbf{q}, t)$ [ver J. H. Van Vleck (1928)]. De manera más directa se puede hacer mediante el siguiente argumento:

Se considera que la función $S = \sigma(\mathbf{q}, \mathbf{I}; t)$ genera una transformación canónica, definida por

$$\frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} = \mathbf{p}, \quad \frac{\partial S}{\partial \mathbf{I}} = \phi. \quad (5.19)$$

En el límite semiclásico \mathbf{I} y ϕ corresponden a variables cuánticas $\widehat{\mathbf{I}}$ y $\widehat{\phi}$ con conmutadores

$$\left[\widehat{I}_i, \widehat{I}_j\right] = \left[\widehat{\phi}_i, \widehat{\phi}_j\right] = 0, \quad \left[\widehat{\phi}_i, \widehat{I}_j\right] = i\hbar. \quad (5.20)$$

Pero \mathbf{I} es una constante de movimiento. Así que en la representación de las ϕ la función de onda $\langle\phi|\psi_I\rangle$ debe tener una amplitud constante [2, 3]. Por la conservación de probabilidad bajo un cambio de variables,

$$|\langle\phi|\psi_I\rangle|^2 d\phi = |\langle\mathbf{q}|\psi_I(t)\rangle|^2 dq, \quad (5.21)$$

y así se obtiene

$$A^2 = |\psi_I(q)|^2 \propto \left|\det \frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{q}}\right| = \left|\det \frac{\partial^2 S}{\partial\mathbf{q}\partial\mathbf{I}}\right|. \quad (5.22)$$

Por lo tanto, la función de onda semiclásica tiene la forma

$$\langle\mathbf{q}|\psi_I(t)\rangle = C \left|\det \frac{\partial^2 S(\mathbf{q}, \mathbf{I}, t)}{\partial\mathbf{q}\partial\mathbf{I}}\right|^{1/2} \exp\{i\hbar^{-1}S(\mathbf{q}, \mathbf{I}, t)\}. \quad (5.23)$$

Resulta importante analizar la función de onda estacionaria. Bajo estas circunstancias, la función de la acción adopta la forma

$$S(\mathbf{q}, \mathbf{I}) = \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} \mathbf{p}_I(\mathbf{q}) \cdot d\mathbf{q}. \quad (5.24)$$

Generalmente el toro n-dimensional interseca transversalmente al plano de n dimensiones, con \mathbf{q} constante, en puntos diferentes dentro del espacio fase 2n-dimensional. La función S es, por lo tanto, multivaluada.

Por ello, los toros (superficies Lagrangianas invariantes) están especificados por la acción multivaluada $S_j(\mathbf{q})$. No obstante, cada una de las acciones satisface la ecuación de Hamilton-Jacobi estacionaria

$$H\left(\frac{\partial S(\mathbf{q})}{\partial\mathbf{q}}, \mathbf{q}\right) = E. \quad (5.25)$$

Por lo tanto, la solución correspondiente de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo está dada por el principio de superposición como:

$$\langle\mathbf{q}|\psi_I(t)\rangle = C \sum_j \left|\det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q})}{\partial\mathbf{q}\partial\mathbf{I}}\right|^{1/2} \exp\{i\hbar^{-1}S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I}) + i\alpha_j\} \quad (5.26)$$

donde α_j es una constante de fase. El problema con esta función de onda 5.26 es que diverge en ciertos puntos llamados cústicas, es decir, en los puntos donde se tiene

$$\det \frac{d\mathbf{p}}{d\mathbf{q}} = \infty. \quad (5.27)$$

Una manera de evitar estas singularidades de la función de onda es usar la representación del momento². La función de onda semiclásica es entonces

$$\langle \mathbf{p} | \psi_I(t) \rangle = C \sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} \exp \{ i \hbar^{-1} S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I}, t) + i \beta_j \}, \quad (5.28)$$

con la acción

$$S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I}) = \int_{\mathbf{p}_0}^{\mathbf{p}} \mathbf{q}_j(\mathbf{p}) \cdot d\mathbf{p} \quad (5.29)$$

que es la transformada de Legendre de $S_j(\mathbf{q})$.

5.2. Onda semiclásica (segundo método).

Cuando $t = 0$ el estado cuántico inicial $\psi(\mathbf{q}, 0; \mathcal{P}^*)$ puede tomarse como una curva $\mathcal{C}_0(\mathcal{P}^*)$ en el espacio fase \mathbf{p}, \mathbf{q} [6]. Entonces $\mathcal{C}_0(\mathcal{P})$ está definido por

$$\mathcal{C}_0(\mathcal{P}) : F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, 0; \mathcal{P}) = 0, \quad (5.30)$$

donde F es una familia de funciones de \mathbf{q} y \mathbf{p} . Es decir, se liga a ψ y \mathcal{C} a familias parametrizadas por \mathcal{P} (figura 5.1).

Al hacer la elección particular 5.30, ésta queda determinada por la distribución asumida de puntos clásicos a lo largo de curvas $\mathcal{C}(\mathcal{P})$ como sigue: Q es una coordenada a lo largo de \mathcal{C} (figura 5.1), elegida de forma que los puntos clásicos en $\mathcal{C}(\mathcal{P})$ estén uniformemente distribuidos en Q ; entonces, Q puede considerarse como una nueva coordenada canónica en el espacio fase, y el parámetro \mathcal{P} puede ser tomado como el momento conjugado. El generador de esta transformación es la función de acción $S_0(\mathbf{q}; \mathcal{P})$, que satisface las relaciones

$$\mathbf{p} = \frac{\partial S_0}{\partial \mathbf{q}}, \quad Q = \frac{\partial S_0}{\partial \mathcal{P}}. \quad (5.31)$$

Por otra parte, contribuciones a las funciones de onda semiclásica $\psi(\mathbf{q}, 0; \mathcal{P}^*)$ surgen cuando la línea con \mathbf{q} constante interseca a $\mathcal{C}_0(\mathcal{P}^*)$. Se

²En el siguiente capítulo de hará un estudio de las cústicas

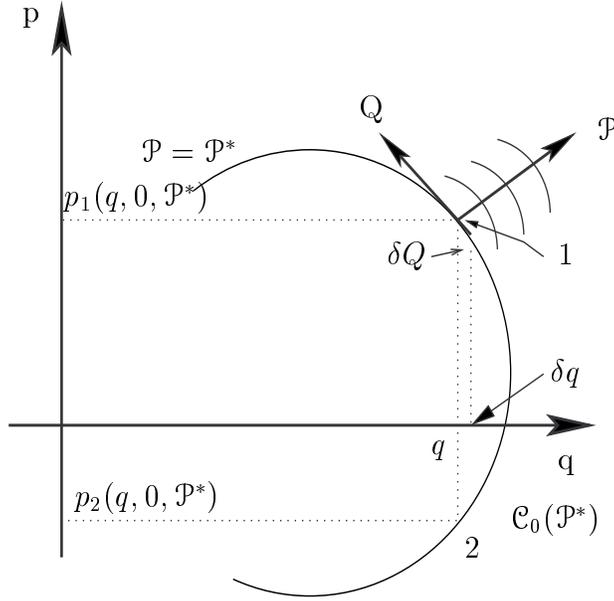


Figura 5.1: Geometría relacionada a familias de curvas parametrizadas por \mathcal{P}

etiquetan estas intersecciones por un índice y se denota por ψ_j a la contribución de la j -ésima intersección a ψ . Salvo una constante ϕ_j , la fase de ψ_j es simplemente \hbar^{-1} veces la acción

$$S_{0j}(\mathbf{q}, \mathcal{P}^*) = \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} p_j(\mathbf{q}', 0; \mathcal{P}^*) d\mathbf{q}', \quad (5.32)$$

donde $p_j(\mathbf{q}, 0; \mathcal{P}^*)$ denota la j -ésima rama (figura 5.1) de la función inversa correspondiente a 5.30, es decir, expresando \mathbf{p} en términos de \mathbf{q} a lo largo de la curva $\mathcal{C}_0(\mathcal{P}^*)$, y \mathbf{q}_0 es una constante.

El módulo $|\psi_j|$ se obtiene en términos de los puntos resultantes de la proyección de segmentos dQ_j de \mathcal{C} sobre el segmento $d\mathbf{q}$ (figura 5.1), usando el hecho de que la densidad de puntos a lo largo de \mathcal{C} es uniforme en Q . Entonces:

$$I_0 dQ_j = |\psi_j(\mathbf{q}, 0; \mathcal{P}^*)|^2 d\mathbf{q} \quad (5.33)$$

o equivalentemente

$$|\psi_j|^2 = I_0 \frac{dQ_j}{d\mathbf{q}} = I_0 \left(\frac{\partial S_{0j}(\mathbf{q}, \mathcal{P}^*)}{\partial \mathbf{q} \partial \mathcal{P}} \right)_{\mathcal{P}=\mathcal{P}^*}, \quad (5.34)$$

donde I_0 es una constante y además se usó la segunda ecuación de 5.31. Combinando estos resultados, la función de onda semiclásica inicial es

$$\psi(\mathbf{q}, 0; \mathcal{P}^*) = \sum_j \left| I_0 \left(\frac{\partial S_{0j}(\mathbf{q}, \mathcal{P}^*)}{\partial \mathbf{q} \partial \mathcal{P}} \right) \right|_{\mathcal{P}=\mathcal{P}^*}^{1/2} \exp [i\hbar^{-1} S_0(\mathbf{q}, \mathcal{P}^*) + i\theta_j]. \quad (5.35)$$

Las curvas \mathcal{C} (que no cambian con el tiempo) son justamente las curvas de nivel $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E$. En este sentido, la energía puede ser el parámetro \mathcal{P} de la ecuación 5.30; alternativamente, ese papel podría ser jugado por la variable de acción

$$I = \mathcal{P}(E) = \frac{1}{2\pi} \oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{q} d\mathbf{p} \Theta(E - H(\mathbf{q}, \mathbf{p})), \quad (5.36)$$

donde Θ denota la función escalón unidad. La acción $\mathcal{P}(E)$ es $1/2\pi$ veces el área encerrada por la curva \mathcal{C} que corresponde a E . Cuando $\mathcal{P}(E)$ y no E es el parámetro, la coordenada Q conjugada a \mathcal{P} es la variable ángulo y puntos distribuidos alrededor de \mathcal{C} de modo uniforme en Q permanece para tiempos posteriores (es decir, Q da la medida invariante en \mathcal{C}), y la correspondiente función de onda semiclásica 5.35 representa un estado estacionario [6].

Por otra parte, cada punto \mathbf{q}, \mathbf{p} en la curva inicial $\mathcal{C}(\mathcal{P}^*)$, se mueve de acuerdo a la dinámica gobernada por los sistemas Hamiltonianos $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, así que en el tiempo t la curva inicial tiene evolución $\mathcal{C}_t(\mathcal{P}^*)$ (figura 5.2), la cuál esta ligada a la familia parametrizada por \mathcal{P} y definida como

$$\mathcal{C}_t(\mathcal{P}) : F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t; \mathcal{P}) = 0, \quad (5.37)$$

donde $F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t; \mathcal{P})$ se desarrolla a partir de $F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, 0; \mathcal{P})$ por la acción de $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$. La pregunta ahora es: ¿Puede la función de onda semiclásica $\psi(\mathbf{q}, t; \mathcal{P}^*)$ expresarse en términos de las curvas $\mathcal{C}_t(\mathcal{P})$?

Para dar respuesta a esta pregunta, se empieza por escribir la ecuación de Schrödinger que ψ debe satisfacer:

$$H\left(\mathbf{q}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}, t\right) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (5.38)$$

Previamente se encontró una solución semiclásica mostrando que ψ está hecha de contribuciones de ψ_j donde la fase es \hbar^{-1} veces la solución de la

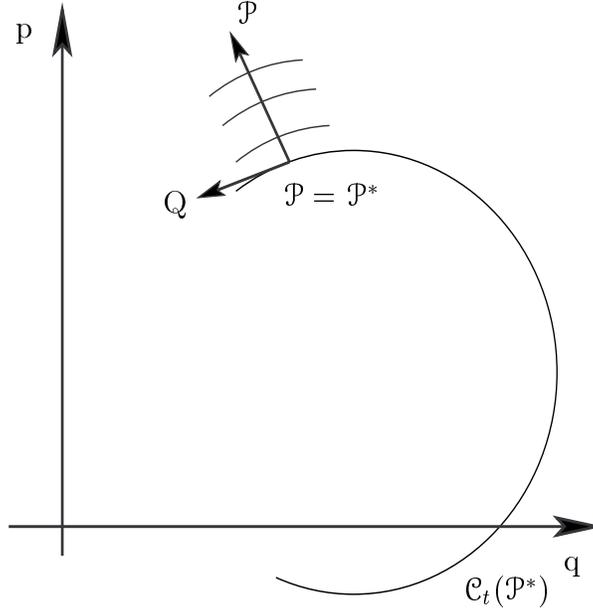


Figura 5.2: Evolución de la curvas parametrizadas por $\mathcal{C}_t(\mathcal{P}^*)$

ecuación de Hamilton-Jacobi. Es conveniente trabajar con una familia de soluciones que contenga el parámetro \mathcal{P} , es decir $S(\mathbf{q}, t; \mathcal{P})$. Entonces la ecuación de Hamilton-Jacobi es

$$H\left(\mathbf{q}, \frac{\partial S(\mathbf{q}, t; \mathcal{P})}{\partial \mathbf{q}}, t\right) = -\frac{\partial S(\mathbf{q}, t; \mathcal{P})}{\partial t}. \quad (5.39)$$

Por otro lado, el módulo $|\psi_j|^2$ se puede expresar en términos de S como (ec. 5.22)

$$|\psi|^2 = cte \times \frac{\partial^2 S(\mathbf{q}, t; \mathcal{P})}{\partial \mathbf{q} \partial \mathcal{P}}. \quad (5.40)$$

Por lo que la función de onda semiclassical adopta la forma

$$\psi(\mathbf{q}, t; \mathcal{P}^*) = \sum_j \left| I_0 \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q}, t; \mathcal{P}^*)}{\partial \mathbf{q} \partial \mathcal{P}^*} \right|^{1/2} \exp \left[i \left(\phi_j + \frac{S_j(\mathbf{q}, t; \mathcal{P}^*)}{\hbar} \right) \right], \quad (5.41)$$

donde S_j son las ramas de la solución de 5.39 con valor inicial

$$S_j(\mathbf{q}, 0; \mathcal{P}) = S_{j0}(\mathbf{q}; \mathcal{P}) = \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} p_j(\mathbf{q}', 0; \mathcal{P}) d\mathbf{q}'. \quad (5.42)$$

Resta mostrar cómo S depende de las curvas $\mathcal{C}_t(\mathcal{P})$.

La solución resultante de la ecuación de Hamilton-Jacobi que satisface la condición inicial es

$$S(\mathbf{q}, t; \mathcal{P}) = S_0(\mathbf{q}'(0; \mathbf{q}, t, \mathcal{P}); \mathcal{P}) + \int_0^t dt' L\left(\mathbf{q}'(t'; \mathbf{q}, t, \mathcal{P}), \frac{\partial \mathbf{q}'(t'; \mathbf{q}, t, \mathcal{P})}{\partial t'}, t'\right) \quad (5.43)$$

donde $L\left(\mathbf{q}', \frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial t'}, t'\right)$ denota la Lagrangiana. Una expresión mucho más simple para S (ya que 5.43 envuelve todas las trayectorias sobre el tiempo de 0 a t) es

$$S_j(\mathbf{q}, t; \mathcal{P}) = \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} p_j(\mathbf{q}', t; \mathcal{P}) d\mathbf{q}' - \int_0^t dt' H(\mathbf{q}_0, p_j(\mathbf{q}'_0, t'; \mathcal{P}), t'), \quad (5.44)$$

donde $p_j(\mathbf{q}', t; \mathcal{P})$ denota la j -ésima rama de la función inversa de 5.37 -es decir, aquella en donde se expresa \mathbf{p} en términos de \mathbf{q} a lo largo de la curva $\mathcal{C}_t(\mathcal{P})$ - y \mathbf{q}_0 es la constante que aparece en la expresión 5.32. En la ecuación 5.44, el primer término depende sólo de la curva final $\mathcal{C}_t(\mathcal{P})$ y el segundo término, contiene la dependencia temporal de H en la coordenada fija \mathbf{q}_0 de la curva correspondiente \mathcal{C} .

La expresión 5.44 satisface la condición de frontera 5.42. Ahora, se muestra que satisface la ecuación de Hamilton-Jacobi 5.39. Por simplicidad se omite el subíndice j y el parámetro \mathcal{P} . Entonces se tiene

$$\frac{\partial S(\mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{q}} = \mathbf{p}(\mathbf{q}, t), \quad (5.45)$$

como tenía que ser. Después se calcula la derivada temporal

$$-\frac{\partial S(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = -\int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} \frac{\partial \mathbf{p}(\mathbf{q}', t)}{\partial t} d\mathbf{q}' + H(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}(\mathbf{q}_0, t), t). \quad (5.46)$$

Se considera ahora

$$\frac{\partial \mathbf{p}(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} - \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t}, \quad (5.47)$$

donde $d\mathbf{q}/dt$ y $d\mathbf{p}/dt$ denotan la razón de cambio a lo largo de trayectorias que pasan por \mathbf{q} y \mathbf{p} en t y $\partial \mathbf{p}/\partial t$ denota la pendiente de $\mathcal{C}_t(\mathcal{P})$ en \mathbf{q} . La geometría de esta derivada se muestra en la figura 5.3, de la cuál 5.47 resulta evidente. Usando las ecuaciones de Hamilton se obtiene

$$\frac{\partial \mathbf{p}(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p}(\mathbf{q}(t)), t)}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p}(\mathbf{q}, t), t)}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{dH(\mathbf{q}, \mathbf{p}(\mathbf{q}, t), t)}{d\mathbf{q}}. \quad (5.48)$$

Capítulo 6

CÁUSTICAS.

¹ En este capítulo se introduce el concepto de cáusticas, esto es, singularidades en la proyección de superficies invariantes. A continuación, se discutirá un método sencillo para evitar estas singularidades conocido como el método de Maslov [9]. Se verá que esto implica un cambio de representación de la función de onda semiclásica 5.26 y, el usar la transformada de Legendre, permite expresar esta función como una suma de integrales con argumentos que oscilan y que tienen buen comportamiento en las cáusticas. Por último, el método de fase estacionaria es usado para evaluar dichas integrales.

6.1. Cáusticas \mathbf{q} .

Se demostró, en el capítulo anterior, que cuando $t = 0$ un estado cuántico inicial puede tomarse como una curva en el espacio fase \mathbf{q}, \mathbf{p} . Entonces, se considera una curva en el espacio fase 2-dimensional (figura 6.1). Esto muestra que la función $\mathbf{p}(\mathbf{q})$ es multivaluada. Por otro lado, se tiene que la acción está dada por

$$S(\mathbf{q}) = \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} \mathbf{p}(\mathbf{q}) d\mathbf{q} \quad (6.1)$$

y, por lo tanto, resulta ser una función multivaluada. Debido a esto², se invocó el principio de superposición y se extendió la asociación (estado cuántico-curva) escribiendo $\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle$ como una suma de términos. Entonces

¹[9, 10, 11, 12, 5]

²Ver capítulo 5

se escribió

$$\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle = C \sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} \exp \{ i \hbar^{-1} S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I}) + i \alpha_j \}, \quad (6.2)$$

una para cada rama de $\mathbf{p}_j(\mathbf{q})$ - en la figura 6.1 se ve que las ramas son dos, con los valores $i = 1, 2$). Surgen en este punto dos problemas; primero, no es claro cómo se relacionan las fases de las diferentes contribuciones a la función de onda semiclásica, en otras palabras, cómo se unen las diferentes ramas de $S(\mathbf{q})$ en las cústicas; segundo, $\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle$ dada por 6.2 se hace infinita en las cústicas. Sin embargo, es posible desarrollar caminos que permiten seguir adelante [10, 11, 12].

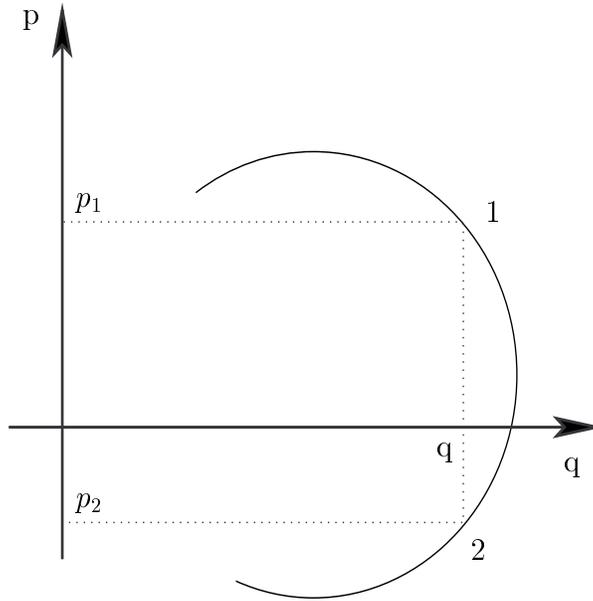


Figura 6.1: Multivaluación de \mathcal{P}

Las cústicas corresponden al conjunto de puntos en el espacio fase donde (figura 6.2)

$$\det \frac{d\mathbf{p}}{d\mathbf{q}} = \infty. \quad (6.3)$$

Por otra parte, la transformada de Legendre de la acción es [5]

$$S(\mathbf{p}) = \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} - S(\mathbf{q}), \quad (6.4)$$

donde $\mathbf{p}(\mathbf{q})$ esta dado por

$$\mathbf{p} = \frac{\partial S(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}}. \quad (6.5)$$

Para el caso con un grado de libertad, se puede hacer la construcción gráfica mostrada en la figura 6.3. La condición Lagrangiana en el toro invariante

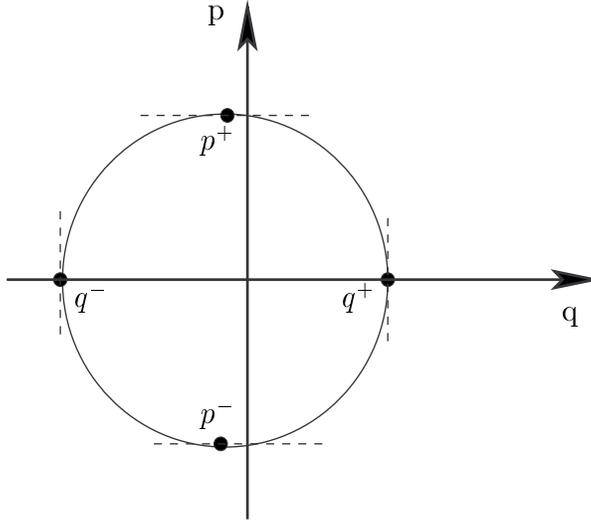


Figura 6.2: Cáusticas \mathbf{q}^+ y \mathbf{q}^-

implica

$$\oint \mathbf{q} \cdot d\mathbf{p} = - \oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = 0 \quad (6.6)$$

y por lo tanto,

$$S(\mathbf{p}) = \int_{\mathbf{p}_0}^{\mathbf{p}} \mathbf{q} \cdot d\mathbf{p} \quad (6.7)$$

que resulta la misma función de 6.4 salvo una constante aditiva. Esta función es multivaluada (fig. 6.2). Sin embargo, $S(\mathbf{p})$ es una función uno a uno en la vecindad de la cáustica de $S(\mathbf{q})$. Diferenciando 6.7 resulta

$$\mathbf{q} = \frac{\partial S(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad (6.8)$$

e invirtiendo 6.3, se obtiene la condición sobre las cáusticas \mathbf{p}

$$\det \left| \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{p}} \right| = \det \left| \frac{\partial^2 S(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{p}} \right| = 0. \quad (6.9)$$

La representación de la función de onda semiclásica en el espacio de momentos es

$$\langle \mathbf{p} | \psi_I \rangle = C \sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} \exp \{ -i\hbar^{-1} S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I}) + i\beta_j \} \quad (6.10)$$

con la acción $S(\mathbf{p})$ dada por 6.7, es decir

$$S_j(\mathbf{p}) = \int_{\mathbf{p}_0}^{\mathbf{p}} \mathbf{q}_j(\mathbf{p}) \cdot d\mathbf{p}.$$

Por supuesto, las funciones de onda semiclásicas $\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle$ y $\langle \mathbf{p} | \psi_I \rangle$ están re-

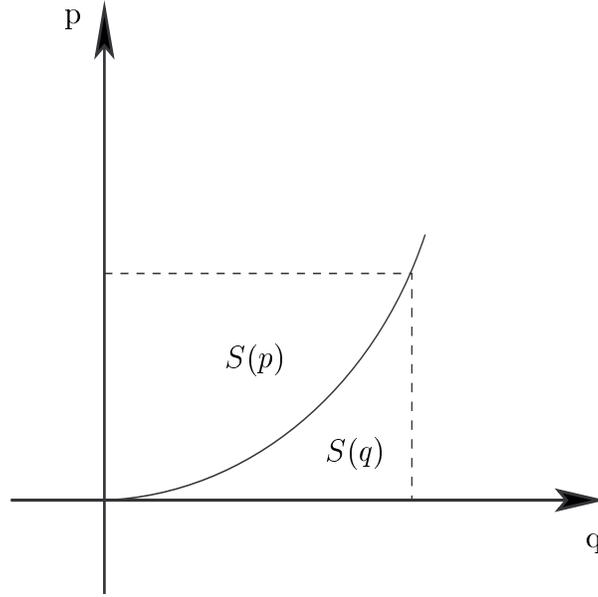


Figura 6.3: Construcción gráfica de la acción $S(\mathbf{p})$ dado $S(\mathbf{q})$

lacionadas por la transformada de Fourier

$$\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle = (2\pi\hbar)^{-L/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \langle \mathbf{p} | \psi_I \rangle \exp(i\hbar^{-1} \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}) \quad (6.11)$$

donde L indica los grados de libertad. De la sustitución de 6.10 en 6.11 resulta

$$\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle = (2\pi\hbar)^{-L/2} C \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} \exp \{ i\hbar^{-1} [\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} - S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})] + i\beta_j \} \quad (6.12)$$

lo que da $\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle$ en términos de integrales oscilatorias que se comportan bien en las cústicas de \mathbf{q} . Cuando \mathbf{q} no está cerca de una cústica, la integral 6.12 puede ser evaluada por el método de fase estacionaria (Apéndice C), porque cuando $\hbar \rightarrow 0$ el integrando es una función con oscilaciones rápidas de su variable \mathbf{p} . Este método da el resultado

$$(2\pi\hbar)^{-L/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} \exp \{ i\hbar^{-1} [\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} - S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})] + i\beta_j \} = \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \det^{-1} \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p}^2} \right|^{1/2} \exp \{ i\hbar^{-1} [\mathbf{p}_j(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q} - S_j(\mathbf{p}_j(\mathbf{q}), \mathbf{I})] + i\alpha_j \}. \quad (6.13)$$

Luego, la función de onda semiclásica es

$$\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle = \sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \det^{-1} \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p}^2} \right|^{1/2} \exp \{ i\hbar^{-1} [\mathbf{p}_j(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q} - S_j(\mathbf{p}_j(\mathbf{q}), \mathbf{I})] + i\alpha_j \} \quad (6.14)$$

y si se identifica la transformada de Legendre

$$\mathbf{p}_j(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q} - S_j(\mathbf{p}_j(\mathbf{q}), \mathbf{I}) = S_j(\mathbf{q}) \quad (6.15)$$

la expresión 6.14 se puede simplificar. Además, para la amplitud se tiene

$$\left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \det^{-1} \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p}^2} \right|^{1/2} = \left| \det \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{I}} \det^{-1} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{p}} \right|^{1/2} = \left| \det \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{I}} \det \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} \right|^{1/2} = \left| \det \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{I}} \right|^{1/2}$$

donde se usó la ec. 6.8. Si ahora se considera a la ec. 6.5 se encuentra finalmente para la amplitud

$$\left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \det^{-1} \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p}^2} \right|^{1/2} = \left| \det \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} = \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2}. \quad (6.16)$$

Por último, de la sustitución de las ecs. 6.15 y 6.16 en 6.14

$$\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle = \sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} \exp \{ -i\hbar^{-1} S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I}) + i\alpha_j \}. \quad (6.17)$$

Para lograr este resultado, se tomó la transformada de Fourier de $\langle \mathbf{p} | \psi_I \rangle$ en una región sin cústicas bajo la aproximación de fase estacionaria. La consistencia en la representación de coordenadas y momentos, donde las dos son no singulares, permite usar la definición de la función de onda $\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle$ cerca de una cústica por medio de la transformada de Fourier. Esta manera de evitar singularidades semiclásicas es conocida como el método de Maslov [9].

Capítulo 7

ÓRBITAS PERIÓDICAS.

¹ En este capítulo se encuentra la contribución de órbitas periódicas clásicas a la función de onda, usando el propagador semiclásico. Lo que aquí se muestra es un método para extraer información acerca de estados estacionarios de sistemas no integrables, considerando la manera de la propagación de Hamiltonianos de estados no estacionarios [5].

7.1. Estados estacionarios y el propagador.

En el apéndice B, se demuestra que el propagador de una función de onda semiclásica corresponde al movimiento de una superficie Lagrangiana clásica. Alternativamente, el propagador puede también tomarse como la representación coordenada $\langle \mathbf{q}' | \hat{U} | \mathbf{q} \rangle$ del operador de evolución

$$\hat{U}(t) = \exp\left(i\hbar^{-1}\hat{H}t\right). \quad (7.1)$$

Por otra parte, la evolución temporal de un estado $|\psi(t)\rangle$ está dado por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle \quad (7.2)$$

y tiene como solución formal, cuando \hat{H} no depende explícitamente del tiempo, la expresión

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(i\hbar^{-1}\hat{H}t\right)|\psi_0\rangle \quad (7.3)$$

¹[5, 2]

bajo la condición inicial

$$|\psi_0\rangle = |\psi(t=0)\rangle. \quad (7.4)$$

Introduciendo el operador de evolución 7.1 en 7.3 resulta

$$|\psi(t)\rangle = \widehat{U}(t) |\psi_0\rangle. \quad (7.5)$$

Así que el operador de evolución transforma el estado $|\psi_0\rangle$ al tiempo t_0 en el estado $|\psi(t)\rangle$ al tiempo t . Enseguida se desarrolla el estado inicial $|\psi_0\rangle$ en términos de los eigenestados $|\psi_k\rangle$ del Hamiltoniano

$$|\psi_0\rangle = \sum_k c_k |\psi_k\rangle, \quad c_k = \langle\psi_k|\psi_0\rangle, \quad (7.6)$$

en donde

$$\widehat{H} |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle \quad (7.7)$$

con lo que la ec. 7.5 se escribe como

$$|\psi(t)\rangle = \widehat{U}(t) \sum_k c_k |\psi_k\rangle. \quad (7.8)$$

Ahora se desarrolla el operador de evolución en serie de potencias del operador \widehat{H} [2], esto es

$$\begin{aligned} \widehat{U}(t) |\psi_k\rangle &= \exp\left(i\hbar^{-1}\widehat{H}t\right) |\psi_k\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}t\right)^n \widehat{H}^n |\psi_k\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}t\right)^n E_k^n |\psi_k\rangle = \exp(i\hbar^{-1}E_k t) |\psi_k\rangle \end{aligned} \quad (7.9)$$

por lo que la expresión 7.8 resulta ser igual a

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k \exp(i\hbar^{-1}E_k t) |\psi_k\rangle. \quad (7.10)$$

Sustituyendo c_k de la ec. 7.6, entonces 7.10 se convierte en

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k \langle\psi_k|\psi_0\rangle \exp(i\hbar^{-1}E_k t) |\psi_k\rangle \quad (7.11)$$

o equivalentemente

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k |\psi_k\rangle \langle\psi_k|\exp(i\hbar^{-1}E_k t)|\psi_0\rangle. \quad (7.12)$$

Comparando las ecs. 7.12 y 7.5 resulta claramente

$$\widehat{U}(t) = \sum_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \exp(i\hbar^{-1}E_k t) \quad (7.13)$$

el operador de evolución en la representación de la energía. Por otra parte, la representación coordenada de este operador es

$$\langle \mathbf{q}' | \widehat{U}(t) | \mathbf{q} \rangle = \sum_k \langle \mathbf{q}' | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \mathbf{q} \rangle \exp(i\hbar^{-1}E_k t) \quad (7.14)$$

que recibe el nombre del propagador. La importancia crucial de esta ecuación es que toma la suma sobre estados estacionarios desconocidos de la función de onda semiclásica.

Se puede invertir la ec. 7.14 tomando la transformada de Fourier. Sin embargo, esto implica que se conoce el propagador en el límite $t \rightarrow \pm\infty$ (puede suceder que la superficie Lagrangiana inicial se doble al evolucionar en el tiempo). Entonces, es conveniente multiplicar al propagador por una función sombrero (unidad cerca del origen mientras decae a cero para $t \rightarrow \pm\infty$) antes de tomar la transformada. Se define la transformada de Fourier para una familia de funciones pico $\Delta_\lambda(E)$ (que son la delta de Dirac δ en el límite $\lambda \rightarrow 0$) como

$$\Delta_\lambda(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_\lambda(E) \exp(-i\hbar^{-1}Et) \quad (7.15)$$

donde la anchura de la función sombrero $\Delta_\lambda(t)$ es \hbar/λ (como sería el caso para una familia de gaussianas). Luego la transformada de Fourier 7.14 es

$$\begin{aligned} (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \Delta_\lambda(t) \langle \mathbf{q}' | \widehat{U}(t) | \mathbf{q} \rangle \exp(i\hbar^{-1}Et) = \\ (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \Delta_\lambda(t) \sum_k \langle \mathbf{q}' | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \mathbf{q} \rangle \exp i\hbar^{-1}(E - E_k)t \end{aligned} \quad (7.16)$$

o equivalentemente

$$\begin{aligned} (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \Delta_\lambda(t) \langle \mathbf{q}' | \widehat{U}(t) | \mathbf{q} \rangle \exp(i\hbar^{-1}Et) = \\ \sum_k \langle \mathbf{q}' | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \mathbf{q} \rangle (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \Delta_\lambda(t) \exp [i\hbar^{-1}(E - E_k)t]. \end{aligned} \quad (7.17)$$

A partir de 7.15 se obtienen el siguiente par de ecuaciones, con el combi de variable: $(E - E_k)$

$$\Delta_\lambda(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_\lambda(E - E_k) \exp[-i\hbar^{-1}(E - E_k)t] \quad (7.18)$$

y

$$\delta_\lambda(E - E_k) = (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \Delta_\lambda(t) \exp[-i\hbar^{-1}(E - E_k)t]. \quad (7.19)$$

Por lo tanto 7.1 se transforma, considerando 7.19, en

$$\sum_k \delta_\lambda(E - E_k) \langle \mathbf{q}' | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \mathbf{q} \rangle. \quad (7.20)$$

De esta manera la transformada de 7.14 resulta ser igual a

$$(2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \Delta_\lambda(t) \langle \mathbf{q}' | \widehat{U}(t) | \mathbf{q} \rangle \exp(i\hbar^{-1}Et) = \sum_k \delta_\lambda(E - E_k) \langle \mathbf{q}' | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \mathbf{q} \rangle. \quad (7.21)$$

Si se elige $\lambda \sim \hbar$, entonces la anchura de la función sombrero \hbar/λ no diverge en el límite $\hbar \rightarrow 0$. Por lo tanto es posible usar sin problema el propagador semiclásico. Cada término en el lado derecho de 7.21 es la matriz de densidad, en la representación de las coordenadas, del estado puro $|\psi_k\rangle$.

Para el caso con $\mathbf{q}' = \mathbf{q}$, hay ondas intensas en el lado derecho de 7.21. El propagador resulta ser la suma de términos -una para cada órbita que sale del punto \mathbf{q} en $t = 0$ y regresa después de un tiempo t . A continuación se integra sobre el tiempo, incluyendo la órbita cero -esto es, la órbita en un punto \mathbf{q} para $t = 0$. Esta integral puede evaluarse porque cualquier órbita regresa a \mathbf{q} después de un tiempo finito t . Cuando $\mathbf{q}' \rightarrow \mathbf{q}$ se puede considerar que la función de Hamilton $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ depende sólo del momento. Por lo tanto, en la representación de momentos el propagador es

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}' | \widehat{U}(t) | \mathbf{p} \rangle &= \langle \mathbf{p}' | \exp(-i\hbar^{-1}t\widehat{H}(\mathbf{p})) | \mathbf{p} \rangle = \\ &= \exp\{-i\hbar^{-1}tH(\mathbf{p}, \mathbf{q})\} \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}), \end{aligned} \quad (7.22)$$

resultando que el propagador en el espacio de coordenadas de L dimensiones es la doble transformación de Fourier

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q}' | \widehat{U}(t \rightarrow 0) | \mathbf{q} \rangle &= (2\pi\hbar)^{-L} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} d\mathbf{p}' \langle \mathbf{p}' | \widehat{U}(t) | \mathbf{p} \rangle \exp\{-i\hbar^{-1}(\mathbf{p}'\mathbf{q}' - \mathbf{p}\mathbf{q})\} = \\ &= (2\pi\hbar)^{-L} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \exp\{-i\hbar^{-1}tH(\mathbf{p}, \mathbf{q})\} \exp\{-i\hbar^{-1}\mathbf{p} \cdot (\mathbf{q}' - \mathbf{q})\}. \end{aligned} \quad (7.23)$$

De la sustitución de 7.23 en 7.21, después de tomar $\mathbf{q}' = \mathbf{q}$, conduce a

$$(2\pi\hbar)^{-L} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \delta_{\lambda}(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})), \quad (7.24)$$

que es la contribución de la órbita cero. Se pueden eliminar todas las contribuciones de las otras órbitas que regresan a \mathbf{q} eligiendo $\hbar\lambda^{-1}$, el ancho de $\Delta_{\lambda}(t)$, más pequeño que el menor tiempo de regreso. Por consiguiente 7.21 es, para esta contribución

$$(2\pi\hbar)^{-L} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \delta_{\lambda}(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) = \sum_k \delta_{\lambda}(E - E_k) |\langle \mathbf{q} | \psi_k \rangle|^2. \quad (7.25)$$

Considérese, ahora, el propagador semiclásico (Apéndice B)

$$\langle \mathbf{q}' | \hat{U}(t) | \mathbf{q} \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q}', \mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}' \partial \mathbf{q}} \right|^{1/2} \exp \left\{ i\hbar^{-1} S_j(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t) - i\mu_j \frac{\pi}{2} \right\}. \quad (7.26)$$

La idea a continuación es usar este propagador directamente en la integral 7.21. Como la contribución de orbitas que regresan aparece sólo si el ancho de la función sombrero es $\hbar\lambda^{-1} \geq O(\hbar^0)$, se puede evaluar la integral por medio del método de la fase estacionaria (Apéndice C), donde se considera $\Delta_{\lambda}(t)$ parte de la amplitud. El tiempo estacionario es determinado por

$$E + \frac{\partial S}{\partial t}(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t) = E - H(\mathbf{p}(\mathbf{q}'), \mathbf{q}) = 0. \quad (7.27)$$

Luego, sustituyendo 7.26 en 7.21 da

$$(2\pi\hbar)^{-3/2} \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} dt \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q}', \mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}' \partial \mathbf{q}} \right|^{1/2} \Delta_{\lambda}(t) \exp \left\{ i\hbar^{-1} [Et + S_j(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t)] - i\mu_j \frac{\pi}{2} \right\}, \quad (7.28)$$

entonces la fase estacionaria puede ser

$$Et_E + S(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t_E) = W(\mathbf{q}', \mathbf{q}) \quad (7.29)$$

donde t_E es la solución de 7.27 y W es conocida como la función característica de Hamilton - W es el área simpléctica sustentada por la órbita que regresa y en ese sentido resulta ser igual a la acción reducida. Así que la integral es

$$C \left| \det \frac{\partial^2 S(\mathbf{q}', \mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}' \partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \right)^{-1} \right|^{1/2} \Delta_{\lambda}(t_E) \exp \left\{ i\hbar^{-1} W(\mathbf{q}', \mathbf{q}) \right\}. \quad (7.30)$$

Muchas de estas contribuciones oscilan rápidamente con \mathbf{q} . La fase de estas oscilaciones está dada por

$$\frac{dW}{d\mathbf{q}} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{q}'}(\mathbf{q}', \mathbf{q}) - \frac{\partial W}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}', \mathbf{q}) = \mathbf{p}'(\mathbf{q}) - \mathbf{p}(\mathbf{q}). \quad (7.31)$$

Por lo tanto, la condición para la fase de una órbita que regresa no sea muy oscilatoria es que el momento de regreso sea idéntico al momento inicial - sólo las órbitas estables dan contribución a la intensidad de la onda.

Capítulo 8

CONCLUSIÓN

La mecánica cuántica incluye en sí la mecánica clásica como un cierto caso límite (límite semiclásico $\hbar \rightarrow 0$). Partiendo de esta hipótesis, se encontró que del caso límite que representa la mecánica clásica corresponden en mecánica cuántica funciones de onda de la forma 2.9 o, equivalentemente, 5.9. Esta analogía condujo a que la fase de la función de onda, en el límite semiclásico, debe ser proporcional a la acción mecánica del sistema físico considerado: 2.22, 5.23, 5.26, 5.35 y 5.41. El coeficiente de proporcionalidad es la constante de Planck. Por lo tanto, el paso de la mecánica cuántica a la clásica, corresponde a grandes valores de la fase. Se estableció así, la forma límite de la función de onda.

En la primera parte, siguiendo el método WKB, se introdujo la función de onda – ec. 2.22-:

$$\psi_{WKB}(x) = \frac{C}{(2m[E - V(x)])^{1/4}} \exp \left\{ \pm i \hbar \int^x 2m[E - V(x')] dx' \right\} \quad \hbar \rightarrow 0,$$

para el caso particular del Hamiltoniano autónomo

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = E$$

Resulta evidente que la función ψ_{WKB} diverge en los puntos $E = V(x)$, donde tiene una amplitud de onda con denominador igual a cero mientras que la fase permanece finita. Se nota también que la función de onda cuenta con una exponencial que tiene argumento complejo si $E > V(x)$ y real para el caso contrario, es decir cuando $E < V(x)$. En otras palabras, se tiene una función de onda con comportamientos distintos dependiendo de si se está de

un lado u otro del punto $E = V(x)$. Luego estos puntos dividen la región clásicamente permitida y la región prohibida. Por ese motivo se les conoce como puntos de retorno clásicos. Sin embargo, para la mecánica cuántica no existe una restricción acerca de tales puntos. Como se sabe, se presenta el efecto túnel que es un resultado mecánico-cuántico sin contraparte clásica. Por lo tanto, si se pretende una descripción de la mecánica cuántica con la dinámica clásica, se deben encontrar métodos que permitan describir la función de onda independientemente de si se tiene $E > V(x)$ o $E < V(x)$.

Para el caso del pozo o barrera de potencial, (capítulo 3 y 4), resulta sumamente sencillo resolver esta situación: Se pidió, simplemente, que la función de energía potencial $V(x)$ fuera aproximadamente lineal en la vecindad de $E = V(x)$. Esto permitió expresar la ecuación de Schrodinger 2.1 como la ecuación de Airy, independientemente de si se trata del problema de pozo o barrera de potencial, ecs. 3.9 y 4.10 respectivamente. Luego, las condiciones de aplicabilidad, permitieron usar las formas asintóticas de la función de Airy. Para el caso del pozo, los resultados obtenidos proporcionan la condición que determina los niveles cuánticos de energía. Así si se considera 3.61, para un periodo completo, muestra que la fase de la función de onda dentro del pozo pasa de π en $x = x_1$ hasta $\pi(n + 3/4)$ en $x = x_2$, por lo que la función de onda tiene n ceros dentro de éste; en otras palabras, el número n de cuantización determina el número de nodos de la función de onda en esta región.

Para la barrera de potencial, se consiguió el resultado 4.50. Lo que muestra, en particular, que la transparencia de la barrera a una partícula depende fuertemente de la masa. Análogamente, para un potencial $V(x)$ dado, la transparencia de la barrera a una partícula también depende fuertemente de la energía E con que incide.

En la segunda parte se introdujo la función de onda considerando un Hamiltoniano autónomo. La estructura es esencialmente la misma de la obtenida por el método WKB. Lo diferente, es que este camino permite aclarar la idea acerca de la cuantización de superficies Lagrangianas. La función de onda resultante es ec. 5.26

$$\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle = C \sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} \exp \{ i \hbar^{-1} S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I}) + i \alpha_j \}$$

donde $S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I})$ satisface la ecuación de Hamilton-Jacobi estacionaria

$$H\left(\frac{\partial S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{q}}, \mathbf{q}\right) = E.$$

Es decir, se tiene un sistema clásico integrable, cuya solución es justamente S_j . Luego S_j es una variedad n -dimensional, con n igual a los grados de libertad. Por un importante teorema de topología, esta variedad tiene la misma forma que un toro n -dimensional [10, 13]. Es decir, cada trayectoria de la dinámica clásica yace dentro de un toro invariante. Por lo tanto, los toros invariantes corresponden a estados estacionarios. Si se considera la evolución de tales superficies S_j dada por $S(\mathbf{q}, t)$ se encontró que corresponde a la evolución de la función de onda

$$\langle \mathbf{q} | \psi_I(t) \rangle = C \sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I}, t)}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} \exp \{ i \hbar^{-1} S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I}, t) + i \alpha_j \}$$

Esto es, la evolución de superficies Lagrangianas corresponde a estados no estacionarios. Todo esto desde luego, en el límite semiclásico ($\hbar \rightarrow 0$). Es claro que también estas funciones de onda presentan el problema de contar con una amplitud infinita que corresponde a un cierto conjunto de puntos conocidos como las cústicas de la función de onda.

La clasificación de las cústicas depende de las dimensiones del espacio de configuraciones [5]. El caso simple es para un grado de libertad que presenta cústicas estables que reciben el nombre de puntos de retorno. Para dos grados de libertad se tienen curvas de dobles y puntos cúspides. El estudio de las cústicas esta englobado en la teoría de catastrofes con el teorema Thom como piedra angular, presentado por Poston y Stewart [14]. La presentación más elegante en el contexto de la dinámica Hamiltoniana es la de Arnold [10], quien extiende la clasificación de cústicas basado en lo que se conoce como formas normales.

En lugar de esta teoría se utilizó una representación de la función de onda que da el comportamiento correcto semiclásico a través de las cústicas. El método lo derivó Maslov [9, 15, 16]. Esencialmente, lo que se hizo es poner la función de onda $\langle \mathbf{q} | \psi \rangle$ como una integral de Fourier de $\langle \mathbf{p} | \psi \rangle$ y usar el hecho de que las cústicas en \mathbf{q} y en \mathbf{p} no ocurren simultáneamente. Finalmente con el método de fase estacionaria se pudo evaluar la integral y se consiguió así, la función de onda semiclásica 6.17. Así se tiene una forma de evitar las singularidades de la función de onda.

Por último, usando el propagador semiclásico B.4, se encontró la contribución de órbitas periódicas clásicas. Se demostró, que dicho propagador puede representarse por una suma de la amplitud de la función de onda estacionaria ec. 7.14. Tomando la traza del propagador se consiguió una fórmula para la densidad de estados puros 7.21. La expresión que da la contribución de las órbitas periódicas, con un periodo máximo de $\hbar\lambda^{-1}$, es la ec. 7.30. Integrando 7.30 sobre todo \mathbf{q} , se obtiene la contribución de toda órbita periódica a la densidad de estados arriba de un periodo de $\hbar\lambda^{-1}$.

Por otra parte, la cuantización de sistemas clásicos integrables depende explícitamente de los toros invariantes que hacen una foliación del espacio de fase. Luego, no se hace distinción en la teoría semiclásica si se encuentra el movimiento sobre un toro cuantizado periódico o cuasi-periódico. Una gran perturbación puede romper los toros con frecuencias inconmensurables, sobreviviendo sólo algunos invariantes. El límite semiclásico de estados estacionarios puede por lo tanto tener alguna relación con estas curvas invariantes. Es decir, esto abre la posibilidad del estudio del caos cuántico teniendo en cuenta la conexión con la mecánica clásica.

Apéndice A

ECUACIÓN DE AIRY

La ecuación de Airy es

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} - xy(x) = 0. \quad (\text{A.1})$$

Se propone como solución la siguiente función

$$y(x) = \sum_{j=0}^{\infty} A_j x^{j+\alpha}. \quad (\text{A.2})$$

Derivando esta última dos veces se encuentra

$$\frac{dy(x)}{dx} = \sum_{j=0}^{\infty} A_j (j + \alpha) x^{j+\alpha-1} \quad (\text{A.3})$$

y

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} = \sum_{j=0}^{\infty} A_j (j + \alpha) (j + \alpha - 1) x^{j+\alpha-2}. \quad (\text{A.4})$$

Sustituyendo los resultados, A.2 y A.4, en la ecuación de Airy A.1 se obtiene

$$\sum_{j=0}^{\infty} A_j (j + \alpha) (j + \alpha - 1) x^{j+\alpha-2} = \sum_{j=0}^{\infty} A_j x^{j+\alpha+1} \quad (\text{A.5})$$

o equivalentemente

$$\sum_{l=0}^{\infty} A_l (l + \alpha) (l + \alpha - 1) x^{l+\alpha-2} = \sum_{l=3}^{\infty} A_{l-3} x^{l+\alpha-2}. \quad (\text{A.6})$$

Es claro que esta última se debe cumplir término a término. Entonces, igualando

$$\begin{aligned}
 l = 0 : & & A_0 \alpha (\alpha - 1) &= 0 \\
 l = 1 : & & A_1 \alpha (\alpha + 1) &= 0 \\
 l = 2 : & & A_2 \alpha (\alpha + 2) (\alpha + 1) &= 0 \\
 l = 3 \rightarrow \infty : & & A_l (\alpha + l) (\alpha + l - 1) &= A_{l-3}.
 \end{aligned}$$

Es decir, resulta la ecuación

$$A_l = \frac{A_{l-3}}{(\alpha + l) (\alpha + l - 1)}. \quad (\text{A.7})$$

Ahora, considerando $l = 0$ se encuentra que $\alpha = 0$ o $\alpha = 1$. De cualquier modo, con $l = 1$ y $l = 2$, resulta

$$A_1 = A_2 = 0 \quad (\text{A.8})$$

en ambos casos. Luego las A_l brincan de 3 en 3. Con esta experiencia se propone:

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} B_k x^{3k}. \quad (\text{A.9})$$

donde $B_k = A_{3k}$. Luego las dos primeras derivadas con respecto a x son

$$\frac{dy(x)}{dx} = \sum_{k=0}^{\infty} 3k B_k x^{3k-1} \quad (\text{A.10})$$

y

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} = \sum_{k=0}^{\infty} 3k(3k-1) B_k x^{3k-2}. \quad (\text{A.11})$$

De la sustitución de las ecs. A.9 y A.11 en la ecuación de Airy se obtiene

$$\sum_{k=0}^{\infty} 3k(3k-1) B_k x^{3k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} B_k x^{3k+1} \quad (\text{A.12})$$

o convenientemente

$$\sum_{l=0}^{\infty} 3l(3l-1)B_l x^{3l-2} = \sum_{l=1}^{\infty} B_{l-1} x^{3l-2}. \quad (\text{A.13})$$

Comparando potencias de x

$$B_l 3l(3l-1) = B_{l-1}, \quad (\text{A.14})$$

es decir

$$B_l = \frac{B_{l-1}}{3l(3l-1)} \quad (\text{A.15})$$

Entonces una solución es

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} B_k x^{3k} \quad (\text{A.16})$$

con coeficientes de la forma dada por A.15.

La otra solución independiente resulta ser

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k x^{3k+1}. \quad (\text{A.17})$$

Procediendo como en el caso anterior, se deriva dos veces resultando

$$\frac{dy(x)}{dx} = \sum_{k=0}^{\infty} (3k+1) C_k x^{3k} \quad (\text{A.18})$$

y

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} = \sum_{k=0}^{\infty} 3k(3k+1) C_k x^{3k-1}. \quad (\text{A.19})$$

Sustituyendo en la ecuación de Airy, se encuentra

$$\sum_{l=0}^{\infty} 3l(3l+1) C_l x^{3l-1} = \sum_{l=1}^{\infty} C_{l-1} x^{3l-1}. \quad (\text{A.20})$$

Luego la solución particular es

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k x^{3k+1} \quad (\text{A.21})$$

con los coeficientes dados por

$$C_l = \frac{C_{l-1}}{3l(3l+1)}. \quad (\text{A.22})$$

¿Cómo son los coeficientes B_l dados por la ec. A.15? Considerando A.15, se ve que

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{B_0}{3 \cdot 2} = \frac{B_0}{3 \cdot \frac{2}{3} \cdot 3} \\ B_2 &= \frac{B_1}{6 \cdot 5} = \frac{B_0}{3 \cdot 6 \cdot \frac{5}{3} \cdot \frac{2}{3} \cdot 3^2} \\ B_3 &= \frac{B_2}{9 \cdot 8} = \frac{B_0}{3 \cdot 6 \cdot 9 \cdot \frac{8}{3} \cdot \frac{5}{3} \cdot \frac{2}{3} \cdot 3^3}. \end{aligned}$$

Entonces resulta claro el resultado

$$B_l = \frac{B_0}{3^{2l} l! \frac{2}{3} \left(\frac{2}{3} + 1\right) \left(\frac{2}{3} + 2\right) \dots \left(\frac{2}{3} + l - 1\right)}. \quad (\text{A.23})$$

De las funciones gamma, se conocen las siguientes igualdades

$$\Gamma(Z+1) = Z\Gamma(Z) \quad (\text{A.24})$$

$$\Gamma(Z+2) = (Z+1)Z\Gamma(Z) \quad (\text{A.25})$$

$$\Gamma(Z+2) = (Z+2)(Z+1)Z\Gamma(Z). \quad (\text{A.26})$$

De aquí, tomando $Z = \frac{2}{3}$ se encuentra

$$\frac{2}{3} \left(\frac{2}{3} + 1\right) \left(\frac{2}{3} + 2\right) \dots \left(\frac{2}{3} + l - 1\right) = \frac{\Gamma\left(\frac{2}{3} + l\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}. \quad (\text{A.27})$$

Por lo tanto A.23 se convierte en

$$B_l = \frac{B_0 \Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}{3^{2l} l! \Gamma\left(\frac{2}{3} + l\right)}. \quad (\text{A.28})$$

Puesto que B_0 y $\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)$ son constantes se pone simplemente B_0 que incluye a $\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)$. Luego por inducción

$$B_{l+1} = \frac{B_l}{3(l+1)\left(l + \frac{2}{3}\right)3^l} = \frac{B_0}{3^{2(l+1)}(l+1)!\Gamma\left(\frac{2}{3} + l + 1\right)}, \quad (\text{A.29})$$

quedando esto demostrado. Luego

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} B_k x^{3k} \quad \text{con} \quad B_k = \frac{A}{3^{2k} k! \Gamma\left(\frac{2}{3} + k\right)} \quad (\text{A.30})$$

donde se definió $A = B_0 \Gamma\left(\frac{2}{3}\right)$. Equivalentemente

$$y(x) = A \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^{3k}}{3^{2k} k! \Gamma\left(\frac{2}{3} + k\right)} = A \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{x^3}{3^2}\right)^k}{k! \Gamma\left(\frac{2}{3} + k\right)}. \quad (\text{A.31})$$

De manera análoga, para los coeficientes de la otra solución A.21. Entonces, de la ecuación A.22 se ve que

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{C_0}{3 \cdot 4} \\ C_2 &= \frac{C_1}{7 \cdot 6} = \frac{C_0}{3 \cdot 6 \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{7}{3} \cdot 3^2} \\ C_3 &= \frac{C_2}{10 \cdot 9} = \frac{C_0}{3 \cdot 6 \cdot 9 \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{7}{3} \cdot \frac{10}{3} \cdot 3^3}. \end{aligned}$$

Luego, con propiedades de la función gamma se encuentra

$$C_l = \frac{C_0 \Gamma\left(\frac{4}{3}\right)}{3^{2l} l! \Gamma\left(\frac{4}{3} + l\right)} = \frac{B}{3^{2l} l! \Gamma\left(\frac{4}{3} + l\right)} \quad (\text{A.32})$$

donde se definió $B = C_0 \Gamma\left(\frac{4}{3}\right)$. Por inducción se demuestra

$$C_{l+1} = \frac{C_l}{3(3l+4)(l+1)} = \frac{C_l}{3^2 \left(l + \frac{4}{3}\right)(l+1)}. \quad (\text{A.33})$$

Sustituyendo C_l

$$C_{l+1} = \frac{B}{3^{2(l+1)} (l+1)! \Gamma\left(\frac{4}{3} + l + 1\right)}. \quad (\text{A.34})$$

Así, la otra solución linealmente independiente se puede escribir como:

$$y(x) = B \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{x^3}{3^2}\right)^k}{k! \Gamma\left(\frac{4}{3} + k\right)}. \quad (\text{A.35})$$

Otra representación de solución de la ecuación de Airy, se basa en el método de Laplace. Este dice que una ecuación de la forma

$$(a_0 + b_0x)y^n + (a_1 + b_1x)y^{n-1} + \dots + (a_n + b_nx)y = 0 \quad (\text{A.36})$$

es de Laplace, y la solución es

$$y(x) = \int_{\alpha}^{\beta} dt f(t) \exp(xt). \quad (\text{A.37})$$

En el caso de la ecuación de Airy, A.36 se reduce a

$$(a_0 + b_0x)y^n + (a_n + b_nx)y = 0 \quad (\text{A.38})$$

con $a_0 = 1$, $a_n = b_0 = 0$ y $b_n = -1$.

Sin pérdida de generalidad, la ec. A.37 puede tomar la forma

$$y(x) = \int_{\alpha}^{\beta} dt f(t) \exp(ixt) \quad (\text{A.39})$$

con derivadas igual a

$$\frac{dy(x)}{dx} = \int_{\alpha}^{\beta} dt f(t) (it) \exp(ixt) \quad (\text{A.40})$$

y

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = - \int_{\alpha}^{\beta} dt f(t) t^2 \exp(ixt). \quad (\text{A.41})$$

De la sustitución de A.41 y A.39 en la ecuación de Airy A.1 resulta

$$\int_{\alpha}^{\beta} dt f(t) \exp(ixt) [t^2 + x] = 0 \quad (\text{A.42})$$

Trabajando el segundo término

$$\begin{aligned} x \int_{\alpha}^{\beta} dt f(t) \exp(ixt) &= -i \int_{\alpha}^{\beta} dt f(t) \frac{\partial}{\partial t} \exp(ixt) \\ &= -i \int_{\alpha}^{\beta} dt \frac{\partial}{\partial t} [f(t) \exp(ixt)] + i \int_{\alpha}^{\beta} dt f'(t) \exp(ixt) \\ &= -i [f(t) \exp(ixt)]_{\alpha}^{\beta} + i \int_{\alpha}^{\beta} dt f'(t) \exp(ixt). \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

Por lo tanto la ecuación A.42 se convierte en

$$-i [f(t) \exp(ixt)]_{\alpha}^{\beta} + \int_{\alpha}^{\beta} dt \exp(ixt) [t^2 f(t) + i f'(t)] = 0 \quad (\text{A.44})$$

Pasando el primer término al lado derecho y luego derivando respecto a t , se encuentra

$$\exp(ixt) [t^2 f(t) + i f'(t)] = 0$$

y manipulando esta última

$$\frac{f'(t)}{f(t)} = it^2, \quad (\text{A.45})$$

es decir

$$\ln f(t) = i \frac{t^3}{3} \quad (\text{A.46})$$

y por lo tanto

$$f(t) = \exp i \frac{t^3}{3}. \quad (\text{A.47})$$

Al sustituir este resultado en la ec. A.44 resulta

$$[f(t) \exp(ixt)]_{\alpha}^{\beta} = 0. \quad (\text{A.48})$$

Al llevar el resultado A.47 a la ecuación A.39 resulta

$$y(x) = \int_0^{\infty} dt \exp i \left[xt + \frac{t^3}{3} \right]. \quad (\text{A.49})$$

Si ahora se considera sólo la parte real, entonces esta última se escribe como

$$\Re y(x) = \int_0^{\infty} dt \cos \left[xt + \frac{t^3}{3} \right] \quad (\text{A.50})$$

que es la representación de la integral Airy.

Conviene, ahora, analizar el comportamiento asintótico de la función de Airy ($x \gg 0$, y real). Entonces, sea la función de Airy

$$Ai = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} dt \exp \left[tx - \frac{t^3}{3} \right]. \quad (\text{A.51})$$

El camino de integración C_1 debe elegirse de manera que en sus dos extremos se anule la función $\left[tx - \frac{t^3}{3}\right]$. Para ello, estos extremos tienen que ir al infinito en dominios del plano complejo t en los que $Re(t^3) > 0$ -esos dominios aparecen rayados en la fig. A.1. Se obtiene una solución finita para todo x eligiendo el camino C_1 conforme se representa en la figura. Este camino puede desplazarse de manera arbitraria con la única condición de que sus extremos vayan a infinito en los dos mismos sectores rayados (I y III en la fig. A.1). Obsérvese que si se elige un camino que se encuentre, por ejemplo, en los sectores III y II, se obtiene una solución que tiende a infinito cuando $x \rightarrow \infty$. Una vez que ha quedado claro este aspecto, se hace un desarrollo de

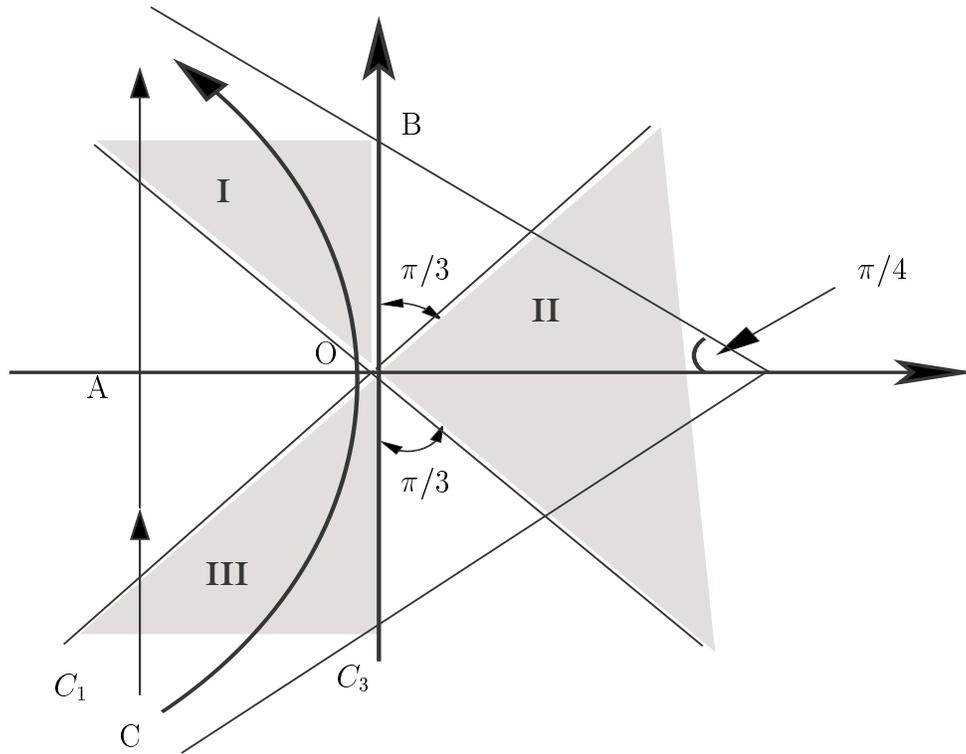


Figura A.1: Regiones

$f(t) = \left[tx - \frac{t^3}{3}\right]$ alrededor del punto silla $t_s = -\sqrt{x}$, entonces

$$f(t) = -\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}} + \sqrt{x}(t + \sqrt{x})^2 - \frac{1}{3}(t + \sqrt{x})^3 + \dots \quad (\text{A.52})$$

Luego A.51 es

$$Ai = \frac{\exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)}{2\pi i} \int_{t=-i\infty}^{t=i\infty} dt \exp \sqrt{x} (t + \sqrt{x})^2 \exp \left[-\frac{1}{3} (t + \sqrt{x})^3\right]. \quad (\text{A.53})$$

Ahora se propone el cambio de variable

$$t = -\sqrt{x} - i\frac{w}{x^{\frac{1}{4}}}, \quad (\text{A.54})$$

entonces

$$dt = -i\frac{dw}{x^{\frac{1}{4}}} \quad (\text{A.55})$$

y por lo tanto

$$Ai = \frac{\exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)}{2\pi x^{\frac{1}{4}}} \int_{-\infty}^{\infty} dw \exp(-w)^2 \exp\left[-\frac{i}{3}\frac{w^3}{x^{\frac{3}{4}}}\right]. \quad (\text{A.56})$$

Pero,

$$\exp\left[-\frac{i}{3}\frac{w^3}{x^{\frac{3}{4}}}\right] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left[-\frac{i}{3}\frac{w^3}{x^{\frac{3}{4}}}\right]^k}{k!}. \quad (\text{A.57})$$

Usando ésto y el lema de Watson, la ec. A.56 se transforma en

$$Ai = \frac{\exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)}{2\pi x^{\frac{1}{4}}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left[-\frac{i}{3}\frac{1}{x^{\frac{3}{4}}}\right]^k}{k!} \int_{-\infty}^{\infty} dw \exp(-w)^2 \exp(w)^{3k}. \quad (\text{A.58})$$

Se ve que los sumandos impares dan cero, por lo que

$$Ai = \frac{\exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)}{2\pi x^{\frac{1}{4}}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\left[\frac{1}{9x^{\frac{3}{4}}}\right]^l}{(2l)!} \int_{-\infty}^{\infty} dw \exp(-w)^2 \exp(w)^{6l}. \quad (\text{A.59})$$

Usando tablas de integrales [17], se encuentra el resultado

$$\int_{-\infty}^{\infty} dw \exp(-w)^2 \exp(w)^{6l} = \Gamma\left(3l + \frac{1}{2}\right), \quad (\text{A.60})$$

entonces

$$Ai = \frac{\exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)}{2\pi x^{\frac{1}{4}}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\left[\frac{1}{9x^{\frac{3}{4}}}\right]^l}{(2l)!} \Gamma\left(3l + \frac{1}{2}\right). \quad (\text{A.61})$$

De aquí, desarrollando la suma, resulta

$$Ai \sim \frac{\exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)}{2\sqrt{\pi}x^{\frac{1}{4}}} [1 + \dots] \quad (x \gg 0) \quad (\text{A.62})$$

obteniendo así el comportamiento asintótico de la función de Airy Ai .

Apéndice B

EL PROPAGADOR SEMICLÁSICO

Se mostró, en el capítulo 5, que la propagación de las funciones de onda no estacionarias, corresponden en general a superficies Lagrangianas que se mueven bajo la acción de Hamiltonianos clásicos. Por otro lado, se dijo que las funciones de onda semiclásicas dependientes del tiempo son insensibles a la no integrabilidad del sistema, aunque los detalles de su evolución son ciertamente sensibles a la dinámica clásica. En ese sentido, resulta conveniente definir estados relacionados al operador de evolución

$$\hat{U}(t) = \exp(-i\hbar\hat{H}t). \quad (\text{B.1})$$

Su representación coordenada $\langle \mathbf{q}' | \hat{U}(t) | \mathbf{q} \rangle$, conocida como el propagador, puede ser identificada con la función de onda $\langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle$ que resulta de la propagación de $\langle \mathbf{q}' | \mathbf{q} \rangle = \delta(\mathbf{q}' - \mathbf{q})$ en el tiempo t . Clásicamente el estado inicial corresponde a una distribución \mathbf{p} uniforme a lo largo del plano $\mathbf{q}' = \mathbf{q}$ -capítulo 5. Este plano puede evolucionar en la superficie Lagrangiana

$$\mathbf{p}' = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}'}(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t), \quad (\text{B.2})$$

donde S es la solución a la ecuación clásica de Hamilton-Jacobi

$$H\left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}'}, \mathbf{q}'\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

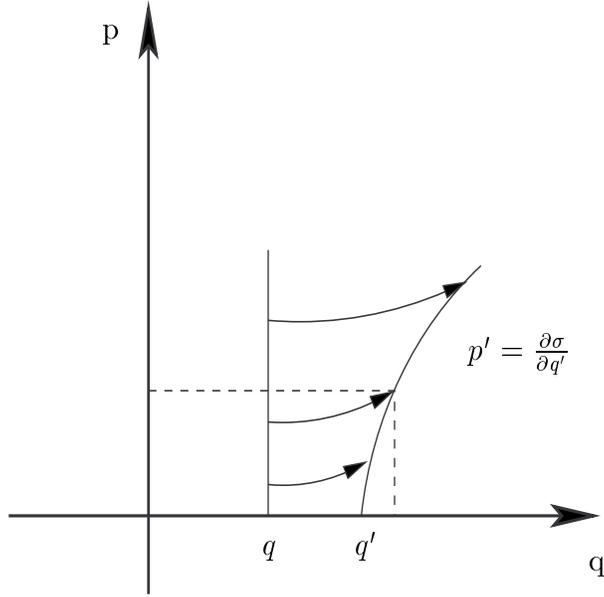


Figura B.1: Propagador para un sistema con un grado de libertad es asociado con la evolución de la línea vertical \mathbf{q} constante.

La configuración para un sistema con un grado de libertad se muestra en la figura B.1.

El propagador semiclásico tiene la forma estándar 5.23 excepto para la presencia de cústicas. No obstante, se puede recurrir al método de Maslov, siguiendo lo que se hizo en el capítulo 6, puesto que en la representación \mathbf{p}

$$\langle \mathbf{p}' | \hat{U}(t) | \mathbf{q} \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \left| \det \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{q}} \right|^{1/2} \exp \{ i\hbar^{-1} S(\mathbf{p}', \mathbf{q}, t) \} \quad (\text{B.3})$$

se garantiza que no hay cústicas para t suficientemente pequeño.

El índice Morse μ para una órbita \mathbf{q} [5] es el número de veces que ésta cruza una cústica. Por otra parte, se sabe que la presencia de cústicas en una superficie Lagrangiana conduce a incrementos en la fase¹ de las funciones de onda correspondientes a cada una de estas ramas. Afortunadamente, la fase para la j -ésima rama puede obtenerse por el índice Morse μ_j de las órbitas correspondientes \mathbf{q} . El propagador semiclásico lejos de las cústicas tiene la

¹Ver capítulo 6

forma

$$\langle \mathbf{q}' | \hat{U}(t) | \mathbf{q} \rangle = (2\pi i \hbar)^{-1/2} \sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{q}} \right|^{1/2} \exp \left\{ i \hbar^{-1} S(\mathbf{p}', \mathbf{q}, t) - i \mu_j \frac{\pi}{2} \right\}. \quad (\text{B.4})$$

El propagador es la representación coordenada del operador de evolución unitario. La transformación unitaria para una t fija corresponde clásicamente a la transformación canónica $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow (\mathbf{p}', \mathbf{q}')$, generada implícitamente por $S(\mathbf{p}', \mathbf{q}, t)$ de acuerdo con

$$\mathbf{p}' = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}'}(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t); \quad -\mathbf{p} = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t). \quad (\text{B.5})$$

Desde que la representación coordenada del operador evolución depende sólo de la transformación canónica final, se puede asociar un operador aproximadamente unitario \hat{U} a una transformación canónica generada por alguna función arbitraria $S(\mathbf{p}', \mathbf{q})$.

Si la transformación es simpléctica, la línea vertical $\mathbf{q}' = \mathbf{q}$ será transformada en otra línea recta. De esta forma no habrá cústicas a menos que la línea recta sea vertical.

Apéndice C

EL MÉTODO DE FASE ESTACIONARIA.

Un procedimiento muy usado para obtener aproximaciones de varias integrales que frecuentemente ocurren en la teoría de ondas esta basado en el llamado método (o principio) de fase estacionaria. Éste proporciona una aproximación asintótica de integrales para valores grandes de un parámetro apropiado [4]. Antes de explicar la esencia del método puede ser útil aclarar que significa una expansión asintótica.

C.1. Definición de una expansión asintótica.

Supóngase que

$$F(\xi) = G(\xi) \left[\sum_{n=1}^N \frac{a_n}{\xi^n} + R_N(\xi) \right] \quad (\text{C.1})$$

donde, para toda N ,

$$\xi^N R_N(\xi) \rightarrow 0 \quad (\text{C.2})$$

cuando $|\xi| \rightarrow \infty$ dentro de algún rango de $\arg \xi$, las a_n 's siendo constantes y $G(\xi)$ alguna función de ξ . Entonces se puede escribir

$$F(\xi) = G(\xi) \left[a_0 + \frac{a_1}{\xi} + \frac{a_2}{\xi^2} + \dots \right] \quad (\text{C.3})$$

y al lado derecho de la fórmula C.3 se le dice expansión asintótica de $F(\xi)$ para el rango particular de $\arg \xi$. La fórmula C.2 implica que cuando $|\xi|$ es suficientemente grande el valor absoluto de la diferencia entre $F(\xi)/G(\xi)$ y la suma de las series infinitas $\sum_{n=1}^N a_n/\xi^n$ es del orden de $1/|\xi|^{N+1}$.

Las expansiones asintóticas pueden comportarse muy diferente a las series ordinarias. En particular puede fallar la convergencia de algunos o todos los valores de ξ . Sin embargo con frecuencia proporcionan excelentes aproximaciones para valores suficientemente grandes de $|\xi|$. En efecto, cuando $|\xi|$ es suficientemente grande, el primer término $G(\xi) a_0$ en el lado derecho de C.3 puede proporcionar una muy buena aproximación de $F(\xi)$. Si sólo este primer (o los primeros) término(s) de la expansión asintótica es (son) usado(s), se habla de una aproximación asintótica de $F(\xi)$.

C.2. Método de fase estacionaria para integrales simples

Se considera una integral de la forma

$$F(k) = \int_a^b f(x) \exp[ikg(x)] dx \quad (\text{C.4})$$

donde $f(x)$ y $g(x)$ son reales, funciones bien comportadas de la variable real x y a y b son constantes reales. El parámetro k también es real. Sin pérdida de generalidad, se puede asumir k positivo. En aplicaciones físicas $F(k)$ con frecuencia representa los efectos combinados de fase $g(x)$ y amplitud $f(x)$ de onda, con el mismo número de onda k .

Para obtener alguna idea acerca del comportamiento de la integral C.4 como función de k , se considera un ejemplo simple. Sea

$$f(x) = 1, \quad g(x) = x^2, \quad (\text{C.5})$$

y considerando la parte real (denotado por $\Re Re$) de la integral:

$$\Re Re F_1(k) = \int_a^b \cos(kx^2) dx, \quad (a < 0, b > 0). \quad (\text{C.6})$$

Ahora se compara el comportamiento del integrando

$$G(x, k) = \cos kx^2 \quad (\text{C.7})$$

en C.6 para diferentes valores de k . Con k fijo, $G(x, k)$ puede oscilar entre los valores $+1$ y -1 , donde la rapidez de oscilación depende del valor de k . Dado que k está fijo, los ceros de $G(x, k)$ están dados por

$$x = \pm \left[\frac{(n + \frac{1}{2}) \pi}{k} \right]^{1/2}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

entonces es claro que si se toman valores de k cada vez más grandes, $G(x, k)$ oscilará más y más rápido.

Supóngase ahora que se considera $f(x)$, pero se mantiene $g(x) = x^2$. En vez de la ec. C.6 se tiene la integral

$$\Re F_2(k) = \int_a^b f(x) \cos(kx^2) dx, \quad (a < 0, b > 0). \quad (\text{C.8})$$

El factor $f(x)$ puede dar un aumento a la amplitud de modulación del término coseno; pero es claro que con independencia de la forma exacta de $f(x)$, sólo si k es suficientemente grande, el integrando de la integral C.8 puede otra vez oscilar muy rápido y habrá una tendencia para las contribuciones positivas y negativas del integrando o anularse. Además estas cancelaciones pueden esperarse si se toman lugares con independencia de si $g(x) = x^2$ o tiene otra forma. Sin embargo, para valores suficientemente grandes de k , la cancelación puede no ser completa en la vecindad de puntos (si hay) donde $g(x)$ es estacionario dentro del intervalo de integración, es decir donde

$$\frac{dg(x)}{dx} = 0, \quad (\text{C.9})$$

y también en los puntos

$$x = a \text{ y } x = b. \quad (\text{C.10})$$

Estos puntos especiales son llamados puntos críticos del integrando en la ec. C.4. Los que satisfacen la ec. C.9 se les conoce como puntos críticos de primera clase, y a los puntos extremos C.10 se les dice puntos críticos de la segunda clase. Por supuesto, está el caso especial de varios puntos críticos que pueden coincidir con uno o los dos puntos extremos, entonces son éstos, puntos estacionarios de $g(x)$. Otras complicaciones surgen, por ejemplo cuando $g(x)$ o $f(x)$ tienen comportamientos singulares. Sin embargo en estas situaciones más complicadas se puede mostrar que el comportamiento asintótico cuando $k \rightarrow \infty$ de una integral de la forma C.4 está determinado completamente

por el comportamiento del integrando en los puntos críticos, y, además, el término principal en la expansión asintótica de $F(k)$ con frecuencia depende de los puntos críticos de la primera clase, es decir, en puntos interiores al rango de integración donde $g(x)$ es estacionario. Este hecho es la esencia del principio de fase estacionaria.

C.3. Contribución de puntos críticos de la primera clase.

Se asume que en la integral C.4 $f(x)$ es continuo y que $g(x)$ es dos veces diferenciable con derivadas continuas en el intervalo $a < x < b$. Supóngase, para empezar, que hay un y sólo un punto crítico de la primera clase, es decir que hay un punto x_1 y ningún otro en el intervalo para el que

$$g'(x_1) = 0, \quad (\text{C.11})$$

donde la prima denota diferenciación con respecto a x . También se asume que la segunda derivada de $g(x)$, es decir $g''(x)$, es distinta de cero para $x = x_1$:

$$g''(x_1) \neq 0. \quad (\text{C.12})$$

Entonces en puntos x en la vecindad inmediata de x_1

$$g(x) \approx g(x_1) + \frac{1}{2}(x - x_1)^2 g''(x_1) \quad (\text{C.13})$$

Puesto que, recordando el principio de fase estacionaria, la aproximación asintótica de la integral para grandes valores de k viene de la vecindad inmediata de x_1 , se tiene de las ecs. C.4 y C.13

$$F(k) \sim \int_a^b f(x_1) \exp[ikg(x_1)] \exp[ik(x - x_1)^2 g''(x_1)/2] dx. \quad (\text{C.14})$$

Por las mismas razones se puede extender el rango de integración (a, b) a $(-\infty, \infty)$ y se obtiene la fórmula

$$F(k) \sim f(x_1) \exp[ikg(x_1)] \int_{-\infty}^{\infty} \exp[ik(x - x_1)^2 g''(x_1)/2] dx. \quad (\text{C.15})$$

Si se cambia la variable de integración de x a $x' = x - x_1$ y se usa la simetría del integrando, la fórmula C.15 resulta ser

$$F(k) \sim 2f(x_1) \exp[ikg(x_1)] \int_0^\infty \exp[ikx'^2 g''(x_1)/2] dx' \quad (\text{C.16})$$

Esta integral C.16 es la muy conocida integral de Fresnel, que tiene el valor

$$\int_0^\infty \exp(iau^2) du = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{|a|} \right)^{1/2} \exp\left(\pm i \frac{\pi}{4}\right), \quad (\text{C.17})$$

donde el signo en el exponente se toma dependiendo de si $a > 0$ o $a < 0$. Con ayuda de este resultado, la ec. C.16 resulta en

$$F^{(1)}(k) \sim \left[\frac{2\pi}{k |g''(x_1)|} \right]^{1/2} f(x_1) \exp(ikg(x_1)) \exp\left(\pm i \frac{\pi}{4}\right) \quad \text{cuando } k \rightarrow \infty, \quad (\text{C.18})$$

donde el signo en el exponente se toma dependiendo de si $g''(x_1) > 0$ o $g''(x_1) < 0$ respectivamente y se ha escrito $F^{(1)}(k)$ en vez de $F(k)$ para remarcar el hecho de que la ec. C.18 es la contribución de un punto crítico de la primera clase.

Al derivar la fórmula C.18 se asumió que el integrando tiene sólo un punto crítico de la primera clase. Si se tiene varios de estos puntos, x_1, x_2, \dots, x_n , la aproximación asintótica correspondiente de $F(k)$ se obtiene sumando las contribuciones, dados por expresiones de la forma C.18, para todos éstos, es decir se tiene

$$F^{(1)}(k) \sim \left(\frac{2\pi}{k} \right)^{1/2} \sum_{j=1}^n \frac{\varepsilon_j}{|g''(x_j)|^{1/2}} f(x_j) \exp(ikg(x_j)), \quad (\text{C.19})$$

donde

$$\varepsilon_j = \exp\left(\pm i \frac{\pi}{4}\right) \text{ de acuerdo si } g''(x_j) \text{ es mayor o menor que cero,} \quad (\text{C.20})$$

¹El término $|g''(x_1)|$ tiene una simple interpretación geométrica. De acuerdo a la geometría diferencial el radio de curvatura $\rho(x)$ en un punto típico de la curva $y = g(x)$ esta dado por $\rho(x) = \left| (1 + y')^{3/2} / y'' \right|$. Por lo tanto en un punto $x = x_1$ donde y es estacionario, $\rho(x) = 1/|y''(x_1)|$ y se ve que el factor $1/|g''(x_1)|^{1/2}$ que aparece en la ec. C.18 es justo la raíz cuadrada del radio de curvatura de la función fase $g(x)$ en el punto estacionario.

El otro factor, $\exp(\pm i \frac{\pi}{4})$ en la fórmula C.18 con frecuencia tiene una interpretación interesante también, por ejemplo, en conexión con la bien conocida fase anómala de ondas cerca del foco [18].

y se asume, por supuesto, que $g''(x_j) \neq 0$, ($j = 1, 2, \dots, n$).

C.4. Evaluación de integrales por el método de fase estacionaria.

Usando la herramienta matemática que proporciona el método de fase estacionaria, se evalúa a continuación la integral 6.12 del capítulo 6:

$$(2\pi\hbar)^{L/2} C \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} [-S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}] + i\beta_j \right\}. \quad (\text{C.21})$$

Considerando la pura integral y reacomodando el integrando

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} \exp \left[i \left(\frac{1}{\hbar} \right) \{-S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} + \hbar\beta_j\} \right] \quad (\text{C.22})$$

que es de la forma C.4, es decir

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} f(\mathbf{p}) \exp ik g(\mathbf{p}) \quad (\text{C.23})$$

con las identificaciones

$$f(\mathbf{p}) = \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \quad (\text{C.24})$$

y

$$g(\mathbf{p}) = -S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} + \hbar\beta_j \quad (\text{C.25})$$

Luego los puntos críticos son

$$\frac{dg(\mathbf{p})}{d\mathbf{p}} = \frac{\partial g(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{\partial S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{q} \quad (\text{C.26})$$

y si se usa

$$\mathbf{q}_j = \frac{\partial S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p}} \quad (\text{C.27})$$

entonces C.26 es

$$\frac{\partial g(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = -\mathbf{q}_j(\mathbf{p}) + \mathbf{q}(\mathbf{p}) = 0. \quad (\text{C.28})$$

En los puntos \mathbf{p} en la vecindad inmediata a \mathbf{p}_j se tiene, siguiendo lo señalado por C.13,

$$g(\mathbf{p}) \approx g(\mathbf{p}_j) + \frac{1}{2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_j) \frac{\partial^2 g(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_j). \quad (\text{C.29})$$

Así que C.23 adopta la forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} f(\mathbf{p}_j) \exp ik g(\mathbf{p}_j) \exp ik \left\{ \frac{1}{2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_j) \frac{\partial^2 g(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_j) \right\} \quad (\text{C.30})$$

que, recordando el principio de fase estacionaria, es la aproximación asintótica de la integral C.23 para valores grandes de k -justamente el límite semiclásico $\hbar \rightarrow 0$. Entonces de C.30

$$f(\mathbf{p}_j) \exp ik g(\mathbf{p}_j) \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \exp ik \left\{ \frac{1}{2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_j) \frac{\partial^2 g(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_j) \right\} \quad (\text{C.31})$$

Se hace el cambio de variable de \mathbf{p} a $\mathbf{p}' = \mathbf{p} - \mathbf{p}_j$, entonces resulta la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p}' \exp \frac{ik}{2} \mathbf{p}' \frac{\partial^2 g(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2} \mathbf{p}'. \quad (\text{C.32})$$

Para evaluar C.32 se considera el siguiente resultado:

Una matriz simétrica de $L \times L$ se puede diagonalizar por una transformación ortogonal con determinante Jacobiano unitario. Entonces

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \exp \{i (2\hbar)^{-1} \mathbf{p} A \mathbf{p}\} = \left(\frac{(2\pi\hbar)^L}{|\det A|} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{i\pi\gamma_A}{4} \right), \quad (\text{C.33})$$

donde γ_A es el signo de A , esto es el número de eigenvalores positivos menos el número de eigenvalores negativos de la matriz. Por lo tanto, C.32 es

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p}' \exp \frac{ik}{2} \mathbf{p}' \frac{\partial^2 g(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2} \mathbf{p}' = \left(\frac{(2\pi)^L}{k^L |\det \frac{\partial^2 g(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2}|} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{i\pi\gamma_A}{4} \right). \quad (\text{C.34})$$

Considerando las ecs. C.34 y C.31, se encuentra que la aproximación asintótica a C.23 tiene la forma

$$f(\mathbf{p}_j) \exp ik g(\mathbf{p}_j) \left(\frac{(2\pi)^L}{k^L |\det \frac{\partial^2 g(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2}|} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{i\pi\gamma_A}{4} \right) \quad (\text{C.35})$$

y sustituyendo a C.24 y C.25 en esta última

$$(2\pi\hbar)^L \left| \frac{\det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}}}{\det \frac{\partial^2 g(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2}} \right|^{1/2} \exp\left(\frac{i\pi\gamma_A}{4}\right) \exp\left[i\left(\frac{1}{\hbar}\right) \{-S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} + \hbar\beta_j\}\right] \quad (\text{C.36})$$

Finalmente, de C.25

$$\frac{\partial^2 g(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2} = -\frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2}, \quad (\text{C.37})$$

entonces C.36 es

$$(2\pi\hbar)^L \left| \frac{\det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}}}{\det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2}} \right|^{1/2} \exp\left(\frac{i\pi\gamma_A}{4}\right) \exp\left[i\left(\frac{1}{\hbar}\right) \{-S_j(\mathbf{p}_j(\mathbf{q}), \mathbf{I}) + \mathbf{p}_j(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q} + \hbar\beta_j\}\right] \quad (\text{C.38})$$

Llevando este resultado a la ec. C.21 se encuentra la expresión

$$\sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{I}} \det^{-1} \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}^2} \right|^{1/2} \exp\{i\hbar^{-1} [\mathbf{p}_j(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q} - S_j(\mathbf{p}_j(\mathbf{q}), \mathbf{I}) + i\alpha_j]\} \quad (\text{C.39})$$

que es el resultado usado en la ec. 6.13 del capítulo 6.

Otra integral que puede ser evaluada por este método es la 7.28 del capítulo 7:

$$(2\pi\hbar)^{-3/2} \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} dt \left| \det \frac{\partial^2 S_j}{\partial \mathbf{q}' \partial \mathbf{q}} \right|^{1/2} \Delta_\lambda(t) \exp\left\{i\hbar^{-1} [Et + S_j(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t)] - i\frac{\pi\mu_j}{2}\right\}. \quad (\text{C.40})$$

Considerando sólo la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \left| \det \frac{\partial^2 S_j}{\partial \mathbf{q}' \partial \mathbf{q}} \right|^{1/2} \Delta_\lambda(t) \exp i\left(\frac{1}{\hbar}\right) \left\{ Et + S_j(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t) - \hbar\frac{\pi\mu_j}{2} \right\} \quad (\text{C.41})$$

que tiene la forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \exp ik g(t) \quad (\text{C.42})$$

identificando

$$f(t) = \left| \det \frac{\partial^2 S_j}{\partial \mathbf{q}' \partial \mathbf{q}} \right|^{1/2} \Delta_\lambda(t), \quad k = \frac{1}{\hbar} \quad (\text{C.43})$$

y

$$g(t) = Et + S_j(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t) - \hbar \frac{\pi \mu_j}{2}. \quad (\text{C.44})$$

Luego, los puntos críticos son

$$\frac{dg(t)}{dt} = E + \frac{\partial S_j(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t)}{\partial t}. \quad (\text{C.45})$$

Sea t_E la solución a C.45, entonces se tiene

$$g(t) = g(t_E) + \frac{1}{2} (t - t_E)^2 \frac{\partial^2 g(t_E)}{\partial t^2}, \quad (\text{C.46})$$

por lo tanto C.42 se puede escribir como

$$f(t_E) \exp ik g(t_E) \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp ik \left\{ \frac{1}{2} (t - t_E)^2 \frac{\partial^2 g(t_E)}{\partial t^2} \right\} \quad (\text{C.47})$$

Se hace el cambio de variable $t' = t - t_E$, por lo que la integral en C.47 es

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp i \frac{k}{2} t'^2 \frac{\partial^2 g(t_E)}{\partial t^2} \quad (\text{C.48})$$

y de acuerdo con C.18 las contribuciones son de la forma

$$\left(\frac{2\pi}{k} \right)^{1/2} \left| \frac{\partial^2 g(t_E)}{\partial t^2} \right|^{-1/2} f(t_E) \exp ik g(t_E) \exp \left(\pm i \frac{\pi}{4} \right). \quad (\text{C.49})$$

Considerando C.43 y C.44, se encuentra

$$\frac{(2\pi\hbar)^{1/2}}{\left| \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t)}{\partial t^2} \right|^{-1/2}} \left| \det \frac{\partial^2 S_j}{\partial \mathbf{q}' \partial \mathbf{q}} \right|^{1/2} \Delta_\lambda(t_E) \exp \left\{ i\hbar^{-1} \left[Et_E + S_j(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t_E) - \hbar \frac{\pi \mu_j}{2} \right] \right\} \exp \left(\pm i \frac{\pi}{4} \right). \quad (\text{C.50})$$

Por lo tanto, llevando este resultado a C.40 se tiene que la aproximación asintótica ($k \rightarrow \infty$) es

$$C \sum_j \left| \left(\frac{\partial^2 S_j}{\partial t^2} \right)^{-1} \det \frac{\partial^2 S_j}{\partial \mathbf{q}' \partial \mathbf{q}} \right|^{1/2} \Delta_\lambda(t_E) \exp \left\{ i\hbar^{-1} [Et_E + S_j(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t_E)] \right\} \quad (\text{C.51})$$

que es el resultado expuesto en 7.30 del capítulo 7.

Referencias

- [1] C.M. Bender and S.A. Orszag. *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers*. McGraw-Hill. Inc., New York, 1978.
- [2] L. De La Peña. *Introducción a la Mecánica Cuántica*. Fondo de Cultura Económica, México, 1991.
- [3] J.J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison Wesley, Reading Mass., 1994.
- [4] E.T. Whittaker and G.N. Watson. *A Course of Modern Analysis*. Cambridge University Press, Cambridge, 1965.
- [5] A.M. Ozorio de Almeida. *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantizations*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [6] M.V. Berry and N.L. Balazs. Evolution of semiclassical quantum states in phase space. *J. Phys. A*, 12:625–42, 1979.
- [7] H. Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1980.
- [8] J.H. Van Vleck. The correspondence principle in the statistical interpretation of quantum mechanics. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 14:178–88, 1928.
- [9] V.P. Maslov and M.V. Fedoriuk. *Semiclassical Approximation in Quantum Mechanics*. Reidel, Boston, 1981.
- [10] V.I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer, New York, 1978.

- [11] M.V. Berry. Regular and irregular semiclassical wave functions. *J. Phys. A*, 10:2083–91, 1977.
- [12] J.H. Hannay M.V. Berry and A.M. Ozorio de Almeida. Intensity moments of semiclassical wave functions. *Physica D*, 8:229–42, 1983.
- [13] M.C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer, New York, 1990.
- [14] T. Poston and I. Stewart. *Catastrophe theory and Its Applications*. Pitman, London, 1978.
- [15] M.V. Berry. *Lectures on Semiclassical Mechanics of Regular and Irregular Motion*. North-Holland, Amsterdam, 1983.
- [16] M.V. Berry and F.J. Wright. Phase-space projections identities for diffraction catastrophes. *J. Phys. A.*, 13:149–60, 1980.
- [17] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. U.S. National Bureau of Standards, Washington, D.C., 1964.
- [18] M. Born and E. Wolf. *Principles of optics:Electromagnetic Theory of Propagation Interference and Diffraction of Light*. Cambridge University Press, Oxford, 1980.