



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

Soluciones exactas semiclásicas en una, dos y tres dimensiones

Tesis presentada al

Posgrado de Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de

Maestro en ciencias (Física Aplicada)

Presenta:

Lic. Citlalli Teresa Sosa Sánchez

asesorada por

Dr. Gerardo F. Torres del Castillo

Mayo, 2016. Puebla, Pue.



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

Soluciones exactas semiclásicas en una, dos y tres dimensiones

Tesis presentada al

Posgrado de Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de

Maestro en ciencias (Física Aplicada)

por

Lic. Citlalli Teresa Sosa Sánchez

asesorada por

Dr. Gerardo F. Torres del Castillo

Puebla Pue.

Título: Soluciones exactas semiclásicas en una, dos y tres dimensiones
Estudiante: LIC. CITLALLI TERESA SOSA SÁNCHEZ

COMITÉ

Dr. Gilberto Silva Ortigoza
Presidente

Dr. Alberto Escalante Hernández
Secretario

Dr. Roberto Cartas Fuentevilla
Vocal

Dr. J. Jesús Toscano Chávez
Suplente

Dr. Gerardo F. Torres del Castillo
Asesor

Índice general

1. Objetivos	1
2. Resumen	3
3. Conceptos preliminares	5
3.1. La ecuación de Hamilton-Jacobi	5
3.1.1. Principio de Hamilton	5
3.1.2. Formulación Hamiltoniana	6
3.1.3. Transformaciones canonoides y canónicas	7
3.1.4. El formalismo de Hamilton-Jacobi	8
3.1.5. Función principal de Hamilton	9
3.2. Aproximación semiclásica	10
4. Análisis y resultados	13
4.1. Caso unidimensional	13
4.1.1. Partícula libre	14
4.1.2. Fuerza homogénea en el espacio	15
4.1.3. Transformación canónica: Partícula libre a Partícula en un campo homogéneo	16
4.1.4. Potencial $V = ktq$	17
4.2. Caso de dos dimensiones	17
4.2.1. Oscilador armónico invertido bidimensional	19
4.2.2. Potencial $V = \frac{k}{r^2}$	20
4.3. Caso tridimensional	21
5. Conclusiones	23
Bibliografía	25

Capítulo 1

Objetivos

Objetivo general

Se buscan las condiciones para que si S (no necesariamente separable o completa) es una solución de la ecuación de Hamilton-Jacobi (HJ), entonces $\psi = \exp(iS/\hbar)$ sea solución a la ecuación de Schrödinger.

Objetivos particulares

1. Analizar la forma general que debe tener el potencial $V(q, t)$ para que dada una solución S a la ecuación de HJ, $\psi = \exp(iS/\hbar)$ satisfaga la ecuación de Schrödinger.
2. Determinar si una solución completa de la ecuación de HJ da lugar a un conjunto completo de funciones de onda (como sucede en el caso de una partícula libre).
3. Obtener la interpretación física.

Capítulo 2

Resumen

La mecánica clásica es una teoría contenida dentro de la mecánica cuántica y es por ello, que en cierto límite debe ser posible recuperarla a partir de la cuántica, a esto se le conoce como aproximación semiclásica. Es un hecho conocido que, al menos en casos simples, la ecuación de Hamilton-Jacobi puede obtenerse como un límite de la ecuación de Schrödinger [6]. Por otro lado, existen ejemplos en los que $\psi = \exp(-iS/\hbar)$ da una relación exacta entre una solución, S , de la ecuación de Hamilton-Jacobi y una solución ψ , de la ecuación de Schrödinger correspondiente. Quizá el ejemplo más simple de esto sea el de una partícula libre, con $S = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{k}^2 t / 2m$, donde \mathbf{k} es una constante. El movimiento de una partícula en un campo central y el de una partícula cargada en un campo magnético uniforme, son también ejemplos en los que ocurre lo mismo.[1]

Esta situación es un tanto similar a lo que ocurre en el caso de las ecuaciones de Einstein para el campo gravitacional, las cuales son no lineales; sin embargo, existe un conjunto de soluciones exactas de estas ecuaciones que son también solución de las ecuaciones de Einstein linealizadas (Teorema de Xanthopoulos).

Capítulo 3

Conceptos preliminares

3.1. La ecuación de Hamilton-Jacobi

Existen diversas formulaciones de la mecánica clásica, todas ellas equivalentes entre sí. La diferencia entre una y otra será el espacio en el cual se analice al sistema. Por ejemplo, si se estudia el Lagrangiano de un sistema, se analiza el espacio de configuraciones conformado por las coordenadas generalizadas $q_i(t)$, donde $i = 1, \dots, n$ y n es el número de grados de libertad del sistema físico. En cambio al analizar el Hamiltoniano, se trabaja en el espacio fase conformado por coordenadas y momentos (q_i, p_i) . La ventaja del formalismo Hamiltoniano es que al estudiar al sistema en un espacio de mayor dimensión ($2n$), las transformaciones de coordenadas que se pueden realizar son más variadas, además cuando se tratan sistemas conservativos, el Hamiltoniano coincide con la energía del sistema por lo que es más fácil la interpretación física de los resultados. Aún más, este enfoque permite analizar la transición de la mecánica clásica a la cuántica de manera natural.

La acción clásica se define como la integral de L sobre una trayectoria permitida por las ecuaciones de movimiento, desde una configuración $q_i = (q_1(t_i), \dots, q_n(t_i))$ en el tiempo t_i a otro punto q_f en el tiempo t_f :

$$S(q_f t_f; q_i t_i) \equiv S(f, i) = \int_{t_i}^{t_f} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt. \quad (3.1)$$

3.1.1. Principio de Hamilton

La dinámica lagrangiana describe el sistema físico en el espacio de configuraciones a través del principio de Hamilton. Las coordenadas generalizadas son funciones parametrizadas por el tiempo y las trayectorias que sigan estas coordenadas estarán determinadas por las leyes de la naturaleza, es decir no cualquier trayectoria en el espacio de configuraciones corresponderá a la evolución temporal del sistema físico. El principio de Hamilton selecciona la trayectoria verdadera entre un punto q_i al tiempo t_i y otro punto q_f en el tiempo t_f , establece que será aquella en la cual la variación de la acción clásica sea idénticamente cero:

$$\delta S = \delta \left(\int_{t_i}^{t_f} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt \right) = 0, \quad (3.2)$$

dicho de otro modo, la trayectoria real es aquella para la cual la acción tiene un valor estacionario (usualmente un mínimo). La condición ec. (3.2) impone restricciones sobre los caminos posibles entre dos puntos en el espacio de configuraciones y es equivalente a las ecuaciones de **Euler-Lagrange**:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0. \quad (3.3)$$

Es importante observar que las ecs. (3.3) son un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden, es por ello que en esta descripción, para conocer la evolución temporal del sistema es necesario el valor inicial de $q_i(t)$ y de su derivada temporal $\dot{q}_i(t)$.

3.1.2. Formulación Hamiltoniana

Como ya se ha mencionado antes, es posible estudiar al sistema físico desde otro espacio, conocido como espacio fase; en éste los puntos se identifican mediante pares coordenados (q_i, p_i) . Los momentos conjugados p_i se definen a partir de la Lagrangiana:

$$p_i = \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}} = p_i(q, \dot{q}, t). \quad (3.4)$$

De la ec. (3.4) se observa que los momentos conjugados son funciones de (q, \dot{q}, t) , así que es posible obtener las velocidades \dot{q} como función de (q, p, t) .

$$\dot{q}_i = v_i(q, p, t), \quad (3.5)$$

ahora se busca una transformación de la Lagrangiana que dependa de los momentos conjugados y no de las velocidades generalizadas.

$$L(q_i, \dot{q}_i, t) \longrightarrow H\left(q_i, \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, t\right) = H(q_i, p_i, t), \quad (3.6)$$

para construir esta nueva función a la que se llama Hamiltoniana, se realiza la transformada de Legendre al Lagrangiano:

$$H(q, p, t) \equiv v_i p_i - L|_{\dot{q}_i=v_i}. \quad (3.7)$$

Ahora la descripción dinámica está dada en términos de coordenadas (q_i, p_i) independientes entre sí, este espacio es $2n$ dimensional. Una trayectoria en el espacio fase determina completamente la evolución temporal del sistema, con condiciones iniciales (q_i, p_i) . En este caso se utiliza el principio de Hamilton modificado para obtener las trayectorias válidas.

$$\delta S = \delta \left(\int_{t_i}^{t_f} (v_i p_i - H(q, p, t)) dt \right) = 0, \quad (3.8)$$

las variaciones se realizan sobre las coordenadas independientes (q_i, p_i) y de ahí se obtienen las ecuaciones de Hamilton:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (3.9)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (3.10)$$

a diferencia de la formulación Lagrangiana, ahora se tiene un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden; pero el doble de ecuaciones. Como ya se ha mencionado, una ventaja es que hay más posibilidades al hacer transformaciones de coordenadas ya que se ha duplicado el número de coordenadas independientes.

Hasta ahora se ha mencionado la función Hamiltoniana sin hacer referencia al significado físico de ésta. Para ver su significado, suponga que el sistema físico involucra únicamente fuerzas conservativas, entonces el potencial depende sólo de las posiciones, y eso implica que:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = p_i, \quad (3.11)$$

utilizando este resultado en la expresión (3.7), se obtiene:

$$H(q, p, t) = v_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} - L \Big|_{\dot{q}_i = v_i}, \quad (3.12)$$

dado que si T es una función homogénea de grado dos en las velocidades

$$v_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = 2T, \quad (3.13)$$

y $L = T - V$, al sustituir esto en (3.12) se observa que:

$$H(q, p, t) = 2T - (T - V) = T + V = E, \quad (3.14)$$

la Hamiltoniana corresponde a la energía total del sistema cuando éste es conservativo. La teoría de Hamilton permite un entendimiento esencial de la estructura formal de la mecánica y es básico para la transición de la mecánica clásica a la mecánica cuántica.[2]

3.1.3. Transformaciones canónicas y canónicas

En algunas ocasiones resulta conveniente realizar una transformación de coordenadas $(q_i, p_i) \rightarrow (Q_i, P_i)$, para evidenciar las cantidades físicas que permanecen constantes durante el movimiento. Este cambio de coordenadas se debe efectuar con ciertas restricciones, se busca que las nuevas coordenadas cumplan las ecuaciones de Hamilton.

Considere una transformación de coordenadas:

$$(q_i, p_i, t) \longrightarrow (Q_i, P_i, t) \quad (3.15)$$

esta transformación no asegura de ninguna manera que la evolución temporal de las nuevas variables preserve aún la forma de las ecuaciones de Hamilton. Es decir, no siempre existe una nueva función $K(q_i, p_i, t)$ tal que:

$$\begin{cases} \dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \\ \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \end{cases} \quad (3.16)$$

Dado un Hamiltoniano específico H , a aquella transformación $(q_i, p_i) \rightarrow (Q_i, P_i)$ tal que existe una función K que cumple las ec. (3.16), se le denomina **transformación canonoide** con respecto a ese Hamiltoniano (H). Una transformación que es **canonoide** con respecto a todos los Hamiltonianos, se llama **canónica**.

En las nuevas coordenadas, también se debe cumplir el principio de Hamilton. Así que:

$$\delta \int L(q, \dot{q}, t) dt = 0, \quad (3.17)$$

y

$$\delta \int \mathcal{L}(Q, \dot{Q}, t) dt = 0, \quad (3.18)$$

de las ec. (3.17) y (3.18), se sigue que:

$$\delta \int (L - \mathcal{L}) dt = 0, \quad (3.19)$$

así que los lagrangianos correspondientes a cada transformación de coordenadas difieren por:

CAPÍTULO 3. CONCEPTOS PRELIMINARES
3.1. LA ECUACIÓN DE HAMILTON-JACOBI

$$L - \mathcal{L} = \frac{dF}{dt}, \quad (3.20)$$

esto implica que la función F media la transformación de las coordenadas (q, p) a (Q, P) . F se denomina **función generatriz**. En el caso general, F será una función de las coordenadas viejas y nuevas; junto con el tiempo esto involucra $4n + 1$ coordenadas:

$$F = F(q, p, Q, P, t). \quad (3.21)$$

Sin embargo hay también $2n$ ecuaciones de transformación para Q y P , por lo que F sólo contiene $2n + 1$ variables independientes. Es necesario que la función generatriz contenga tanto una coordenada del viejo conjunto q (o p) como una del nuevo Q (o P) para así establecer la relación entre los sistemas. Estas son algunas posibilidades para la función generatriz:

$$\begin{aligned} F_1 &= F(q, Q, t), & F_2 &= F(q, P, t), \\ F_3 &= F(p, Q, t), & F_4 &= F(p, P, t). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Cada una de estas funciones tiene $2n + 1$ variables independientes. La elección de una transformación u otra, dependerá del problema en cuestión. Para analizar cómo estas funciones generan las transformaciones canónicas, se utilizará la función F_2 como ejemplo.[3]

3.1.4. El formalismo de Hamilton-Jacobi

A continuación se analiza la función generatriz $F_2(q, P, t)$, si esta función cumple:

$$\det \left(\frac{\partial^2 F_2}{\partial q_i \partial P_j} \right) \neq 0, \quad (3.23)$$

las ecuaciones

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}, \quad (3.24)$$

dan una transformación canónica, $Q_i = Q_i(q_j, p_j, t)$, $P_i = P_i(q_j, p_j, t)$, tal que las ecuaciones de Hamilton preservan su forma:

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}, \quad (3.25)$$

donde

$$K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}. \quad (3.26)$$

Si se encuentra una función F_2 tal que el nuevo Hamiltoniano sea idénticamente cero, las ecuaciones de movimiento se simplifican y la solución se vuelve trivial: $Q_i = \text{const.}$, $P_i = \text{const.}$. Renombrando a la función F_2 como S , y combinando las ec. (3.26) y las primeras ecuaciones en (3.24) se obtiene:

$$H \left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}, t \right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (3.27)$$

La ec. (3.27) es una ecuación diferencial parcial de primer orden para la función $S(q_i, P_i, t)$, se le conoce como ecuación de Hamilton-Jacobi y la función S será llamada *función principal de Hamilton*. La ec. (3.27) no contiene las variables P_i , la solución tendrá n parámetros libres correspondientes a estos P_i , en este caso la solución a la ecuación de Hamilton-Jacobi se denomina *solución completa*. [5]

La ecuación HJ contiene $n + 1$ variables independientes, q_i y t . Esto se parece a la ecuación de Schrödinger en el espacio de configuración: el mismo orden en tiempo y las mismas variables independientes; sin embargo hay una diferencia importante: mientras que la ecuación de Schrödinger es lineal

en ψ , la ecuación de HJ no lo es. La no linealidad proviene de la dependencia cuadrática de H en los momentos conjugados que entran como derivadas de la función principal de Hamilton con respecto a la posición, $p_i = \partial S / \partial q_i$.

3.1.5. Función principal de Hamilton

En el caso de un sistema conservativo, H no es una función explícita del tiempo, de la ec. (3.27) se observa que si $H = E$ es constante, entonces:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H = E. \quad (3.28)$$

La ecuación anterior, permite observar que la función S se puede separar como sigue:

$$S(q_i, P_i, t) = S_0(q_i, P_i) - Et, \quad (3.29)$$

tomando la derivada total de S se obtiene:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial P_i} \dot{P}_i + \frac{\partial S}{\partial t}, \quad (3.30)$$

pero los valores P_i son parámetros constantes, así que $\dot{P}_i = 0$ y la ecuación anterior se reduce a:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial t}, \quad (3.31)$$

por otro lado sabemos que:

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H, \quad (3.32)$$

entonces

$$\frac{dS}{dt} = p_i \dot{q}_i - H = L(q_i, \dot{q}_i, t). \quad (3.33)$$

Note que H y L podrían ser funciones explícitas del tiempo, entonces la función S se puede obtener integrando respecto al tiempo la ec. (3.33)

$$S = \int L dt + \text{constante}. \quad (3.34)$$

La función S corresponde a la acción clásica, sin embargo, esta última relación no puede ser utilizada para cálculos prácticos debido a que L depende de las coordenadas originales (q_i, p_i) , mientras que S depende de las coordenadas q_i y de los parámetros P_i [4].

En el caso de la teoría de Hamilton, una forma de seleccionar una trayectoria clásica particular es especificar q_i y p_i iniciales, pero esto no se puede ocupar en mecánica cuántica, debido al principio de incertidumbre. Afortunadamente existe la teoría de Hamilton-Jacobi, la cual evade este problema, además ofrece una descripción de la dinámica muy diferente de aquella dada por las ecuaciones de movimiento de Hamilton o Lagrange; el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias se reemplaza por una sola ecuación diferencial parcial (3.27).

Hamilton dio una descripción geométrica muy elegante de cómo las trayectorias de las partículas surgen de una formulación continua de la mecánica. De la misma manera que se describen los rayos de óptica geométrica a partir de la óptica ondulatoria (óptica física). Considere un sistema conservativo, es decir el Hamiltoniano no depende del tiempo y además la masa de cada partícula es la misma. Entonces la función principal de Hamilton para cada partícula es:

$$S(q, t) = W(q) - Et, \quad (3.35)$$

donde E es la energía, se obtiene el gradiente de S :

$$|\nabla S| = |\nabla W| = \sqrt{2m(E - V)}. \quad (3.36)$$

Primero considere la familia de superficies $W(q) = \text{constante}$, la cual coincide con la familia de superficies de $S(q, t) = \text{const.}$ al tiempo $t = 0$. Es claro, de la ec.(3.35), que para un tiempo t dado la superficie S habrá cambiado su posición. Ahora fije la atención en una superficie particular $W(q) = W_0$, cuando $t = 0$ la superficie $S = W_0$, al avanzar el tiempo a t será necesario que la superficie S se mueva para coincidir con $W(q) = W_0 + Et$ y así sucesivamente mientras el tiempo transcurra. Las superficies de $S = \text{const.}$ pueden ser consideradas frentes de onda, finalmente, el momento es dado por:

$$p_i = \frac{\partial W(q)}{\partial q_i}, \quad (3.37)$$

y corresponde a la familia de curvas normales a las superficies de $S = \text{const.}$, es decir, son las trayectorias sobre las que un sistema puntual $q(t)$ se mueve de acuerdo a las leyes de la mecánica. Así como en óptica geométrica los rayos son la familia de curvas normales a los frentes de onda. [6]

3.2. Aproximación semiclásica

La ecuación de Schrödinger se puede resolver de manera aproximada con el método de WKB, denominado así por Wentzel, Kramers y Brillouin, quienes aplicaron por primera vez este método. También es llamada aproximación semiclásica o cuasiclásica. Debido a que los artículos de Schrödinger y de Broglie hicieron evidente que \hbar aparece explícitamente en las amplitudes de mecánica cuántica en la forma $\exp(i\theta/\hbar)$, esto planteó la pregunta de si hay circunstancias bajo las que θ no depende de \hbar , y si es así cuál es el significado de θ en mecánica clásica; fue esto lo que dio pie al método WKB.

Para analizar esto, se propone una solución a la ecuación de Schrödinger de la forma $\psi(x, t) = \exp(i\theta(x, t)/\hbar)$, ahora bien para entender el límite entre la mecánica clásica y la cuántica, es necesario analizar qué le ocurre a la función de onda cuando $\hbar \rightarrow 0$. Sin embargo, dicho límite carece de sentido porque el valor \hbar es constante, por ello se realiza el análisis considerando que las dimensiones de la acción son grandes en comparación a la magnitud de \hbar . Para ello considere una expansión en serie de potencias de \hbar de la función θ :

$$\theta = S(x, t) + \frac{\hbar}{i} S_1(x, t) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2(x, t) + \dots, \quad (3.38)$$

donde $S(x, t)$ es una solución a la ecuación de HJ. De acuerdo a (3.38), S será una buena aproximación a θ si:

$$\left| \frac{\partial S}{\partial x} \right|^2 \gg \hbar \frac{\partial^2 S}{\partial x^2}. \quad (3.39)$$

De esta forma, la función $\theta = S(x, t)$ siempre y cuando (3.39) se cumpla, así que la solución propuesta anteriormente se puede sustituir por: $\psi = \exp(iS/\hbar)$ [6].

Se tiene la ecuación de Schrödinger en una dimensión dependiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\psi(x, t) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (3.40)$$

y se sustituye la función de onda $\psi(x, t) = \exp(iS(x, t)/\hbar)$ como solución a la ecuación anterior, se obtiene:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2}. \quad (3.41)$$

Dado que la condición (3.39) se cumple, entonces la ec. (3.41) se reduce a la ecuación de HJ, donde $S(x, t)$ es la función principal de Hamilton. Considere una función de onda estacionaria de la forma:

CAPÍTULO 3. CONCEPTOS PRELIMINARES
3.2. APROXIMACIÓN SEMICLÁSICA

$\psi(x, t) = \exp(iS(x)/\hbar) \exp(-iEt/\hbar)$, lo cual es válido para cualquier sistema cuyo Hamiltoniano sea constante de movimiento, y por tanto su correspondiente función principal de Hamilton es separable:

$$S(x, t) = S_0(x) + S_1(t) = W(x) - Et. \quad (3.42)$$

En el formalismo de HJ el momento está definido como $P = \partial S/\partial x$, ahora la dependencia espacial está contenida únicamente en la función característica de Hamilton $W(x)$, entonces: $P_{clásico} = dW/dx$. En analogía a lo que ocurre en óptica geométrica, una superficie de $S = cte.$ avanza tal como un frente de onda. Ahora bien, el vector $P_{clásico}$ corresponde entonces a un vector de velocidad, el cual indica la dirección de propagación de estas superficies de $S = cte.$, en otras palabras las superficies $S = cte$ son perpendiculares al momento de las partículas en movimiento, y las guían sobre trayectorias fijas de acuerdo a las leyes dinámicas de movimiento [7].

Capítulo 4

Análisis y resultados

4.1. Caso unidimensional

Se presentará la forma que debe tener la función principal de Hamilton S , para que $\psi = e^{iS/\hbar}$ sea solución a la ecuación de Schrödinger, así como la forma del potencial $V(q, t)$ para el caso con un único grado de libertad q .

En los libros de texto, la forma de obtener la aproximación semiclásica a la mecánica cuántica es mediante el límite $\hbar \rightarrow 0$, esto está justificado cuando el término que contiene \hbar es pequeño comparado con los demás términos en la ecuación. De hecho esto tiene como consecuencia que la aproximación sea válida cuando el momento es mucho más pequeño que el gradiente del potencial.

La transición de la cuántica a la mecánica clásica, es análoga a la transición que hay entre la óptica ondulatoria y la óptica geométrica, es por ello que se utiliza la ecuación de Hamilton-Jacobi y la de Schrödinger. De hecho, Schrödinger se inspiró en la ecuación de Hamilton-Jacobi para proponer la ecuación que lleva su nombre.

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es:

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (4.1)$$

Proponiendo la siguiente solución:

$$\psi(q, t) = e^{iS(q, t)/\hbar}, \quad (4.2)$$

se obtiene:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + V(q, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial q^2}. \quad (4.3)$$

El lado izquierdo de la ec. (4.3) corresponde exactamente a la ecuación de Hamilton-Jacobi de la mecánica clásica. Hasta aquí, este es el mismo análisis realizado en los libros de texto, sin embargo en vez de tomar el límite $\hbar \rightarrow 0$ se propone lo siguiente:

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q^2} = 0. \quad (4.4)$$

Se observa que la ec. (4.4) corresponde a la ecuación de Laplace unidimensional (aunque S puede depender de t), al resolverla se obtiene la función principal de Hamilton:

$$S(q, t) = qp(t) + r(t), \quad (4.5)$$

donde $p(t)$ y $r(t)$ son funciones arbitrarias del tiempo. Ahora bien, la función S a su vez satisface la ecuación de Hamilton-Jacobi, por lo cual se debe cumplir:

$$\frac{1}{2m} \left[\frac{\partial}{\partial q} (qp(t) + r(t)) \right]^2 + V(q, t) + \frac{\partial}{\partial t} (qp(t) + r(t)) = 0. \quad (4.6)$$

Despejando a $V(q, t)$ de la ec. (4.6), se obtiene la forma del potencial:

$$V(q, t) = -\frac{1}{2m} [p(t)]^2 - qp'(t) - r'(t). \quad (4.7)$$

Se observa entonces que para potenciales de la forma (4.7), la función principal de Hamilton clásica, está contenida en la solución de la ecuación de Schrödinger $\psi(q, t) = e^{iS(q,t)/\hbar}$. A diferencia de la aproximación que se presenta en los libros de mecánica cuántica, en este caso la solución es exacta, ya que no hay restricción alguna para el momento de las partículas o su longitud de onda, como sucede en la aproximación semiclásica. Un caso particular, trivial, sería partícula libre ya que $V(q, t) = 0$.

Por otra parte cuando $V(q, t) \neq 0$ y tiene la forma (4.7), la fuerza correspondiente a dicho potencial es:

$$\mathbf{F} = p'(t)\hat{\mathbf{u}}, \quad (4.8)$$

donde $\hat{\mathbf{u}}$ es un vector unitario en la dirección de la fuerza.

De la expresión anterior se observa que si la función $p'(t) = cte.$, se tiene el caso de una fuerza homogénea, por ejemplo el campo gravitacional o un campo eléctrico uniforme.

La ecuación de Hamilton-Jacobi no es lineal porque el término $\partial S/\partial q$ aparece cuadráticamente en el Hamiltoniano, esto implica que la superposición de soluciones independientes no es solución. El número de soluciones a una ecuación diferencial parcial es infinito, como es bien conocido, dado un Hamiltoniano para un sistema mecánico con n grados de libertad, el conocimiento de una solución completa (es decir, una solución que contiene n constantes aditivas arbitrarias) de la ecuación HJ correspondiente, permite obtener la solución a las ecuaciones de movimiento [8]. Así que alguna de las soluciones completas (esto es, una en particular) cumplirá la condición establecida en la ec. (4.5). A continuación se muestran algunos ejemplos concretos con un grado de libertad.

4.1.1. Partícula libre

Un ejemplo que se puede analizar fácilmente es partícula libre. Al resolver la ecuación de Hamilton-Jacobi se obtiene:

$$S(q, E, t) = q\sqrt{2mE} - Et, \quad (4.9)$$

donde $E = cte.$

Esta solución es completa porque contiene un parámetro libre, que en este caso corresponde al valor de la energía E .

Evidentemente la forma de la función principal de Hamilton mostrada en la ec. (4.9), corresponde a un caso especial de la solución hallada anteriormente en la ec. (3.5). Por otra parte, también la siguiente función soluciona la ecuación de HJ correspondiente a una partícula libre:

$$S(q, Q, t) = \frac{(q - Q)^2}{2t}. \quad (4.10)$$

Aunque esta es una solución completa, no es de la forma de la ec. (4.5) y entonces ésta no produce una solución a la ecuación de Schrödinger de la forma $\psi = e^{iS/\hbar}$.

La ec. (4.9) genera la siguiente solución a la ecuación de Schrödinger:

$$\psi(q, t) = \exp \left[\frac{i(q\sqrt{2mE} - Et)}{\hbar} \right]. \quad (4.11)$$

Note que en este caso, la solución completa de HJ S , lleva a un conjunto completo de funciones de onda que satisfacen la ecuación de Schrödinger. La propagación de la onda cuántica está dada por el operador de evolución temporal, que en este caso contiene a la energía y la onda preserva su forma. Cada función describe una onda plana, en la que la partícula tiene una energía definida E y de acuerdo con la relación de de Broglie, momento $p = \hbar k = h/\lambda$; por lo que el espectro de energías de una partícula libre es continuo. Dicho de otra forma, aunque es un conjunto completo de funciones, no son cuadrado integrables porque al tener energía definida la integral sobre todo el espacio diverge; así que será necesario preparar **paquetes de onda** los cuales están localizados en cierta región del espacio y resultan de la superposición de varias ondas planas con distinto número de onda (o energía).

4.1.2. Fuerza homogénea en el espacio

A continuación se analiza el caso de una partícula bajo la acción de una fuerza constante, para resolver el problema, partimos de la forma que debe tener el potencial dada por la ec. (4.7), como $V = -Fq$ se obtiene la solución a la ecuación de HJ:

$$S(q, P, F, t) = (P + Ft)q - \frac{P^2 t}{2m} - \frac{F P t^2}{2m} - \frac{F^2 t^3}{6m}, \quad (4.12)$$

la ec. (4.12) es una solución completa a la ecuación de HJ porque tiene un parámetro libre P y además no es separable, los valores de $p(t)$ y $r(t)$ en (4.5) se han obtenido mediante la expresión del potencial (4.7), así que:

$$p(t) = P + Ft, \quad (4.13)$$

y

$$r(t) = -\frac{(P + Ft)^3}{6mF}, \quad (4.14)$$

el potencial:

$$V(q, t) = -\frac{1}{2m}[P + Ft]^2 - q(F) + \frac{(P + Ft)^2}{2m} = -Fq. \quad (4.15)$$

La correspondiente solución a la ecuación de Schrödinger es:

$$\psi(q, t) = \exp \left[\frac{i(P + Ft)q}{\hbar} - \frac{iP^2 t}{2m\hbar} - \frac{iF P t^2}{2m\hbar} - \frac{iF^2 t^3}{6m\hbar} \right], \quad (4.16)$$

la función de onda anterior se puede escribir también de la siguiente manera:

$$\psi(q, t) = \exp \left[i \frac{(P + Ft)q}{\hbar} - \frac{i(P + Ft)^3}{6mF\hbar} \right] \exp \left[\frac{iP^3}{6mF\hbar} \right]. \quad (4.17)$$

Observe que al igual que la función principal de Hamilton, la función de onda (4.16) tampoco es separable.

Otra forma de resolver este problema en cuántica, es analizar la ecuación en el espacio de momentos, al realizar esto la función de onda que se obtiene es la siguiente:

$$\phi(p) = \exp \left[\frac{i}{F\hbar} \left(Ep - \frac{p^3}{6m} \right) \right], \quad (4.18)$$

y para obtener la solución en el espacio de coordenadas se aplica una transformación de Fourier, esto da como resultado la función de Airy:

$$\psi'(q, t) \propto \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p + Ft)q - \frac{i(p + Ft)^3}{6m\hbar} \right], \quad (4.19)$$

donde p es el momento de la partícula, la ec. (4.19) es el resultado de superponer eigenestados de energía con igual probabilidad, los cuales están dados por la ec. (4.18). Además la ec. (4.17), muestra que la

solución obtenida con la función principal de Hamilton, es proporcional a la solución que se obtiene por el método usual. Por otra parte, las funciones de Airy conforman un conjunto completo, entonces ¿las funciones de la ec. (4.16) conforman un conjunto completo? En efecto, la solución dada por la ec. (4.16) conforma un conjunto completo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(q, t) \psi^*(q', t) dq = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \delta(q - q'), \quad (4.20)$$

la relación de completitud se cumple manteniendo fijo el tiempo t , al igual que en el caso de una onda plana libre, el espectro es continuo y el momento P puede tomar cualquier valor. Las funciones de onda (4.16) son eigenfunciones del operador de momento inicial: $p - Ft$.

4.1.3. Transformación canónica: Partícula libre a Partícula en un campo homogéneo

A continuación se realiza una transformación de coordenadas, de un sistema de referencia inercial a uno no inercial. Para ello se utiliza el procedimiento presentado en el artículo [9]

$$U_g^{-1} x U_g = x - \frac{1}{2} g t^2, \quad U_g^{-1} p U_g = p - m g t, \quad (4.21)$$

el parámetro en este caso es g , que corresponde a la aceleración entre los dos marcos de referencia. Al diferenciar respecto a g y evaluando en $g = 0$ se obtiene:

$$\frac{1}{i\hbar} [A, x] = -\frac{1}{2} t^2, \quad \frac{1}{i\hbar} [A, p] = -m t, \quad (4.22)$$

utilizando las ecuaciones anteriores y las siguientes relaciones:

$$[A, x] = i\hbar \frac{\partial A}{\partial p}, \quad [A, p] = -i\hbar \frac{\partial A}{\partial x}, \quad (4.23)$$

se obtiene la forma de A :

$$A = m x t - \frac{p}{2} t^2 + f(t). \quad (4.24)$$

Si $f(t) = -m g t^3 / 6$, la expresión (4.24) sirve para construir el operador que transforma la función de onda para partícula libre en la función de onda para movimiento en un campo homogéneo en el espacio.

$$A = m x t - \frac{p}{2} t^2 - m g \frac{t^3}{6}, \quad (4.25)$$

la transformación unitaria entonces es:

$$U_g = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(m g x t - g \frac{p}{2} t^2 - m g^2 \frac{t^3}{6} \right) \right], \quad (4.26)$$

y finalmente la función de onda correspondiente a una partícula que se mueve en un campo homogéneo es:

$$\psi(x, t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left((p + m g t) x - \frac{p^2 t}{2m} - g \frac{p}{2} t^2 - m g^2 \frac{t^3}{6} \right) \right]. \quad (4.27)$$

Observe que sustituyendo $F = m g$ en la expresión (4.16), se obtiene una expresión idéntica a (4.27), donde $q = x$ y $p = P$. Es decir, se ha encontrado un operador unitario que transforma la función de onda de un sistema de referencia inercial a uno no inercial.

4.1.4. Potencial $V = ktq$

Utilizando la ec. (4.7), se encuentra la forma que debe tener la función principal de Hamilton:

$$S(q, P, t) = \left(\frac{1}{2}kt^2 + P\right)q - \frac{1}{2m} \left(P^2t + \frac{1}{3}Pkt^3 + \frac{1}{20}k^2t^5\right), \quad (4.28)$$

ésta es una solución completa a la ecuación de HJ, donde el parámetro libre es P . La función de onda que soluciona la ecuación de Schrödinger es:

$$\psi(q, P, t) = \exp \frac{i}{\hbar} \left[\left(\frac{kt^2}{2} + P\right)q - \frac{1}{2m} \left(P^2t + \frac{1}{3}Pkt^3 + \frac{1}{20}k^2t^5\right) \right]. \quad (4.29)$$

De igual forma, la solución dada por la ec. (4.29) conforma un conjunto completo de funciones de onda para cada valor fijo de t . El espectro de P también es continuo, por lo que es necesario formar un paquete de onda para que las funciones sean cuadrado integrable, igual que en el caso de una partícula libre. Además la función de onda (4.29) es eigenfunción del operador $p - kt^2$, con eigenvalor P , para cada valor fijo de t .

4.2. Caso de dos dimensiones

Se presenta el análisis para una partícula con dos grados de libertad. En este caso el hamiltoniano tiene la siguiente forma en coordenadas cartesianas:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x, y, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 \right] + \hat{V}(x, y, t), \quad (4.30)$$

así que la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + V(x, y, t)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (4.31)$$

Proponiendo la siguiente solución:

$$\psi(x, y, t) = e^{iS(x, y, t)/\hbar}, \quad (4.32)$$

se obtiene:

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 \right] + V(x, y, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right), \quad (4.33)$$

el lado izquierdo de la ec. (4.33) corresponde exactamente a la ecuación de Hamilton-Jacobi de la mecánica clásica, siempre que el lado derecho de la ecuación satisfaga:

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} = 0. \quad (4.34)$$

La solución más general a la ecuación diferencial (4.34) es de la forma:

$$S(x, y, t) = u(x, y, t) = \frac{1}{2} \left[f(z(x, y), t) + \overline{f(z(x, y), t)} \right], \quad (4.35)$$

donde $z = x + iy$ y f es una función analítica. Es decir, la solución es una función armónica. Utilizando la ec. (4.35) en la ecuación de HJ, la cual corresponde al lado izquierdo en la ec. (4.33):

$$\frac{1}{8m} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 + 2 \left(\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial \bar{f}}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2 + 2 \left(\frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial \bar{f}}{\partial y}\right) + \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial y}\right)^2 \right] + V(z; t) + \frac{1}{2} \frac{\partial (f + \bar{f})}{\partial t} = 0. \quad (4.36)$$

CAPÍTULO 4. ANÁLISIS Y RESULTADOS
4.2. CASO DE DOS DIMENSIONES

Las funciones complejas que componen a la solución dada por la ec. (4.35), satisfacen las siguientes ecuaciones diferenciales parciales de primer orden:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -i \frac{\partial f}{\partial y}, \quad \frac{\partial \bar{f}}{\partial x} = i \frac{\partial \bar{f}}{\partial y}, \quad (4.37)$$

pues se tiene que:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} + i \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} - i \frac{\partial u}{\partial y} = -i \left(\frac{\partial u}{\partial y} + i \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -i \frac{\partial f}{\partial y}, \quad (4.38)$$

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} - i \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} + i \frac{\partial u}{\partial y} = i \left(\frac{\partial u}{\partial y} - i \frac{\partial v}{\partial y} \right) = i \frac{\partial \bar{f}}{\partial y}, \quad (4.39)$$

al sustituir la ec. (4.37) en la ec. (4.36) se obtiene la forma que debe tener el potencial:

$$V(z, t) = -\frac{1}{2m} \left| \frac{\partial f}{\partial z} \right|^2 - \frac{1}{2} \frac{\partial (f + \bar{f})}{\partial t}. \quad (4.40)$$

Proponiendo la forma de la función f se pueden obtener ejemplos de sistemas físicos en los que el resultado de tomar en cuenta cada camino cuántico posible en la integral de trayectoria de Feynman, es equivalente a la trayectoria clásica. Sustituyendo la ec. (4.40) en la ec. (4.36), se obtiene lo siguiente:

$$\frac{1}{8m} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 - 2 \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial \bar{f}}{\partial x} + \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial \bar{f}}{\partial y} + \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial y} \right)^2 \right] = 0, \quad (4.41)$$

así se obtiene la siguiente condición:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\text{Im}f) = -\frac{\partial}{\partial y} (\text{Re}f). \quad (4.42)$$

En la teoría de la integral de trayectoria, se establece que cuando la lagrangiana es a lo más cuadrática en las coordenadas generalizadas, entonces la única contribución que permanece después de realizar la integral de caminos, es la clásica[10]. Sin embargo, en este caso se está encontrando que la condición necesaria para que esto se cumpla es que las funciones que componen al potencial sean analíticas. Es decir, las funciones deben cumplir las condiciones de Cauchy-Riemann y por lo tanto corresponden a funciones armónicas. El potencial cambia la fase de las amplitudes asociadas a cada camino, lo cual cambia los patrones de interferencia constructiva y destructiva entre las amplitudes de los diferentes caminos posibles. Se ha encontrado que si el potencial, para el caso de dos dimensiones y sin dependencia en las velocidades, tiene la forma dada por (4.40), entonces sólo la fase correspondiente a la acción clásica contribuye a la integral de caminos. Es decir, $e^{iS/\hbar}$ es solución a la ecuación de Schrödinger.

A continuación se presenta el mismo análisis para el caso de coordenadas curvilíneas ortogonales q_1, q_2 , con factores de escala h_1, h_2 . En este caso, la ecuación de Hamilton-Jacobi se expresa como:

$$\frac{1}{2m} \left[\frac{1}{h_1^2} \left(\frac{\partial S}{\partial q_1} \right)^2 + \frac{1}{h_2^2} \left(\frac{\partial S}{\partial q_2} \right)^2 \right] + V(q_1, q_2, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (4.43)$$

Por otro lado se tiene el laplaciano en coordenadas curvilíneas:

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{h_2 h_1} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2}{h_1} \frac{\partial \psi}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_1}{h_2} \frac{\partial \psi}{\partial q_2} \right) \right] \quad (4.44)$$

Así que la ecuación de Schrödinger es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{h_2 h_1} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_1}{h_2} \frac{\partial \psi}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_1}{h_2} \frac{\partial \psi}{\partial q_2} \right) \right] + V(q_1, q_2, t) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (4.45)$$

Proponiendo la solución $\Psi = e^{iS/\hbar}$ para la ecuación de Schrödinger, se obtiene:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m} \left[\frac{1}{h_1^2} \left(\frac{\partial S}{\partial q_1} \right)^2 + \frac{1}{h_2^2} \left(\frac{\partial S}{\partial q_2} \right)^2 \right] + V(q_1, q_2, t) + \frac{\partial S}{\partial t} \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \left[\frac{1}{h_1^2} \frac{\partial^2 S}{\partial q_1^2} + \frac{1}{h_2^2} \frac{\partial^2 S}{\partial q_2^2} + \frac{1}{h_1 h_2} \frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2}{h_1} \right) \frac{\partial S}{\partial q_1} + \frac{1}{h_1 h_2} \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_1}{h_2} \right) \frac{\partial S}{\partial q_2} \right] \end{aligned} \quad (4.46)$$

Para obtener la ecuación de Hamilton-Jacobi se debe cumplir que:

$$\frac{1}{h_1^2} \frac{\partial^2 S}{\partial q_1^2} + \frac{1}{h_2^2} \frac{\partial^2 S}{\partial q_2^2} + \frac{1}{h_1 h_2} \frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2}{h_1} \right) \frac{\partial S}{\partial q_1} + \frac{1}{h_1 h_2} \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_1}{h_2} \right) \frac{\partial S}{\partial q_2} = 0 \quad (4.47)$$

La cual corresponde a la ecuación de Laplace en dos dimensiones para coordenadas curvilíneas. Es decir, la condición que se debe cumplir para que dada una función principal de Hamilton S , la exponencial $e^{iS/\hbar}$ sea solución a la ecuación de Schrödinger no depende del sistema coordenado en que se analice al sistema físico.

4.2.1. Oscilador armónico invertido bidimensional

El oscilador armónico invertido, es un ejemplo que cumple con las características dadas por la ec. (4.35). Se propone la función $f(z, t) = f(x, y, t)$:

$$f(z, t) = f(x, y, t) = \frac{k}{2}(x^2 - y^2)g(t) + i(kxy)g(t) + h(t) \quad (4.48)$$

Las funciones $g(t)$ y $h(t)$ se determinarán más adelante. Por ahora, dada la forma de la función $f(z, t)$, es posible obtener la forma del potencial:

$$V(z, t) = V(x, y, t) = -\frac{k^2}{2m}(x^2 + y^2)g^2(t) - \frac{k}{2}(x^2 - y^2)g'(t) - h'(t) \quad (4.49)$$

De la ec. (4.49) se observa que si $g(t) = 1$ y $h(t) = -Et$, se obtiene el potencial correspondiente a un oscilador armónico invertido bidimensional:

$$V(x, y, t) = -\frac{k^2}{2m}(x^2 + y^2) + E, \quad (4.50)$$

la función principal de Hamilton es:

$$S(x, y, t) = \frac{1}{2}k(x^2 - y^2) - Et, \quad (4.51)$$

la solución a la correspondiente ecuación de Schrödinger será:

$$\psi(x, y, t) = \exp \frac{i}{2\hbar} [k(x^2 - y^2) - Et]. \quad (4.52)$$

El oscilador armónico invertido comenzó como un ejercicio en el libro de Landau, sus aplicaciones físicas han ido en aumento desde la tesis de Doctorado de Barton (publicada en [11]), como un modelo de juguete para explicar los modelos inflacionarios en una etapa temprana. Es interesante observar que ambos potenciales el oscilador armónico y el armónico invertido son producidos a la vez en una trampa ideal de Penning la cual, por lo general se utiliza para confinar partículas cargadas. En su configuración normal, un campo electrostático cuadrupolar crea un potencial de oscilador armónico sobre el eje de simetría de la trampa, induciendo confinamiento a lo largo de esta dirección. Además en el plano ortogonal surge un potencial de oscilador armónico invertido conduciendo a las partículas hacia las paredes de la trampa. Con el fin de compensar este último efecto, se aplica un campo magnético estático y homogéneo a lo largo del eje de simetría de la trampa [12].

Observe que la solución presentada en la ecuación (4.51) y (4.52) no es completa porque no contiene ningún parámetro libre. La solución que se presenta a continuación sí es completa:

$$S(x, y, t) = \frac{m\omega}{2}(x^2 - y^2) + P_1 e^{-\omega t} x + P_2 e^{\omega t} y + \frac{1}{4m\omega}(P_1^2 e^{-2\omega t} - P_2^2 e^{2\omega t}) \quad (4.53)$$

contiene como parámetros libres a P_1 y P_2 , además ω y m son constantes. La correspondiente solución a la ecuación de Schrödinger es:

$$\psi(x, y, t) = \exp \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m\omega}{2}(x^2 - y^2) + P_1 e^{-\omega t} x + P_2 e^{\omega t} y + \frac{1}{4m\omega}(P_1^2 e^{-2\omega t} - P_2^2 e^{2\omega t}) \right] \quad (4.54)$$

Cada función de onda de la solución anterior (4.54) es eigenfunción común de los operadores conservados $e^{\omega t}(p_x - m\omega x)$ y $e^{-\omega t}(p_y + m\omega y)$ con eigenvalores P_1 y P_2 respectivamente.

4.2.2. Potencial $V = \frac{k}{r^2}$

La función $\ln(z)$ es armónica, por lo que debe cumplir la ecuación de Laplace (4.34). Si se propone la función $f(z, t)$ como:

$$f(z, t) = g(t) \ln(z) + h(t), \quad (4.55)$$

para obtener el potencial asociado a esta función, se utiliza (4.40):

$$V(r, t) = -\frac{g(t)^2}{2mr^2} - g'(t) \ln(r^2) - h'(t), \quad (4.56)$$

si $g(t) = k$ y $h'(t) = 2E$, el potencial queda expresado finalmente como:

$$V(r, t) = -\frac{k^2}{2mr^2} + 2E, \quad (4.57)$$

y la función $f(z, t)$ tiene la siguiente forma:

$$f(z, t) = k \ln(z) - Et, \quad (4.58)$$

esta función debe cumplir (4.42), observe que:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\text{Im}f) = \frac{\partial}{\partial x} \left[k \arctan \left(\frac{y}{x} \right) \right] = -\frac{ky}{x^2 + y^2}, \quad (4.59)$$

y por otra parte:

$$\frac{\partial}{\partial y} (\text{Re}f) = \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{k}{2} \ln(x^2 + y^2) - Et \right] = \frac{ky}{x^2 + y^2} \quad (4.60)$$

de las expresiones anteriores, (4.59) y (4.60), se observa que $f(z, t)$ cumple la relación. Así que la función principal de Hamilton es:

$$S(r, t) = k \ln(r^2) - Et \quad (4.61)$$

La solución al problema análogo cuántico será entonces:

$$\psi(r, t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} k \ln(r^2) - \frac{i}{\hbar} Et \right] \quad (4.62)$$

4.3. Caso tridimensional

Se ha realizado el análisis para el caso unidimensional y bidimensional, ahora se presenta el análisis para tres dimensiones (o tres grados de libertad) en coordenadas curvilíneas ortogonales. En este caso el hamiltoniano tiene la siguiente forma:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(q_1, q_2, q_3; t), \quad (4.63)$$

el operador dado por:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial \psi}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\partial \psi}{\partial q_2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial \psi}{\partial q_3} \right) \right], \quad (4.64)$$

así que la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial \psi}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\partial \psi}{\partial q_2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial \psi}{\partial q_3} \right) \right] + V(q_1, q_2, q_3; t) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (4.65)$$

Proponiendo la siguiente solución:

$$\psi(q, t) = e^{iS(q, t)/\hbar} \quad (4.66)$$

se obtiene:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m} \left[\frac{1}{h_1^2} \left(\frac{\partial S}{\partial q_1} \right)^2 + \frac{1}{h_2^2} \left(\frac{\partial S}{\partial q_2} \right)^2 + \frac{1}{h_3^2} \left(\frac{\partial S}{\partial q_3} \right)^2 \right] + V(q_1, q_2, q_3; t) + \frac{\partial S}{\partial t} \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \left[\frac{1}{h_1^2} \frac{\partial^2 S}{\partial q_1^2} + \frac{1}{h_2^2} \frac{\partial^2 S}{\partial q_2^2} + \frac{1}{h_3^2} \frac{\partial^2 S}{\partial q_3^2} + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \right) \frac{\partial S}{\partial q_1} + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_1 h_3}{h_2} \right) \frac{\partial S}{\partial q_2} \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \right) \frac{\partial S}{\partial q_3} \right]. \end{aligned} \quad (4.67)$$

El lado izquierdo de la ec. (4.67) corresponde exactamente a la ecuación HJ de la mecánica clásica, siempre que el lado derecho de la ecuación satisfaga:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_1^2} \frac{\partial^2 S}{\partial q_1^2} + \frac{1}{h_2^2} \frac{\partial^2 S}{\partial q_2^2} + \frac{1}{h_3^2} \frac{\partial^2 S}{\partial q_3^2} + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \right) \frac{\partial S}{\partial q_1} \\ & + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_1 h_3}{h_2} \right) \frac{\partial S}{\partial q_2} + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \right) \frac{\partial S}{\partial q_3} = 0. \end{aligned} \quad (4.68)$$

La ecuación diferencial (4.68) es el laplaciano en coordenadas curvilíneas:

$$\nabla^2 S = \frac{1}{\prod_j h_j} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\frac{\prod_j h_j}{h_i^2} \frac{\partial S}{\partial q_i} \right) = 0, \quad (4.69)$$

la solución en coordenadas cartesianas a esta ecuación es:

$$S = C_{ij\dots k} q_i q_j \cdots q_k, \quad (4.70)$$

donde S es un polinomio homogéneo de grado p , los coeficientes (reales o complejos) son simétricos en sus p índices ($i, j, \dots = 1, \dots, n$) y $tr(C_{ij\dots k}) = 0$. Una vez más se sustituye la solución (4.70) en la ecuación de HJ y así se obtiene la forma del potencial:

$$V = -\frac{[p(C_{ij\dots k})x_i x_j \cdots x_k]^2}{2m} - \frac{d}{dt}(C_{ij\dots k} x_i x_j \cdots x_k), \quad (4.71)$$

CAPÍTULO 4. ANÁLISIS Y RESULTADOS
4.3. CASO TRIDIMENSIONAL

una solución trivial es partícula libre en 3 dimensiones, lo cual es un resultado esperado ya que partícula libre corresponde a $V = 0$, además se sabe que $\psi = \exp^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)/\hbar}$ es la onda plana y conforma un conjunto completo de funciones de onda.

Para encontrar soluciones, sólo es necesario proponer una matriz $C_{ij\dots k}$ simétrica y de traza cero, ya que ésta determina el potencial y la solución S .

Observe que la función de onda propuesta como solución siempre tiene módulo constante sin importar en qué dimensión se analice, así que la probabilidad es constante. Esto nos indica que es necesario en cada caso formar paquetes de onda, así como se realiza para partícula libre.

Capítulo 5

Conclusiones

- Las soluciones que se han presentado tienen una característica especial, la densidad de probabilidad resulta ser constante para cualquier punto del espacio. Además las soluciones no son cuadrado integrables.
- La solución obtenida se puede utilizar como base, para formar paquetes de onda y de esta manera la densidad de probabilidad de la función de onda ya no es constante y es cuadrado integrable, así como en el caso de una partícula libre.
- Las soluciones más usuales al problema de una partícula que se mueve en un campo homogéneo en el espacio, son las funciones de Airy y se observó que las soluciones obtenidas con el método propuesto son equivalentes a éstas, aún más, estas funciones, al igual que las de Airy, conforman un conjunto completo.
- No ha sido necesario resolver la ecuación de HJ, la cual es una ecuación diferencial parcial (no siempre sencilla de resolver), una vez que se propone el potencial la función principal de Hamilton se determina casi automáticamente.
- Las soluciones completas a la ecuación de Hamilton-Jacobi $S(x_i, t)$, llevan a un conjunto completo de soluciones a la ecuación de Schrodinger $\psi = \exp iS/\hbar$.
- Se analizó la transformación canónica que se debe realizar en cuántica, para pasar de partícula libre a partícula en un campo homogéneo.
- Se observó que el problema en una dimensión es muy restringido, ya que el potencial puede ser a lo más lineal en la coordenada. Sin embargo para el caso en dos dimensiones, las posibilidades son más amplias, ya que se pueden construir de funciones principales de Hamilton que son armónicas y éstas pueden ser utilizadas para construir una solución a la ecuación de Schrodinger.

- Las soluciones obtenidas no son separables, al menos no necesariamente, por lo que obtenerlas mediante el método usual de separación de variables no es posible.
- Dado un potencial, se busca la forma de las funciones $r(t)$ y $p(t)$ o $f(z,t)$ para construir la función principal de Hamilton, de tal forma que $\psi = \exp iS/\hbar$ sea solución a la ecuación de Schrödinger.
- Para un potencial dado, la existencia de una solución simultánea a la ecuación de HJ y Laplace, no implica que todas las soluciones a la ecuación de HJ satisfacen la ecuación de Laplace.

Bibliografía

- [1] TORRES DEL CASTILLO, G.F., *Rev. Mex. Fis.* **59** (2013) 478.
- [2] GREINER, WALTER (2003), *Classical Mechanics: systems of particles and Hamiltonian dynamics*, New York, Springer, cap. 20 pp. 341-345.
- [3] GOLDSTEIN, HERBERT (2000), *Classical Mechanics*, New York, Addison Wesley, cap. 9 pp. 368-387.
- [4] GREINER, WALTER (2003), *Classical Mechanics: systems of particles and Hamiltonian dynamics*, New York, Springer, cap. 20 pp. 386-416.
- [5] TORRES DEL CASTILLO, G.F. *An Introduction to Hamiltonian Mechanics* (in preparation).
- [6] GOTTFRIED, KURT (2002), *Quantum Mechanics: Fundamentals*, New York, Springer, cap. 2 pp. 92-112.
- [7] OREFICE, A. GIOVANELLI, R. AND DITTO, D., arXiv:1310.8077 [quant-ph] (22 Marzo 2014).
- [8] TORRES DEL CASTILLO, G.F., *Rev. Mex. Fis.* **57** (2011) 245.
- [9] TORRES DEL CASTILLO, G.F. AND HERRERA FLORES, J.E., *Rev. Mex. Fis.* **62** (2016) 135-137.
- [10] SCHULMAN, L.S., (2005), *Techniques and Applications of Path Integration*, New York, Dover Publications, cap. 6 pp. 31-41.
- [11] BARTON, G., *Ann. Phys.* **166** (1986) pp. 322-363.
- [12] BERMÚDEZ, D. Y FERNÁNDEZ, D.J., arXiv:1206.4519v3 [quant-ph] (9 Abril 2013).

