

Universidad Juar et Autonorma de Tabasco.

## Declaración de autoría y originalidad

En la ciudad de <u>Cunduacán</u>, el día <u>23</u> del mes de <u>agosto</u> del año <u>2024</u>, el que suscribe <u>Lic. Rafael</u> <u>Díaz Mondragón</u> alumno del Programa de <u>Maestría en Ciencias con Orientación en Nanociencias</u> con número de matrícula <u>152A17001</u>, adscrito a la <u>División Académica de Ciencias Básicas</u>, de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, como autor de la Tesis presentada para la obtención del titulo de <u>Maestro en Ciencias con Orientación en Nanociencias</u> y titulada <u>Principio de</u> correspondencia aplicado al pozo circular infinito dirigido por Dr. Jorge Alejandro Bernal Arroyo.



La Tesis es una obra original que no infringe los derechos de propiedad intelectual ni los derechos de propiedad industrial u otros, de acuerdo con el ordenamiento jurídico vigente, en particular, la LEY FEDERAL DEL DERECHO DE AUTOR (Decreto por el que se reforman y adicionan diversas disposiciones de la Ley Federal del Derecho de Autor del 01 de Julio de 2020 regularizando y aclarando y armonizando las disposiciones legales vigentes sobre la materia), en particular, las disposiciones referidas al derecho de cita.

Del mismo modo, asumo frente a la Universidad cualquier responsabilidad que pudiera derivarse de la autoría o falta de originalidad o contenido de la Tesis presentada de conformidad con el ordenamiento jurídico vigente.

Cunduacán, Tabasco a 23 de agosto del 2024.

Lic. Rafael Díaz Mondragón



Universidad march Amtonoma de Tabasco.





División Académica de Ciencias Básicas



"ESTUDIO EN LA DUDA. ACCIÓN EN LA FE"

DIRECCIÓN

Cunduacán, Tabasco a 17 de septiembre de 2024

DIVISION ACADÉMICA DE

Kabascu

### LIC. RAFAEL DÍAZ MONDRAGÓN PASANTE DE MAESTRÍA EN CIENCIAS CON ORIENTACIÓN EN NANOCIENCIAS PRESENTE

Por medio de la presente me dirijo a Usted para hacer de su conocimiento que proceda a la impresión del trabajo titulado **"Principio de correspondencia aplicado al pozo circular infinito**"; en virtud de que reúne los requisitos para el EXAMEN PROFESIONAL y obtener el grado de Maestro en Ciencias con Orientación en Nanociencias.

Sin más por el momento, reciba un cordial saludo.

DRA. HERMICENDA PÉREZ VIDAL DIRECTORA

ATENTAMENTE

C.c.p.- Archivo DIR´DRA.HPV/JP´DRA.EAM/jkal Universidad march Amtonoma de Labasco.

### Carta de cesión de derechos

Cunduacán, Tabasco a 23 de agosto del 2024

Por medio de la presente manifestamos haber colaborado como AUTORES en la producción, creación y realización de la obra denominada Principio de correspondencia aplicado al pozo circular infinito.

Con fundamento en el artículo 83 de la Ley Federal del Derecho de Autor y toda vez que, la creación y realización de la obra antes mencionada se realizó bajo la comisión de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco: entendemos y aceptamos el alcance del artículo en mención, de que tenemos el derecho al reconocimiento como autores de la obra, y la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco mantendrá en un 100 % la titularidad de los derechos patrimoniales por un período de 20 años sobre la obra en la que colaboramos, por lo anterior, cedemos el derecho patrimonial exclusivo en favor de la Universidad.

COLABORADORES ernal Arroyo Kalael Diaz Mondragón Jorge Al Director de tesis Alumno TESTIGOS Dr. Jorge Mauricio Paulin Fuentes abrera Dr. Jaime basce

Universidad Juar et Autonorma de Tabasco.

# Dedicatorias

A mill padres Maria Natividad y Catarino, por su amor y apoyo incondicional

Universidad march Amtonoma de Fabasco.

# Agradecimientos

Agradezco de manera especial a mi director de tesis, al Dr. Jorge Alejandro Bernal Arroyo, por su apoyo, paciencia y comprensión durante estos años.

De manera particular agradezco al exdirector de la División Académica de Ciencias Básicas de <sup>μ</sup> y a. la UJAT, Dr. Gerardo Delgadillo Piñon y a la directora, Dra. Hermicenda Pérez Vidal, por su gran apoyo.

Finalmente quiero agradecer a la jefatura de posgrado de la DACB, M.C. Norma Leticia Becerril Altamirano y Dra. Erika Alarcón Matus, por su gran apoyo y comprensión en este proceso.

# Índice general

1. Introducción	25
2. Principio de correspondencia	<b>31</b>
2.1. Nueva formulación matemática del principio de correspondencia	32
2.1.1. Procedimiento de la nueva formulación matemática del principio de corres-	
pondencia	33
2.2. Aplicaciones de la nueva formulación del principio de correspondencia a algunos	
sistemas cuánticos	34
$2.2.1. Pozo cuadrado infinito unidimensional \dots \dots$	34
$2.2.2. Oscilador armónico unidimensional \ldots \ldots$	37
2.2.3. El problema cuántico de Kepler	37
3. Pozo circular infinito	<b>39</b> 43
3.2. Densidad de probabilidad cuántica	45
	10
4. Principio de correspondencia aplicado al Pozo circular infinito	<b>49</b>
4.1. Transformada de Fourier de la densidad de probabilidad cuántica	49
4.1.1. Primera aproximación del límite clásico	51
4.1.2. Transformada inversa de Fourier de la primera aproximación	52
4.2. Mecánica cuántica asintótica del pozo circular infinito	54
4.2.1. Aproximación asintótica del coeficiente de Fourier	55
4.2.2. Transformada inversa del coeficiente de Fourier 🔨	55
4.3. Discusiones	57
5. Conclusiones	59
Α.	61
A.1. Funciones de Bessel	61
В.	69
B.1. Integral de $J_{\circ}^2$	69
B.2. Generalización de la integral de $J_0^2$	73
B.3. Generalización de la integral de $J_n^2$	76
C.	77
	$\dot{\mathbf{C}}$

# Índice de figuras

2.1. Procedimiento de la nueva formulación matemática del principio de correspondenc	ia. 33
2.2. El potencial es $V(x) = 0$ dentro del pozo cuadrado, región determinado por $0 < x < 0$	<
$a, y \in V(x) = \infty$ fuera de esa región.	34
3.1. El potencial es $V(r) = 0$ dentro del pozo circular, región definido por $r < a$ , y e	s
$V(r) = \infty$ fuera de esa región.	39
3.2. Gráfica de la función de estado $\psi_{\alpha}(x) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi a} J_1(\alpha) } J_0(\alpha x)$ , con $a = 1$ y $x \in [0, 1]$ . Lo	s
incisos muestran la gráfica de esta función para algunos valores de los ceros de l	a
función de Bessel $\alpha$ .	44
3.3. Gráfica de la densidad de probabilidad cuántica (QPD) dado por $\rho_{\alpha}^{QM}(x) = \frac{2}{\pi a^2 J_1^2(\alpha)}$	$J_0^2\left(\alpha x\right)$
y de la densidad de probabilidad clásica (CM) dado por $\rho^{CM}(x) = \frac{1}{\pi a^2} \left[ \theta(x) - \theta(x - \theta) \right]$	- 1)],
donde $r = ax$ , $a = 1$ y $x \in [0, 1]$ . Los incisos muestran las gráficas para los diferente	s
números cuánticos dados por los ceros de la función de Bessel $\alpha$ .	46
3.4. Gráfica de la densidad de probabilidad cuántica (QPD) dado por $\rho_{\alpha}^{QM}(x)$ y de l	a
densidad de probabilidad clásica (CM) dado por $\rho^{CM}(x)$ , donde $r = ax$ , $a =$	1
y $x \in [0, 1]$ . Los incisos muestran las gráficas para los diferentes números cuántico	s
grandes dados por los ceros de la función de Bessel $\alpha$ .	47

IIdao 4.1. Comportamiento asintótico de la densidad de probabilidad cuántica (AQM). 56

# ncipio de corresponden plicado al pozo circular infi.

# Resumen

La física clásica y la mecánica cuántica son dos de las teorías más importantes de la física; la primera describe al mundo macroscópico y la segunda al microscópico. Sin embargo, las relaciones entre la física cuántica y la clásica no se han logrado comprender completamente. La descripción no intuitiva y probabilística de la mecánica cuántica en contraste con el determinismo de la física clásica han sido y siempre serán temas de discusión mientras no se esclarezcan y comprendan de manera unitaria y coherente las relaciones entre ambas teorías. Existen diferentes planteamientos para ello, pero aún no hay un trabajo acabado que haya respondido todas las interrogantes, pero el hecho de que existen trabajos que partiendo de la mecánica cuántica logran recuperar los equivalentes clásicos de las magnitudes físicas, los llamados límites clásicos, independientemente A A c descri s los trabajs se análogos clás orma completa el , pleando una nueva for del procedimiento empleado, arroja la luz de que en algún momento se llegarán a completar estos trabajos. Por ejemplo, sería muy interesante poder describir completamente los fenómenos físicos en la frontera de la física cuántica y clásica. Uno de los trabajos más importantes que permite conectar las magnitudes cuánticas en sus límites con sus análogos clásicos, es el principio de correspondencia de Bohr. En este trabajo se resuelve en forma completa el problema del pozo circular cuántico infinito y se determina su límite clásico empleando una nueva formulación matemática del principio de correspondencia de Bohr.

# Abstract

Classical physics and quantum mechanics represent two of the most significant theories in the field of physics; the former describes the macroscopic world, while the latter addresses the microscopic realm. However, the relationships between quantum and classical physics have yet to be fully understood. The non-intuitive and probabilistic nature of quantum mechanics, in contrast with the determinism of classical physics, has been and will continue to be topics of debate until the relationships between both theories are elucidated and comprehended in a unified and coherent manner. Various approaches have been proposed, yet no definitive work has answered all the questions. Nonetheless, the fact that there are studies that, starting from quantum mechanics, successfully recover the classical equivalents of physical quantities—commonly referred to as classical limits—regardless po y intrig physics. C aentities in th k, the problem of mined using a new n. of the methodology employed, sheds light on the possibility that these efforts may eventually be completed. For instance, it would be particularly intriguing to fully describe physical phenomena at the boundary between quantum and classical physics. One of the most crucial contributions that facilitates the connection between quantum quantities in their limits with their classical analogs is Bohr's correspondence principle. In this work, the problem of the infinite quantum circular well is fully resolved, and its classical limit is determined using a new mathematical formulation of Bohr's correspondence principle.

19

# ni Palabras claves

Pozo circular infinito; principio de correspondencia; límite clásico.

the there is a second sec

# · mil Keywords

Principle on The second Infinite circular well; principle of correspondence; classical limit.

# Capítulo 1

### Introducción

La mecánica cuántica es una de las teorías más exitosas de la física. La importancia de su éxito se debe a que permite explicar experimentos obtenidos en el laboratorio y a predecir otros fenómenos. Sin embargo, la física cuántica conceptualmente difiere en gran manera respecto de la física clásica. Las diferencias conceptuales fundamentales surgieron desde los inicios de la mecánica cuántica, y debido al carácter no intuitivo, el dualismo corpuscular y ondulatorio, y el carácter estadístico de su descripción generaban grandes debates y discusiones. Una de estas discusiones se centraba sobre la aparente contradicción que surgía al analizar el rastro de trayectoria que deja un electrón en una cámara de niebla, mientras que en la mecánica cuántica el concepto de trayectoria no era explicada, ya que al no ser una magnitud observable, la idea de trayectoria no entraba en el contexto de los principios de la mecánica cuántica. Sin embargo, la presencia de los electrones en los átomos y la estabilidad de la misma sugerían la existencia de órbitas de electrones, y por tanto, la necesidad de explicar los movimientos y trayectorias de los electrones en dichas órbitas. En febrero 1927, Werner Heisenberg logró resolver esta aparente contradicción al concebir a la trayectoria del electrón del experimento de la cámara de niebla como una sucesión discreta de lugares imprecisamente determinados y no como una travectoria continua, es decir, se planteó la posibilidad de encontrar una situación donde con cierta imprecisión puede encontrarse un electrón en un lugar y con cierta imprecisión pueda tener una velocidad, y que estas imprecisiones se puedan hacer muy pequeñas de tal modo que no se encuentren dificultades con el experimento 1. Partiendo de esta idea, Heisenberg logró establecer este planteamiento de forma rigurosa con las matemáticas de la mecánica cuántica mediante su teorema de indeterminación.

La implicación del teorema de indeterminación de Heisenberg es que el producto de las indeterminaciones de la posición y del momento no puede ser más pequeño que el quantum de acción de Planck, es decir, una menor imprecisión de la medida de la posición implica una mayor imprecisión en la medida del momento y viceversa, pero el límite del producto de estas imprecisiones no puede ser menor que la constante de Planck. Las imprecisiones al medir la posición y el momento de un electrón de manera simultánea no es debido a la falta de instrumentos óptimos, se debe a una ley natural, una consecuencia misma de los principios fundamentales de la mecánica cuántica. Este y otros resultados de carácter no intuitivo sobre la descripción de los fenómenos cuánticos mantienen el debate hasta hoy en día sobre nuestra comprensión de la mecánica cuántica y su relación con la física clásica, ya que en la física clásica los eventos suceden independientemente de los efectos a causa de la observación, se da por hecho la objetividad de los fenómenos físicos, en cambio, en la física cuántica, y en el contexto anterior, los eventos se ven afectados por el acto de observar a dichos fenómenos.

En este contexto, la búsqueda con el propósito de establecer una relación entre ambas teorías conceptualmente diferentes puede avudar a entender mejor las leves naturales que rigen al mundo cuántico y clásico, es decir, aquellos principios o reglas bajo las cuales ambas teorías se relacionan. Existen varios intentos a este propósito, uno de los primeros en proponer una relación fue Niels Bohr mediante su principio de correspondencia. El principio de correspondencia se introdujo por primera vez en el contexto de la antigua mecánica cuántica, el cual comprende al periodo de 1900 a 1925, y se formuló en diferentes versiones desde 1913. En 1923, Bohr propuso la forma final del principio de correspondencia, el cual indica que los sistemas cuánticos periódicos adquieren un comportamiento clásico cuando el número cuántico principal es muy grande 2. La primera aplicación del principio de correspondencia fue al átomo de hidrógeno, y su forma de aplicación consistía en una combinación de la mecánica cuántica antigua y la clásica. Cabe recordar que la mecánica cuántica antigua consideraba que un átomo solo puede existir en uno de una serie de estados estacionarios discretos y en los que el electrón se encuentra en una órbita periódica estable permitida y que no emite radiación, es decir, los electrones ocupando órbitas estacionarias concéntricas con el núcleo del átomo en el centro, estos estados estacionarios están caracterizados por los números cuánticos principales n, donde la órbita más baja, n = 1, es el estado base. El movimiento del electrón en una órbita determinada, caracterizada por n, puede describirse adecuadamente por la mecánica clásica. Sin embargo, cuando el electrón hace una transición de un estado estacionario a otro, ya no puede describirse por la mecánica clásica, y la radiación emitida es de una sola frecuencia  $\nu$ , el cual está dada por la relación de Bohr-Einstein. Bajo estas consideraciones, en sus comienzos, Bohr consideraba al principio de correspondencia como una analogía entre la mecánica cuántica y la clásica al estudiar estas radiaciones. Posteriormente, deja esta consideración y afirma que el principio de correspondencia debe ser considerado puramente como una ley de la teoría cuántica, que en nada puede disminuir el contraste entre los postulados y la teoría electrodinámica, y no debe considerarse como una restricción metodológica proveniente de fuera de la misma teoría.

Posteriormente, una nueva formulación de Heisenberg en 1924 buscó darle una forma matemática precisa para así obtener nuevos resultados 3. Trabajando conjuntamente con Bohr, Kramers y otros, sobre la polarización de la luz de los átomos sobre la fluorescencia resonante, logró nuevos resultados importantes. Estos resultados le permitieron generalizar la fórmula de dispersión de Kramers para la dispersión no coherente de la luz de los átomos. Heisenberg consideró este avance como una agudización del principio de correspondencia. Sin embargo, el principio de correspondencia de Bohr-Heisenberg, en su formulación original, es inaplicable a sistemas físicos fundamentales como el oscilador armónico, esto se debe a que fue formulado para la antigua mecánica cuántica. A pesar de que Heisenberg había asumido la tarea de defender al principio de correspondencia, principio en el que basó en gran manera el desarrollo de la mecánica matricial, a partir de 1925 comenzó a distanciarse de ella, al menos ya no apoyarla públicamente, ya que en el artículo de la mecánica matricial de 1925 no cita al principio de correspondencia de Bohr. Si bien Heisenberg admite la utilidad limitada de este principio, no lo considera un principio fundamental de la mecánica cuántica como lo hace Bohr. En cambio, Heisenberg argumenta que si bien una combinación de argumentos basados en el principio de correspondencia puede hacer que la teoría cuántica de la materia combinado con la teoría clásica de la radiación proporcionen valores cuantitativos para las probabilidades de transición, sin embargo, conducen a resultados lejos de ser satisfactorios y llevan fácilmente a conclusiones falsas 4. Además, considera que esta correspondencia es un resultado puramente formal y que no se sigue de ninguno de los principios físicos de la mecánica cuántica Hay que agregar que Heisenberg consideraba a la mecánica cuántica como una teoría cerrada, un sistema axiomático completo en sí mismo y que no depende de la mecánica clásica.

La forma de interpretar y aplicar el principio de correspondencia ha ido cambiando posteriormente. En 1933, Max Born, considera como absolutamente necesario y como requisito general exigir que le nueva mecánica cuántica y otras nuevas teorías, recuperen los resultados empíricos de la mecánica clásica. Como requisito específico, Born enfatiza que la nueva mecánica cuántica debe poder recuperar las predicciones de la mecánica clásica, de tal modo que en el límite de las grandes masas y órbitas de gran dimensión, es decir con  $n \to \infty$ , debe fusionarse con la mecánica clásica [5].

Por otro lado, además del principio de correspondencia, otro procedimiento muy conocido es el límite de Planck, mediante el cual, se recuperan las cantidades clásicas tomando  $\hbar \rightarrow 0$ . La radiación del cuerpo negro fue el primer problema cuya solución mostró la necesidad de modificar a fondo las teorías clásicas para poder describir las leves fundamentales de interacción de la materia con la radiación electromagnética. Un cuerpo cualquiera absorbe parte de la radiación electromagnética que incide sobre su superficie, un cuerpo negro lo absorbe todo. Una manera de describir un cuerpo negro es mediante un cuerpo con una cavidad muy pequeña en donde la radiación que penetra solo una cantidad muy pequeña logra escapar, similar a la de un cuerpo negro. La física clásica describe que la densidad de radiación espectral del cuerpo negro está dada por la ecuación de Rayleigh-Jeans, el cual depende de las frecuencias de radiación y de la temperatura del cuerpo, pero no de las propiedades de las paredes del material. La descripción de esta relación coincide con los datos experimentales para frecuencias bajas, para frecuencias altas no, además, contradice la lev de Stefan-Boltzman de la energía de radiación de un cuerpo negro. Como la radiación no depende de las propiedades del material, su descripción se podía modelar mediante osciladores. La descripción anterior se basa en la hipótesis de que cada oscilador puede tener una energía arbitraria, es decir, un continuo de energía. Este problema se logró superar cuando Max Planck propuso un modelo diferente, el cual se basa en un conjunto de osciladores en interacción únicamente con la radiación 6 Planck propuso que los osciladores y el campo de radiación en equilibrio solo pueden intercambiar energía que sea múltiplo entero de cierto valor mínimo  $E = nE_1$ , con n = 1, 2, 3..., y a este valor mínimo de energía  $E_1 = \hbar \omega$ , le llamo cuanto de energía, donde  $\hbar$  es la hoy conocida como constante de Planck. De este modo Planck obtuvo la nueva distribución de densidad espectral que lleva su nombre y dado por  $\rho(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$ . Este resultado describe los datos experimentales tanto para frecuencias bajas como altas y conduce a la ley de Stefan-Boltzman. Al tomar a  $\hbar \to 0$ y tomar fija la temperatura y frecuencia, como el exponente tiende a cero, podemos desarrollar a la exponencial en series de Taylor y al quedarnos con los dos primeros términos se recuperan los resultados clásicos dados por la distribución de Rayleigh-Jeans. Este es el conocido límite de Planck de  $\hbar \to 0$ .

Sin embargo, esta formulación de Planck con  $\hbar \to 0$ , no siempre tiene éxito en la obtención de los límites clásicos. Como ejemplo podemos mencionar que al tratar de encontrar la relación entre la teoría cuántica y clásica, en el contexto de  $\hbar \to 0$ , se muestra que la ecuación de Schrödinguer para una partícula única que se mueve en un potencial externo V no conduce, salvo algunas excepciones de casos especiales, a la ecuación de Newton para una partícula individual [7]. Lo anterior muestra que no se puede considerar que la mecánica clásica pueda surgir de la mecánica cuántica, en este contexto, al tomar el límite  $\hbar \to 0$ .

Por otra parte, se ha aplicado el principio de correspondencia a algunos sistemas periódicos **[3]**, por ejemplo, el de una partícula en una caja con paredes impenetrables, en los cuales se han encontrado que en los límites de números cuánticos muy grandes efectivamente se dan la correspondencia en la forma entre las frecuencias clásicas y cuánticas que dependen de la energía, es decir, en el límite de  $n \to \infty$ , la frecuencia cuántica  $\nu_{QM}(E_n)$  y la frecuencia clásica  $\nu_{CM}(E)$  tienen la misma forma funcional. Por otro lado, la correspondencia en la frecuencia no se cumple al

tomar únicamente  $n \to \infty$ , es decir, el espectro de frecuencia cuántica y clásica no son iguales. Por tanto, en este caso, pasar únicamente a números cuánticos grandes no conduce al espectro clásico de la frecuencia, para ello debe tomarse el límite de Planck,  $\hbar \to 0$ . De este modo, del espectro de frecuencia cuántica se recupera el clásico. Si embargo, se han afirmado que estos límites no son equivalentes y que ninguno de ellos tiene un carácter universal  $[\mathbf{S}]$ .

Muchos de los trabajos sobre los límites clásicos se basan en el teorema de Ehrenfest, el cual establece un vínculo entre la mecánica cuántica y la mecánica clásica, afirmando que las leyes del movimiento para los valores medios de los operadores son las mismas leyes clásicas del movimiento. Esto esencialmente puede demostrarse al considerar el ejemplo de una partícula en movimiento unidimensional en un potencial V(x) que genera la fuerza  $F = \nabla V(x)$ . Sin embargo, se ha demostrado que el teorema de Ehrenfest no es necesario ni suficiente para caracterizar el régimen clásico en la mecánica cuántica, ya que según este teorema para una distribución de probabilidad suficientemente estrecha, la posición media en el estado cuántico seguirá una trayectoria clásica [9]. Sin embargo, de modo general, el límite clásico de un estado cuántico no es una única trayectoria clásica, si no un conjunto de trayectorias. Los promedios y los momentos superiores de las distribuciones de probabilidades cuánticas y clásicas suelen coincidir en situaciones donde el teorema de Ehrenfest no es aplicable, y por tanto, el teorema de Ehrenfest no define las condiciones del comportamiento clásico.

Existe otro planteamiento interesante que relaciona el principio de correspondencia de Bohr y el límite de Planck 10, el cual muestra que para obtener un límite clásico significativo de los eigenvalores de los sistemas cuánticos, se debe sintetizar la formulación de Planck y Bohr del principio de correspondencia. Las formulaciones de Planck de  $\hbar \rightarrow 0$  y de Bohr con  $n \rightarrow \infty$  se consideran como dos formulaciones diferentes del principio de correspondencia, por lo que ellos proponen una forma sintetizada del principio de correspondencia tomando simultáneamente  $n \to \infty$  y  $\hbar \to 0$ , con la restricción de que su producto se mantenga fija en la acción clásica apropiada,  $n\hbar = J$ . Por otro lado, se obtienen resultados sin sentidos para el clásico de los eigenvalores de los sistemas cuánticos si se toma un límite sin el otro. De acuerdo a lo anterior, el valor correcto de la observable clásica correspondiente al eigenvalor de la mecánica cuántica se obtiene en este doble límite restringido. Para demostrar lo anterior, se han aplicado la forma sintetizada del principio de correspondencia a los sistemas cuánticos del oscilador armónico, la partícula en una caja y al átomo de hidrógeno. Para estos sistemas, se consideran las observables básicas y sus eigenvalores, posteriormente se toman simultáneamente la formulación de Planck y Bohr del principio de correspondencia con la restricción de que el producto del número cuántico principal y la constante de Planck sea igual a la acción clásica apropiada de cada sistema. Esta acción clásica apropiada se puede determinar. De este modo, con la aplicación del principio de correspondencia sintetizada de Planck y Bohr a los sistemas cuánticos anteriores se recuperan las energías y frecuencias angulares clásicos de estos sistemas.

Otros estudios proponen enfoques diferentes sobre los límites clásicos de sistemas cuánticos, por ejemplo, uno de ellos es el estudio sobre un indicador simple del no clasicismo de sistemas cuánticos y que depende del volumen de la parte negativa de la función de Wigner. Para ello, consideran un estado cuántico arbitrario y se busca determinar hasta que punto es no clásico en el sentido de que sus estados difieren de los estados coherentes [11]. Esto se logra al introducir un parámetro que refleja legítimamente el grado de no clasicidad de un estado cuántico dado. Este enfoque con el indicador que depende del volumen de la parte negativa de la función de Wigner se aplica para investigar ciertas familias de estados cuánticos, los estados de Fock y a los estados de Fock desplazados comprimidos.

En 2011, se propuso una nueva formulación matemática del principio de correspondencia 12, el cual puede ser aplicada a las soluciones de la ecuación de Schrödinger y, por lo tanto, para sistemas cuánticos más generales, como el oscilador armónico y el problema de la partícula en una caja. Esta nueva formulación da un giro diferente en la aplicación del principio de correspondencia. Parte de considerar a la densidad de probabilidad de un sistema cuántico y estableciendo un procedimiento muy simple se logra recuperar la densidad de probabilidad clásica correspondiente más términos de corrección. El procedimiento de esta formulación se puede resumir del siguiente modo. Primero se determina la densidad de probabilidad del sistema cuántico en cuestión, en el siguiente paso se calcula su transformada de Fourier para obtener el coeficiente de Fourier correspondiente, a este resultado se le aplica el principio de correspondencia de Bohr tomando n >> 1, y finalmente, al resultado anterior se le aplica la transformada inversa de Fourier del cual se obtiene la densidad de probabilidad clásica exacta más términos cuánticos residuales de corrección en series de potencias pares crecientes de  $(\hbar/S_{clásico})$ , donde  $S_{clásico}$  es la acción clásica del sistema. Al resultado anterior se le conoce como la densidad de probabilidad cuántica asintótica (AQM), del cual se obtiene la densidad de probabilidad clásica del sistema al tomar la primera aproximación de orden cero independiente de  $\hbar$ , sin la necesidad de tomar el límite de Planck de  $\hbar \to 0$ . Estos términos de corrección son muy pequeños comparados con las energías clásicas, pero no son ceros.

Se ha podido aplicar la nueva formulación matemática del principio de correspondencia a varios sistemas físicos importantes, por ejemplo, al estudio del comportamiento macroscópico de sistemas periódicos en el régimen de altas energías [13] y al límite clásico del problema de Kepler [14]. Utilizando estos resultados se pueden determinar los valores esperados de las cantidades físicas y luego recuperar los valores clásicos correspondientes.

En este trabajo se aplica la nueva formulación matemática del principio de correspondencia al problema del pozo circular infinito para obtener el límite clásico de este sistema, esto es, su densidad de probabilidad clásica y otras cantidades físicas importantes.

3	
O,	
3	
Ġ,	
Q	
C	2
	0
	6
	Ş
	Ċ
	0

Universidad Juar et Autonoma de Tabasco.

# Principio de correspondencia

Capítulo 2

En este apartado nos enfocaremos en describir el principio de correspondencia de Bohr, y para ello, primero abordaremos de manera general la formulación de Bohr y posteriormente describiremos la nueva formulación matemática del principio de correspondencia. Para este último describiremos su formulación y el procedimiento requerido para su aplicación. Finalmente mostraremos algunos resultados importantes obtenidos mediante la aplicación de este método a diferentes sistemas cuánticos.

Es importante recordar que el principio de correspondencia hoy se concibe de modo muy diferente a como lo concibió Bohr, es más, algunos autores consideran que aún no es muy clara la visión que Bohr tenía de su principio de correspondencia. Por otro lado, debemos recordar que el límite de Planck de  $\hbar \rightarrow 0$  es considerado también principio de correspondencia, aún cuando la formulación de Planck apareció mucho antes que Bohr acuñara este término. Posteriormente, algunos consideran que el principio de correspondencia debe requerír que cualesquiera dos teorías físicas válidas, que tengan superposición en su dominio de validez deben, con precisión pertinente, producir las mismas predicciones para las observaciones físicas [15]. De este modo, también se ha establecido el principio de correspondencia generalizado, introducido por los filósofos de la ciencia, el cual es el requisito de que cualquier teoría aceptable L debería dar cuenta de su predecesora S, degenerando en esa teoría en aquellas condiciones en las que S ha sido bien confirmada por las observaciones [16].

Como lo hemos mencionado anteriormente, el principio de correspondencia ha consistido de varias versiones desde que Bohr lo introdujo por primera vez, pero independientemente de los diferentes enfoques que existen de este principio, el sentido de ella no ha cambiado de modo esencial. En la nueva formulación del principio de correspondencia ese sentido tampoco cambia, ya que la búsqueda de la densidad de probabilidad clásica partiendo de la densidad de probabilidad cuántica se logra tomando  $n \gg 1$ , idea propuesta por Bohr para recuperar las magnitudes clásicas partiendo de las cuánticas. Para nuestros propósitos recurriremos a la nueva formulación matemática del principio de correspondencia aplicado al problema del pozo circular infinito.

### 2.1. Nueva formulación matemática del principio de correspondencia

La nueva formulación matemática del principio de correspondencia esencialmente se basa en un procedimiento que considera la solución de la ecuación de Schrödinger de un sistema cuántico, mediante el cual se determina la densidad de probabilidad del sistema al cual se le aplica este procedimiento [12]. Debemos recordar que para sistemas periódicos la densidad de probabilidad cuántica (QPD) dado por  $\rho^{QM}(x,n)$  es oscilatorio mientras que para la densidad de probabilidad clásica (CPD), dado por  $\rho^{CM}(x)$ , no lo es. Sin embargo, ambos se pueden expandir en series de Fourier de la siguiente manera:

$$\rho^{QM}(x,n) = \int f^{QM}(k,n) e^{ikx} dk, \qquad (2.1)$$

$$\rho^{CM}(x) = \int f^{CM}(k) e^{ikx} dk.$$
(2.2)

Recordemos que  $f^{QM}(k, n) \ge f^{CM}(k)$  son los coeficientes de Fourier cuánticos y clásicos, respectivamente. Para sistemas periódicos simples estos coeficientes se aproximan entre sí en el sentido promediado localmente para números cuánticos grandes [17]. Es decir, para números cuánticos  $n \gg 1$  se debe cumplir que:

$$f^{QM}(k,n) \sim f^{CM}(k), \qquad (2.3)$$

Esta comparación es muy importante, ya que nos permite entender la relación entre las densidades de probabilidad cuántica y la clásica.

Por otro lado, los coeficientes de Fourier se pueden determinar mediante la transformación de Fourier dado por:

$$f_n^{QM}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_n^{QM}(x) e^{-ikx} dx,$$

$$f^{CM}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_n^{CM}(x) e^{-ikx} dx.$$
(2.4)
(2.5)

Al tomar  $n \gg 1$ , estos dos coeficientes deben ser similares de acuerdo a la relación dada por (2.3).

Considerando todo lo anterior, estamos en condiciones de describir el procedimiento seguido en la nueva formulación matemática del principio de correspondencia. Para ello, describiremos el procedimiento de manera general, mediante el cual podremos obtener los límites clásicos de los sistemas cuánticos periódicos.

### Procedimiento de la nueva formulación matemática del principio de correspondencia

El procedimiento de la nueva formulación matemática del principio de correspondencia se puede enunciar del siguiente modo:

- El procedimiento inicial consiste en tomar la densidad de probabilidad cuántica (QPD) de las soluciones de la ecuación de Schrödinger del problema y calcular su transformada de Fourier  $(F \{k\})$ .
- Al resultado se le calcula su aproximación asintótica tomando el número cuántico principal muy grande,  $n \gg 1$ .
- Se determina el número cuántico grande en el límite al igualar la energía cuántica con la energía clásica.
- Se calcula la transformada inversa de Fourier  $(F^{-1} \{x\})$  mediante el cual se obtiene la llamada densidad de probabilidad de la mecánica cuántica asintótica (QMA), y es la suma de la densidad de probabilidad clásica (CPD) más correcciones cuánticas residuales de términos que dependen de potencias crecientes de  $\left(\frac{\hbar}{S_{clastea}}\right)^{2n}$ .
- La densidad de probabilidad clásica (CPD) se obtiene del resultado anterior al tomar la primera aproximación de orden cero independiente de  $\hbar$ , sin la necesidad de tomar el límite de Planck de  $\hbar \to 0$ .

El procedimiento de la nueva formulación del principio de correspondencia se puede resumir mediante el diagrama de la figura 2.1



Figura 2.1: Procedimiento de la nueva formulación matemática del principio de correspondencia.

### 2.2. Aplicaciones de la nueva formulación del principio de correspondencia a algunos sistemas cuánticos

La nueva formulación matemática del principio de correspondencia se ha aplicado a varios sistemas físicos importantes y fundamentales como es el oscilador armónico simple, la partíclula en una caja [12], el problema de Kepler [14] y el comportamiento de sistemas cuánticos periódicos en el régimen de altas energías [13]. A continuación describiremos el límite clásico de la partícula en una caja, es decir, el sistema cuántico de una barrera de potencial infinito en la cual se encuentra confinado una partícula. El desarrollo de este problema simple servirá como una introducción y ejemplo de la aplicación de esta nueva formulación matemática, mostrando la sencillez de la aplicación del procedimiento.

### 2.2.1. Pozo cuadrado infinito unidimensional

Este problema, también conocido como la partícula en una caja, es un sistema que consiste de una partícula de masa m que se encuentra confinado en una región unidimensional entre dos barreras de potencial infinito. A continuación se muestra el potencial matemáticamente y también de manera gráfica:



Figura 2.2: El potencial es V(x) = 0 dentro del pozo cuadrado, región determinado por 0 < x < a, y es  $V(x) = \infty$  fuera de esa región.

Este sistema puede puede tratarse desde el enfoque clásica y cuántico. El estudio clásico nos permite determinar la densidad de probabilidad clásica (CPD) de este sistema y esta dado como:

$$\rho^{CM}(x) = \frac{1}{a} \left[ \theta(x) - \theta(x-a) \right], \qquad (2.6)$$
donde  $\theta$  es la función de Heaviside o función escalon. Las correspondientes funciones de Heaveside se definen como:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \ge 0\\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}$$
$$\theta(x-a) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \ge a\\ 0 & \text{si } x < a \end{cases}$$

Lo anterior indica que la densidad de probabilidad es  $\frac{1}{a}$  dentro del pozo y cero fuera de ella.

El pozo cuadrado infinito cuántico se puede estudiar mediante la aplicación de la ecuación de Schrödinger a este sistema. De acuerdo a las consideraciones de las condiciones de contorno de este sistema, la solución es la función:

$$\psi_{\overline{n}}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \qquad (2.7)$$

donde n = 1, 2, 3, ..., por lo tanto, su densidad de probabilidad cuántica es:

$$\rho_n^{QM}(x) = \frac{2}{a} \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right).$$
(2.8)

La transformada de Fourier de la densidad de probabilidad cuántica est

$$f_n^{QM}(k) = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \left(\frac{e^{ika} - 1}{ik}\right) \left(1 + \frac{1}{\frac{4\pi n^2}{k^2 a^2} - 1}\right),$$
(2.9)  
senemos el siguiente resultado:

y al tomar  $n\gg 1,$  obtenemos el siguiente resultado:

$$f_n^{QM}\left(k\right) \approx \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \left(\frac{e^{ika} - 1}{ik}\right) \left(1 + \frac{k^2 a^2}{4\pi N^2}\right) \tag{2.10}$$

donde N es el número cuántico muy grande. El valor de este número cuántico se puede obtener al tomar la energía cuántica de este sistema  $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$  e igualarla a la energía clásica  $E = \frac{p^2}{2m}$ , del cual se obtiene que  $N = \frac{pa}{\pi\hbar}$ . Este resultado se basa en la consideración de que en el límite de  $n \gg 1$ , la energía cuántica y clásica son iguales, y el número cuántico de ese límite es N.

Si ahora calculamos la transformada de Fourier de la densidad de probabilidad clásica (2.6), obtenemos:

$$f^{CM}(k) = \frac{k}{ai} \left( e^{-ika} - 1 \right).$$
 (2.11)

Del resultado anterior podemos observar que se cumple que:

$$f_n^{QM}\left(k\right) \sim f^{CL}\left(k\right) \tag{2.12}$$

Este es un resultado importante de comparación que debe cumplirse al tomar  $n \gg 1$ .

Al calcular la transformada inversa de Fourier de la ecuación (2.10), se obtiene la densidad de probabilidad cuántica asintótica (AQM);

$$\rho^{AQM}(x) = \frac{1}{a} \left[ \theta(x) - \theta(x-a) \right] + \left( \hbar / S_{class} \right)^2 a \left[ \delta' x \right] - \delta'(x-a) + \cdots .$$
(2.13)

Como podemos observar, la densidad de probabilidad cuántica asintótica es la versión macroscópica de la densidad de probabilidad cuántica, ya que la constante de Planek no es cero, ( $\hbar \neq 0$ ). El resultado muestra que  $\rho_{AQM}(x)$  es igual a la densidad de probabilidad clásica más términos de correcciones cuánticos residuales que dependen de potencias pares crecientes de la forma  $(\hbar/S_{class})^{2n}$ .

Finalmente, si tomamos de la ecuación (2.13) el primer orden de proximación solo queda el término de orden cero independiente de  $\hbar$ , del cual se obtiene la densidad de probabilidad clásica:

$$\rho^{AQM}(x) \sim \frac{1}{a} \left[ \theta(x) - \theta(x-a) \right]$$

Podemos observar que no es necesario aplicar el límite de Planck, de  $\hbar \rightarrow 0$ , para encontrar el límite clásico de la densidad de probabilidad cuántica. El resultado anterior ya es conocido [12], al igual que los siguentes, en las cuales primero se muestran las densidades de probabilidades clásicas (CPD) y después sus correspondientes densidades de probabilidades cuánticas asintóticas (AQPD).

## 2.2.2. Oscilador armónico unidimensional

Los límites clásicos del problema del oscilador armónico simple y el de la partícula en una caja, fueron los dos primeros problemas a los que se aplicó la nueva formulación matemática del principio de correspondencia [12]. La densidad de probabilidad clásica y la densidad de probabilidad cuántica asintótica del oscilador armónico simple se muestran acontinuación:

$$\rho_{CM}(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x_0^2 - x^2}},\tag{2.15}$$

$$\varphi_{AQM}(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x_0^2 - x^2}} + O\left[(\hbar/S_{class})^{2n}\right].$$
(2.16)

#### 2.2.3. El problema cuántico de Kepler

El límite clásico del problema de Kepler se basó en la nueva formulación matemática del princpio de correspondecia, fue el tecero de los problemas resueltos mediante este método [14]. La densidad de probabilidad clásica y la densidad de probabilidad cuántica asintótica del problema de Kepler se muestra acontinuación:

$$\rho_{CM}(r) = \frac{1}{\pi a} \frac{r}{\sqrt{\epsilon^2 a^2 - (r-a)^2}}$$
(2.17)

$$\rho_{AQM}(r) = \frac{1}{\pi a} \frac{r}{\sqrt{\epsilon^2 a^2 - (r-a)^2}} + O\left[\left(\frac{\hbar}{S_{class}}\right)^2\right]$$
(2.18)

En este trabajo se obtiene el comportamiento cuántico asintótico de la densidad de probabilidad y el límite clásico del pozo circular infinito aplicando el procedimiento de la nueva formulación del principio de correspondencia. El desarrollo de este trabajo se presentan en los siguientes capítulos comenzando por el plateamiento del problema, la solución de la ecuación de Schródinger, la obtención de la densidad de probabilidad clásica y cuántica, la aplicación del procedimiento de la nueva formulación matemática del principio de correspondencia, la obtención del límite clásico del sistema, y finalmente, las discusiones y conclusiones de este trabajo. Universidad Interest Autonoma de Tabasco.

# Capítulo 3

## Pozo circular infinito

El problema del pozo circular infinito consiste de una partícula de masa m atrapada en un pozo de potencial circular infinito y de radio a, cuya definición matemática y gráfica del potencial está dada como sigue:

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r \ge a \\ 0 & \text{si } r < a \end{cases}$$

Figura 3.1: El potencial es V(r) = 0 dentro del pozo circular, región definido por r < a, y es  $V(r) = \infty$  fuera de esa región.

(3.1)

La ecuación estacionaria de Schrödinger para el problema corresponde a:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi$$

Al considerar las condiciones de simetría del problema elegimos convenientemente las coordenadas polares para describir al sistema, donde la función de onda tiene la forma  $\Psi = \Psi(r, \theta)$ . El laplaciono en coordenadas polares esta dado como:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2},\tag{3.2}$$

y teniendo en cuenta todo lo anterior, la ecuación de Schrödinger adquiere la forma:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} \right) + V\Psi = E\Psi.$$
(3.3)

De acuerdo al método de separación de variables proponemos una solución de la forma  $\Psi(r,\theta) = \psi(r)\varphi(\theta)$ , mediante el cual, al sustituirse en la ecuación anterior y despues dividirse entre  $\psi(r)\varphi(\theta)$  se obtiene:

$$\frac{1}{\psi}\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r\psi}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2\varphi}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\theta^2} - V = -\frac{2mE}{\hbar^2} = -k^2,$$
(3.4)

donde  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ .

Considerando el hecho de que V = V(r) solo depende de r y que dentro del pozo circular V(r) = 0, y al reordenar lo anterior se puede expresar cada miembro de la ecuación solo en términos de cada una de las variables independientes:

$$\frac{r^2}{\psi}\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{r}{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial r} + k^2r^2 = -\frac{1}{\varphi}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\theta^2}.$$
(3.5)

Como ambos miembros varían de forma independiente podemos igualarlos a una constante  $c^2$ , lo que al reordenarlo resulta:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \left(k^2 - \frac{c^2}{r^2}\right) \psi = 0, \qquad (3.6)$$
$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2} = -c^2 \varphi. \qquad (3.7)$$

La ecuación diferencial (3.7) que depende de  $\theta$ , es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden, lineal y homogénia. Nosotros proponemos una solución para esta ecuación de la forma:

$$\varphi\left(\theta\right) = e^{in\theta},\tag{3.8}$$

donde al calcular su segunda derivada se obtiene:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2} = -n^2 \varphi, \tag{3.9}$$

y con esto se a obtenido de (3.7) que c = n.

Considerando las condiciones físicas del problema, como el hecho de que el potencial central en nuestro sistema solo depende de r y no de  $\theta$ , signica que la función  $\varphi(\theta)$  debe tener el mismo valor sin importar el ángulo, por lo tanto la función  $\Psi$  solo puede depender de r. Esto significa que se cumple:

$$e^{in\theta} = 1, (3.10)$$

y únicamente se cumple si n = 0.

En la ecuación (3.6) se hace el cambio de variable  $x \equiv kr$  para reescribirlo en términos de variables adimencionales, del cual resulta:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx} + \left(1 - \frac{c^2}{x^2}\right)\psi = 0.$$
(3.11)

Esta es la ecuación diferencial de Bessel, cuyas soluciones son conocidas como las funciones de Bessel [18]. Por otro lado, recordemos que (c = n = 0), y haciendo esta consideración la ecuación anterior resulta:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx} + \psi = 0.$$
(3.12)

La ecuación diferencial anterior tiene por solución a la funcion de Bessel de orden cero. Esto significa que la solución de la parte radial de la ecuación de Schrödinger podemos expresarla como:

$$\psi\left(r\right) = J_0\left(kr\right).\tag{3.13}$$

Como el potencial es infinito en r = a, entonces la condición de frontera para la función es:

$$J_0(ka) = 0. (3.14)$$

La solución a esta ecuación es  $ka = \alpha_{0s} = \alpha_s = \alpha$ , con s = 1, 2, 3, ... donde  $\alpha_{0s}$  son los ceros de la función de Bessel de orden 0. Los ceros de las funciones de Bessel son valores conocidos y vienen dados en diferentes tablas [19]. Es muy importante hacer notar que cada función de Bessel de un orden determinado tiene ceros diferentes a cualquier otra función de Bessel de orden diferente, por lo que hay que designar los ceros de la función con los dos índices de la forma  $\alpha_{ns}$ . Considerando todo esto, podemos describir las eigenfunciones y los eigenvalores de energía según los números cuánticos que caracterizan a los estados físicos del sistema. Por lo tanto, la energía de la particula está dado:

$$E_{\alpha} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \alpha^2,$$
 (3.15)

donde estas energías no son degeneradas. Los números cuánticos están dadas por los valores de  $\alpha$ , de acuerdo a  $s = 1, 2, 3, \dots$  Por otro lado, los estado físicos del sistema en la representación de los vectores de estados se expresan mediante los kets de la forma:

y de acuerdo a esto, la ecuacion de eigenvalor resulta:

$$\hat{H} \left| \alpha \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \alpha^2 \left| \alpha \right\rangle.$$
(3.17)

Considerando todo la anterior, la eigenfunción que corresponde a la parte radial está dado como:

$$\psi_{\alpha}\left(r\right) = AJ_{0}\left(kr\right) = AJ_{0}\left(\alpha x\right).$$
(3.18)

El proceso de normalización de las funciones de Bessel ya es conocido, el cual se incluye en el apéndice A. Este proceso nos permite determinar la constante de normalización:

$$A = \frac{\sqrt{2}}{a|J_1(\alpha)|}.\tag{3.19}$$

Al incluir la constante de normalización obtenemos la eigenfunción para la parte radial del sistema:

$$\psi_{\alpha}\left(r\right) = \frac{\sqrt{2}}{a|J_{1}\left(\alpha\right)|} J_{0}\left(\alpha x\right), \qquad (3.20)$$

Por lo tanto, al tener en cuenta la componente angular en la normalización, obtenemos una solución completa normalizada de la eigenfunción del sistema:

$$\Psi_{\alpha}(r) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}a|J_{1}(\alpha)|} J_{0}(\alpha x).$$
(3.21)

La función normalizada  $\Psi = \Psi(r)$ , que satisface las condiciones de frontera y que es una solución general de la ecuación de Schrödinger del pozo circular infinito se puede expresar como:

$$\Psi(r) = \sum_{\alpha_1}^{\infty} C_{\alpha} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi a} |J_1(\alpha)|} J_0(\alpha x).$$
(3.22)

Donde  $C_{\alpha}$  son los coeficientes del desarollo y  $x = \frac{r}{a}$ .

donde x =

En la figura 3.2 puede observarse que conforme  $\alpha \gg 1$ , la grafica tiende a una misma forma cada vez más definida.

### 3.1. Densidad de probabilidad clásica

La densidad de probabilidad clásica de una partícula en un pozo circular infinito está dado por  $\frac{1}{\pi a^2}$  dentro del pozo circular y fuera de ella es cero. La función que describe correctamente la densidad de probabilidad clásica (CM) es:

$$\rho^{CM}(r) = \frac{1}{\pi a^2} \left[ \theta(r) - \theta(r-a) \right], \qquad (3.23)$$



Figura 3.2: Gráfica de la función de estado  $\psi_{\alpha}(x) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi a}|J_1(\alpha)|} J_0(\alpha x)$ , con a = 1 y  $x \in [0, 1]$ . Los incisos muestran la gráfica de esta función para algunos valores de los ceros de la función de Bessel  $\alpha$ .

donde a es el radio de la circunferencia y  $\theta$  representa la función escalón o de Heaveside. Las correspondientes funciones de Heaveside se definen como:

$$\theta(r) = \begin{cases} 1 & \text{si } r \ge 0 \\ 0 & \text{si } r < 0 \end{cases}$$
$$\theta(r-a) = \begin{cases} 1 & \text{si } r \ge a \\ 0 & \text{si } r < a \end{cases}$$

Considerando lo anterior, la probabilidad de encontrar a la partícula dentro del pozo de potencial circular está dado por:

$$\int \int \rho(r) r dr d\theta = \frac{1}{\pi a^2} \int \int \left[\theta\left(r\right) - \theta\left(r-a\right)\right] r dr d\theta = 1.$$
(3.24)

La densidad de probabilidad clásica del pozo de potencial circular infinito dado por la ecuación (3.23), es la que se obtendrá más adelante aplicando la nueva formulación matemática del principio de correspondencia a la densidad de probabilidad cuántica de este sistema, desarrollo que se verá en la sección 4.2

### 3.2. Densidad de probabilidad cuántica

La densidad de probabilidad cuántica es es el cuadrado de la eigenfunción del sistema, el cual queda expresado como:

$$\rho = |\psi|^2. \tag{3.25}$$

De acuerdo a esto y la función solución dada por la ecuación (3.21), la densidad de probabilidad cuántica del pozo circular infinito está dado por la siguiente relación:

$$\rho_{\alpha}^{QM}\left(r\right) = \frac{2}{\pi a^2 J_1^2\left(\alpha\right)} J_0^2\left(\alpha \frac{r}{a}\right).$$
(3.26)

Si consideramos que  $x = \frac{r}{a}$ , podemos reescribir la densidad de probabilidad cuántica en función de x, del cual resulta una ecuación con una forma más conveniente a nuestros propósitos:

$$\rho_{\alpha}^{QM}(x) = \frac{2}{\pi a^2 J_1^2(\alpha)} J_0^2(\alpha x) \,. \tag{3.27}$$

También podemos observar que la densidad de probabilidad cuántica depende de los números cuánticos dados por  $\alpha$ , y para cada valor de estos tendremos una densidad determinada, los cuales pueden verse en las gráficas de la figura 3.3 y 3.4.

En la gráfica 3.3 puede observarse que la densidad de probabilidad las amplitude son mayores en x = 0 o cerca de ella y que en el límite x = 1 es cero, esto se debe a que es más probable encontrar a la partícula en el centro del círculo y que conforme se acerca a la barrera de potencial infinito es menos probable, siendo cero la probabilidad de encontrarla en la barrera de x = 1. Recordemos que  $x = \frac{r}{a}$ , por tanto, en r = 0 el valor de x = 0 y en r = a el valor de x = 1, y en este último la barrera de potencial circular se vuelve infinito.

En las figuras 3.3 y 3.4 pueden apreciarse el comportamiento de la densidad de probabilidad cuántica y clásica para los diferentes números cuánticos. En todas las gráficas podenos observar que la densidad de probabilidad cuántica  $\rho_{\alpha}^{QM}(x)$  en casi todo el intervalo de [0, 1] trata de mantener la oscilación alredor de la densidad de probabilidad clásica  $\rho^{CM}(x)$  el cual es una constante, aumentando su amplitud cerca de x = 0. Lo anterior puede apreciarse en la figura 3.3 en los cincisos 3.3a, 3.3b y 3.3c muy claramente, y en los incisos 3.3d, 3.4a y 3.3f en menor grado, pero en todas las figuras  $\rho_{\alpha}^{QM}(x)$  tiene el mismo comportamiento. Sin embargo, las gráficas de la figura 3.4 correspondientes a números cuánticos grandes presentan un patrón similar al de la gráfica 3.3 pero con ligeras variaciones de las amplitudes, ya que hay pequeñas oscilaciones fuera de la línea de la densidad de probabilidad clásica.



Figura 3.3: Gráfica de la densidad de probabilidad cuántica (QPD) dado por  $\rho_{\alpha}^{QM}(x) = \frac{2}{\pi a^2 J_1^2(\alpha)} J_0^2(\alpha x)$  y de la densidad de probabilidad clásica (CM) dado por  $\rho^{CM}(x) = \frac{1}{\pi a^2} \left[\theta(x) - \theta(x-1)\right]$ , donde r = ax, a = 1 y  $x \in [0, 1]$ . Los incisos muestran las gráficas para los diferentes números cuánticos dados por los ceros de la función de Bessel  $\alpha$ .



Figura 3.4: Gráfica de la densidad de probabilidad cuántica (QPD) dado por  $\rho_{\alpha}^{QM}(x)$  y de la densidad de probabilidad clásica (CM) dado por  $\rho^{CM}(x)$ , donde r = ax, a = 1 y  $x \in [0, 1]$ . Los incisos muestran las gráficas para los diferentes números cuánticos grandes dados por los ceros de la función de Bessel  $\alpha$ .

Universidad Interest Autonorma de Tabasco.

# Capítulo 4

## Principio de correspondencia aplicado al Pozo circular infinito

El objetivo de este trabajo es encontrar el límite clásico del problema del pozo de potencial circular infinito. El procedimiento a seguir se basa en la nueva formulación matemática del principio de correspondencia, descrito en la sección (2.1.1) y gráficamente representado mediante el diagrama de la figura (2.1).

## 4.1. Transformada de Fourier de la densidad de probabilidad cuántica

A continuación nos enfocaremos en desarrollar el proceso de cálculo que determina el coeficiente de Fourier de la densidad de probabilidad cuántica (QPD), el cual requiere del uso de las integrales de las funciones de Bessel de orden cero cuadrático. La transformada de Fourier de la densidad de probabilidad cuántica del pozo circular infinito está dado como sigue:

$$f_{\alpha}^{QM}(k) = \int \rho_{\alpha}^{QM}(x) e^{-ikax} x dx,$$

(4.1)

donde ax = r. Considerando lo anterior y la ecuación (3.27), la transformada de Fourier es:

$$f_{\alpha}^{QM}\left(k\right) = \int \left[\frac{2}{\pi a^2 J_1^2\left(\alpha\right)} J_0^2\left(\alpha x\right)\right] e^{-ikax} x dx.$$

$$(4.2)$$

Reescribiendo la relación anterior, podemos expresarlo en la forma:

$$f_{\alpha}^{QM}(k) = \frac{2}{\pi a^2 J_1^2(\alpha)} \int_0^1 J_0^2(\alpha x) e^{-ikax} x dx.$$
(4.3)

Lo que es igual:

$$f_{\alpha}^{QM}(k) = \frac{2}{\pi a^2 J_1^2(\alpha)} \int_0^1 J_0^2(\alpha x) \sum_{n=0}^\infty \frac{(-ikax)^n}{n!} x dx.$$
(4.4)

Si reescribimos la integral llegamos a la relación:

$$f_{\alpha}^{QM}(k) = \frac{2}{\pi a^2 J_1^2(\alpha)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^n}{n!} \int_0^1 x^n J_0^2(\alpha x) \, x dx \tag{4.5}$$

El procedimiento del cálculo de la integral de la forma  $\int x^n J_0^2(\alpha x) x dx$ , se desarrolla en el Apéndice B y se demuestra su generalización mediante el método de inducción matemática. De acuerdo a lo anterior, la integral está dada por la relación (B.24) del Apéndice B, es decir, por la siguiente ecuación:

$$\int x^{n} J_{0}^{2}(\alpha x) x \, dx = \frac{1}{n+1} \left[ \frac{1}{2} x^{n+2} \left( J_{0}^{2}(\alpha x) + J_{1}^{2}(\alpha x) \right) + \frac{n}{2\alpha} x^{n+1} J_{0}(\alpha x) J_{1}(\alpha x) \right. \\ \left. + \frac{n^{2}}{(2\alpha)^{2}} x^{n} J_{0}^{2}(\alpha x) - \frac{n^{3}}{(2\alpha)^{2}} \int x^{n-2} J_{0}^{2}(\alpha x) x \, dx \right]$$

Si ahora evaluamos esta integral, obtenemos:

$$\int_{0}^{1} x^{n} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx = \frac{1}{n+1} \left[ \frac{1}{2} J_{1}^{2}(\alpha) - \frac{n^{3}}{(2\alpha)^{2}} \int_{0}^{1} x^{n-2} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx \right].$$
(4.6)

Al introducir este resultado (4.6) en la ecuación (4.5), obtenemos el resultado siguiente:

$$f_{\alpha}^{QM}(k) = \frac{2}{\pi a^2 J_1^2(\alpha)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^n}{n!} \frac{1}{n+1} \left[ \frac{1}{2} J_1^2(\alpha) - \frac{n^3}{(2\alpha)^2} \int_0^1 x^{n-2} J_0^2(\alpha x) \, x dx \right]. \tag{4.7}$$

El proceso para el cálculo de la integral del segundo término de (4.7) se puede continuar empleando el mismo procedimiento repetitivo hasta llegar al exponente de grado n = 0. Los resultados que se obtienen de ella quedan en términos de potencias pares crecientes de  $\frac{1}{\alpha}$ . El desarrollo y análisis de este término requiere de un tratamiento especial, por lo que se volverá a ella en las siguientes secciones. 4.1.1. Primera aproximación del límite clásico

El resultado obtenido en la ecuación (4.7) de la sección anterior, lo expresaremos como se ve a continuación:

$$f_{\alpha}^{QM}(k) = \pm \frac{1}{\pi a^{2}} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} + \frac{1}{\pi a^{2}} \frac{2}{J_{1}^{2}(\alpha)} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n^{3}}{2^{2}} \frac{1}{\alpha^{2}} \int_{0}^{1} x^{n-2} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx$$

$$(4.8)$$

El desarrollar la integral del segundo término del miembro derecho de la ecuación obtenemos:

$$\begin{split} f_{\alpha}^{QM}\left(k\right) &= -\frac{1}{\pi a^{2}} \frac{1}{ika} \left(e^{-ika} - 1\right) \\ &+ \frac{1}{\pi a^{2}} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n^{3}}{(n-1)2^{2}} \frac{1}{\alpha^{2}} \\ &- \frac{1}{\pi a^{2}} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n^{3}(n-2)^{3}}{(n-1)(n-3)2^{4}} \frac{1}{\alpha^{4}} \\ &+ \frac{1}{\pi a^{2}} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n^{3}(n-2)^{3}(n-4)^{3}}{(n-1)(n-3)(n-5)2^{6}} \frac{1}{\alpha^{6}} \\ &- \frac{1}{\pi a^{2}} \frac{2}{J_{1}^{2}(\alpha)} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n^{3}(n-2)^{3}(n-4)^{3}(n-6)^{3}}{(n-1)(n-3)(n-5)2^{8}} \frac{1}{\alpha^{8}} \int_{0}^{1} x^{n-8} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx \end{split}$$

Según el principio de correspondencia de Bohr, al tomar el número cuántico principal muy grande, es decir  $n \gg 1$ , se recuperan las cantidades clásicas. De acuerdo a esto, si tomamos  $\alpha \gg 1$  en la ecuación (4.9), los términos con potencias pares crecientes  $\frac{1}{\alpha^{2n}}$  de la ecuación serán pequeños y podemos despreciarlos. Considerando lo anterior, solo nos queda el siguiente término:

$$f^{QM}(k) \approx -\frac{1}{\pi a^2} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!}.$$
(4.10)

Como podemos ver, esta ecuación y<br/>a no depende de  $\alpha.$  Si reescribimos este resultado se obti<br/>ene:

$$f^{QM}(k) \approx -\frac{1}{\pi a^2} \frac{1}{ika} \left( e^{-ika} - 1 \right)$$
 (4.11)

Este resultado es clave para determinar el límite clásico del pozo circular infinito, es decir, la densidad de probabilidad clásica. Por otro lado, la transformada de Fourier de la densidad de probabilidad clásica (CM) es:

$$f^{CM}(k) = -\frac{1}{\pi a} \frac{1}{ik} e^{-ika} + \frac{1}{\pi a^2} \frac{1}{k^2} \left( e^{-ika} - 1 \right).$$
(4.12)

Observemos que este resultado es similar al de la ecuación (4.11), por lo tanto, podemos ver que se cumple que al tomar  $\alpha \gg 1$  en la ecuación (4.9), podemos despreciar los terminos que contienen las  $\alpha$  y solo nos queda el primer término. De acuerdo con lo anterior podemos ver que se cumple que:

$$f_{\mu}^{QM}\left(k\right) \sim f^{CL}\left(k\right). \tag{4.13}$$

Debemos recordar que esta similitud está contemplado en los procedimientos de la nueva formulación matemática del principio de correspondencia de acuerdo a la relación (2.3). A continuación procederemos para calcular la transformada inversa de Fourier al resultado dado por (4.11) para obtener una primera aproximación del límite clásico.

#### Transformada inversa de Fourier de la primera aproximación 4.1.2.

Para el cálculo de la transformada inversa de Fourier del coeficiente  $f^{QM}(k)$  dado por (4.11), se realiza el cambio de variable de K = ka, del cual resulta:

> $f^{QM}\left(K\right) \approx \frac{1}{\pi a^{2}} \frac{1}{\left(-iK\right)} \left(e^{-iK} - 1\right)$ (4.15) (4.14)

La transformada inversa de Fourier está dado por:

$$\rho^{QM}\left(r\right)\approx\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}f^{QM}(K)e^{iKx}dK.$$

Al calcularla obtenemos:

$$\rho^{QM}(r) \approx \frac{1}{2\pi^2 a^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(-iK)} \left( e^{-iK} - 1 \right) e^{iKx} dK 
= \frac{1}{2\pi^2 a^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(-iK)} \left( e^{iK(x-1)} - e^{iKx} \right) dK 
= \frac{1}{2\pi^2 a^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(-ik)} \left( e^{ika(\frac{x}{a} - \frac{a}{a})} - e^{ika\frac{x}{a}} \right) dk 
= \frac{1}{2\pi^2 a^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(-ik)} \left( e^{ik(r-a)} - e^{ikr} \right) dk,$$
y de lo anterior se obtiene:
$$\rho^{QM}(r) \approx \frac{1}{\pi a^2} \left[ \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k} e^{ikr} dk - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k} e^{ik(r-a)} dk \right]. \quad (4.16)$$

La forma de las integrales de la ecuación (4.16) son funciones de Heaviside, los cuales están dadas por:

$$\theta(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k} e^{ikx} dk$$
(4.17)

Según lo anterior, la ecuación (4.16) se transforma en lo siguiente:

$$\rho^{QM}(r) \sim \frac{1}{\pi a^2} \left[ \theta(r) - \theta(r-a) \right].$$
(4.18)

El miembro derecho de la ecuación es la conocida densidad de probabilidad clásica del problema del pozo circular infinito, resultado buscado en este trabajo y dada por la ecuación (3.23). Este es un resultado interesante, pero solo es una primera aproximación de orden cero. Obtendremos el comportamiento asintótico al considerar la ecuación completa dado por (4.8), los cuales son los resultados exáctos.

# 4.2. Mecánica cuántica asintótica del pozo circular infinito

Al igual que el problema del pozo cuadrado infinito, el oscilador armónico, el problema de Kepler y otros sistemas ya estudiados, el problema del pozo circular infinito puede estudiarse mediante la nueva formulación matemática del principio de correspondencia, el cual conduce a determinar el comportamiento cuántico asintótico del sistema, es decir, se puede determinar la densidad de probabilidad clásica más términos de corrección partiendo de la densidad de proabilidad cuántica. Para ello consideraremos de nuevo la ecuación (4.8) el cual es:

$$f_{\alpha}^{QM}(k) = -\frac{1}{\pi a^2} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} + \frac{1}{\pi a^2} \frac{2}{J_1^2(\alpha)} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n^3}{2^2} \frac{1}{\alpha^2} \int_0^1 x^{n-2} J_0^2(\alpha x) x dx$$

$$(4.19)$$

La integración del segundo término del miembro derecho ya lo conocemos, y da como resultados los siguientes términos, en este caso, se calculan los primeros tres términos, y el cuarto, es la integral del cual surgen los siguientes términos:

$$\begin{aligned} f_{\alpha}^{QM}(k) &= -\frac{1}{\pi a^2} \frac{1}{ika} \left( e^{-ika} - 1 \right) \\ &+ \frac{1}{\pi a^2} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n^3}{(n-1)2^2} \frac{1}{\alpha^2} \\ &- \frac{1}{\pi a^2} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n^3(n-2)^3}{(n-1)(n-3)2^4} \frac{1}{\alpha^4} \\ &+ \frac{1}{\pi a^2} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n^3(n-2)^3(n-4)^3}{(n-1)(n-3)(n-5)2^6} \frac{1}{\alpha^6} \\ &- \frac{1}{\pi a^2} \frac{2}{J_1^2(\alpha)} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n^3(n-2)^3(n-4)^3(n-6)^3}{(n-1)(n-3)(n-5)2^8} \frac{1}{\alpha^8} \int_0^1 x^{n-8} J_0^2(\alpha x) x dx \end{aligned}$$

El primer término del miembro derecho de la ecuación anterior (4.20) es independiente de  $\alpha$ , el cual ya hemos estudiado y del que se obtiene la densidad de probabilidad clásica al calcular la transformada inversa de Fourier. El resto de los términos dependen de potencias pares crecientes de  $\frac{1}{\alpha^{2n}}$ , respectivamente, los cuales se hacen visibles de manera explicita en la ecuación. Estos términos tienen formas más complejas, lo que los hace difíciles de reducir a integrales simples al momento de calcular la transformada inversa de Fourier, de lograrse, estos cálculos proporcionarán los términos de las correcciones cuánticas residuales. Sin embargo, hasta ahora no hemos logrado obtener estas correcciones de manera precisa, por lo que ahora solo dejaremos expresados estos términos.

# 4.2.1. Aproximación asintótica del coeficiente de Fourier

A continuación calcularemos la aproximación asintótica del coeficiente de Fourier al tomar  $\alpha \gg$ 1, de tal modo, que en el límite  $\alpha$  es muy grande y lo representamos como  $\alpha_N$ . Debemos observar también, que en ese límite la energía cuántica  $E_{\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2ma^2}$  y la energía clásica  $E = \frac{p^2}{2m}$  del sistema, son aproximadamente iguales. Por lo tanto, en estos límites, establecemos que se cumple la relación:

$$E_{\alpha_N} = \frac{\hbar^2 \alpha_N^2}{2ma^2} = \frac{p^2}{2m}.$$
 (4.21)

Según lo anterior, se cumple que:

$$\alpha_N = \frac{pa}{\hbar}.\tag{4.22}$$

Si consideramos la acción clásica de una partícula libre dado por  $S_{class} = 2pa$ , al combinarla con la ecuación (4.22) se obtiene:

$$\alpha_N = \frac{S_{class}}{2\hbar}.\tag{4.23}$$

Este es el número cuántico grande, el cuál consideraremos para determinar el comportamiento asintótico del sistema.

#### 4.2.2. Transformada inversa del coeficiente de Fourier

El comportamiento asintótico del sistema se determina a partir de considerar el número cuántico grande  $\alpha_N$ , para ello ahora procedemos a sustituir el valor de  $\alpha_N$  en la ecuación (4.19), del cual resulta:

$$f_{\alpha}^{QM}(k) = \frac{1}{\pi a^2} \frac{1}{(-ika)} \left( e^{-ika} - 1 \right) + \frac{1}{\pi a^2} \frac{2}{J_1^2 \left( \frac{S_{class}}{2\hbar} \right)} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1} n^3}{(n+1)!} \left( \frac{\hbar}{Sclass} \right)^2 \int_0^1 x^{n-2} J_0^2 \left( \frac{S_{class}}{2\hbar} x \right) x dx$$
(4.24)

El primer término del miembro derecho de la ecuación ya es conocido y la integración del segundo están desarrollados en la ecuación (4.20) para algunos términos, y como ya hemos mencionado, aún no se han lograda calcular sus transformadas inversas de Fourier. Considerando todo lo anterior, la transformada inversa de Fourier de esta ecuación se puede expresar como:

$$\rho^{AQM}(r) = \frac{1}{\pi a^2} \left[\theta(r) - \theta(r-a)\right] + O\left[r, \left(\frac{\hbar}{S_{class}}\right)^{2n}\right]$$
(4.25)

Donde  $O\left[r, \left(\frac{\hbar}{S_{class}}\right)^{2n}\right]$  representa los términos que se obtienen del proceso de desarrollo de las integrales. El resultado anterior es la llamada densidad de probabilidad de la mecánica cuántica asintótica (AQM), donde podemos observar que el primer término es la densidad de probabilidad clásica del pozo circular infinito y el segundo representa los siguientes términos de las correcciones cuánticas residuales que dependen de potencias pares crecientes de la forma  $\left(\frac{\hbar}{S_{class}}\right)^{2n}$ . El comportamiento asintótico de la densidad de probabilidad cuántica se puede ilustrar en la figura 4.1 donde podemos observar que se acerca asintóticamente a la densidad de probabilidad clásica conforme  $\alpha \gg 1$ .



Figura 4.1: Comportamiento asintótico de la densidad de probabilidad cuántica (AQM).

Al tomar de la ecuación (4.25) la primera aproximación de orden cero, se obtiene la densidad de probabilidad clásica:

$$\rho^{AQM}\left(r\right) \sim \frac{1}{\pi a^{2}} \left[\theta(r) - \theta(r-a)\right].$$

Este resultado es el límite clásico de la densidad de probabilidad cuántica mediante la aplicación de la nueva formulación matemática del principio de correspondencia y tiene una importancia de carácter general y es esencialmente el objetivo de este trabajo. Estos detalles los analizaremos y discutiremos en la siguiente sección.

## Discusiones

La densidad de probabilidad de la mecánica cuántica asintótica dado por la ecuación (4.25), que consiste de términos de la densidad de probabilidad clásica más correcciones cuánticas residuales de potencias pares crecientes de la forma  $\left(\frac{\hbar}{S_{class}}\right)^{2n}$ , muestra que en la primera aproximación de orden cero se recupera la dencidad da relativitada de terra la dencidad da relativitada de terra la dencidada de terra la dencidada de terra la dencidada de terra de la dencidada de t orden cero se recupera la densidad de probabilidad clásica, término independiente de  $\hbar$ :

$$\rho^{AQM}(r) \sim \frac{1}{\pi a^2} \left[ \theta(r) - \theta(r-a) \right]. \tag{4.27}$$

Podemos observar que no es necesario tomar el límite de  $\hbar \rightarrow 0$ , lo cual tiene sentido, ya que no es consistente hacer variar una cantidad que se define como constante. Por otro lado, el hecho de que  $\hbar$  este presente en el comportamiendo macroscópico de este sistema, significa que el teorema de indeterminación de Heisenberg sigue siendo válido, es decir, la mecánica cuántica es aplicable en todas las escalas de la naturaleza, y que el mundo macroscópico es una consecuancia de su comportamiento asintótico.

Estos análisis y resultados únicamente se han logrado obtener mediante el enfoque de la nueva formulación matemática del principio de correspondencia. Otros procedimientos conducen a los límites clásicos sin llegar a los anteriores resultados. Por ejemplo, mediante este procedimiento se hace a un lado el método que toma simultáneamente  $n \to \infty$  y  $\hbar \to 0$ , con el producto de  $n\hbar = J$ , donde J es cierta acción adecuada.

También debemos observar que la nueva formulación matemática del principio de correspondencia toma el número cuántico principal muy grande  $(n \gg 1)$  y no  $n \rightarrow \infty$ , con un valor determinado de n muy grande. Por ejemplo, para este problema, el número cuántico principal  $\alpha \gg 1$ , es  $\alpha_N$  dado por la ecuación (4.23), y se obtiene al considerar que en el límite clásico el eigenvalor de energía es igual a la energía clásica del sistema. Sin embargo, no se calcula su valor numérico ya que se busca determinar el comportamiento asintótico de la densidad de probabilidad cuántica.

Por otro lado, los términos de corrección de la ecuación (4.25) aún no han sido determinados, si bien $O\left[r, \left(\frac{\hbar}{S_{class}}\right)^{2n}\right]$ está dado por: (4.28)

$$O\left[r, \left(\frac{\hbar}{S_{class}}\right)^{2n}\right] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} O'(k) e^{ikax} dk,$$

donde:

$$O'(k) = \frac{1}{\pi a^2} \frac{2}{J_1^2 \left(\frac{S_{class}}{2\hbar}\right)} \frac{1}{ika} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ika)^{n+1} n^3}{(n+1)!} \left(\frac{\hbar}{S_{class}}\right)^2 \int_0^1 x^{n-2} J_0^2 \left(\frac{S_{clas}}{2\hbar} x\right) x dx, \quad (4.29)$$

donde las integrales de los primeros términos están desarrolladas en la ecuación 4.20, las transformadas inversas de estas no se han logrado reducir a una forma simple. Por otro lado, en la ecuación (C.2) del apéndice C, se calculan algunos términos de la integral en orden creciente, únicamente para mostrar el comportamiento que conforman estos resultados.

Por otro lado, es importante destacar la implicación que la solución del límite clásico del pozo circular infinito pueda tener a nivel de aplicación en otros problemas por su configuración similar. A continuación se mencionan algunos ejemplos de manera general:

- Moléculas diatómicas: Para ciertas moléculas diatómicas simples, donde la interacción entre los átomos puede aproximarse como una fuerza radial, el pozo de potencial circular infinito puede utilizarse para analizar las propiedades de energía y las transiciones cuánticas.
- Anillos conductores: En sistemas físicos como los anillos conductores, donde los electrones se encuentran confinados en una estructura circular, el problema del pozo de potencial circular infinito puede ser un modelo útil para entender las propiedades electrónicas y la conductividad cuántica.
- Luz confinada en cavidades circulares: En el campo de la óptica cuántica, se puede modelar la propagación de la luz confinada en cavidades circulares utilizando este enfoque para analizar modos de resonancia y efectos cuánticos de la luz confinada.

Desde luego que existen más sistemas físicos que pueden estudiarse mediante el modelo del pozo circular infinito, pero solo hemos mencionado estos tres, que por sus configuraciones físicas pueden abordarse como un problema del pozo circular infinito. Sin embargo, en este trabajo nuestro objetivo se enfoca únicamente en la obtención del límite clásico del pozo circular infinito empleando la nueva formulación matemática del principio de correspondencia, el cual se ha logrado completar plenamente.

En modo general, la obtención del límite clásico de la densidad de probabilidad cuántica y los términos de corrección para el problema del pozo circular infinito representa un paso importante en la aplicación de la nueva formulación matemática del principio de correspondencia a diferentes problemas. Sin embargo, a pesar de que este enfoque ha dado resultados en la obtención de los límites clásicos de problemas fundamentales como el oscilador armónico simple, aún estamos lejos de poder comprender y resolver de manera completa el problema de los límites clásicos. Una característica importante a destacar de este método en comparación de otros, es que se aplica a las densidades de probabilidades cuánticas, y estos se construyen a partir del cuadrado de las funciones de estado, funciones o vectores de estado que contienen toda la información física del sistema de acuerdo al primer postulado de la mecánica cuántica.

58

# Capítulo 5

### Conclusiones

Este trabajo inició con el objetivo de determinar el límite clásico del problema del pozo circular infinito; su estudio, análisis y proceso de solución nos condujo a determinar magnitudes importantes, como la densidad de probabilidad clásica y cuántica del sistema. La aplicación de la nueva formulación matemática del principio de correspondencia a este sistema, nos permitió obtener el límite clásico del problema del pozo circular infinito, por lo tanto, los estudios y análisis de los resultados nos permiten formular las siguientes conclusiones:

- Se obtiene una solución completa del problema del pozo circular infinito. Entre otras magnitudes importantes, la solución del problama nos permitió conocer acerca de las propiedades del sistema, como su función solución, el número cuántico principal, el eigenvalor de energía y la densidad de probabilidad cuántica. La solución de este problema no se ha encontrado reportado anteriormente en la literatura.
- Debido a la simetría radial del pozo circular infinito, el número cuántico principal está dado por  $\alpha$ , por lo tanto, lo que define el comportamiento asintótico de este sistema es  $\alpha$ , el cero de la función de Bessel de orden 0,  $J_0$ .
- La nueva formulación matemática del principio de correspondencia es aplicable para este caso, salvo una pequeña variación en el procedimiento, en vez de tomar  $n \gg 1$ , se considera  $\alpha \gg 1$ . De igual modo, los eigenvalores de las observables físicas dependen de  $\alpha$ , como es el caso de la energía del sistema.
- Según los resultados obtenidos anteriormente, al aplicar la nueva formulación matemática del principio de correspondencia al problema del pozo circular infinito, más precisamente, a la densidad de probabilidad cuántica, se puede recuperar la densidad de probabilidad clásica más terminos cuánticos residuales de corrección dependientes de potencias pares crecientes de la forma  $\left(\frac{\hbar}{S_{class}}\right)^{2n}$ , resultado al que llamaremos densidad de probabilidad cuántica asintótica (AQM). Este resultado indica que la hipótesis inicial se cumple, por lo tanto también se ha logrado el objetivo principal de este trabajo.

- La densidad de probabilidad cuántica asintótica (AQM) consiste en la suma de la densidad de probabilidad clásica más terminos cuánticos residuales de corrección. Estos términos de corrección dependen de potencias pares crecientes de la forma  $\left(\frac{\hbar}{S_{class}}\right)^{2n}$  pero no son ceros: En este contexto, el teorema de indeterminación de Heisenberg se aplica inclusive a nivel macroscópico. Esto significa que la mecánica cuántica logra describir el comportamiento macroscópico del sistema. Sin embargo, no es posible establecer sus trayectorias, ya que la mecánica cuántica no aporta esa información.
- La densidad de probabilidad clásica puede obtenerse a partir de la densidad de probabilidad cuántica asintótica como el primer término de aproximación de orden cero de la serie independiente de  $\hbar$ , es decir, no hay necesidad de tomar  $\hbar \to 0$ , ya que de hecho  $\hbar$  es una constante.
- Los resultados del comportamiento asintótico del sistema solo se han logrado obtener mediante la nueva formulación matemática del principio de correspondencia.
- La nueva formulación matemática del principio de correspondencia ha sido aplicado a otros sistemas físicos fundamentales, cuyos resultados son conocidos, como es el caso del problema del oscilador armónico simple, el pozo cuadrado infinito, el problema de Kepler y el estudio del comportamiento de sistemas periódicos en el regimen de altas energías.

Actualmente, el procedimiento de la nueva formulación matemática del principio de correspondencia de Bohr se pretende aplicar a diferentes problemas de la física cuántica para el estudio de sus límites clásicos. También se han comenzado a implementar su enseñanza en las aulas de clases, lo que necesariamente conduce a los análisis y discusiones de sus implicaciones, contribuyendo a la compresión de la relación entre la física cuántica y clásica, por estas y otras razones, tenemos la convicción de que se aclararán las interrogantes sobre las aplicaciones e implicaciones de este procedimiento.

2110001011	o o mipi	000101100	40 0000	-
The second secon	2			
7				
	0			
	Č (			
			$\mathbf{O}$	
			J.	
				$\mathbf{O}$
				•



Se incluirá en esta capítulo algunos temas especiales de matemáticas que serán útiles para el desarrollo de este trabajo, eso incluyen definiciones y las relaciones de recurrencia de las funciones de Bessel que importantes para nuestros objetivos. Tambien se incluyen temas de ecuaciones diferenciales, tranformaciones de coordenadas y otros métodos matemáticos.

### A.1. Funciones de Bessel

Queremos encontrar una serie de relaciones de recurrencia de las funciones de Bessel, para eso recurrimos a su función generatriz:

$$e^{\frac{x}{2}\left(t-\frac{1}{t}\right)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n\left(x\right) t^n \tag{A.1}$$

A partir de esta ecuación podemos encontrar las relaciones recursivas derivando ambos miembros de la función generatriz respecto a x, del cual resulta:

$$\frac{1}{2}\left(t-\frac{1}{t}\right)e^{\frac{x}{2}\left(t-\frac{1}{t}\right)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J'_{n}\left(x\right)t^{n}.$$
(A.2)

?

Evidentemente esto es igual a:

$$\frac{1}{2}\left(t-\frac{1}{t}\right)\sum_{n=-\infty}^{\infty}J_{n}\left(x\right)t^{n}=\sum_{n=-\infty}^{\infty}J_{n}'\left(x\right)t^{n},\tag{A.3}$$

o que conduce a la siguiente expresión:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} J_n(x) t^{n+1} - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} J_n(x) t^{n-1} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J'_n(x) t^n,$$
(A.4)

y reenumerando las sumatorias se obtiene:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} J_{n-1}(x) t^n - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} J_{n+1}(x) t^n = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n'(x) t^n.$$
(A.5)

Lo anterior nos permite reescribir la ecuación como sigue:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{2} J_{n-1}(x) - \frac{1}{2} J_{n+1}(x) - J'_n(x) \right] t^n = 0.$$
 (A.6)

Podemos ver que esta ecuación se satisface si se anula las expresiones dentro del corchete en cada término de la sumatoria, lo cual nos lleva a obtener la primera relación de recurrencia:

$$J'_{n}(x) = \frac{1}{2} \left[ J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x) \right].$$
(A.7)

A continuación buscaremos una segunda relación de recurrencia derivando la función generatríz respecto de t, por lo tanto, de (A.1) se tiene:

$$\frac{x}{2}\left(1+\frac{1}{t^{2}}\right)e^{\frac{x}{2}\left(t-\frac{1}{t}\right)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{n}\left(x\right)nt^{n-1},$$
(A.8)
$$J_{n}\left(x\right)t^{n} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{n}\left(x\right)t^{n-2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{n}\left(x\right)nt^{n-1},$$
(A.9)

lo que es igual a:

$$\frac{x}{2} \left[ \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^n + \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^{n-2} \right] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) n t^{n-1},$$

y al reenumerar las sumatorias obtenemos:

$$\frac{x}{2} \left[ \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^n + \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{n+2}(x) t^n \right] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{n+1}(x) (n+1) t^n,$$
(A.10)

de tal modo que al agrupar la ecuación nos queda:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{x}{2} \left[ J_n(x) + J_{n+2}(x) \right] - J_{n+1}(x)(n+1) \right\} t^n = 0.$$
 (A.11)

De lo anterior vemos que la ecuación se satisface si la expresión dentro del corchete es nulo para todos los términos de la sumatoria. Considerando esto se obtiene la segunda relación de recurrencia de las funciones de Bessel:

$$\frac{x}{2} \left[ J_n \left( x \right) + J_{n+2} \left( x \right) \right] = \left( n+1 \right) J_{n+1} \left( x \right), \tag{A.12}$$

de los cuales se derivan evidentemente las relaciones de recurrencias equivalentes:

$$J_{n-1}(x) + J_{n+1}(x) = \frac{2n}{x} J_n(x).$$
 (A.13)

Ahora solo hace falta normalizar la solución de la parte radial de la ecuación de Schrödinger, para ello se requiere encontrar las integrales de Lommel para las funciones de Bessel. Partiendo de la ecuación de Bessel (3.11), donde como sabemos x = kr, pero para darle un carácter general se hace el cambio de la siguiente forma  $x \to \alpha x$ , y con una solución de la ecuación de Bessel  $\mu = \mu(\alpha x)$ , con lo que esta ecuación se convierte en:

$$\frac{d^{2}\mu}{dx^{2}} + \frac{1}{x}\frac{d\mu}{dx} + \left(\alpha^{2} - \frac{n^{2}}{x^{2}}\right)\mu = 0.$$
 (A.14)

La ecuación anterior, para mayor simplicidad, lo podemos reescribir de la siguiente forma:

$$\mu'' + \frac{1}{x}\mu' + \left(\alpha^2 - \frac{n^2}{x^2}\right)\mu = 0.$$

En forma semejante, sea una ecuación de Bessel con solución  $\nu\left(\beta x\right)$ :

$$\nu'' + \frac{1}{x}\nu' + \left(\beta^2 - \frac{n^2}{x^2}\right)\nu = 0, \tag{A.16}$$

y si ahora a la ecuación (A.15) se le multiplica por  $\nu$  y a la ecuación (A.16) por  $\mu$ , se obtiene:

$$\nu\mu'' + \frac{1}{x}\nu\mu' + \left(\alpha^2 - \frac{n^2}{x^2}\right)\nu\mu = 0, \tag{A.17}$$

$$\mu\nu'' + \frac{1}{x}\mu\nu' + \left(\beta^2 - \frac{n^2}{x^2}\right)\mu\nu = 0.$$
(A.18)

Restando la ecuación (A.18) de (A.17) se obtiene:

٦

Ż

$$\nu\mu'' - \mu\nu'' + \frac{1}{x}\left(\nu\mu' - \mu\nu'\right) + \left(\alpha^2 - \beta^2\right)\nu\mu = 0$$
 (A.19)

Si ahora multiplicamos esta ecuación por x se obtiene lo siguiente:

$$x (\nu \mu'' - \mu \nu'') + (\nu \mu' - \mu \nu') + (\alpha^2 - \beta^2) x \nu \mu = 0.$$
 (A.20)  
nue se cumple:

Puede comprobarse que se cumple:

$$\frac{d}{dx} (\nu \mu' - \mu \nu') = \nu \mu'' - \mu \nu'', \qquad (A.21)$$

$$\frac{d}{dx} [x (\nu \mu' - \mu \nu')] = \nu \mu' - \mu \nu' + x \frac{d}{dx} (\nu \mu' - \mu \nu'), \qquad (A.22)$$
(A.22)
(A.22)
(A.23)
$$\frac{d}{dx} [x (\nu \mu' - \mu \nu')] + (\alpha^2 - \beta^2) x \nu \mu = 0.$$

con lo que la ecuación (A.20) se reduce a:

$$\frac{d}{dx}\left[x\left(\nu\mu'-\mu\nu'\right)\right]+\left(\alpha^2-\beta^2\right)x\nu\mu=0.$$

Con lo anterior puede escribirse la integreación del siguiente modo:

$$\left(\alpha^2 - \beta^2\right) \int x\nu\mu dx = \int \frac{d}{dx} \left[x \left(\nu\mu' - \mu\nu'\right)\right] dx,\tag{A.24}$$

donde la primera integral de Lommel es:

$$\left(\alpha^{2}-\beta^{2}\right)\int x J_{n}\left(\alpha x\right) J_{n}\left(\beta x\right) dx = x \left[J_{n}\left(\beta x\right) J_{n}'\left(\alpha x\right) - J_{n}\left(\alpha x\right) J_{n}'\left(\beta x\right)\right].$$
(A.25)

Ahora evaluaremos la integral en el intervalo [0, 1], por el hecho de que  $J_n(kr) = J_n(\alpha_{ns}\frac{r}{a}) = J_n(\alpha_{ns}x)$ , con  $x = \frac{r}{a}$ , y que por otro lado, la integral de normalización comprende el intervalo [0, r = a], entonces se sigue que:

$$\left(\alpha^{2}-\beta^{2}\right)\int_{0}^{1}xJ_{n}\left(\alpha x\right)J_{n}\left(\beta x\right)dx = J_{n}\left(\beta\right)J_{n}'\left(\alpha\right) - J_{n}\left(\alpha\right)J_{n}'\left(\beta\right).$$
(A.26)

Para poder comprender mejor este resultado consideremos la forma siguiente:

$$\left(\alpha_{ns}^{2} - \alpha_{ns'}^{2}\right) \int_{0}^{1} x J_{n}\left(\alpha_{ns}x\right) J_{n}\left(\alpha_{ns'}x\right) dx = J_{n}\left(\alpha_{ns'}\right) J_{n}'\left(\alpha_{ns}\right) - J_{n}\left(\alpha_{ns}\right) J_{n}'\left(\alpha_{ns'}\right), \quad (A.27)$$

donde como sabemos  $J_n(\alpha_{ns}) = J_n(\alpha_{ns'}) = 0$ , y como  $\alpha_{ns} \neq \alpha_{ns'}$ , por lo que se cumple que:

$$\int_0^1 x J_n\left(\alpha_{ns}x\right) J_n\left(\alpha_{ns'}x\right) dx = 0.$$
(A.28)

Con esto se demuestra que las eigenfunciones radiales son ortogonales.

A continuación encontraremos la constante de normalización de las eigenfunciones radiales, y con este propósito, encontraremos la segunda integral de Lommel. Partiendo de la ecuación de Bessel (A.15), que ya es conocida:

$$\mu'' + \frac{1}{x}\mu' + \left(\alpha^2 - \frac{n^2}{x^2}\right)\mu = 0$$

y si después multiplicamos a toda la ecuación por  $x^2\mu'$ , de donde se obtiene:

$$x^{2}\mu'\mu'' + x\mu'^{2} + x^{2}\mu'\mu - n^{2}\mu'\mu = 0.$$
 (A.29)

La anterior ecuación se puede reescribir de la forma:

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dx}(x^{2}\mu'^{2}) + \frac{1}{2}\frac{d}{dx}(x^{2}\mu^{2}) - x\mu^{2} - n^{2}\frac{1}{2}\frac{d}{dx}(\mu^{2}) = 0,$$
(A.30)

y lo anterior se puede agrupar como:

$$\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{2}x^{2}{\mu'}^{2} + \frac{1}{2}\left(x^{2} - n^{2}\right)\mu^{2}\right] = x\mu^{2}.$$
(A.31)

La integración de la ecuación anterior da como resultado:

$$\int x\mu^2 dx = \int \frac{d}{dx} \left[ \frac{1}{2} x^2 {\mu'}^2 + \frac{1}{2} \left( x^2 - n^2 \right) \mu^2 \right] dx.$$
(A.32)

Para nuestro caso, al hacer un cambio  $x \to \alpha x$  se obtiene:

$$\int x J_n^2(\alpha x) \, dx = \frac{1}{2} \left[ x^2 J_n'^2(\alpha x) + \left( x^2 - \frac{n^2}{\alpha^2} \right) J_n^2(\alpha x) \right]. \tag{A.33}$$

Esta es la llamada segunda integral de Lommel. Al integrarlo en el internalo $\left[0,1\right]$  se obtiene:

$$\int_{0}^{1} x J_{n}^{2}(\alpha x) \, dx = \frac{1}{2} \left[ J_{n}^{\prime 2}(\alpha) + \left( 1 - \frac{n^{2}}{\alpha^{2}} \right) J_{n}^{2}(\alpha) \right], \tag{A.34}$$

y considerando que  $J_n(\alpha) = 0$ , el cual es el cero de la función de Bessel, la integral anterior resulta:

$$\int_{0}^{1} x J_{n}^{2}(\alpha x) \, dx = \frac{1}{2} J_{n}^{\prime 2}(\alpha) \,. \tag{A.35}$$

Falta determinar  $J_n^{\prime 2}(\alpha)$ , para ello recurrimos a las relaciones de recurrencia dados por (A.7) y (A.13):  $J'_{n}(x) = \frac{1}{2} \left[ J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x) \right],$  $\frac{2n}{x}J_{n}(x) = J_{n-1}(x) + J_{n+1}(x).$ Si  $x=\alpha_{ns}$  , un cero de la función de Bessel, se obtiene:  $J'_{n}(\alpha_{ns}) = \frac{1}{2} \left[ J_{n-1}(\alpha_{ns}) - J_{n+1}(\alpha_{ns}) \right]$  $0 = J_{n-1}(\alpha_{ns}) + J_{n+1}(\alpha_{ns}).$ De la segunda relación de recurrencia se consigue:  $-1(\alpha_{ns}) = -1$  $T_{n+1}(\alpha_{ns}),$ y al combinarla con la primera relación de recuerrencia se tiene:  $J_n'(\alpha_{ns}) = -J_{n+1}(\alpha_{ns}).$ (A.36)Al sustituir el resultado anterior en (A.35) se tiene que:  $\int_{0}^{1} x J_{n}^{2}(\alpha_{ns}x) \, dx = \frac{1}{2} J_{n+1}^{2}(\alpha_{ns}) \, .$ (A.37)A continuación nos enfocaremos en la normalización de la eigenfunción  $\psi\left(r\right)$ dado por la ecuación (3.18). Partimos de la condición de normalización dado por:

$$\int_{0}^{a} |\psi\left(r\right)|^{2} r dr = 1.$$
(A.38)

De lo anterior se sigue que:

$$\int_{0}^{a} |\psi(r)|^{2} r dr = \int_{0}^{1} a^{2} A^{2} J_{n}^{2}(\alpha_{ns}x) x dx$$

$$= a^{2} A^{2} \int_{0}^{1} J_{n}^{2}(\alpha_{ns}x) x dx = a^{2} A^{2} \left[\frac{1}{2} J_{n+1}^{2}(\alpha_{ns})\right] = 1.$$
(A.39)

Por lo tanto, de acuerdo con esto, la constante de normalización está dado por:

$$A = \frac{\sqrt{2}}{a|J_{n+1}(\alpha_{ns})|}.$$
(A.40)

La eigenfunción de la parte radial del problema de la partícula en el pozo circular infnito es:

$$\psi_{n\alpha_{ns}}(\mathbf{v}) = \frac{\sqrt{2}}{|J_{n+1}(\alpha_{ns}s)|} J_n(\alpha_{ns}x) \tag{A.41}$$

donde  $x = \frac{r}{a}$ .

# Apéndice B

# B.1. Integral de $J_0^2$

Para realizar la interal de  $J_0^2$ , debemos recordar los resultados obtenidos de las integrales de Lommel, en este caso la ecuación (A.33), o su equivalente obtenido a partir de ésta última y la combinación de las ecuaciones (A.1), (A.7) y (A.13):

$$\int x J_n^2(\alpha x) \, dx = \frac{1}{2} \left\{ x^2 \left[ J_{n-1}^2(\alpha x) + J_n^2(\alpha x) \right] - \frac{2nx}{\alpha} J_{n-1}(\alpha x) \, J_n(\alpha x) \right\}$$
(B.1)

A partir de esta ecuación se obtienen las integrales:

$$\int x J_0^2(\alpha x) \, dx = \frac{x^2}{2} \left( J_0^2 + J_1^2 \right), \tag{B.2}$$

$$\int x J_1^2(\alpha x) \, dx = \frac{x^2}{2} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) - \frac{x}{2} J_0 J_1. \tag{B.3}$$

$$\int x J_1^2(\alpha x) \, dx = \frac{x^2}{2} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) - \frac{x}{\alpha} J_0 J_1. \tag{B.3}$$

Donde  $J_0 = J_0(\alpha x)$  y  $J_1 = J_1(\alpha x)$ . Para la integral (B.2), además de (B.1), se usa también la propiedad de las funciones de Bessel:  $J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x)$ .

A continuación calcularemos la integral  $\int x^3 J_0(\alpha x)$ , mediante el método de integración por partes:

$$\int u dv = uv - \int v du, \tag{B.4}$$

del cual se tiene lo siguiente:

$$\int x^{3} J_{0}^{2} (\alpha x) = \int x^{2} \left( x J_{0}^{2} (\alpha x) dx \right)$$
  
$$= \frac{x^{4}}{2} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) - \int x^{3} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) dx$$
  
$$2 \int x^{3} J_{0}^{2} (\alpha x) = \frac{x^{4}}{2} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) - \int x^{3} J_{1}^{2} dx,$$
 (B.5)

donde se ha tomado  $u = x^2$  y  $dv = xJ_0^2 dx$ , y de acuerdo con la ecuación (B.2) se tiene que  $v = \frac{x^2}{2} (J_0^2 + J_1^2)$ .

Siguiendo el mismo método de integración se calcula para:

$$\int x^{3} J_{1}^{2}(\alpha x) dx = \int x^{2} \left( x J_{1}^{2}(\alpha x) dx \right)$$
  
=  $x^{2} \left[ \frac{x^{2}}{2} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) - \frac{x}{\alpha} J_{0}^{2} J_{1}^{2} \right] - \int 2x \left[ \frac{x^{2}}{2} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) - \frac{x}{\alpha} J_{0}^{2} J_{1}^{2} \right] dx,$   
$$\int x^{3} J_{1}^{2}(\alpha x) dx = \frac{x^{4}}{4} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) - \frac{x^{3}}{2\alpha} J_{0} J_{1} - \frac{1}{2} \int x^{3} J_{0} dx + \frac{1}{\alpha} \int x^{2} J_{0} J_{1} dx,$$
 (B.6)

donde, de acuerdo con el método de integración por partes, se ha tomado  $dv = xJ_1^2 dx$ , y como sabemos, su integración esta dado por (B.3). Al introducir lo anterior en (B.5) y hacer las operaciones necesarias se llega al resultado: .

$$\int x^3 J_0^2(\alpha x) = \frac{x^4}{6} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) + \frac{x^3}{3\alpha} J_0 J_1 - \frac{2}{3\alpha} \int x^2 J_0 J_1 dx.$$
(B.7)

Como podemos ver aun falta calcular la integral del tercer término del miembro derecho. Procedemos mediante una integración por partes, considerando además el hecho de que  $J'_0(\alpha x) =$  $-J_1(\alpha x)$ :

$$\int x^2 J_0 J_1 dx = -\int x^2 J_0 J_0' dx = -\frac{1}{\alpha} \int x^2 \left( \alpha J_0 J_0' dx \right).$$

(B.8) Dado que  $\frac{d}{dx}[J_0(\alpha x)] = \alpha J'_0(\alpha x)$ , se toma a  $dv = \alpha J_0 J'_0 dx$ , del cual resulta:  $v = \frac{1}{2}J_0^2$ , por otro lado tenemos  $u = x^2$ . Con lo anterior, la integral por partes resulta:
$$\int x^2 J_0 J_1 dx = -\frac{1}{\alpha} \left( \frac{x^2}{2} J_0^2 - \int x J_0^2 dx \right).$$
(B.9)

Al introducir este resultado (B.9) en (B.7), la integral se reduce a la forma:

$$\int x^3 J_0^2(\alpha x) \, dx = \frac{x^4}{6} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) + \frac{x^3}{3\alpha} J_0 J_1 + \frac{x^2}{3\alpha^2} J_0^2 - \frac{2}{3\alpha^2} \int x J_0^2 dx. \tag{B.10}$$

Siguiendo el mismo procedimiento se integran algunos algunos términos para exponentes mayores de x, los cuales podemos resumirlos en las siguientes relaciones:

$$\int x J_0^2(\alpha x) \, dx = \frac{x^2}{2} \left( J_0^2 + J_1^2 \right),\tag{B.11}$$

$$\int x^2 J_0^2(\alpha x) \, dx = \frac{x^3}{4} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) + \frac{x^2}{4\alpha} J_0 J_1 + \frac{x^1}{8\alpha^2} J_0^2 - \frac{1}{8\alpha^2} \int J_0^2 dx, \tag{B.12}$$

$$\int x^3 J_0^2(\alpha x) \, dx = \frac{x^4}{6} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) + \frac{x^3}{3\alpha} J_0 J_1 + \frac{x^2}{3\alpha^2} J_0^2 - \frac{2}{3\alpha^2} \int x J_0^2 dx, \tag{B.13}$$

$$\int x^4 J_0^2(\alpha x) \, dx = \frac{x^5}{8} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) + \frac{3x^4}{8\alpha} J_0 J_1 + \frac{9x^3}{16\alpha^2} J_0^2 - \frac{27}{16\alpha^2} \int x^2 J_0^2 dx, \tag{B.14}$$

$$\int x^5 J_0^2(\alpha x) \, dx = \frac{x^6}{10} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) + \frac{2x^5}{5\alpha} J_0 J_1 + \frac{4x^4}{5\alpha^2} J_0^2 - \frac{16}{5\alpha^2} \int x^3 J_0^2 dx, \tag{B.15}$$

$$\int x^6 J_0^2(\alpha x) \, dx = \frac{x^7}{12} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) + \frac{5x^6}{12\alpha} J_0 J_1 + \frac{25x^5}{24\alpha^2} J_0^2 - \frac{125}{24\alpha^2} \int x^4 J_0^2 dx, \tag{B.16}$$

$$\int x^7 J_0^2(\alpha x) \, dx = \frac{x^8}{14} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) + \frac{3x^7}{7\alpha} J_0 J_1 + \frac{9x^6}{7\alpha^2} J_0^2 - \frac{54}{7\alpha^2} \int x^5 J_0^2 dx. \tag{B.17}$$

Como podemos observar, el último término del miembro derecho de la integral de la ecuación (B.13) es la integral dado por la ecuación (B.11), el último término de la integral dado por (B.14) está dado por la integral (B.12), y así sucesivamente para las demás integrales.

Es importante observar, y es clave para la integración de  $J_0^2$ , que la forma de la integral se mantiene para las distintas  $x^n$ , es decir, conforme los exponentes de x crecen, la integral para un exponente determinado de x, queda en términos de la integral correspondiente con exponente n-2 de x. Los otros términos tambien mantienen su forma. Esto lleva a pensar que para un exponente n cualquiera de x se obtendrá una integración donde se mantengan esta misma relación.

Una forma de conocer la forma general de esta integral es calculando la integral  $\int x^n J_0^2(\alpha x) x dx = \int x^{n+1} J_0^2(\alpha x) dx$ . Esta integral se resuelve siguiendo el mismo procedimiento que en los casos anteriores:

$$\int x^{n} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx = \int x^{n} \left[ J_{0}^{2}(\alpha x) x dx \right]$$
  
$$= \frac{1}{2} x^{n+2} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) - \frac{n}{2} \int x^{n} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) x dx$$
  
$$\left( 1 + \frac{n}{2} \right) \int x^{n} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx = \frac{1}{2} x^{n+2} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) - \frac{n}{2} \int x^{n} J_{1}^{2} x dx.$$
(B.18)

La integral por partes de  $\int x^n J_1^2 x dx$ al tomar  $u=x^n$  y  $dv=J_1^2 x dx$  resulta:

$$\int x^{n} J_{1}^{2}(\alpha x) x dx = \frac{2}{n+2} \left[ \frac{1}{2} x^{n+2} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) - \frac{1}{\alpha} x^{n+1} J_{0} J_{1} - \frac{n}{2} \int x^{n} J_{0}^{2} x dx + \frac{n}{\alpha} \int x^{n} J_{0} J_{1} dx \right].$$
(B.19)

Al introducir este resultado (B.19) en (B.18) se obtiene:

$$\left(1+\frac{n}{2}\right)\int x^n J_0^2\left(\alpha x\right) x dx = \frac{1}{2}x^{n+2} \left(J_0^2+J_1^2\right) -\frac{n}{2} \cdot \frac{2}{n+2} \left[\frac{1}{2}x^{n+2} \left(J_0^2+J_1^2\right) -\frac{1}{\alpha}x^{n+1} J_0 J_1 \right.$$

$$\left. -\frac{n}{2}\int x^n J_0^2 x dx + \frac{n}{\alpha}\int x^n J_0 J_1 dx \right],$$
(B.20)

y de lo anterior se sigue:

$$\left[1 + \frac{n}{2} - \frac{n^2}{2(n+2)}\right] \int x^n J_0^2(\alpha x) \, x dx = \frac{1}{n+2} x^{n+2} \left(J_0^2 + J_1^2\right) + \frac{n}{(n+2)\alpha} x^{n+1} J_0 J_1 - \frac{n^2}{(n+2)\alpha} \int x^n J_0 J_1 dx, \tag{B.21}$$

y al hacer las operaciones necesarias se obtiene:

acer las operaciones necesarias se obtiene:  

$$\int x^{n} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx = \frac{n+2}{2(n+1)} \left[ \frac{1}{n+2} x^{n+2} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) + \frac{n}{(n+2)\alpha} x^{n+1} J_{0} J_{1} - \frac{n^{2}}{(n+2)\alpha} \int x^{n} J_{0} J_{1} dx \right].$$
(B.22)

Integrando por partes el tercer término, se obtiene:

$$\int x^n J_0 J_1(\alpha x) \, dx = -\frac{1}{\alpha} \left( \frac{1}{2} x^n J_0^2 - \frac{n}{2} \int x^{n-2} J_0^2 x \, dx \right). \tag{B.23}$$

Finalmente, al sustituir este resultado en (B.22) se obtiene:

$$\int x^{n} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx = \frac{1}{n+1} \left[ \frac{1}{2} x^{n+2} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) + \frac{n}{2\alpha} x^{n+1} J_{0} J_{1} + \frac{n^{2}}{(2\alpha)^{2}} x^{n} J_{0}^{2} - \frac{n^{3}}{(2\alpha)^{2}} \int x^{n-2} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx \right].$$
(B.24)

Como podemos observar la integral mantiene la misma forma que la que hemos observado en los otros casos, y se puede inferir que se cumple para cualquier n; sin embargo, esto no lo hemos demostrado. Para demostrar la generalidad de este procedimiento se empleará el método de inducción en la siguiente sección.

## B.2. Generalización de la integral de $J_0^2$

Para demostrar que la relación de la integral (B.24) se cumple para cualquier n, recurrimos al método de inducción matemática, lo cual se sigue de la siguiente manera:

- 1. Dado que la relación (B.24) se cumple para n = 0, 1, 2, 3, los cuales están dados por las ecuaciones (B.2), (B.10), (B.16) y (B.17), respectivamente, podemos inferir que se cumple para un n cualquiera.
- 2. Para demostrar que se cumple para cualquier n, se supone que es verdadero para cierto valor de n, digamos n = k, y basandonos en esta hipótesis hay que demostrar que tambien es verdadero para n = k + 1, que es el siguiente valor posible de n. Si esto se cumple, significa que es verdadero para cualquier n.
- 3. Como hemos comprobado del paso 1 que la relación se cumple para el primer valor admisible de n, el cual es n = 0, del paso 2 se sigue que también es cierta para n = 1. Análogamente, si la relación es cierta para n = 2, se sigue que es cierta para n = 3, y así susesivamente.

Demostración:

Ya hemos comprobado que la relación (B.24) se cumple para n = 0, 1, 2, 3. Ahora supongamos que se cumple para un n = k cualquiera, lo cual es:

$$\int x^{k} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx = \frac{1}{k+1} \left[ \frac{1}{2} x^{k+2} \left( J_{0}^{2} + J_{1}^{2} \right) + \frac{k}{2\alpha} x^{k+1} J_{0} J_{1} + \frac{k^{2}}{(2\alpha)^{2}} x^{k} J_{0}^{2} \right]$$

$$\frac{k^{3}}{(2\alpha)^{2}} \int x^{k-2} J_{0}^{2} x dx dx dx dx dx dx dx$$
(B.25)

Bajo la hipótesis anterior, se demotrará que la relación (B.24) también es verdadera para n =k + 1. Por lo tanto, la integral  $\int x^{(k+1)+1} J_0^2 dx$  se calcula siguiendo el mismo procedimiento que en los casos antiores, que es, la integración por partes y el uso como base de las integrales de Lommel dados por los casos de las integrales de Lommel dados por las ecuaciones (B.2) y (B.3):

$$\int x^{k+1} J_0^2(\alpha x) x dx = \int x^{k+2} J_0^2 dx$$
  
=  $\frac{1}{2} x^{k+3} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) - \frac{k+1}{2} \int x^{k+1} J_0^2 x dx - \frac{k+1}{2} \int x^{k+1} J_1^2 x dx$   
 $\frac{k+3}{2} \int x^{k+1} J_0^2(\alpha x) x dx = \frac{1}{2} x^{k+3} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) - \frac{k+1}{2} \int x^{k+1} J_1^2 x dx.$  (B.26)  
Tenemos también la integral:

Tenemos también la integral:

$$\int x^{k+1} J_1^2(\alpha x) \, x dx = \frac{2}{k+3} \left\{ \frac{1}{2} x^{k+3} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) - \frac{1}{\alpha} x^{k+2} J_0 J_1 - \frac{k+1}{2} \int x^{k+1} J_0^2 x dx + \frac{k+1}{\alpha} \int x^{k+1} J_0 J_1 dx \right\}.$$
(B.27)  
sustituir (B.27) en (B.26) se obtiene lo siguiente:

Al sustituir (B.27) en (B.26) se obtiene lo siguiente:

$$\frac{k+3}{2}\int x^{k+1}J_0^2\left(\alpha x\right)xdx = \frac{1}{2}x^{k+3}\left(J_0^2+J_1^2\right) - \frac{k+1}{k+3}\left\{\frac{1}{2}x^{k+3}\left(J_0^2+J_1^2\right) - \frac{1}{\alpha}x^{k+2}J_0J_1 - \frac{k+1}{2}\int x^{k+1}J_0^2xdx + \frac{k+1}{\alpha}\int x^kJ_0J_1dx\right\},$$
(B.28)

y de lo anterior se sigue:  

$$\begin{aligned} \left(\frac{k+1}{2}, \frac{(k+1)^2}{2(k+3)}\right) \int x^{k+1} J_0^2(\alpha x) x dx &= \frac{1}{k+3} x^{k+3} (J_0^2 + J_1^2) + \frac{k+1}{(k+3)\alpha} x^{k+2} J_0 J_1 \\ &\quad - \frac{(k+1)^2}{(k+3)\alpha} \int x^{k+1} J_0 J_1 dx, \end{aligned} (B.29) \end{aligned}$$
lo cual conduce a:  

$$\int x^{k+1} J_0^2(\alpha x) x dx &= \frac{k+3}{2(k+2)} \left\{ \frac{1}{k+3} x^{k+3} (J_0^2 + J_1^2) + \frac{k+1}{(k+3)\alpha} x^{k+2} J_0 J_1 \\ &\quad - \frac{(k+1)^2}{(k+3)\alpha} \int x^{k+1} J_0 J_1 dx \right\}, \tag{B.30}$$
y lo anterior se reduce a:  

$$\int x^{k+1} J_0^2(\alpha x) x dx &= \frac{1}{2(k+2)} \left\{ x^{k+3} (J_0^2 + J_1^2) + \frac{k+1}{\alpha} x^{k+2} J_0 J_1 - \frac{(k+1)^2}{\alpha} \int x^{k+1} J_0 J_1 dx \right\}. \tag{B.31}$$
Por otro lado, la integral faltante es:  

$$\int x^{k+1} J_0^2(\alpha x) x dx &= \frac{1}{2(k+2)} \left\{ x^{k+3} (J_0^2 + J_1^2) + \frac{k+1}{\alpha} x^{k+2} J_0 J_1 - \frac{(k+1)^2}{\alpha} \int x^{k+1} J_0 J_1 dx \right\}. \tag{B.32}$$
Sustituyendo lo anterior (B.32) en (B.31) nos lleva al resultado final:  

$$\int x^{k+1} J_0^2(\alpha x) x dx &= \frac{1}{2(k+2)} \left\{ x^{k+3} (J_0^2 + J_1^2) + \frac{k+1}{\alpha} x^{k+2} J_0 J_1 + \frac{(k+1)^2}{2\alpha^2} x^{k+1} J_0^2 - \frac{(k+1)^2}{2\alpha^2} \int x^{k+1} J_0^2 (x^k) x dx = \frac{1}{2(k+2)} \left\{ x^{k+3} (J_0^2 + J_1^2) + \frac{k+1}{\alpha} x^{k+2} J_0 J_1 + \frac{(k+1)^2}{2\alpha^2} x^{k+1} J_0^2 - \frac{(k+1)^2}{2\alpha^2} \int x^{k+1} J_0^2 (x^k) x dx = \frac{1}{2(k+2)} \left\{ x^{k+3} (J_0^2 + J_1^2) + \frac{k+1}{\alpha} x^{k+2} J_0 J_1 + \frac{(k+1)^2}{2\alpha^2} x^{k+1} J_0^2 - \frac$$

Esta integral tambien se puede escribir de la siguiente forma:

$$\int x^{k+1} J_0^2(\alpha x) \, x dx = \frac{1}{(k+1)+1} \left\{ \frac{1}{2} x^{(k+1)+2} \left( J_0^2 + J_1^2 \right) + \frac{(k+1)}{2\alpha} x^{(k+1)+1} J_0 J_1 + \frac{(k+1)^2}{(2\alpha)^2} x^{k+1} J_0^2 - \frac{(k+1)^3}{(2\alpha)^2} \int x^{(k+1)-2} J_0^2 x dx \right\}.$$
 (B.34)

Como puede verse, la relación es verdadera tambien para n = k + 1. Para completar el razonamiento en la que se basa la demostración se sigue de este modo: como la relación (B.24) se cumple para n = 0, del paso 2 del método de inducción matematica, lo cual hemos demostrado que se satisfacen, se sigue que es válido para n = 1. De modo análogo, si se cumple para n = 1 por consiguiente se cumple para n = 2, y así susesivamente.

Lo anterior demuestra que la relación (B.24) es general. Sin embargo falta mencionar que esto se cumple para integrales que tienen la forma:  $\int x^{n+1} J_0^2(\alpha x) dx = \int x^n \left[ x J_0^2(\alpha x) dx \right]$ .

## B.3. Generalización de la integral de $J_n^2$

El procedimiento anterior se puede generalizar para la integral de  $J_n^2$ , es decir, para una integral de la forma  $\int x^m J_n^2(\alpha x) x dx$ . Para ello se debe seguir esencialmente el mismo procedimiento y considerar adicionalmente algunas de las relaciones de recurrencia desarrollada en el apéndica A. La generalización tiene la siguiente forma:

$$\int x^{m} J_{n}^{2}(\alpha x) x dx = \frac{1}{m+1} \left\{ \frac{1}{2} x^{m+2} \left( J_{n}^{2} + J_{n+1}^{2} \right) + \frac{m-2n}{2\alpha} x^{m+1} J_{n} J_{n+1} + \frac{m(m-2n)}{(2\alpha)^{2}} x^{m} J_{n}^{2} - \frac{m \left[ m^{2} - (2n)^{2} \right]}{(2\alpha)^{2}} \int x^{m-2} J_{n}^{2}(\alpha x) x dx \right\},$$
(B.35)

donde  $n = 0, 1, 2, \dots$  y  $m = 0, 1, 2, \dots$  Este resultado se ha verificado su generalidad mediante el método de inducción. Evidentemente este resultado se reduce a la ecuación (B.24) al tomar n = 0.

## Apéndice C

Para determinar los términos de corrección, debemos analizar el segundo término de la ecuación dado por (4.8). Primero recordemos la ecuación (4.6):

$$\int_{0}^{1} x^{n} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx = \frac{1}{n+1} \left[ \frac{1}{2} J_{1}^{2}(\alpha) - \frac{n^{3}}{(2\alpha)^{2}} \int_{0}^{1} x^{n-2} J_{0}^{2}(\alpha x) x dx \right].$$
(C.1)

Revisemos los primeros términos de la integral, los cuales se pueden desarrollar de la siguiente manera:

$$\begin{split} n &= 0 \longrightarrow \int_{0}^{1} J_{0}^{2} (\alpha x) x dx &= \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) \\ n &= 1 \longrightarrow \int_{0}^{1} x J_{0}^{2} (\alpha x) x dx &= \frac{1}{2} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) - \frac{1^{3}}{2 \cdot (2\alpha)^{2}} S^{0} \\ n &= 2 \longrightarrow \int_{0}^{1} x^{2} J_{0}^{2} (\alpha x) x dx &= \frac{1}{3} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) - \frac{2^{3}}{3 \cdot (2\alpha)^{2}} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) \\ n &= 3 \longrightarrow \int_{0}^{1} x^{3} J_{0}^{2} (\alpha x) x dx &= \frac{1}{4} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) - \frac{3^{3}}{4 \cdot 2 \cdot (2\alpha)^{2}} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) + \frac{3^{3} \cdot 1^{3}}{4 \cdot 2 \cdot (2\alpha)^{2}} S^{0} \\ n &= 4 \longrightarrow \int_{0}^{1} x^{4} J_{0}^{2} (\alpha x) x dx &= \frac{1}{5} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) - \frac{4^{3}}{5 \cdot 3 \cdot (2\alpha)^{2}} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) + \frac{4^{3} \cdot 2^{3}}{5 \cdot 3 \cdot (2\alpha)^{4}} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) \\ n &= 5 \longrightarrow \int_{0}^{1} x^{5} J_{0}^{2} (\alpha x) x dx &= \frac{1}{6} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) - \frac{5^{3}}{6 \cdot 4 \cdot 2 \cdot (2\alpha)^{2}} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) + \frac{5^{3} \cdot 3^{3}}{6 \cdot 4 \cdot 2 \cdot (2\alpha)^{4}} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) \\ - \frac{5^{3} \cdot 3^{3} \cdot 1^{3}}{6 \cdot 4 \cdot 2 \cdot (2\alpha)^{4}} S^{0} \\ n &= 6 \longrightarrow \int_{0}^{1} x^{6} J_{0}^{2} (\alpha x) x dx &= \frac{1}{7} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) - \frac{6^{3}}{7 \cdot 5 \cdot 2 \cdot (2\alpha)^{2}} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) + \frac{6^{3} \cdot 4^{3}}{7 \cdot 5 \cdot 3 \cdot (2\alpha)^{4}} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) \\ - \frac{6^{3} \cdot 4^{3} \cdot 2^{3}}{7 \cdot 5 \cdot 3 \cdot (2\alpha)^{6}} \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) \end{split}$$

De la relación anterior podemos observar que la integrales  $\int_0^1 x^n J_0^2(\alpha x) x dx$  con exponentes n pares conducen a resultados con su último término con factor  $\frac{1}{2}J_1^2(\alpha)$ , mientras que las integrales con exponentes n impares conducen a resultados en su ultimo término con factor  $S^0 = \int_0^1 J_0^2(\alpha x) dx$ . Esta última integral tiene una forma más complicada. Por otro lado, los resultados anteriores podemos expresarlos de un forma más ganeral al realizar la integrales correspondientes al segundo término de la ecuación (C.1). De modo general se obtiene:

$$\int_{0}^{1} x^{n} J_{0}^{2} (\alpha x) \, dx = \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) \frac{1}{(n+1)} \\ = \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) \frac{n^{3}(n-2)^{3}}{(n+1)(n-1)(2} \frac{1}{\alpha^{2}} \\ + \frac{1}{2} J_{1}^{2} (\alpha) \frac{n^{3}(n-2)^{3}(n-4)^{2}}{(n+1)(n-1)(n-3)(n-5)2^{6}} \frac{1}{\alpha^{6}} \\ + \frac{n^{3}(n-2)^{3}(n-4)^{2}(n-6)^{3}}{(n+1)(n-1)(n-3)(n-5)2^{3}} \frac{1}{\alpha^{8}} \int_{0}^{1} x^{n-8} J_{0}^{2} (\alpha x) \, x dx.$$
(C.3)

## Bibliografía

- [1] W. Heisenberg. Diálogos sobre la Física Atómica. La Editorial Católica, 1975.
- [2] N. Bohr. Collected Works: Vol. 3. North-Holland, New York, 1976.
- [3] A. J. Makowski. A brief survey of various formulations of the correspondence principle. European journal of physics, 27(5):1133, 2006.
- [4] W. Heisenberg. The physical principles of the quantum theory. Dover, New York, 1949.
- [5] M. Born. Moderne Physik. Sieben Vorträge über Materie und Strahlung, ausgearbeitet von F. Sauter. Julius Springer Berlin, 1933.
- [6] L. De La Peña. Introducción a la mecánica cuántica. Fondo de Cultura económica, 2014.
- [7] U. Klein. What is the limit  $\hbar \rightarrow 0$  of quantum theory? <u>American Journal of Physics</u>, 80(11):1009-1016, 2012.
- [8] R. L. Liboff. The correspondence principle revisited. Physics Today, 37(2):50–55, 1984.
- [9] L. E. Ballentine, Y. Yang, and J. P. Zibin, Inadequacy of ehrenfest's theorem to characterize the classical regime. Physical review A, 50(4):2854, 1994.
- [10] G. Q. Hassoun and D. H. Kobe. Synthesis of the planck and bohr formulations of the correspondence principle. American Journal of Physics, 57(7):658–662, 1989.
- [11] A. Kenfack and K. Życzkowski. Negativity of the wigner function as an indicator of nonclassicality. Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics, 6(10):396, 2004.
- [12] J. Bernal, A. Martín-Ruiz, and J. C. García-Melgarejo. A simple mathematical formulation of the correspondence principle. Journal of Modern Physics, 4:108–112, 2013.
- [13] A. Martín-Ruiz, J. Bernal, and A. Carbajal-Domínguez. Macroscopic quantum behaviour of periodic quantum systems. Journal of Modern Physics, 5:44–55, 2014.
- [14] A. Martín-Ruiz, J. Bernal, A. Frank, and A. Carbajal-Dominguez. The classical limit of the quantum kepler problem. Journal of Modern Physics, 4:818–822, 2013.
- [15] J. Ford and G. Mantica. Does quantum mechanics obey the correspondence principle? is it complete? American journal of physics, 60(12):1086–1098, 1992.
- [16] H. R. Post. Correspondence, invariance and heuristics: In praise of conservative induction. Studies in History and Philosophy of Science Part A, 2(3):213–255, 1971.
- [17] G. Yoder. Using classical probability functions to illuminate the relation between classical and quantum physics. American journal of physics, 74(5):404–411, 2006.

- 18 F. Bornen Inn. 19 To Nation Atron 19 To Nation 19 To Nation Atron 19 To Nation 1

Aloj	amiento de la tesis en el repositorio institucional
Titulo de la tesis:	Principio de correspondencia aplicado al pozo circular infinito
Autor:	Ratael Díaz Mondragón
ORCID:	https://orcid.org/0009-0007-0267-2555
Resumen de la tesis:	La fisica clasica y la mecanica cuantica son dos de las teorias mas impor- tantes de la física: la primera describe al mundo macroscópico y la segun-
	da al microscónico. Sin embargo las relaciones entre la física cuántica
	y la clásica no se han logrado comprender completamente. La descrip-
	ción no intuitiva y probabilística de la mecánica cuántica en contraste
	con el determinismo de la física clásica han sido y siempre serán temas
	de discusión mientras no se esclarezcan y comprendan de manera uni-
	taria y coherente las relaciones entre ambas teorías. Existen diferentes
	respondido todas las interrogantes, pero el hecho de que existen trabajos
	que partiendo de la mecánica cuántica logran recuperar los equivalentes
	clásicos de las magnitudes físicas, los llamados límites clásicos, indepen-
	dientemente del procedimiento empleado, arroja la luz de que en algún
	momento se llegarán a completar estos trabajos. Por ejemplo, sería muy
	frontera de la física cuántica y clásica. Uno de los trabajos más impor-
	tantes que permite conectar las magnitudes cuánticas en sus límites con
	sus análogos clásicos, es el principio de correspondencia de Bohr. En es-
	te trabajo se resuelve en forma completa el problema del pozo circular
	cuántico infinito y se determina su límite clásico empleando una nueva
Palabras clavos do lo	Poro circular infinito: principio de correspondencia de Bohr.
tesis:	1 ozo en cutar mininto, principio de correspondencia; minite ciasico.

<ul> <li>Alojamiento de la tesis en el repositorio institucional</li> <li>Referencias citadas:</li> <li>[1] W. Heisenberg. Diálogos sobre la Física Atómica. La Editorial Cató- lica, 1975.</li> <li>[2] N. Bohr. Collected Works: Vol. 3. North-Holland, New York, 1976.</li> <li>[3] A. J. Makowski. A brief survey of various formulations of the correspondence principle. European journal of physics, 27(5):1133, 2006.</li> <li>[4] W. Heisenberg. The physical principles of the quantum theory. Dover, New York, 1949.</li> <li>[5] M. Born. Moderne Physik. Sieben Vorträge über Materie und Strahlung, ausgearbeitet von F. Sauter. Julius Springer Berlin, 1933.</li> <li>[6] L. De La Peña. Introducción a la mecánica cuántica. Fondo de Cultura éconómica, 2014.</li> <li>[7] U. Klein. What is the limit h → 0 of quantum theory? American Journal of Physics, 80(11):1009–1016, 2012.</li> <li>[8] R. L. Liboff. The correspondence principle revisited. Physics Today, 37(2):50-55, 1984.</li> <li>[9] L. E. Ballentine, Y. Yang, and J. P. Zibin. Inadequacy of chrenfest's theorem to characterize the classical regime. Physical review A, 50(4):2854, 1694.</li> <li>[10] G. Q. Hassoun and D. H. Kobe. Synthesis of the planck and bohr formulations of the corres-pondence principle. American Journal of Physics, 57(7):658-662, 1989.</li> <li>[11] A. Koptack and K. Życzkowski. Negativity of the wigner function as an indicator of non-classicality. Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics, 61(0):396, 2004.</li> <li>[12] J. Bernel, A. Martír Fuiz, and J. C. García-Melgarejo. A simple mathematical formulation of the correspondence principle. Journal of Modern Physics, 541-65, 2014.</li> <li>[13] A. Martín-Ruiz, J. Bernal, A. Fraik, and A. Carbajal-Domínguez. The classical Init of the quantum kepter problem. Journal of Modern Physics, 4318-822, 2013.</li> <li>[13] J. Ford and G. Mantica. Does quantum mechanics obey the correspondence principle? is it complete? American journal of physics, 60(12):1086-1089, 1992.</li> <li>[16] H. R. Post. Corresp</li></ul>	<ul> <li>Alojamiento de la tesis en el repositorio institucional</li> <li>Referencias citadas: <ol> <li>W. Heisenberg. Diálogos sobre la Física Atómica. La Editorial C lica, 1975.</li> <li>N. Bohr. Collected Works: Vol. 3. North-Holland, New York, 19</li> <li>A. J. Makowski. A brief survey of various formulations of the corpondence principle. European journal of physics, 27(5):1133, 2006.</li> <li>W. Heisenberg. The physical principles of the quantum theory. Do New York, 1949.</li> <li>M. Born. Moderne Physik. Sieben Vorträge über Materie und St lung, ausgearbeitet von F. Sauter. Julius Springer Berlin, 1933.</li> <li>L. De La Peña. Introducción a la mecánica cuántica. Fondo de Cul conómica, 2014.</li> <li>U. Klein. What is the limit ħ → 0 of quantum theory? Amer Journal of Physics, 80(11):1009–1016, 2012.</li> <li>R. L. Liboff. The correspondence principle revisited. Physics To 37(2):50–55, 1984.</li> <li>L. E. Ballentine, Y. Yang, and J. P. Zibin. Inadequacy of eh fest's theorem to characterize the classical regime. Physical review 50(4):2854, 1994.</li> <li>G. Q. Hassoun and D. H. Kobe. Synthesis of the planck and based on the planck a</li></ol></li></ul>	Cató-
<ul> <li>[1] W. Heisenberg. Diálogos sobre la Física Atómica. La Editorial Cató- lica, 1975.</li> <li>[2] N. Bohr. Collected Works: Vol. 3. North-Holland, New York, 1976.</li> <li>[3] A. J. Makowski. A brief survey of various formulations of the correspondence principle. European journal of physics, 27(5):1133, 2006.</li> <li>[4] W. Heisenberg. The physical principles of the quantum theory. Dover, New York, 1949.</li> <li>[5] M. Born. Moderne Physik. Sieben Vorträge über Materie und Strah- lung, ausgearbeitet von F. Sauter. Julius Springer Berlin, 1933.</li> <li>[6] L. De La Peña. Introducción a la mecánica cuántica. Fondo de Cultura feonómica, 2014.</li> <li>[7] U. Klein. What is the limit ħ → 0 of quantum theory? American Journal of Physics, 80(11):1009–1016, 2012.</li> <li>[8] R. L. Juboff. The correspondence principle revisited. Physics Today, 37(2):50-55, 1984.</li> <li>[9] L. E. Ballentine, Y. Yang, and J. P. Zibin. Inadequacy of ehren- fest's theorem to characterize the classical regime. Physical review A, 50(4):2854, 1994.</li> <li>[10] G. Q. Hassoun and D. H. Kobe. Synthesis of the planck and bohr formulations of the corres- pondence principle. American Journal of Phy- sics, 57(7):655–662, 1989.</li> <li>[11] A. Kentack and K. Życzkowski. Negativity of the wigner function as an infifeator of non-curscicality. Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Yorics, 6(0):396, 2004.</li> <li>[12] J. Bernat, A. Martín-Ruiz, and J. C. García-Melgarejo. A simple mathematical formulation of the correspondence principle. Journal of Modern Physics, 4:408–112, 2013.</li> <li>[13] A. Martín-Ruiz, J. Bernal, and A. Carbajal-Domínguez. Macroscopic quantum behaviour of periodic (mantum systems. Journal of Modern Physics, 4:188–8:22, 2013.</li> <li>[15] J. Ford and G. Mantica. Does quantum mechanics obey the co- respondence principle? is it complete? American journal of physics, 60(12):1086–1098, 1992.</li> <li>[16] H. R. Post. Correspondence, invariance and heuristics: In praise of conservative induction. Studies in</li></ul>	<ul> <li>Referencias citadas:</li> <li>[1] W. Heisenberg. Diálogos sobre la Física Atómica. La Editorial C lica, 1975.</li> <li>[2] N. Bohr. Collected Works: Vol. 3. North-Holland, New York, 199</li> <li>[3] A. J. Makowski. A brief survey of various formulations of the compondence principle. European journal of physics, 27(5):1133, 2006.</li> <li>[4] W. Heisenberg. The physical principles of the quantum theory. Do New York, 1949.</li> <li>[5] M. Born. Moderne Physik. Sieben Vorträge über Materie und St lung, ausgearbeitet von F. Sauter. Julius Springer Berlin, 1933.</li> <li>[6] L. De La Peña. Introducción a la mecánica cuántica. Fondo de Cul económica, 2014.</li> <li>[7] U. Klein. What is the limit ħ → 0 of quantum theory? Amer Journal of Physics, 80(11):1009–1016, 2012.</li> <li>[8] R. L. Liboff. The correspondence principle revisited. Physics To 37(2):50–55, 1984.</li> <li>[9] L. E. Ballentine, Y. Yang, and J. P. Zibin. Inadequacy of eh fest's theorem to characterize the classical regime. Physical review 50(4):2854, 1994.</li> <li>[10] G. Q. Hassoun and D. H. Kobe. Synthesis of the planck and Participal Science of the planck and Partic</li></ul>	Cató-
	<ul> <li>formulations of the corres- pondence principle. American Journal of I sics, 57(7):658-662, 1989.</li> <li>[11] A. Kenfack and K. Życzkowski. Negativity of the wigner funct as an indicator of non-classicality. Journal of Optics B: Quantum Semiclassical Optics, 6(10):396, 2004.</li> <li>[12] J. Bernal, A. Martín-Ruiz, and J. C. García-Melgarejo. A sir mathematical formulation of the correspondence principle. Journa Modern Physics, 4:108-112, 2013.</li> <li>[13] A. Martín-Ruiz, J. Bernal, and A. Carbajal-Domínguez. Macrosc quantum behaviour of periodic quantum systems. Journal of Moe Physics, 5:44-55, 2014.</li> <li>[14] A. Martín-Ruiz, J. Bernal, A. Frank, and A. Carbajal-Doming The classical limit of the quantum kepler problem. Journal of Moe Physics, 4:818-822, 2013.</li> <li>[15] J. Ford and G. Mantica. Does quantum mechanics obey the rrespondence principle? is it complete? American journal of phy 60(12):1086-1098, 1992.</li> <li>[16] H. R. Post. Correspondence, invariance and heuristics: In pr of conservative induction. Studies in History and Philosophy of Sci Part A, 2(3):213-255, 1971.</li> <li>[17] G. Yoder. Using classical probability functions to illuminate relation between classical and quantum physics. American journal journal physics, 74(5):404-411, 2006.</li> <li>[18] F. Bowman. Introduction to Bessel functions. Courier Corporat 2012.</li> <li>[19] G. N. Watson. A treatise on the theory of Bessel functions.</li> </ul>	276. orres- over, trah- ltura rican oday, hren- w A, bohr Phy- ction and mple al of copic odern guez. odern e co- ysics, oraise ience e the al of ttion, Cam-