



14

UNIVERSIDAD JUÁREZ AUTÓNOMA DE TABASCO
DIVISIÓN ACADÉMICA DE CIENCIAS BÁSICAS



**NUEVA FORMULACIÓN AL PRINCIPIO DE
CORRESPONDENCIA DE BOHR APLICADA AL
POZO ESFÉRICO INFINITO**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

LICENCIADO EN FÍSICA

PRESENTA

ABEL ISAÍ OVANDO ÁVALOS

DIRECTOR

DR. JORGE ALEJANDRO BERNAL ARROYO

Cunduacán, Tab.

Abril 2021



UNIVERSIDAD JUÁREZ
AUTÓNOMA DE TABASCO

"ESTUDIO EN LA DUDA. ACCIÓN EN LA FE"



División
Académica
de Ciencias
Básicas



DIRECCIÓN

Cunduacán, Tabasco; a 18 de marzo de 2021.

C. ABEL ISAÍ OVANDO ÁVALOS
PASANTE DE LA LIC. EN FÍSICA
P R E S E N T E

Por medio del presente y de la manera más cordial, me dirijo a usted para hacer de su conocimiento que proceda a la impresión del trabajo titulado **"NUEVA FORMULACIÓN AL PRINCIPIO DE CORRESPONDENCIA DE BOHR APLICADA AL POZO ESFÉRICO INFINITO"** bajo la modalidad de titulación por **TESIS**, en virtud de que reúne los requisitos para el **EXAMEN PROFESIONAL** correspondiente.

Sin otro particular, reciba usted un cordial saludo.

ATENTAMENTE

DR. GERARDO DELGADILLO PIÑÓN
DIRECTOR

C.c.p. Pasante.
C.c.p. Archivo.

Miembro CUMEX desde 2008
Consortio de
Universidades
Mexicanas
UNA ALIANZA DE CALIDAD POR LA EDUCACIÓN SUPERIOR

Km. 1 Carretera Cunduacán-Jalpa de Méndez, A.P. 24, C.P. 86690, Cunduacán, Tab., México.
Tel/Fax: (993) 3581500 Ext. 6702,6701 E-Mail: direccion.dacb@ujat.mx

www.ujat.mx

CARTA DE AUTORIZACIÓN

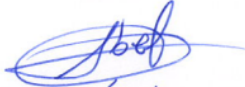
El que suscribe, autoriza por medio del presente escrito a la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco para que utilice tanto física como digitalmente la tesis de grado denominada "NUEVA FORMULACIÓN AL PRINCIPIO DE CORRESPONDENCIA DE BOHR APLICADA AL POZO ESFÉRICO INFINITO", de la cual soy autor y titular de los Derechos de Autor.

La finalidad del uso por parte de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco de la tesis antes mencionada, será única y exclusivamente para difusión, educación y sin fines de lucro; autorización que se hace de manera enunciativa mas no limitativa para subirla a la Red Abierta de Bibliotecas Digitales (RABID) y a cualquier otra red académica con las que la Universidad tenga relación institucional.

Por lo antes manifestado, libero a la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco de cualquier reclamación legal que pudiera ejercer respecto al uso y manipulación de la tesis mencionada y para los fines estipulados en este documento.

Se firma la presente autorización en la ciudad de Villahermosa, Tabasco a los 19 días del mes de abril del año 2021.

AUTORIZÓ



Abel Isai Orinda Avalos 142412004

NOMBRE COMPLETO SIN ABREVIATURAS
MATRÍCULA

Resumen

En este trabajo de tesis se prueba la validez de una nueva formulación al Principio de Correspondencia de Bohr para el caso de una partícula encerrada en un pozo de potencial esférico infinito. Para esto, primero se hace una revisión histórica y conceptual de formulaciones previas, las que sean necesarias para poder tener un mejor entendimiento del desarrollo de este trabajo, y poder entender la importancia de éste. Luego, habiendo realizado dicha revisión, se describe la consistencia de esta nueva formulación y su procedimiento general, así como se muestra que ésta ya ha sido aplicada a diferentes sistemas cuánticos. Se muestra, como ejemplo, el caso ²pecial de una partícula encerrada en una caja. Seguidamente se analiza el sistema de ⁴una partícula en un pozo de potencial cuántico esférico infinito. Se resuelve la ecuación de Schrödinger para este sistema y así se obtienen las eigenfunciones. Se revisa el comportamiento asintótico de las eigenfunciones y se calcula la densidad de probabilidad cuántica (QDP), pues es lo que será útil para aplicar la nueva formulación. Continuamente, habiendo obtenido la densidad de probabilidad cuántica, se aplica la nueva formulación a dicho sistema cuántico. Esto se realiza de la siguiente manera: se calculan los coeficientes de Fourier de la densidad de probabilidad cuántica; al resultado obtenido se le calcula la aproximación asintótica para valores del número cuántico principal muy grandes ($n \gg 1$). Posteriormente se calcula la transformada de Fourier inversa a los valores obtenidos. Se podrá ver que se obtienen valores parecidos a los de una partícula encerrada en una caja. Por último se analizan los resultados obtenidos, que estos sean consistentes con los valores clásicos esperados; se les da una explicación física.

Índice general

1. Introducción	3
2. El Límite Clásico	5
2.1. El Límite Clásico de la Mecánica Cuántica, $\hbar \rightarrow 0$	6
2.2. La Ecuación Hamilton-Jacobi y el Potencial Cuántico	7
3. Método WKB	9
4. El Principio de Correspondencia de Bohr	12
5. La Regla de Cuantización Bohr-Sommerfeld	14
5.1. La Regla de Cuantización Exacta	14
5.2. La Regla de Cuantización Bohr-Sommerfeld y Correcciones	16
5.3. El Oscilador Armónico Simple	19
6. El Teorema de Ehrenfest	21
7. Principio de Correspondencia Bohr-Heisenberg	23
8. Funciones de Wigner	25
9. Los Límites de los Estados Coherentes	28
10. Nueva Formulación	29
10.1. Procedimiento General	29
10.2. El Oscilador Armónico	30
10.3. Partícula en una Caja	32
11. El Pozo Esférico Infinito	36
11.1. Solución a la Ecuación de Schrödinger Independiente del Tiempo	37
11.2. Probabilidad Clásica	40
12. Aplicación de la Nueva Formulación	41
13. Conclusión	43
Bibliografía	45

Capítulo 1

Introducción

La Mecánica Clásica, teoría desarrollada durante el siglo XVII por Isaac Newton, es un modelo físico macroscópico, que es útil para describir el movimiento de los cuerpos en el espacio relacionando este movimiento con sus causas eficientes, a saber, fuerzas. Ésta busca proveer una precisa y consistente descripción de la dinámica de partículas y sistema de partículas, esto es, un conjunto de leyes físicas que matemáticamente describen el movimiento de cuerpos. Son necesarios, para esto, conceptos fundamentales tales como la distancia y el tiempo. La combinación de estos conceptos permite definir la velocidad y la aceleración de una partícula, cantidades clásicas fundamentales. El tercer concepto fundamental es la masa, que es un concepto bastante discutido en la literatura. Algo muy importante, y que se toma en cuenta en el desarrollo de este texto, es que la Mecánica Clásica está formulada en términos de trayectorias continuas [1].

Ahora bien, la Mecánica Cuántica es una teoría muy extensa, mucho más elemental que la Mecánica Clásica; esta fue desarrollada en la primera mitad del siglo XX, y ha sido una teoría física muy exitosa desde entonces. Ésta es aplicable a todo, desde electrones, y muchas más partículas subatómicas, hasta estrellas y galaxias. A diferencia de otras teorías como la Mecánica Newtoniana, la Teoría de la Relatividad y la Teoría Electromagnética, ésta no fue desarrollada por un solo individuo, sino que es el resultado de las aportaciones de varios físicos, tanto en sus conceptos como en su formalismo matemático. Ésta está formulada ya no en términos de trayectorias continuas, sino en términos de probabilidades. Algunos conceptos de la Mecánica Clásica como la velocidad y la aceleración ya no se mantienen como tal a niveles cuánticos.

Dado lo anterior, se repara en que casi desde los inicios de la formulación de la teoría cuántica, durante la primera mitad del siglo XX, se ha tratado de encontrar una correspondencia entre la Mecánica Cuántica y la Mecánica Clásica; con lo cual se habría de comprobar que la Mecánica Cuántica es consistente con la Mecánica Clásica. Pues una nueva teoría física no solo debe explicar fenómenos físicos, sino ser consistente con teorías clásicas [2].

Se ha considerado que la Mecánica Cuántica contiene a la Mecánica Clásica en un cierto caso límite [3]; sin embargo, ¿cuál es éste límite? Se han propuesto varias sugerencias de este límite, entre las cuales se encuentran el Principio de Correspondencia de Bohr y la Formulación que se revisa en este trabajo.

Luego, nótese que una de las formas en que podemos comprobar, de forma par-

particular, la validez de una nueva formulación, es aplicando esta misma a un caso en particular. Se busca aplicar Una Nueva Formulación al Principio de correspondencia de Bohr, descrita en [4], al caso del pozo de potencial esférico infinito, lo que permitirá comprobar la validez de esta formulación para este caso y observar que la nueva formulación puede extenderse para varios sistemas cuánticos. Y, además, se logrará tener un entendimiento más profundo de lo que ocurre en el sistema de la partícula encerrada en un pozo esférico infinito. Pues sería muy interesante poder notar cómo el comportamiento clásico del sistema emerge de la Mecánica Cuántica. Esto no solo comprobaría que la Nueva Formulación es correcta, sino que también se pueden obtener de ésta resultados muy importantes para la física en general.

Hasta ahora, el problema de una partícula encerrada en un pozo de potencial esférico infinito ha sido bien discutido en diferentes textos de Mecánica Cuántica. Éste sistema resulta ser bastante interesante y peculiar, pues, además, en términos de su razonamiento es que se estudia el átomo de hidrógeno.

Lo que hasta ahora no se había realizado, y que, por tanto, no está en los textos, es la aplicación de la Nueva Formulación a este sistema; con esto se demostraría que la Mecánica Cuántica es consistente con la Mecánica Clásica para este caso. Pero antes de esto, es necesario discutir varios aspectos históricos acerca del Principio de Correspondencia para tener un mejor entendimiento del trabajo realizado y para dar razón de por qué es importante la Nueva Formulación al igual que su aplicación al sistema en cuestión.

Capítulo 2

EL Límite Clásico

En la física se debe cumplir que, tomando el límite apropiado, es posible llegar a cantidades dadas en teorías clásicas partiendo de cantidades pertenecientes a teorías nuevas; esto para comprobar que las nuevas formulaciones son coherentes con las clásicas. A esto se le conoce como Límite Clásico. Los casos más comunes son el límite clásico de la Mecánica Relativista y el límite clásico de la Mecánica Cuántica.

Como ilustración, sería de gran utilidad revisar un poco la forma en la que la Mecánica Relativista se reduce a la Mecánica Clásica en el límite cuando $c \rightarrow +\infty$, o más bien, cuando la velocidad de la luz es muy grande en comparación con la velocidad v de un cuerpo, o sea $v/c \ll 1$. Consideremos una partícula de masa m y que se mueve con velocidad constante v , entonces el momento lineal relativista está dado como:

$$P = mv / \sqrt{1 - v^2/c^2}; \quad (2.1)$$

entonces, al aplicarse el límite $v/c \ll 1$,

$$\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2} = 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{v^2}{c^2}\right) + \dots; \quad (2.2)$$

así, al sustituir en (2.1), ésta se reduce al momento lineal clásico.

$$p = mv. \quad (2.3)$$

Lo mismo sucede para el caso de la energía cinética,

$$E_c = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - mc^2, \quad (2.4)$$

al hacer $v/c \ll 1$, ocurre que se reduce a

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2, \quad (2.5)$$

que es la energía cinética clásica.

Hablando más generalmente, todos los resultados de la Mecánica Newtoniana son recuperados en el límite $v/c \ll 1$ o, equivalentemente, en el límite cuando las energías potencial y cinética son pequeñas comparadas con la energía en reposo mc^2 . En este límite las trayectorias predichas por la Mecánica Relativista se unen con las predichas por la Mecánica Newtoniana. Por tanto, es bastante correcto decir que la Mecánica Relativista contiene a la Mecánica Newtoniana en un caso límite especial [5].

2.1. El Límite Clásico de la Mecánica Cuántica, $\hbar \rightarrow 0$

No solo en la Teoría de la Relatividad, sino que en un amplio dominio de experiencia, la Mecánica Clásica ha sido verificada, así que, si la Mecánica Cuántica es correcta, esta debe concordar con la Mecánica Clásica en el límite apropiado. En 1906, Max Planck propuso que la Mecánica Clásica emerge de la Mecánica Cuántica en el límite $\hbar \rightarrow 0$; éste fue una de las pautas importantes para la formulación de la Mecánica Cuántica. Bohr y Heisenberg destacaron la analogía entre los límites $c \rightarrow \infty$, ambos supuestamente conducen de vuelta a la Mecánica Cuántica, esto en un intento de disuadir a Einstein de su visión de dicha teoría. Einstein se mantuvo inmutable ante tales argumentos, y, no obstante, la analogía simplificó el problema seriamente. No se puede simplemente definir $\hbar \rightarrow 0$ como el Límite Clásico para el caso cuántico. Tal límite no está bien definido matemáticamente, a menos que se especifique qué cantidades se deben mantener constantes durante el proceso límite, como en el ejemplo anterior. Y, también, hay que considerar que, al igual que c , $\hbar$ es una constante universal, por lo que el límite $\hbar \rightarrow 0$ no tiene sentido desde el punto de vista de muchos teóricos. Además, existen problemas conceptuales que son, al menos, tan importantes como el problema matemático [5].

Considérese lo siguiente, las formulaciones de la Mecánica Clásica y la Mecánica Relativista están dadas en términos de los mismos conceptos, a saber, trayectorias continuas de partículas individuales a través del espacio-tiempo. Existen diferencias cuantitativas entre ambas teorías; sin embargo, en el límite $c \rightarrow +\infty$, estas diferencias se desvanecen. No obstante, véase lo que ocurre con la Mecánica Cuántica; es bien sabido que esta está formulada en términos de probabilidades, y no están meramente relacionadas con trayectorias de partículas individuales. Entonces, se puede notar que entre la Mecánica Clásica y la Mecánica Cuántica, no solo existe una diferencia cuantitativa, sino también una diferencia conceptual, y esta última es mucho más difícil de tratar. Se sabe que la Teoría Cuántica no predice el fenómeno individual observado, sino solo las probabilidades de los posibles fenómenos. Este hecho es particularmente importante en el estudio del límite clásico. El límite clásico de un estado cuántico es un ensamble de trayectorias clásicas, no una trayectoria clásica individual [5].

2.2. La Ecuación Hamilton-Jacobi y el Potencial Cuántico

La ecuación de Schrödinger, $-(\hbar^2/2m)\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\partial\Psi/\partial t$, toma una forma interesante cuando Ψ está expresada en términos de su amplitud y fase reales,

$$\Psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}, t)e^{iS(\vec{r}, t)/\hbar}. \quad (2.6)$$

Haciendo esta sustitución en la ecuación de Schrödinger y separando en partes real e imaginaria, se obtienen dos ecuaciones,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 A + \frac{1}{2m}A(\nabla S)^2 + VA = -A\frac{\partial S}{\partial t}, \quad (2.7)$$

$$-\frac{1}{2m}\{A\nabla^2 S + 2(\nabla A) \cdot (\nabla S)\} = \frac{\partial A}{\partial t} \quad (2.8)$$

La segunda de estas puede ser escrita en términos de la densidad de probabilidad, $\rho \equiv |\Psi|^2 = A^2$, como $\partial\rho/\partial t + \{\rho\nabla^2 S + (\nabla\rho) \cdot (\nabla S)\}/m = 0$, o, equivalentemente,

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\nabla \cdot (\rho\nabla S)}{m} = 0. \quad (2.9)$$

Esta es la ecuación de continuidad para la conservación de la probabilidad.

La ecuación (2.9) puede ser escrita convenientemente en la forma

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V + V_q = 0 \quad (2.10)$$

donde

$$V_q = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A} \quad (2.11)$$

es llamado el potencial cuántico, porque entra en la ecuación de la misma manera que el potencial ordinario V . La ecuación (2.10) tiene la misma forma de la ecuación Hamilton-Jacobi de la Mecánica Clásica. Si se introduce un campo de velocidad

$$\vec{v}(\vec{r}, t) = \frac{\vec{J}}{\rho} = \frac{\nabla S}{m} \quad (2.12)$$

y se toma el gradiente de (2.12), se obtiene que

$$m\frac{\partial\vec{v}}{\partial t} + m(\vec{v} \cdot \nabla)\vec{v} + \nabla(V + V_q) = 0. \quad (2.13)$$

Una partícula siguiendo el flujo definido por el campo de velocidad (2.12) obedecería la ecuación de movimiento

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = -\nabla(V + V_q) \quad (2.14)$$

Por tanto, si $V_q \rightarrow 0$ en el límite $\hbar \rightarrow 0$, las trayectorias de las partículas obedecerán las leyes de movimiento de Newton.

Hay dos pasos lógicos mayores envueltos en demostrar, con base en este resultado, que la Mecánica Cuántica tiene el límite clásico correcto. Uno es mostrar que el potencial cuántico se desvanece en límite $\hbar \rightarrow 0$, lo cual no es trivial a pesar de su proporcionalidad formal a $\hbar$. El otro es una pregunta conceptual profunda considerando el significado de la función de estado Ψ y su relación con la función del principio de Hamilton.

El comportamiento del potencial cuántico en el límite $\hbar \rightarrow 0$ evidentemente puede depender de la naturaleza de la función de estado particular. Consideremos dos ejemplos simples que ilustran las características de este problema.

El primer ejemplo es una partícula libre en una dimensión de la que su estado inicial es un paquete de onda Gaussiano, $\Psi(x, 0) \propto \exp(x^2/4a^2)$. Consideremos que la función de onda dependiente del tiempo está dada de la forma

$$\Psi(x, t) = (2\pi)^{-1/4} \left[a \left(1 + \frac{i\hbar t}{2ma^2} \right) \right]^{-1/2} e^{-x^2/4\alpha^2}, \quad (2.15)$$

donde $\alpha^2 = a^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{2ma^2} \right)$. Porque el potencial cuántico (2.11) es independiente de la normalización de Ψ , se pueden eliminar todos los factores de (2.15) que no dependen de x . Al eliminar tales factores, la amplitud real de $\Psi(x, t)$ toma la forma $A = \exp(-x^2/4\beta^2)$, donde $\beta^2 = a^2 [1 + (\hbar t/2ma^2)^2]$. Por tanto, el potencial cuántico es

$$V_q = \frac{\hbar^2}{4m\beta^2} \left(1 - \frac{x^2}{\beta^2} \right). \quad (2.16)$$

Tomando el límite $\hbar \rightarrow 0$ con a fijo, se encuentra que el potencial cuántico, en efecto, se reduce a la ecuación clásica en ese límite.

Estrictamente hablando, el criterio para decir que el potencial cuántico es pequeño es que $\hbar/m\beta^2$ es pequeño comparado con otros términos de energía. Así, cuanto más amplia sea la densidad de probabilidad de la posición, más precisa será la aproximación provista por el límite clásico. La aproximación de Hamilton-Jacobi tiene mayor alcance porque reconoce que un estado cuántico generalmente corresponde a un ensamble de trayectorias clásicas en vez de a una sola trayectoria.

Sin embargo, hay muchos estados que no satisfacen estas condiciones. Considere la función de estado $\Psi(x) = \sin(px/\hbar)$, el cual puede describir una partícula con energía $E = p^2/2m$ confinada entre dos barreras reflectoras en $x = 0$ y $x = L$, con $L = n\hbar\pi/p$ para algún entero grande n . El potencial cuántico para este estado es $V_q = p^2/2m$, el cual no se desvanece cuando se toma el límite $\hbar \rightarrow 0$ con p fija. Además la ecuación (2.12) daría una velocidad $v = (1/m)(\partial S/\partial x) = 0$, contraria a la velocidad clásica $v = p/m$. La falla de este método en dar como resultado el límite clásico esperado en este caso es claro debido a la formación de una onda estacionaria, la cual es una manifestación del fenómeno cuántico de interferencia entre las ondas hacia la izquierda y la derecha que componen Ψ [5].

Capítulo 3

Método WKB

La ecuación de Schrödinger para estados estacionarios tiene la forma

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2(x)\psi(x) = 0 \quad (3.1)$$

con

$$k^2(x) = \frac{[E - V(x)] 2m}{\hbar^2}. \quad (3.2)$$

Es más conveniente hallar las dos soluciones linealmente independientes complejas de esta ecuación, sin considerar las condiciones de frontera, y entonces formar la función de estado como una combinación lineal de estas soluciones. Para esto, se hace $\psi(x) = e^{i\Phi(x)}$; así (3.1) se convierte en

$$-\left(\frac{d\Phi}{dx}\right)^2 + i\left(\frac{d^2\Phi}{dx^2}\right) + k^2(x) = 0. \quad (3.3)$$

Si el potencial V fuese constante, la solución sería $\Phi(x) = \pm kx$, con k constante, y así se tendría que $d^2\Phi/dx^2 = 0$. Si $V(x)$ no es constante, pero cambia muy poco sobre la distancia de la longitud de onda local, $\lambda = 2\pi/k(x)$, se puede esperar que $d^2\Phi/dx^2$ sea pequeña comparada con los demás términos de (3.3). Ya que λ decrece conforme E se incrementa, esta aproximación debería ser válida en el límite del número cuántico grande. El esquema de aproximación basado en esta idea es llamado el método WKB (Wentzel, Kramer, y Brillouin), y es otro intento de hallar el límite clásico.

Como primera aproximación, se quita $d^2\Phi/dx^2$ de (3.3), obteniendo

$$\frac{d\Phi}{dx} \approx \pm k(x) \quad (3.4)$$

Para obtener la segunda aproximación, se sustituye $d^2\Phi/dx^2$ en (3.3), obteniendo así

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\Phi}{dx}\right)^2 &= k^2(x) \pm i\left(\frac{dk}{dx}\right), \\ \frac{d\Phi}{dx} &= \pm k(x) \left\{ 1 \pm \frac{i(dk/dx)}{2k^2(x)} \right\} \end{aligned}$$

$$\frac{d\Phi}{dx} = \pm k(x) + \frac{i(dk/dx)}{2k(x)},$$

$$\Phi(x) = \pm \int k(x)dx + i\frac{1}{2} \log[k(x)]$$

Así, las soluciones complejas aproximadas de (3.1) son

$$\phi(x) = e^{i\Phi(x)} = [k(x)]^{-1/2} \exp \left\{ \pm i \int k(x)dx \right\}; \quad (3.5)$$

las funciones reales de estados ligados tendrán la forma,

$$\Psi(x) = \frac{c}{[k(x)]^{1/2}} \cos \left\{ \int k(x)dx + \phi \right\}. \quad (3.6)$$

La constante ϕ será determinada por las condiciones de frontera, y la c por la normalización. Las oscilaciones rápidas de escala fina y la envolvente suave son exhibidas explícitamente en esta forma. El promedio de $|\Psi|^2$ sobre una corta distancia Δx da la densidad de probabilidad $\frac{1}{2}|c|^2/k(x)$. Cuanto mayor sea la energía menor será la longitud de onda de la oscilación de escala fina, y, por tanto, se puede elegir Δx más pequeño. La densidad de probabilidad de posición clásica es proporcional al tiempo que la partícula pasa en el intervalo Δx , y así es proporcional a $dt/dx = 1/v$, con la constante de proporcionalidad siendo definida normalizando la probabilidad total a 1. Ya que $\frac{1}{2}mv^2 = E - V(x)$, es evidente de (3.2) que la velocidad clásica es $v = \hbar k(x)/m$, y así, la densidad de probabilidad cuántica coincide con la densidad de probabilidad clásica. La longitud Δx puede hacerse arbitrariamente pequeña en el límite de la energía suficientemente alta. Pero, a pesar de que las densidades de probabilidad de posición clásica y cuántica se vuelven indistinguibles en el límite de energía alta (número cuántico grande), la Mecánica Clásica no necesita hacerse parecida a la Mecánica Clásica en este límite. En el ejemplo de la partícula entre dos barreras reflectoras, las energías permitidas permanecen discretas y la separación entre los niveles de energía no se hacen cero.

La aproximación de la probabilidad de la posición a su límite clásico ha sido explícitamente estudiada en sistemas simples. Pauling y Wilson (1935) la ilustran para el oscilador armónico. Rowe (1987) ha examinado el átomo de hidrógeno, ilustrando el límite de n grande para los casos del momento angular mínimo ($\ell = 0$) y el momento angular máximo ($\ell = n - 1$). Los estados $\ell = 0$ corresponden a elipses estrechas que se han degenerado en líneas rectas a través del centro de la órbita, y la densidad de probabilidad de la posición radial es ancha. Los estados de ℓ máximo corresponden a órbitas circulares, y la densidad de probabilidad de la posición radial se agudiza sobre el radio de la órbita clásica en el límite $n \rightarrow +\infty$. Esto se puede deducir de las fórmulas (3.5) y (3.6) para $\langle r \rangle$ y $\langle r^2 \rangle$. El radio medio $\langle r \rangle$ en el estado atómico $|m\ell m\rangle$ es de orden $n^2 a_0$, donde a_0 es el radio de Bohr y n es el número cuántico principal. La fluctuación cuadrada media en la variable radial es

$$\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = \frac{a_0^2(n^4 + 2n^2 - \ell^4 - 2\ell^3 - \ell^2)}{4}, \quad (3.7)$$

con ambos términos de la derecha siendo de orden $n^4 a_0$. Pero para $\ell = n - 1$ la fluctuación cuadrada media se reduce a

$$\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = \frac{1}{2} a_0^2 n^3 \left(1 + \frac{1}{2n}\right), \quad (3.8)$$

y, así, en el límite $n \rightarrow \infty$ la fluctuación relativa, $(\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2) / \langle r \rangle^2$, se desvanece como n^{-1} . La dependencia angular de la densidad de probabilidad está dada por

$$|Y_\ell^m(\theta, \phi)|^2 \propto |P_\ell^m(\cos \theta)|^2.$$

Es claro de la relación

$$P_\ell^m(u) = (1 - u^2)^{m/2} \left(\frac{d}{du} \right)^m P_\ell(u)$$

que cuando m tiene su valor máximo, $m = \ell$, la densidad angular se reduce a

$$|Y_\ell^\ell(\theta, \phi)|^2 \propto (\sin \theta)^\ell,$$

la cual se hace arbitrariamente aguda alrededor de $\theta\pi/2$ en el límite $n \rightarrow +\infty$. Así se puede ver que en el límite $n \rightarrow +\infty$, la distribución de probabilidad de la posición del estado atómico, con $m = \ell = n - 1$, se aproxima a una órbita circular ecuatorial. Dado que el ancho de la distribución de probabilidad es una fracción del radio medio $\langle r \rangle$ que se desvanece, el límite clásico de este estado cuántico parece ser una órbita única. Este es un ejemplo típico por causa de su alto grado de simetría. Es más común para el límite de un estado cuántico ser un ensamble de órbitas clásicas [5].

Capítulo 4

El Principio de Correspondencia de Bohr

Otro intento por de hallar el límite apropiado, por el cual se pueda confirmar que la Mecánica Clásica emerge de la Mecánica Cuántica fue hecho por Niels Bohr. Niels Bohr formuló un principio que impone una condición sobre la Teoría Cuántica para que esta se reduzca a la Mecánica Clásica en ciertas condiciones. De esta manera nunca habrá una contradicción entre las dos teorías [6]. Esto se conoce como el Principio de Correspondencia de Bohr, y llegó a ser una propuesta para Límite Clásico, y es muy mencionado en la literatura; sin embargo, la formulación propuesta por Bohr es muy particular, no es cierta en general, no es aplicable a muchos sistemas cuánticos [10]. Esto se debe a que el Principio de Correspondencia de Bohr fue formulado con base en una Mecánica Cuántica muy primitiva; la formulación formal de la Mecánica Cuántica como se le conoce hoy en día fue establecida en 1925, mientras que Bohr propuso su principio por primera vez en 1913.

Pero ¿en qué consiste exactamente el Principio de Correspondencia de Bohr? Bohr observó [7] que el espectro de frecuencia emitido por un átomo de hidrógeno se aproxima al espectro calculado clásicamente en el límite de el número cuántico principal n muy grande. La frecuencia de emisión en este límite es la frecuencia orbital clásica del electrón, la cual se aproxima a cero según el número cuántico n tiende a infinito. En palabras de Bohr: *Si n es grande, la razón entre la frecuencia (orbital) antes y después de la emisión será muy cercana a 1; y de acuerdo con la electrodinámica clásica, deberíamos, por lo tanto, esperar que la razón entre la frecuencia de la radiación y la frecuencia de la revolución también es muy cercana a 1.* En 1918, en un memorial académico dedicado a su profesor, Christian Christiansen, Bohr generalizó este hallazgo a sistemas periódicos. En sus propias palabras: *En cuanto a las frecuencias, vemos que en el límite cuando n es grande existe un relación cercana entre la teoría ordinaria de radiación y la teoría del espectro.*

Hay que tener en cuenta la siguiente distinción, una es la correspondencia de frecuencia y la otra es la correspondencia de configuración, esta última se logra cuando la densidad de probabilidad cuántica coincide con la densidad de probabilidad clásica. El concepto está bien ilustrado por el oscilador armónico, para el cual la densidad de

probabilidad clásica para una partícula de energía especificada está dada por

$$P_C(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x_0^2 - x^2}} \quad (4.1)$$

Aquí x es desplazamiento y $\pm x_0$ son los puntos de retorno. La densidad de probabilidad clásica P_C no sigue a la densidad de probabilidad cuántica $|\psi_n|^2$. En vez de eso, se aprecia que ésta sigue el promedio local en el límite de los números cuánticos n grandes:

$$P_C(x) = \langle P_Q(x) \rangle = \langle |\psi_n|^2 \rangle = \frac{1}{2\epsilon} \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} |\psi_n(y)|^2 dy \quad (4.2)$$

El intervalo ϵ decrece cuando el número n se incrementa [10].

Otro aspecto muy importante que cabe mencionar es que según se recalca en [33], esta primera formulación del Principio de Correspondencia de Bohr no es aplicable al sistema de una partícula encerrada en una caja, ya que el número de nodos va creciendo hasta que la función de onda se hace cero. Se vio que para este sistema el límite $\hbar \rightarrow 0$ tampoco es aceptable, aunque se vio bajo la descripción de una partícula entre dos barreras reflectoras. También, cabe afirmar que, si tanto el Principio de Correspondencia de Bohr como el límite $\hbar \rightarrow 0$ no funcionan para la partícula encerrada en una caja, tampoco funcionarán para el caso de una partícula encerrada en un pozo de potencial esférico infinito, ya que son sistemas un tanto parecidos.

Entonces se puede concluir de esto, que ésta primera formulación al Principio de Correspondencia es muy incompleta. Sin embargo, a través de los años se han propuesto extensiones, en diferentes formulaciones, al principio de correspondencia de Bohr; lo que se discutirá después.

Capítulo 5

La Regla de Cuantización Bohr-Sommerfeld

Una regla de cuantización de la energía de un sistema periódico con un grado de libertad está dado por la bien conocida Regla de Cuantización de Bohr-Sommerfeld (BS), la cual establece que la integral de la acción del sistema debe ser igual a un medio entero veces la constante de Planck. En esta forma, la cual está ligeramente modificada de la original postulada por Bohr, esta regla ha sido derivada sobre la base de la aproximación WKB a la ecuación de Schrödinger para la función de onda del sistema. Esta es una aproximación asintótica válida solo para valores pequeños de la constante de Planck. Solo el sistema más simple con un Hamiltoniano de la forma

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q).$$

ha sido considerada. La derivación depende crucialmente de la llamadas “Fórmulas de conexión” para la función de onda a cada lado de los puntos de retorno clásicos. El establecimiento de las fórmulas de conexión es un problema matemático un poco delicado. La regla de cuantización BS ha sido probada para sistemas simples, y se tiene como válida solo para números cuánticos grandes.

5.1. Regla de Cuantización Exacta

Considérese un sistema de un grado de libertad con el Hamiltoniano clásico $H(p, q) = (p^2/2m) + V(q)$, donde q es la coordenada cartesiana en el intervalo $(-\infty, +\infty)$, y p el momento conjugado. Se toma el potencial $V(q)$ de tal forma que el movimiento clásico sea periódico, al menos para un cierto rango de valores de su energía total. Cuánticamente las energías de los estados estacionarios de este sistema están dadas por los eigenvalores ϵ_n del operador Hamiltoniano $\hat{H} = (\hat{P}^2/2m) + V(\hat{Q})$, donde $\hat{P}$ y $\hat{Q}$ son los operadores de momento y posición, respectivamente, que satisfacen la relación de conmutación $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar$.

Para el espectro discreto se sabe que los eigenvalores de energía no son degenerados. Podemos entonces enumerar los estados ligados con las energías ϵ_n mediante el uso de

los números enteros $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Con la ayuda de la función de escalón unitaria $s(\epsilon_n)$,

$$s(\epsilon) = \begin{cases} 1, & \epsilon > 0 \\ 1/2, & \epsilon = 0 \\ 0, & \epsilon < 0 \end{cases} \quad (5.1)$$

tenemos que $Tr \{s(\epsilon - \hat{H})\} = \sum_{n'} s(\epsilon - \epsilon_{n'})$ es igual a un entero que da el número de los estados ligados con las eigenenergías menores que ϵ , si $\epsilon \neq \epsilon_{n'}$. Si ϵ es igual a uno de los eigenvalores, se tiene de (5.1) que

$$Tr \{s(\epsilon_n - \hat{H})\} = n + 1/2 \quad (5.2)$$

donde $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Claramente, una evaluación independiente de la traza en la ecuación (5.2) dará una ecuación para los valores de energía ϵ_n del sistema. Es posible ahora expresar la traza en forma de una integral sobre el espacio de fase clásico del sistema. Además, esta forma se presta fácilmente a una evaluación en potencias de $\hbar^2$. Esta transformación es esencialmente la misma usada por Wigner en el estudio de las correcciones cuánticas para las propiedades del equilibrio térmico, al introducir la función de distribución de Wigner. Generalizando ligeramente el procedimiento de Wigner, se define una función clásica, $S(p, q; \epsilon)$, correspondiente al operador, $s(\epsilon - \hat{H})$, por la relación

$$S(p, q; \epsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \langle q - 1/2x | s(\epsilon - \hat{H}) | q + 1/2x \rangle, \quad (5.3)$$

donde $\hat{Q}|q\rangle = q|q\rangle$. Ahora, como Wigner notó, el integrando de la ecuación (5.3) puede ser escrito como $\langle q - 1/2x | \hat{U}^\dagger s \hat{U} | q + 1/2x \rangle$, donde $\hat{U} = \exp(i\hat{Q}p/\hbar)$; además, se tiene que

$$U^\dagger s(\epsilon - \hat{H}) \hat{U} = s(\epsilon - U^\dagger \hat{H} \hat{U})$$

con

$$\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = H(\hat{U}^\dagger \hat{P} \hat{U}, \hat{Q}) = H(p + \hat{P}, \hat{Q}). \quad (5.4)$$

La última igualdad es un resultado de $[\hat{P}, \hat{U}] = p\hat{U}$, la cual es una consecuencia directa de la relación de conmutación fundamental $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar$. Así se puede expresar (5.3) en la forma

$$S(p, q; \epsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle q - 1/2x | s(\epsilon - H(p + \hat{P}, \hat{Q})) | q + 1/2x \rangle \quad (5.5)$$

Se sigue que

$$Tr \{s(\epsilon - \hat{H})\} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp dq S(p, q; \epsilon), \quad (5.6)$$

como puede ser fácilmente visto al realizar la integración sobre p primero. La ecuación (5.2) se convierte en la regla de cuantización exacta

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp dq S(p, q; \epsilon_n) = n + 1/2, \quad (5.7)$$

donde $S(p, q; \epsilon)$ está dado por (5.5), y $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Es fácil ver que esta regla de cuantización es válida para un Hamiltoniano arbitrario, $\hat{H} = H(P, Q)$, siempre que su espectro de energía no esté degenerado, ya que, bajo esta condición, ninguno de los pasos (5.2) y (5.7) dependen en forma particular del Hamiltoniano.

Para referencias posteriores, se debe notar que, en este caso, la función Hamiltoniano de la Mecánica Cuántica, $H(\hat{P}, \hat{Q})$, no es, en general, la misma que la correspondiente a la función Hamiltoniano de la Mecánica Clásica, la cual se denota como $H_c(p, q)$, pero es idéntica a ésta por la correspondencia de Weyl [8]. Esta correspondencia entre cualquier cantidad dinámica clásica, $A_c(p, q)$, y el operador cuántico correspondiente, $A(P, Q)$, siendo diseñado por $A(P, Q) \longleftrightarrow A_c(p, q)$, está definida de la siguiente forma: si

$$A_c(p, q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma d\tau a(\sigma, \tau) e^{i(\sigma p + \tau q)}, \quad (5.8)$$

entonces

$$A_c(P, Q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma d\tau a(\sigma, \tau) e^{i(\sigma P + \tau Q)} \quad (5.9)$$

y vice versa. Entonces $a(\sigma, \tau)$ puede expresarse tanto en términos de $A_c(p, q)$ o en términos de $A(P, Q)$, a saber,

$$\begin{aligned} a(\sigma, \tau) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \iint dp dq A_c(p, q) e^{-i(\sigma p + \tau q)} \\ &= \frac{\hbar}{2\pi} \text{Tr} \left\{ A(P, Q) e^{-i(\sigma P + \tau Q)} \right\}, \end{aligned} \quad (5.10)$$

ya que los operadores $(\hbar/2\pi)^{1/2} \exp \{i(\sigma P + \tau Q)\}$ forman un conjunto ortonormal.

Con la ayuda de las ecuaciones (5.8), (5.9) y (5.10) es fácil mostrar que la relación entre un operador y una función clásica como se prescribe por la ecuación (5.3) es idéntica a la correspondencia de Weyl; así se tiene que

$$S(p, q; \epsilon) \longleftrightarrow s(\epsilon - H(\hat{P}, \hat{Q})). \quad (5.11)$$

Se puede notar que, en particular, la importante relación (5.6) es obvia ahora, según esta se obtenga de la ecuación (5.10) haciendo $\sigma = \tau = 0$.

5.2. Regla de Cuantización Bohr-Sommerfeld y correcciones

Ahora se prueba que, para el orden más bajo en $\hbar$, la integral del lado izquierdo de la ecuación (5.7), para un ϵ_n fijo, es solo la integral de la acción, y, así, la ecuación (5.7) se reduce a la regla de cuantización BS. Se nota que, ya que en la representación de Schrödinger $\hat{Q}|q\rangle = q|q\rangle$ y $\hat{P}|q\rangle = i\hbar(\partial/\partial q)|q\rangle$, en el orden más bajo en $\hbar$, la ecuación (5.5), para $S(p, q; \epsilon)$, con un parámetro fijo ϵ , se hace igual a

$$\begin{aligned} S_0(p, q; \epsilon) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle q - 1/2x | s(\epsilon - H_c(p, q + 1/2x)) | q + 1/2x \rangle \\ &= s(\epsilon - H_c(p, q)). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Así, de la definición de $s(\epsilon)$, la ecuación (5.1), y la regla de cuantización exacta (5.7), se obtiene que, para $\hbar$ pequeña, la condición de cuantización es

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \iint_{H_c \leq \epsilon_n} dp dq = n + 1/2. \quad (5.13)$$

En el caso usual de $H_c(p, q) = p^2/2m + V(q)$ con un potencial tal que existan dos puntos de retorno, $a(\epsilon)$ y $b(\epsilon)$, para el movimiento clásico de energía total ϵ , la ecuación (5.13) se convierten en

$$(1/\hbar) \oint p(\epsilon_n, q) dq = (2/\hbar) \int_{a(\epsilon_n)}^{b(\epsilon_n)} |p(\epsilon_n, q)| dq = (n + 1/2)2\pi, \quad (5.14)$$

donde $p(\epsilon, q)$ es la solución de $H_c(p, q) = \epsilon$. Esta es la regla de cuantización BS, como se deriva con base en la aproximación WKB para la ecuación de Schrödinger.

Se pueden hallar términos de corrección a $S(p, q; \epsilon)$ para $\hbar$ pequeña, y ϵ fija, de la relación exacta (5.5). Por ejemplo, una expansión de $s(\epsilon - H(p + P, Q))$ en potencias de P daría una expansión en serie de $S(p, q)$ en $\hbar$. Para tal expansión es útil notar que $s(\epsilon)$, como se define por (5.1), tiene la representación de la transformada de Fourier

$$s(\epsilon) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{z + i\eta} e^{-iz\epsilon}. \quad (5.15)$$

Sin embargo, una expansión directa de $\exp\{iz[H(p + P, Q) - \epsilon]\}$ en potencias de P es tediosa, especialmente para un Hamiltoniano arbitrario. Es más conveniente proceder como se sigue. De acuerdo con (5.15) y (5.11), se puede escribir

$$S(p, q) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{z + i\eta} E(p, q; z), \quad (5.16)$$

donde

$$E(p, q; z) \longleftrightarrow \hat{E}(\hat{P}, \hat{Q}; z) \equiv \exp\{iz[H(\hat{P}, \hat{Q}) - \epsilon]\}, \quad (5.17)$$

$\longleftrightarrow$ indica, como antes, la correspondencia de Weyl (5.8) y (5.9). Se puede ahora, convenientemente, expandir $E(p, q; z)$ en potencias de $\hbar$, construyendo una ecuación para esta, la cual es obtenida de la ecuación obvia para $\hat{E}(\hat{P}, \hat{Q}; z)$

$$\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z} \hat{E}(z) = \hat{E} \bar{\hat{H}} = \frac{1}{2} (\hat{E} \bar{\hat{H}} + \bar{\hat{H}} \hat{E}) \quad (5.18)$$

donde $\bar{\hat{H}} \equiv \hat{H} - \epsilon = H(\hat{P}, \hat{Q}) - \epsilon$. La correspondencia de Weyl (5.17) permite escribir inmediatamente la ecuación correspondiente para $E(z)$ en términos de $\bar{H}_c(p, q) \equiv H_c(p, q) - \epsilon \longleftrightarrow \bar{\hat{H}}$. Si se hace uso de la expresión, derivada por Groenewold [11], para la cantidad clásica correspondiente a $\frac{1}{2}(\hat{E} \bar{\hat{H}} + \bar{\hat{H}} \hat{E})$, se tiene que

$$\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z} E(p, q; z) = \bar{H}_c(p, q) \left\{ \cos \frac{\hbar}{2} \left(\frac{\delta}{\delta p} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\delta}{\delta q} \frac{\partial}{\delta p} \right) \right\} E(p, q; z) \quad (5.19)$$

con $E(z=0) = 1$. Aquí $\delta/\delta p$, $\delta/\delta q$ operan solo sobre la función a su derecha, al igual que $\partial/\partial p$, $\partial/\partial q$. No se puede encontrar una solución de (5.19) en series de potencia en $\hbar^2$,

$$E(z) = e^{iz\bar{H}_c} \sum_{r=0}^{\infty} \hbar^{2r} G_r(z), \quad (5.20)$$

ya que, de la expansión del coseno en (5.19), es obvio que los coeficientes de los potencias impares de $\hbar$ se desvanecen. De (5.19) se encuentra, pues, que $G_0(z) = 1$ y

$$G_1(z) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{z^2}{2} H_c \left(\frac{\delta}{\delta p} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\delta}{\delta q} \frac{\partial}{\partial p} \right)^2 H_c + \frac{iz^3}{3} H_c \left(\frac{\delta}{\delta p} \frac{\partial H_c}{\partial q} - \frac{\delta}{\delta q} \frac{\partial H_c}{\partial p} \right)^2 \right\}. \quad (5.21)$$

Sustituyendo las ecuaciones (5.20) y (5.21) en la ecuación (5.16), se tiene que

$$S(p, q) = S_0(p, q) + \hbar^2 S_1(p, q) + O(\hbar^4) \quad (5.22)$$

donde $S_0(p, q; \epsilon) = s(\epsilon - H_c(p, q))$, de acuerdo con (5.12), y

$$\begin{aligned} S_1(p, q; \epsilon) = & \frac{1}{16} \left\{ H_c \left(\frac{\delta}{\delta p} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\delta}{\delta q} \frac{\partial}{\partial p} \right)^2 H_c \right\} \delta'(H_c - \epsilon) \\ & + \frac{1}{24} H_c \left(\frac{\delta}{\delta p} \frac{\partial H_c}{\partial q} - \frac{\delta}{\delta q} \frac{\partial H_c}{\partial p} \right)^2 \delta''(H_c - \epsilon) \end{aligned} \quad (5.23)$$

Para llegar a (5.23), se ha hecho uso de $s'(\epsilon) = ds/d\epsilon = \delta(\epsilon)$, la función delta de Dirac. Así, la regla de cuantización BS (5.13) da buenos resultados para valores de ϵ_n , para los cuales

$$\hbar^2 \iint dp dq S_1(p, q; \epsilon_n) \ll \iint_{H_c \leq \epsilon_n} dp dq. \quad (5.24)$$

Para el caso simple, $H_c = (p^2/2m) + v(q)$, de interés común, se obtiene de (5.23) que

$$S_1(p, q; \epsilon) = \frac{1}{24\pi} \left\{ 3V''(q)\delta'(H_c - \epsilon) + \left[V'(q)^2 + \frac{p^2}{m} V''(q) \right] \delta''(H_c - \epsilon) \right\}. \quad (5.25)$$

La integral del espacio fase de S_1 , dada en (5.25), puede realizarse haciendo el cambio de variable $y = H_c(p, q)$, siendo el Jacobiano de la transformación $m/|p(y, q)| = m/\sqrt{2m[y - V(q)]}$. Si se denotan los puntos de retorno del movimiento clásico de energía ϵ por $a(\epsilon)$ y $b(\epsilon)$, entonces se encuentra, para este caso, al integrar por partes, que

$$\hbar^2 \iint dp dq S_1(p, q; \epsilon) = -\frac{\hbar^2}{12} \frac{d}{d\epsilon} \int_{a(\epsilon)}^{b(\epsilon)} \frac{V''(q)}{p(\epsilon, q)} dq; \quad (5.26)$$

dado que $V'(a)$ y $V'(b)$ son finitos y no se desvanecen, $V''(a)$ y $V''(b)$ son finitos.

5.3. El Oscilador Armónico Simple

El caso del oscilador armónico simple es de interés aquí, pues la regla de cuantización BS aproximada, (5.14), da todos los eigenvalores de energía exactamente. En el contexto de la aproximación WKB, esto ha sido considerado un accidente; es interesante, por tanto, preguntar si el presente procedimiento permite justificar esta circunstancia. Se muestra abajo que, en efecto, la regla de cuantización exacta, ecuación (5.7), se reduce para el caso de la regla BS; i. e., se prueba que, para el oscilador armónico,

$$\iint dp dq S(p, q; \epsilon) = \oint p(\epsilon, q) dq \quad (5.27)$$

para todos los órdenes en $\hbar$.

Primero, se nota que, tomando en cuenta la forma especial del Hamiltoniano para el caso $H(p, q) = p^2 + q^2$ (quitando las constantes irrelevantes), la ecuación (5.19), para $E(p, q; z)$, se hace simplemente

$$\frac{1}{i} \frac{\partial E}{\partial z} = \left[H - \epsilon - \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{\partial^2}{\partial p^2} + \frac{\partial^2}{\partial q^2} \right) \right] E, \quad (5.28)$$

con $E(p, q; 0) = 1$. Se prueba, además, que $E(p, q; z)$, para este caso, depende de p y q solo a través de la combinación $H(p, q)$ i. e., $E = E(H, z)$. Para ver esto, se nota de la definición de $\hat{E}(z)$, ecuación (5.17), que $[\hat{E}(z), \hat{H}] = 0$, donde $[\ , \]$ denota el conmutador. Ahora, como Groenewold [11] ha mostrado,

$$\frac{i}{2} [\hat{E}, \hat{H}] \longleftarrow \bar{H}(p, q) \left\{ \sin \frac{\hbar}{2} \left(\frac{\delta}{\delta p} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\delta}{\delta q} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right\} E(p, q). \quad (5.29)$$

Para el oscilador armónico, simplemente se tiene que

$$p \frac{\partial E}{\partial q} - q \frac{\partial E}{\partial p} = 0, \quad (5.30)$$

que es la solución general de la cual $E(p, q)$ depende de p y q solo a través de $H(p, q) = p^2 + q^2$. Esta es consistente con (5.28), ya que, con ésta, se puede fácilmente comprobar que para las funciones $E(H(p, q; z))$ la ecuación (5.28) toma la forma

$$\frac{1}{i} \frac{\partial E(H, z)}{\partial z} = \left[H - \epsilon - \hbar \left(H \frac{\partial^2}{\partial H^2} + \frac{\partial}{\partial H} \right) \right] E(H, z). \quad (5.31)$$

Escribiendo $E(H, z) = \exp[iz(H - \epsilon)]G(H, z)$, se obtiene de (5.31) que

$$\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z} G(H, z) = -\hbar^2 e^{-izH} \left(H \frac{\partial^2}{\partial H^2} + \frac{\partial}{\partial H} \right) e^{izH} G(H, z), \quad (5.32)$$

con $G(H, 0) = 1$, o equivalentemente

$$G(H, z) = 1 - i\hbar^2 \int_0^z dy K \left(H, \frac{\partial}{\partial H}, y \right) G(H, y), \quad (5.33)$$

con

$$K\left(H, \frac{\partial}{\partial H}, y\right) = H\left(\frac{\partial}{\partial H} + iy\right)^2 + \frac{\partial}{\partial H} + iy. \quad (5.34)$$

Iterando la ecuación (5.33), se obtiene la solución $G(H, z)$ en series de potencia de $\hbar^2$:

$$G = \sum_{r=0}^{\infty} \hbar^{2r} G_r$$

con $G_0 = 1$, y

$$G_r(H, z) = -i\hbar^2 \int_0^z dy K\left(H, \frac{\partial}{\partial H}, y\right) G_{r-1}(H, y). \quad (5.35)$$

La expansión correspondiente de $E = \exp(iz\bar{H})G(H, z)$ da, a través de la ecuación (5.16), una expansión en series de potencias de

$$S(p, q; \epsilon) = \sum_{r=0}^{\infty} \hbar^{2r} S_r(H, \epsilon).$$

Claramente el término $G_0 = 1$ da $S_0 = s(\epsilon - H)$, cuya integral sobre el espacio fase es exactamente el lado derecho de la ecuación (5.12). Ahora se prueba que todos los términos restantes $S_r (r \geq 1)$ tienen integrales de espacio fase que se desvanecen, i. e.,

$$\iint dp dq S_r(H(p, q), \epsilon) = \pi \int_0^{\infty} dH S_r(H, \epsilon) = 0 (r \geq 1). \quad (5.36)$$

Esto, entonces, completa la prueba de la ecuación deseada (5.27). Con el propósito de establecer (5.36), se nota que, para $r = 1$, la ecuación (5.35) da

$$G_1 = -i\hbar^2 \left[(iz^2/2) - (z^3/3)H \right],$$

según se puede ver de la ecuación (5.21) para este caso. Ahora, se comprueba fácilmente que, tomando en cuenta la forma especial de $K(H, \partial/\partial H, y)$, la aplicación sucesiva de la ecuación (5.35) da para $G_r(H, z) (r \geq 1)$, una suma de términos de la forma $H^\alpha z^{\alpha+1+\beta}$, donde α y β son enteros y $\beta \geq 1$. Así, ya que $s^{(\alpha+1)}(\epsilon) = \delta^\alpha(\epsilon)$, donde el superíndice (α) denota la α -ésima derivada, la ecuación (5.35) da para cada $S_r(H, \epsilon)$, con $r \geq 1$, una suma de términos de la forma $H^\alpha \delta^{\alpha+\beta}(H - \epsilon)$. Así, ya que $\beta \geq 1$, la integral sobre H de todo S_r , con $r \geq 1$, se desvanece; lo cual prueba la ecuación (5.36) y completa la prueba de la ecuación deseada (5.27).

Esta regla, aunque no es en sí una propuesta del límite clásico, sí trata de relacionar predicciones hechas por la Mecánica Cuántica y la Mecánica Clásica.

Capítulo 6

El Teorema de Ehrenfest

El primer paso para relacionar las probabilidades cuánticas con la Mecánica Clásica, fue este conocido como el Teorema de Ehrenfest. Ahora, considérese el caso más simple, una partícula en una dimensión, cuyo Hamiltoniano es $\hat{H} = \hat{P}^2/2m + \hat{V}(Q)$. Utilizando el método de Heisenberg, en el cual los operadores para las variables dinámicas y los estados son independientes del tiempo, las ecuaciones de movimiento para los operadores de posición y momento son

$$\frac{d\hat{Q}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}] = \frac{\hat{P}}{m}, \quad (6.1)$$

$$\frac{d\hat{P}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{P}] = -\hat{F}(Q), \quad (6.2)$$

donde $\hat{F}(Q) = -\partial\hat{V}/\partial Q$ es el operador fuerza. Tomando los promedios en un estado cualquiera se obtiene que

$$\frac{d\langle\hat{Q}\rangle}{dt} = \frac{\langle\hat{P}\rangle}{m} \quad (6.3)$$

$$\frac{d\langle\hat{P}\rangle}{dt} = \langle\hat{F}(Q)\rangle \quad (6.4)$$

Ahora, si podemos aproximar el promedio de la función de posición con la función del promedio de la posición, esto es

$$\langle\hat{F}(Q)\rangle \approx \hat{F}(\langle Q \rangle), \quad (6.5)$$

entonces (6.4) puede ser reemplazada por

$$\frac{d\langle\hat{P}\rangle}{dt} = \hat{F}(\langle Q \rangle). \quad (6.6)$$

Las ecuaciones (6.3) y (6.6) juntas dicen que los promedios de la mecánica cuántica, $\langle\hat{Q}\rangle$ y $\langle\hat{P}\rangle$, obedecen las ecuaciones clásicas de movimiento. La aproximación (6.5) es exacta solo si la fuerza $\hat{F}(Q)$ es una función lineal de Q , como es el caso para un oscilador armónico o una partícula libre. Pero si la anchura de la distribución de probabilidad de posición es pequeña comparada con la típica escala de longitud sobre la cual la fuerza

varía, entonces el centroide de la distribución de probabilidad de la Mecánica Cuántica seguirá una trayectoria clásica. Este es el teorema de Ehrenfest.

A veces se afirma que las condiciones para el comportamiento clásico de un sistema cuántico son solo aquellas requeridas por el teorema de Ehrenfest. Pero, de hecho, el teorema de Ehrenfest no es ni necesario ni suficiente para definir el régimen clásico. La carencia de suficiencia - que un sistema puede obedecer el teorema de Ehrenfest, pero no se comporta clásicamente - está probada por el ejemplo del oscilador armónico. Éste satisface (6.6) exactamente para todos estados. Todavía un oscilador cuántico tiene niveles de energía discretos, lo cual hace de sus propiedades termodinámicas un tanto diferentes de aquellas del oscilador clásico. La carencia de necesidad consiste en que un sistema puede comportarse clásicamente aún cuando el teorema de Ehrenfest no aplica [5].

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.

Capítulo 7

Principio de Correspondencia Bohr-Heisenberg

⁹ El Principio de Correspondencia, el cual es debido a Bohr, postula una detallada analogía entre la Teoría Cuántica y la Teoría Clásica apropiada para la imagen mental empleada. Esta analogía no sirve meramente como una guía para el descubrimiento de leyes formales; su valor especial es que proporciona la interpretación de las leyes que se encuentran en términos de la figura mental usada.-Werner Heisenberg, en sus conferencias de 1929 en Chicago [12].-

En 1924, Heisenberg hizo un intento de dar al Principio de Correspondencia de Bohr una forma matemática exacta a fin de aplicarla a sistema cuánticos simples. Él sugirió que para una cantidad clásica $f(t)$, para el caso de números cuánticos grandes, la siguiente relación de aproximación es válida:

$$\langle \psi_{n+m}(t) | f | \psi_n(t) \rangle = \langle n+m | f | n \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_{n+m}-E_n)t} \approx f_m(n) e^{im\omega(n)t} \quad (7.1)$$

donde $f_m(n)$ es el m -ésimo componente de Fourier de la variable clásica f y $\omega(n)$ es la frecuencia clásica [13, 14]. A esta formulación se le conoce como Principio de Correspondencia de Bohr-Heisenberg. Sin embargo, la aplicación de este procedimiento fue limitada por el estudio de la polarización de la luz en átomos sujetos a fluorescencia resonante [4].

Este principio fue muy importante en el desarrollo de la Mecánica Cuántica, aunque, como ya se ha mencionado, fue formulado en el marco de referencia de la Mecánica Cuántica temprana. Para Heisenberg fue de mucha utilidad en la construcción la Mecánica Cuántica como se le conoce hoy en día. Sin embargo, aún es muy incompleto.

En 1926, E. Schrödinger propuso una aplicación diferente al principio de correspondencia aplicado al oscilador armónico cuántico. Su aproximación consiste en unir todas las formas de oscilación de la función de onda, generando un paquete de onda semiclásico, desde la cual, otras ideas interesantes han evolucionado recientemente. Por otro lado, discrepancias y discusiones permanecen con respecto a la adecuación del Principio de Correspondencia de Bohr. Algunos autores sugieren que el oscilador armónico no tiene un verdadero límite clásico cuando es descrito por medio de estados estacionarios, y otros argumentan que éste sistema viola el Principio de Correspondencia de

Bohr [4, 15–17].

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.
México.

Capítulo 8

Funciones de Wigner

La función de Wigner se define como

$$W(x, p) = \frac{1}{h} \int e^{-ipy/\hbar} \psi(x + y/2) \psi^*(x - y/2) dy, \quad (8.1)$$

donde

$$h^{-1} = \iint W(x, p)^2 dx dp. \quad (8.2)$$

Esta es una función generadora de todas las funciones de correlación espacial de una función de onda dada, a saber, $\psi(x)$. Así, esta mapea en la matriz de densidad cuántica en la región entre funciones de espacio de fase reales y operadores hermitianos introducidos por Hermann Weyl en 1927, [8] en un contexto relacionado con la teoría de la representación en matemáticas.

La función de Wigner permite estudiar el límite clásico, ofreciendo una comparación de la dinámica clásica y cuántica en el espacio de fase [18].

Veamos lo siguiente. Las ecuaciones de evolución de $W(x, p, t)$

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{\partial W_T}{\partial t} + \frac{\partial W_U}{\partial t}, \quad (8.3)$$

$$\frac{\partial W_T}{\partial t} = -\frac{p}{m} \frac{\partial W(x, p)}{\partial x}, \quad (8.4)$$

$$\frac{\partial W_U}{\partial t} = \sum_{s=0} (-\hbar^2)^s \frac{1}{(2s+1)!} \left(\frac{1}{2}\right)^{2s} \frac{\partial^{2s+1} U(x)}{\partial x^{2s+1}} \times \left(\frac{\partial}{\partial p}\right)^{2s+1} W(x, p), \quad (8.5)$$

se reducen al caso clásico cuando $\hbar \rightarrow 0$. La diferencia entre la transformada de Weyl, $\tilde{A}(x, p)$, del operador $\hat{A} = A(\hat{x}, \hat{p})$ y la función $A(x, p)$ desaparece cuando $\hbar \rightarrow 0$. Esta diferencia es debido al hecho de que $\hat{x}$ y $\hat{p}$ no conmutan ($[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$), lo cual lleva al término extra en la ecuación,

$$\tilde{H}^2 = H^2(x, p) - \frac{(\hbar\omega)^2}{4}. \quad (8.6)$$

Así, en este límite se pueden calcular los valores esperados en la forma usual como una integral de $W(x, p)A(x, p)$ sobre x y p . El problema con esta suposición puede

verse fácilmente. Descartar los términos de orden superior de $\hbar$ en la ecuación (8.5) es sospechoso. Nótese que de la definición de la función de Wigner, $(\partial/\partial p)^{2s+1}$ llevará un factor de $1/\hbar^{2s+1}$ que compensará con creces el factor $\hbar^{2s}$ a menos que se pueda encontrar alguna ayuda en el operador de densidad. Este problema ha sido considerado por Heller [19], quien ha llegado a conclusiones similares a las que se expresan en esta sección. Como un ejemplo, considérese el estado base de un oscilador armónico dado en la siguiente ecuación,

$$W_0(x, p) = \frac{2}{\hbar} e^{-a^2 p^2 / \hbar^2 - x^2 / a^2}, \quad (8.7)$$

A pesar que se están usando los estados del oscilador armónico, no se está asumiendo que el Hamiltoniano que describe el movimiento es el del oscilador armónico. Esta construcción es una forma simple de obtener una función de Wigner apropiada. Si se toma $(\partial/\partial p)^{2s+1}$ de esta función de Wigner y el límite $\hbar \rightarrow 0$, se obtiene, $(-2a^2 p / \hbar^2)^{2s+1} \exp[-a^2 p^2 / \hbar^2]$ para la independencia de p y $\hbar$. Según $\hbar \rightarrow 0$, la exponencial se hace más pequeña con valores significantes solo para $p \sim \hbar/a$. Con esta restricción, $(\partial W_0 / \partial p)^{2s+1}$ se va a $1/\hbar^{2s+1}$. Así, los términos en la ecuación (8.5), que parecen ir a $\hbar^{2s}$, realmente van a $1/\hbar$ y se evita su desvanecimiento en el límite $\hbar \rightarrow 0$. Parte de esta problema es que, según $\hbar \rightarrow 0$, la función de Wigner del estado puro se hace muy pequeña en la dirección de p porque, para un estado puro, la anchura de p está ligada a la anchura de x por $\hbar$. Se puede argumentar que es posible mantener la anchura de p fija en el límite $\hbar \rightarrow 0$, permitiendo que la función de Wigner se haga estrecha en la distribución de x . Puede parecer que este límite evitará los problemas con las derivadas de orden superior en p ; en general, dicha aproximación no sería satisfactoria. Se espera que, en el límite clásico, no se puedan determinar las distribuciones con alta precisión. Se busca controlar las anchuras en x y p independientemente. Una vez que la anchura de x está fija no se puede hacer la anchura de p arbitrariamente pequeña, pero se pueden construir un estado mixto que tenga una distribución arbitrariamente ancha en p . Esta construcción es hecha formando un estado mixto de estados base del oscilador armónico en la ecuación (8.7) dirigida hacia p con una densidad de probabilidad normalizada,

$$P(p_0) = \frac{1}{c\sqrt{\pi}} e^{-p_0^2 / c^2}, \quad (8.8)$$

donde c es una constante positiva. La función de Wigner del estado mixto es,

$$W(x, p) = \int W_0(x, p - p_0) P(p_0) dp_0 = \frac{1}{\pi \sqrt{a^2 c^2 + \hbar^2}} e^{-x^2 / a^2} e^{p^2 / (c^2 + \hbar^2 / a^2)}. \quad (8.9)$$

Ahora se tiene una función de Wigner con anchura a en la dirección x y anchura $\sqrt{c^2 + \hbar^2 / a^2}$ en la dirección p . El límite $\hbar \rightarrow 0$ puede ser tomado de esta función de Wigner y las derivadas despreciadas con respecto de p en la ecuación (8.5) se pueden justificar ahora. Si se aplica este mismo procedimiento al estado puro coherente doble en la ecuación,

$$W(x, p) = \frac{1}{\hbar(1 + e^{-b^2 / a^2})} e^{-(ap)^2 / \hbar^2} [e^{-(x-b)^2 / a^2} + e^{-(x+b)^2 / a^2} + 2e^{-x^2 / a^2} \cos(2bp / \hbar)], \quad (8.10)$$

se obtiene, en el límite $\hbar \rightarrow 0$,

$$W(x, p) = \frac{1}{2\pi ac(1 + e^{-b^2/a^2})} e^{-p^2/c^2} [e^{-(x-b)^2/a^2} + e^{-(x+b)^2/a^2} + 2e^{-x^2/a^2} e^{-b^2/a^2}]. \quad (8.11)$$

De nuevo, se puede ver que el comportamiento es considerablemente más suave que el estado puro y se parece mucho al estado mixto de dos estados coherentes dados en la ecuación

$$W(x, p) = \frac{1}{h} e^{-a^2 p^2 / \hbar^2} [e^{-(x-b)^2/a^2} + e^{-(x+b)^2/a^2}] \quad (8.12)$$

Nuevamente, los términos despreciados, más allá del primer orden, que contienen las derivadas con respecto a p están justificados. Entonces, ¿es correcto tomar este mismo procedimiento de introducir estados mixtos y exitosamente tomar el límite $\hbar \rightarrow 0$ para todos los casos? Esto no está claro. Note que el asunto no es solo que W puede hacerse negativo, aunque eso sería un problema, sino la rápida variación de W .

Es bien sabido que muchos sistemas clásicos no lineales tienen un comportamiento muy complicado los cuales pueden evolucionar en distribuciones que se esperaría que tengan derivadas grandes de orden superior. Este problema de la incompatibilidad entre la Mecánica Clásica y la Mecánica Cuántica es señalado por Ford, en [20], basado en argumentos de teoría de información y es una pregunta central en el caos cuántico. Esta pregunta está aún abierta.

En fin, ¿qué se puede decir acerca del límite clásico? Según se puede ver, el límite es sutil e implica no solo la dependencia del tiempo de los estados, sino los operadores y la naturaleza los estados por sí mismos. Si se puede decir que la distribución inicial en el espacio fase es positiva y suave en todos lados, y si el Hamiltoniano es tal que deja la distribución lo suficientemente suave para permitir despreciar los términos de orden superior en $\hbar$ con sus derivadas de orden superior respecto a p ; entonces el argumento de apertura de esta sección debe sostenerse. A fin de cuentas, se piensa que la descripción cuántica describe correctamente el mundo clásico.

Se puede notar que la distinción entre la Mecánica Clásica y la Mecánica Cuántica no es una simple distinción entre lo grande y lo pequeño, sino el grado para el cual se conoce la distribución. Si se precisa la distribución en el espacio fase, ya sea debido a los detalles de preparación, detalles de evolución, o fineza de medición, a detalles que se acercan a $\Delta x \Delta p = \hbar$, la naturaleza cuántica emergerá [21]. Además que para este método es necesario tomar el límite $\hbar \rightarrow 0$, y, como ya se ha explicado, éste carece de sentido, pues $\hbar$ es una constante universal.

Capítulo 9

Los Límites de los Estados Coherentes

No obstante, también se encuentran otras más extensiones al Principio de Correspondencia, por ejemplo, Los Límites de los Estado Coherentes, lo cual cosiste en que en el límite $\hbar \rightarrow 0$ la evolución en el tiempo de un estado coherente, el cual está inicialmente concentrado cerca de un punto dado en el espacio fase, está bien aproximado por otro estado coherente, concentrado en el punto envuelto clásicamente. Este establecimiento es esencialmente lo que uno obtiene en la versión de la presente aproximación basada en normas de convergencia de estados, más bien que en normas de convergencia de observables [22–24].

Además, ya que se está considerando la Teoría Cuántica como más general que la Teoría Clásica, el comportamiento descrito por la Mecánica Clásica debe emerger de la Mecánica Cuántica. En [25] se hace una descripción de las órbitas de Kepler de un electrón en un átomo de hidrógeno.

Estas son extensiones que se han hecho al principio de Bohr; sin embargo, no se extienden a todos los sistemas cuánticos, como se ha visto y demostrado, solo para ciertos casos particulares. Por lo tanto, es necesario hallar una extensión más general, una con la cual se pueda confirmar de forma clara y precisa que el comportamiento clásico de los sistemas emerge del comportamiento cuántico de éstos, como es el caso del sistema ²de una partícula encerrada en un pozo de potencial esférico infinito.

Capítulo 10

Nueva Formulación

Recientemente se ha realizado una nueva formulación al Principio de Correspondencia de Bohr, el cual se ha estudiado detenidamente para este trabajo. Dicho principio ha sido aplicado a diferentes sistemas, entre los cuales se encuentran el oscilador armónico, el pozo cuadrado infinito, el problema de Kepler, entre otros [4, 26]. Así se ha comprobado su validez para dichos sistemas, pues ha dado resultados correctos. Y, para probar la generalidad de esta formulación, se sigue aplicando a diferentes sistemas cuánticos, como el pozo de potencial esférico infinito, que es lo que se trata en este trabajo.

En esta Nueva Formulación se propone un procedimiento matemático conceptualmente simple para conectar las densidades de probabilidad cuántica y clásica usando el Principio de Correspondencia de Bohr. Se usan las expansiones de Fourier de las distribuciones de probabilidad cuántica y clásica, luego se asume que las expansiones coinciden cuando el número cuántico principal es muy grande. Al llevar a cabo el procedimiento, que explica con más detalle más adelante, se obtienen unos términos adheridos a la densidad de probabilidad clásica, los cuales se interpretan como efectos cuánticos residuales en el límite microscópico-macroscópico [4, 26].

10.1. Procedimiento General

El procedimiento general del principio en cuestión es un tanto simple. Este es descrito de la siguiente manera:

Es bien sabido que para sistemas periódicos, la distribución de probabilidad cuántica (QPD) $\rho^{QM}(x, n)$ es una función oscilatoria, mientras que la distribución de probabilidad clásica (CPD) $\rho^{CL}(x)$ no tiene este comportamiento. Sin embargo, ambas funciones pueden ser escritas como una expansión de Fourier, i.e.

$$\rho^{QM}(x, n) = \int f^{QM}(p, n) e^{i \frac{px}{\hbar}} dp \quad (10.1)$$

$$\rho^{CL}(x) = \int f^{CL}(p) e^{i \frac{px}{\hbar}} dp, \quad (10.2)$$

donde $f^{QM}(p, n)$ y $f^{CL}(p)$ son los coeficientes de Fourier clásico y cuántico, respectivamente. Además, se sabe que para sistema periódicos simples estas distribuciones se aproximan la una a la otra en un sentido promediado localmente para números cuánticos grandes. Esto implica que la expansión de los coeficientes de Fourier deberían aproximarse el uno al otro para $n \gg 1$:

$$f^{QM}(p, n) \sim f^{CL}(p) \quad (10.3)$$

Para hacer esta comparación, primero se sustituye el valor del número cuántico principal n igualando las expresiones cuántica y clásica. Note que las constante de Planck mantiene un valor finito, así que las correcciones dependientes de $\hbar$ pueden surgir en la Ec. (10.3)

Esta propuesta puede ser resumida de la forma siguiente. Primero, se calculan los coeficientes de la expansión $f^{QM}(p, n)$ usando la transformada de Fourier de la QPD, y, entonces, obtener su comportamiento asintótico para n grande. Entonces, igualamos las expresiones cuántica y clásica para la energía, para definir el valor del número cuántico principal. Finalmente, calculando la transformada inversa de Fourier, se obtiene, al menos en una primera aproximación, la CPD. El procedimiento puede ser aplicado también a las distribuciones de probabilidad en el espacio de momentos [4, 26].

10.2. El Oscilador Armónico

La QPD para un oscilador en una dimensión está dada como

$$\rho^{QM}(x, n) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{2^n n!} H_n^2(\sqrt{\alpha}x) e^{-\alpha x^2}, \quad (10.4)$$

donde $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$. Una de las diferencias entre los comportamientos clásicos y cuánticos del oscilador armónico es que la QPD se distribuye sobre todo el eje x , mientras que la CPD está limitada por la amplitud clásica. No obstante, si se aumenta el valor del número cuántico principal, la QPD muestra un efecto de confinamiento parecido al comportamiento clásico.

Ahora, se calculan los coeficientes de Fourier, como

$$f^{QM}(p, n) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{2^n n!} \int H_n^2(\sqrt{\alpha}x) e^{-\alpha x^2} e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx; \quad (10.5)$$

esta integral está calculada en varios textos [31]:

$$f^{QM}(p, n) = e^{-\frac{p^2}{4m\omega\hbar}} L_n\left(\frac{p^2}{2m\omega\hbar}\right), \quad (10.6)$$

donde L_n es un polinomio de Laguerre de grado n . Se remarca que la estructura matemática de los coeficientes $f^{QM}(p, n)$ es similar a la función de Wigner para el oscilador armónico, pero formalmente diferente. El comportamiento asintótico de los coeficientes

de Fourier para n grande es también bien conocido. En [27] se encuentra la siguiente relación iterada:

$$F(u^2) \equiv e^{-\frac{u^2}{2}} L_n(u^2) \sim J_0(2\sqrt{N}u) - \frac{\pi}{2} \int_0^u t^3 F(t^2) \times [J_0(2\sqrt{N}u)Y_0(2\sqrt{N}t) - J_0(2\sqrt{N}t)Y_0(2\sqrt{N}u)] dt, \quad (10.7)$$

donde J_0 y Y_0 son las funciones Bessel usuales de primero y segundo orden, respectivamente, y $N \equiv n + \frac{1}{2}$.

En [27] se muestra que en el límite $N \rightarrow \infty$ los términos de iteración están fuertemente suprimidos comparados con la función Bessel J_0 .

Usando la relación anterior y $\hbar\omega N = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2$, se puede escribir la expresión asintótica para los coeficientes de Fourier como sigue:

$$f^{QM}(p, n) \sim J_0\left(\frac{px_0}{\hbar}\right) - \frac{\pi}{2} \int_0^{\frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}}} t^3 F(t^2) \times \left[J_0\left(\frac{px_0}{\hbar}\right) Y_0(2\sqrt{N}t) - J_0(2\sqrt{N}t) Y_0\left(\frac{px_0}{\hbar}\right) \right] dt. \quad (10.8)$$

Finalmente, se calcula la transformada inversa de Fourier. El primer término puede ser obtenido directamente, mientras los términos iterados pueden ser escritos como integrales adimensionales,

$$\rho^{QM}(x, n) \sim \frac{1}{\pi\sqrt{x_0^2 - x^2}} + \frac{1}{2\pi x_0} \times \sum_{k=1}^{\infty} \left(-\frac{\pi}{32}\right)^k \left(\frac{\hbar}{S}\right)^{2k} i_k(x, x_0), \quad (10.9)$$

donde $S \equiv \pi m\omega x_0^2$ es la acción clásica y la $i_k(x, x_0)$ es la integral k -ésima adimensional. En particular:

$$i_k(x, x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha e^{i\alpha \frac{x}{x_0}} \int_0^{\alpha} \beta^3 J_0(\beta) \times [J_0(\alpha)Y_0(\beta) - J_0(\beta)Y_0(\alpha)] d\beta. \quad (10.10)$$

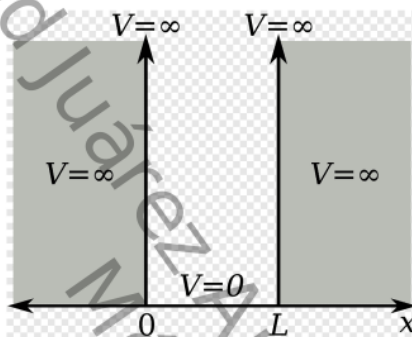
También se pueden evaluar las iteraciones de orden superior en una forma simple: Note que el primer término en la ecuación (10.9) es independiente de $\hbar$ y corresponde exactamente con la CDP. Los términos restantes son proporcionales al incremento de las potencias de $\frac{\hbar}{S}$, los cuales son muy pequeños para sistemas clásicos, así que estos términos están fuertemente suprimidos por la CPD. Un comportamiento oscilatorio residual, como se observa en la QDP es preservado a través del comportamiento armónico de las integrales iteradas. Si ahora se considera el límite de Planck, los resultados clásicos se recuperan exactamente. Esto, sin embargo, no es necesario, ya que los términos de corrección son muy pequeños y parecen reflejar un comportamiento cuántico residual en el nivel clásico.

10.3. Partícula en una caja

Considérese el sistema de una partícula encerrada en una caja unidimensional. Este es un caso bastante bien discutido en los textos de Mecánica Cuántica. El sistema consiste en lo siguiente: una partícula encerrada en un pozo de potencial de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ \infty, & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (10.11)$$

Una partícula dentro de este potencial es completamente libre, excepto en los extremos ($x = 0$ y $x = L$) donde una fuerza infinita le impide escapar.



Las ecuaciones de la Mecánica Clásica dentro de la caja, serían simplemente las de una partícula libre en una dimensión, se tiene que

$$\frac{dP}{dt} = m \frac{d^2x}{dt^2} \quad (10.12)$$

y

$$E = \frac{P^2}{2m} \quad (10.13)$$

Ahora bien, dadas las características del sistema, la probabilidad clásica de hallar la partícula dentro de la caja en un intervalo dx alrededor de x es $P(x)dx$; sin embargo, la densidad de probabilidad clásica de hallar la partícula en cualquier región del espacio es

$$\rho^{CM} = \frac{1}{L} [H(r) - H(r - L)]; \quad (10.14)$$

donde H es la función escalón de Heaviside, lo que sugiere que la probabilidad total de hallar la partícula dentro de la caja es 1, mientras que afuera 0. Se espera poder recuperar este valor al aplicar la nueva formulación al sistema, aunque con las correcciones cuánticas correspondientes.

Luego, desde el punto de vista de la Mecánica Cuántica, nótese que fuera de pozo $\psi(x) = 0$, no hay probabilidad de hallar la partícula en dicho lugar. Dentro de la caja, donde $V = 0$, la ecuación de Schrödinger tiene la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (10.15)$$

o

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad (10.16)$$

donde $k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Esta es la ecuación del oscilador armónico simple unidimensional; la solución general es bien conocida:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (10.17)$$

donde A y B son constantes arbitrarias. Ahora, ¿qué condiciones de frontera son las apropiadas para $\psi(x)$? Considérese que, usualmente, $\psi(x)$ y $d\psi/dx$ son continuas dentro de la caja, aunque donde el potencial se hace infinito, $d\psi/dx$ no es continua. La continuidad de ψ requiere que

$$\psi(L) = \psi(0) = 0 \quad (10.18)$$

Así, aplicando estas condiciones a la solución general,

$$\psi(0) = A \sin(k0) + B \cos(k0); \quad (10.19)$$

entonces $B = 0$, y, por tanto:

$$\psi(x) = A \sin(kx). \quad (10.20)$$

Por lo que $\psi(L) = A \sin(kL) = 0$, de lo cual se puede proponer que $A = 0$, pero esto no es aceptable, puesto que se tendría que $\psi(x) = 0$, y esta no es una función normalizable, y una función no normalizable no representa a partículas. También se puede proponer que $kL = 0$, lo que significa que

$$kL = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots \quad (10.21)$$

pero $k = 0$ no es buena solución ya que de nuevo se obtendría que $\psi = 0$, y las soluciones negativas no dicen nada novedoso ya que $\sin(-\theta) = -\sin(\theta)$, y el signo puede quedar dentro de A ; así que las soluciones distintas son

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \quad (10.22)$$

con $n = 1, 2, 3, \dots$. De forma muy peculiar, las condiciones de frontera en $x = L$ no determinan la constante A , sino la constante k ; pero de esto se obtiene que los posibles valores de E son

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (10.23)$$

En contraste brusco con la mecánica clásica, una partícula cuántica encerrada en una caja no puede tener energía anterior cualquiera, solo los valores permitidos. Ahora, hallar la constante A es muy simple, se toma como nuestra constante de normalización. Se tiene que

$$\int_0^L |A|^2 \sin^2(kx) dx = |A|^2 \frac{L}{2} = 1, \quad (10.24)$$

así

$$|A|^2 = \frac{2}{L}. \quad (10.25)$$

Por tanto, las soluciones dentro de la caja son

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right). \quad (10.26)$$

Ahora, véase que su QPD tiene una forma un tanto sencilla:

$$\rho^{QM}(x, n) = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (10.27)$$

Habiendo obtenido esto, se procede a aplicar la formulación en cuestión a este sistema. Esto ya ha sido realizado en [4]; el procedimiento es muy sencillo. Primero, se calculan los coeficientes de Fourier, esto es

$$f^{QM}(p, n) = \frac{2}{L} \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx; \quad (10.28)$$

esta integral está calculada en [31], y se obtiene que

$$\begin{aligned} f^{QM}(p, n) = & \frac{2}{L} \left\{ \frac{e^{-i\frac{pL}{\hbar}}}{2\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)} - \frac{e^{-i\frac{pL}{\hbar}}}{\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)^2 + 4\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2} \left(\frac{\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)}{2} \cos(n\pi) + \frac{n\pi}{L} \sin(n\pi) \right) \right\} \\ & - \frac{2}{L} \left\{ \frac{1}{2\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)} - \frac{1}{\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)^2 + 4\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2} \left(\frac{\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)}{2} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Así, para valores muy grandes del número cuántico principal ($n \gg 1$), se tiene que

$$f^{QM}(p, n) \sim \frac{i\hbar}{pL} \left\{ e^{-i\frac{pL}{\hbar}} - 1 \right\} \quad (10.29)$$

Después, se procede a calcular la transformada inversa de Fourier de este resultado

$$f^{-1}\{f^{QM}(p, n)\} \sim \frac{1}{L} [H(L-x) - H(-x)] + O\left[\left(\frac{\hbar}{S_c}\right)^n\right] \quad (10.30)$$

donde H es la función escalón de Heaviside, y $O\left[\left(\frac{\hbar}{S_c}\right)^n\right]$ son las correcciones cuánticas; S_c es la acción clásica. Ahora, nótese que sucede lo siguiente,

$$\frac{1}{L} [H(L-x) - H(-x)] + O\left[\left(\frac{\hbar}{S_c}\right)^n\right] \sim \rho^{QM}(x, n), \quad (10.31)$$

se recuperan los valores clásicos esperados de las cantidades física; esto, ya que (10.31) es equivalente a los resultados clásicos esperados, lo que ya se escribió antes, donde la CPD permanece constante dentro de la caja [4]. La densidad de probabilidad obtenida es equivalente a la densidad de probabilidad clásica. Se cumple para este caso que, para $n \gg 1$,

$$f^{QM}(p, n) \sim f^{CL}(p) \quad (10.32)$$

Se había mostrado anteriormente que el Principio de Correspondencia de Bohr no es aplicable a este sistema; sin embargo, ya se ha demostrado que usando esta nueva formulación si hay un buen resultado, la densidad de probabilidad no se hace cero. Esto da la pauta para aplicar esta nueva formulación al sistema de una partícula encerrada en un pozo de potencial esférico infinito, que es lo de más interés en este trabajo.

Capítulo 11

El Pozo Esférico Infinito

²² En este capítulo se analiza el sistema ² de una partícula encerrada en un pozo de potencial esférico infinito; esto será útil para conocer el comportamiento asintótico de las funciones de estado de dicho sistema.

El problema del pozo circular infinito está planteado y resuelto en diferentes textos [28–30]. Al tratar de resolver dicho problema se presentan tres peculiaridades, a saber, la densidad de probabilidad radial de hallar la partícula en el centro del pozo esférico es cero, la densidad de probabilidad radial de hallar la partícula en la frontera del pozo esférico es cero, y los niveles de energía no son degenerados en el número cuántico de momento angular orbital. Consideraremos estas peculiaridades al momento de obtener las eigenfunciones y la densidad de probabilidad.

11.1. Solución a la Ecuación de Schrödinger Independiente del Tiempo

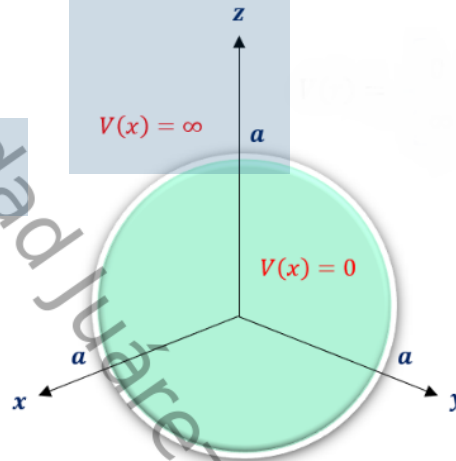


Figura 11.1: Pozo Esférico Infinito.

Tenemos que el pozo de potencial esférico infinito está dado de la forma:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{si } r \leq a \\ \infty, & \text{si } r > a \end{cases} \quad (11.1)$$

Entonces, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este sistema es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (11.2)$$

Y en términos de las coordenadas polares (r, θ, ϕ) se tiene que

$$\frac{1}{2mr^2} \left[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \hat{L}^2 \right] \psi(r, \theta, \phi) + V(r) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi) \quad (11.3)$$

Donde $\hat{L}$ es el operador de momento angular.

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (11.4)$$

Ahora, para resolver esta ecuación, se utiliza el método de separación de variables; entonces, sustituyendo $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ en la ecuación (11.3), se obtienen dos ecuaciones: una ecuación radial,

$$-\frac{2\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R = ER \quad (11.5)$$

y una ecuación angular,

$$\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right\} = -l(l+1) \quad (11.6)$$

La solución de la ecuación (11.6) son los armónicos esféricos,

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (11.7)$$

Seguidamente, para la parte radial, se arregla la ecuación (11.5), con $r < a$, y se obtiene la ecuación diferencial de Bessel esférica,

$$\frac{d^2 R(z)}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{dR(z)}{dz} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(z) = 0 \quad (11.8)$$

Donde $z = kr$ y $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. La ecuación (11.8) tiene dos soluciones linealmente independientes $j_l(z)$ y $n_l(z)$, que es la función de Bessel esférica de orden l y la función de Neumann esférica de orden l . Solo la función de Bessel esférica es aceptable en la física, ya que la función de Neumann es divergente en el centro de la esfera. Así, considerando la condición de frontera $j_{ka} = 0$, se obtiene que los eigenvalores de energía están dados como

$$E_{ln} = \frac{\hbar^2 k_{ln}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \alpha_{ln}^2 \quad (11.9)$$

donde $k_n a$ es la raíz n -ésima α_{ln}^2 , o ceros, de la función de Bessel esférica $j_l(z)$. Algunos valores de α_{ln} se muestran en la Tabla 1, y algunos eigenvalores de energía se muestran en la Tabla 2. Entonces, las eigenfunciones del sistema tienen la forma, para la raíz n -ésima,

$$\psi_{ln}^m(r, \theta, \phi) = A_l j_l(k_{ln} r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (11.10)$$

Donde $A_l = \frac{\sqrt{2}}{a^{3/2} |j_1(\alpha_{ln})|}$, que es la constante de normalización, que está calculada en [29].

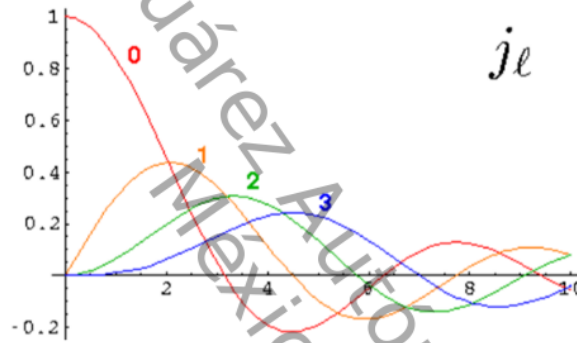
α_{ln}	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$
$l=0$	π	2π	3π	4π
$l=1$	4,49341	7,72525	10,9041	14,0662
$l=2$	5,76346	9,09501	12,3229	15,5146
$l=3$	6,98793	10,4171	13,6980	16,9236
$l=4$	8,18256	11,7049	15,0397	18,3013
$l=5$	9,35581	12,9665	16,3547	19,6532

Tabla 11.1: Los ceros α_{ln} de la función Bessel esférica, para algunos valores de l y n .

E_{ln}	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$
$l = 0$	1	4	9	16
$l = 1$	2,04575	6,04680	12,0471	20,0472
$l = 2$	3,36563	8,38121	15,3861	24,3883
$l = 3$	4,94763	10,9950	19,0115	29,0193
$l = 4$	6,78389	13,8815	22,9180	33,9361
$l = 5$	8,86877	17,0352	27,1010	39,1349

Tabla 11.2: Eigenvalores de energía E_{ln} , para algunos valores de l y n .

Nótese que el comportamiento asintótico del sistema está dado por los ceros ⁵ de la función Bessel, como se muestra en la siguiente figura:

Figura 11.2: Gráfica de j_l , $l = 0, 1, 2, \dots$

⁵ Ahora, considerando que la función de onda es la misma en todas las direcciones, ya que el sistema tiene simetría esférica, se propone lo siguiente, $l = m = 0$; se debe tener en cuenta que los niveles de energía no son degenerados en el número cuántico de momento angular orbital. Así, las eigenfunciones quedan de la forma siguiente

Los índices n, l y m han sido tomados a propósito para representar los números cuánticos principal, azimutal y magnético respectivamente. Así se puede escribir también

$$|nlm\rangle = A_l j_l(k_{ln} r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (11.11)$$

$$\psi_{0n}^0(r) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{4\pi a^{3/2} |j_1(\alpha_{0n})|}} j_0(k_{0n} r). \quad (11.12)$$

También, se debe tener en cuenta que la única función definida en el origen es j_0 .

Para facilitar los cálculos, se aplica el teorema $j_0 = \frac{\sin(x)}{x}$ a la ecuación (11.12); entonces se obtiene que

$$\psi_{0n}^0(r) = \frac{\sqrt{2}}{a^{3/2}|j_1(\alpha_{0n})|} \frac{\sin(k_{0n}r)}{k_{0n}r} \quad (11.13)$$

Por lo cual la densidad de probabilidad cuántica (QDP) queda de la forma

$$\rho^{QM} = |\psi_{0n}^0(r)|^2 = \frac{2}{4\pi a^3 |j_1(\alpha_{0n})|^2} \frac{\sin^2(k_{0n}r)}{(k_{0n}r)^2} \quad (11.14)$$

11.2. Probabilidad Clásica

Desde el punto de vista le Mecánica Clásica, dentro de la esfera, la partícula se comporta como una partícula libre, no tiene ninguna restricción ni está sometida a ningún potencial, como ocurre en el caso de la caja; la partícula rebota libremente contra la pared de la esfera. Entonces se tiene que

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} \quad (11.15)$$

y

$$E = \frac{p_r^2}{2m} \quad (11.16)$$

Ahora, al igual que ocurre en el ejemplo de la caja, la probabilidad de hallar la partícula en un intervalo dr alrededor de $\vec{r}$ es $P(\vec{r})dr$. Y la probabilidad total de hallar la partícula dentro de la esfera es 1, mientras que fuera es 0; la densidad de probabilidad es muy parecida a la del ejemplo de la caja, tiene la siguiente forma:

$$\rho^{CM} = \frac{3}{4\pi a^3} [H(r) - H(r-a)] \quad (11.17)$$

donde H es la función escalón de Heaviside.

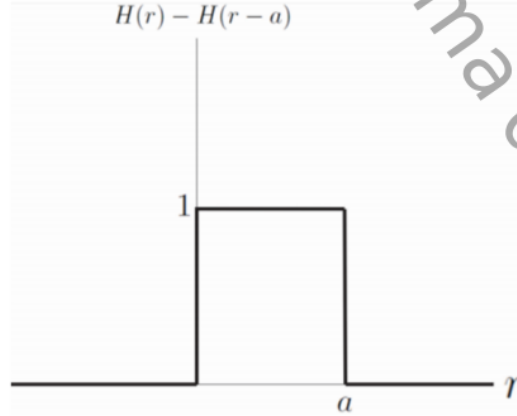


Figura 11.3: Probabilidad Clásica

Se espera poder hallar este valor al aplicar la nueva formulación a la densidad de probabilidad cuántica, aunque con las correcciones cuánticas correspondientes.

Capítulo 12

Aplicación de la Nueva Formulación

Habiendo ya obtenido la QDP, se procede a aplicar la nueva formulación al Principio de Correspondencia de Bohr a este sistema. Para esto, primero, se calculan los coeficientes de Fourier de (11.14),

$$f^{QM}(p, \alpha_{0n}) = \int_0^a \rho^{QM} e^{-i\frac{pr}{\hbar}} r^2 dr = \frac{2}{4\pi a^3 k_{0n}^2 |j_1(\alpha_{0n})|^2} \int_0^a \sin^2(k_{0n}r) e^{-i\frac{pr}{\hbar}} dr \quad (12.1)$$

Esta integral está calculada en [31], de lo cual se obtiene que

$$f^{QM}(p, \alpha_{0n}) = \frac{2}{4\pi a^3 k_{0n}^2 |j_1(\alpha_{0n})|^2} \left\{ \frac{e^{-i\frac{pa}{\hbar}}}{2 \left(-i\frac{p}{\hbar}\right)} - \frac{e^{-i\frac{pa}{\hbar}}}{\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)^2 + 4k_{0n}^2} \left(\frac{\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)}{2} \cos(2k_{0n}a) + k_{0n} \sin(2k_{0n}a) \right) \right\} \\ - \frac{2}{4\pi a^3 k_{0n}^2 |j_1(\alpha_{0n})|^2} \left\{ \frac{1}{2 \left(-i\frac{p}{\hbar}\right)} - \frac{1}{\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)^2 + 4k_{0n}^2} \left(\frac{\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)}{2} \right) \right\}.$$

Así, para valores del número cuántico principal n muy grandes, $\alpha_{0n} \gg 1$ y, por tanto, $k_{0n} \gg 1$; entonces se tiene que

$$k_{0n}^2 |j_1(\alpha_{0n})|^2 \sim 1; \quad (12.2)$$

y, por tanto,

$$f^{QM}(p, \alpha_{0n}) \sim \frac{i\hbar}{4\pi pa^3} \left\{ e^{-i\frac{pa}{\hbar}} - 1 \right\}, \quad (12.3)$$

que es un resultado parecido al resultado del ejemplo de la partícula encerrada en una caja. Por último, se procede a calcular la transformada de Fourier inversa del resultado

obtenido,

$$\int \frac{i\hbar}{4\pi a^3} \left\{ \frac{e^{-i\frac{pa}{\hbar}}}{p} - \frac{1}{p} \right\} e^{i\frac{pr}{\hbar}} dp; \quad (12.4)$$

esta transformada está calculada en [36]. Así, por medio de esto, se regresa a la densidad de probabilidad cuántica,

$$\rho_{\alpha_{0n}}^{QM}(r, \alpha_{0n}) \sim \frac{3}{4\pi a^3} [H(r) - H(r - a)] + O \left[\left(\frac{\hbar}{S_c} \right)^n \right], \quad (12.5)$$

donde H es la función escalón de Heaviside, y $O \left[\left(\frac{\hbar}{S_c} \right)^n \right]$ representan las correcciones cuánticas correspondientes. Entonces, nótese que, al igual que en el ejemplo del pozo cuadrado infinito, se recuperan los valores clásicos esperados de las cantidades físicas; esto, ya que el resultado (12.5) equivale a los resultados clásicos esperados, donde la CPD permanece constante dentro de la esfera. La QDP es similar a la CPD obtenida en (10.32). Por tanto, se cumple también para este caso que, para $n \gg 1$,

$$f^{QM}(p, n) \sim f^{CL}(p) \quad (12.6)$$

Entonces la Nueva Formulación al Principio de Correspondencia de Bohr, descrita en [4] es válida para el sistema de una partícula encerrada en un pozo de potencial esférico infinito, con esto se prueba su validez para este sistema. También se pueden obtener los valores esperados de cantidades clásicas como el momento, la posición y la energía, con el resultado obtenido (12.5), que es lo que principalmente se busca recuperar [4]. Se tiene que

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \int x^2 \rho^{QM}(x, n) dx \sim \bar{x}_{CL}^2 \quad (12.7)$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \int p^2 \rho^{QM}(p, n) dp \sim \bar{p}_{CL}^2 \quad (12.8)$$

$$\langle \hat{H}^2 \rangle \sim E_{CL} \quad (12.9)$$

Capítulo 13

Conclusión

Habiendo obtenido los resultados anteriores, se puede decir que esta formulación puede considerarse una prueba de que, en verdad, la Mecánica Cuántica contiene a la Mecánica Clásica como un cierto caso límite, y, por tanto, ambas teorías son consistentes; esto a pesar que una esté formulada en términos de trayectorias continuas y la otra en términos de probabilidades, que es este un problema conceptual muy difícil de tratar, como ya se ha mencionado antes.

Algo muy importante de esta formulación es que ha sido desarrollada en términos de las densidades de probabilidad, lo que la hace diferente a la formulación propuesta por Heisenberg, pues ésta fue desarrollada con base en valores esperados; y no solo esto, sino que esta nueva formulación es desarrollada con base en la Mecánica Cuántica actual. Esta Nueva Formulación al Principio de Correspondencia de Bohr describe más ampliamente cómo, en un caso límite, la Mecánica Clásica surge de la Mecánica Cuántica. Dicha formulación es bastante más general que la propuesta por Bohr en 1923 como también que las propuestas posteriormente.

Ahora bien, se ha podido observar cómo el comportamiento clásico surge de la Mecánica Cuántica, esto nos da un mejor entendimiento de lo que sucede con el sistema que hemos estudiado, pues no solo obtenemos el comportamiento clásico y el comportamiento cuántico por separados, sino que podemos hallar una correspondencia entre ambos comportamientos, e ir estudiando cómo este sistema se va comportando según vamos aplicando esta formulación; en otras palabras, qué es lo que sucede en el límite microscópico-macroscópico de dicho sistema físico.

Además, el cálculo realizado para el caso del pozo esférico infinito aplicando esta formulación, no existe en la literatura previa. El trabajo realizado es único, no se había llevado a cabo antes, lo que lo hace algo propio de este trabajo; pues aunque la Nueva Formulación sí había sido desarrollada antes, e incluso se ha aplicado a varios sistemas previamente, como he explicado anteriormente, no había sido aplicada a éste sistema, que como he mencionado, es un sistema muy interesante dadas las peculiaridades que presenta, esto está explicado en la sección 6.

Se ha tratado de explicar el procedimiento de forma clara, desde la ² solución a la ecuación de Schrödinger, hasta la aplicación de la Nueva Formulación. Recuérdese que, como se ha dicho antes, este problema es importante, ya que el razonamiento de éste da la pauta para estudiar el átomo de hidrógeno, que es un tema de estudio

muy importante en la física casi desde la formulación de la Mecánica Cuántica. Los resultados que se pueden obtener con esta Nueva Formulación son los deseados, como el que se obtiene en este trabajo, pues recuperamos los valores clásicos esperados, y, además, surgen las correcciones cuánticas correspondientes de cada sistema; por lo cual podemos afirmar que la Mecánica Cuántica es válida en todas las escalas de la física. Aunque se debe tener en cuenta que tampoco este es aplicable a todos los sistemas físicos, sino solo a los que tienen número cuántico principal; por ejemplo, no se puede aplicar esta formulación al caso de una partícula libre, pues este problema tampoco está muy bien entendido en la Mecánica Cuántica. Para este sistema ha sido posible aplicarlo, pues, aunque dentro de la esfera la partícula se comporta como una partícula libre, tiene una restricción en la frontera de la esfera; entonces se puede realizar el estudio previo.

Bibliografía

- [1] S. T. Thorton, J. B. Marion. (2004). "Classical Dynamics of Particles and Systems". United States of America: Thomson Learning.
- [2] A. J. Makowski, "A Brief Survey of Various Formulations of the Correspondence Principle," European Journal of Physics, Vol. 27, No. 5, 2006, pp. 1133-1139.
- [3] L. D. Landau. (1958). "Quantum Mechanics". Great Britain: Pergamon Press Ltd.
- [4] J. A. Bernal; et al. (2013). A Simple Mathematical Formulation of the Correspondence Principle. Journal of Modern Physics, Vol 4, 108-112.
- [5] L. E. Ballentine. (1998). "Quantum Mechanics: A Modern Development". World Scientific.
- [6] A. F. Rañada. (1985). El Principio de Correspondencia. Arbor.
- [7] N. Bohr. (1976). "Collected Works Vol. 3". New York, USA, North-Holland.
- [8] H. Weyl, Gruppentheorie und Quantenmechanik (Leipzig: Hirzel) (1928); H. Weyl, The Theory of Groups and Quantum Mechanics (Dover, New York, 1931).
- [9] H.J. Groenewold.(1946). "Physica 12." NorthHolland Publishing Co. Amsterdam 405
- [10] R. L. Liboff, "The Correspondence Principle Revisited." Physics Today, Vol. 37, No. 2, 1984, pp. 50-55.
- [11] H.J. Groenewold.(1946). "Physica 12." NorthHolland Publishing Co. Amsterdam 405
- [12] W. Heisenberg. (1930). "The Physical Principles of the Quantum Theory". New York: Dover Publications.
- [13] W. Heisenberg, "Übereine Anwendung des Korrespondenzprinzips auf die Frage nach der Polarization des Fluoreszenzlichtes," Zeitschriftfür Physik, Vol. 31, No. 1, 1925, pp. 617-626
- [14] H. A. Kramers. W. Heisenberg, "Über die Streuung von Strahlung durch Atome," Zeitschriftfür Physik, Vol. 31, No. 1, 1925, pp. 681-708.

- [15] E. Schrödinger, "Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik," Die Naturwissenschaften, Vol. 14, No. 28, 1926, pp. 664-666.
- [16] G. Q. Hassoun and D. H. Kobe, "Synthesis of the Planck and Bohr Formulations of the Correspondence Principle", American Journal of Physics, Vol. 57, No. 7, 1998, pp. 658-662.
- [17] C. M. Bender, D. W. Hook, P. N. Meisinger and Q. Wang. "Complex Correspondence Principle". Physical Review Letters, Vol. 104, No. 6, 2010, Article ID: 061601.
- [18] H. J. Groenewold (1946). "On The Principles of Elementary Quantum Mechanics". Physica. 12 (7): 405-460.
- [19] E. J. Heller, (1977), "Wigner phase space method: Analysis for semiclassical applications," J. Chem. Phys.
- [20] J. Ford and M. Ilg, "Eigenfunctions, Eigenvalues, and Time Evolution of Finite, Bound, Undriven, Quantum Systems are not Chaotic," (1992), Phys. Rev. A 45, 6165-6173.
- [21] W. B. Case. (2008, October 1). Wigner Function and Weyl Transforms for Pedestrians. American Journal of Physics , 76, 943-944.
- [22] K. Hepp. The Classical Limit for Quantum Mechanical Correlation Functions. Commun.Math.Phys. 35(1974) 265-277.
- [23] G.A. Hagedorn. Semiclassical Quantum Mechanics. Part I: The Limit for Coherent States Commun.Math.Phys. 71(1980) 77-93.
- [24] R. F. Werner. (1995). The Classical Limit of Quantum Theory. ARXIV, Vol. 1, 2-5.
- [25] D. Deepak. (2016). The Bohr Correspondence Principle, Kepler Orbits of the Electron in a Hydrogen Atom. Springer India. Vol. 1 565-573.
- [26] J. M. Ruíz. (2013). The Classical Limit of the Quantum Kepler Problem. Journal of Modern Physics, Vol. 4, 818-822.
- [27] G. Szego, "Orthogonal Polynomials," (1939), American Mathematical Society, Providence.
- [28] D. J. Griffiths. (2005), "Introduction to Quantum Mechanics, Vol. 1". New Jersey, USA, Pearson Education
- [29] Y. Huang, K. Wu, C. Wu. (2017). The right way to solve the infinite spherical well in quantum mechanics. ARXIV, Vol. 1, 1-7.

- [30] G. Sun, K. D. Launey, T. Dytrych, S. Dong, J. Draayer. (2014). A New Kind of Shift Operators for Infinite Circular and Spherical Well. *Advances in Mathematical Physics*, Vol. 2014, 1-7.
- [31] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik. "Table of Integrals, Series, and Products, 7th Edition".
- [32] W. Heisenberg. (1959). "Physics and Philosophy: The Revolution in Modern Science". Great Britain: John Dickens and Co Ltd Northampton.
- [33] L. Peña. (2006). "Introducción a la Mecánica Cuántica". Ciudad Universitaria, México, D. F. : Fondo de Cultura Económica.
- [34] N. P. Landsman. (2007). *Philosophy of Physics, Between Classical and Quantum*. Vol 1. Nijmegen, Netherlands, Elsevier.
- [35] Larry C. Andrews. (1992). *Special Functions Of Mathematics for Engineers*. New York: McGraw-Hill. Elsevier Academic Press Publications, New York, 2007.
- [36] J. A. Carrasco. (2015). Delta de Dirac. Enero, 2015, de FCFM.
- [37] W. Heisenberg. (1959). "Physics and Philosophy: The Revolution in Modern Science". Great Britain: John Dickens and Co Ltd Northampton.



"Donde hacer ciencia, es Básico"

NUEVA FORMULACIÓN AL PRINCIPIO DE CORRESPONDENCIA DE BOHR APLICADA AL POZO ESFÉRICO INFINITO

INFORME DE ORIGINALIDAD

5%

ÍNDICE DE SIMILITUD

FUENTES PRIMARIAS

1	iopscience.iop.org Internet	73 palabras — 1%
2	dokumen.pub Internet	71 palabras — 1%
3	ri.ues.edu.sv Internet	69 palabras — 1%
4	www.coursehero.com Internet	61 palabras — 1%
5	documentop.com Internet	56 palabras — < 1%
6	aapt.scitacion.org Internet	40 palabras — < 1%
7	pt.scribd.com Internet	23 palabras — < 1%
8	dehesa.unex.es Internet	18 palabras — < 1%
9	repositorio.uam.es Internet	18 palabras — < 1%

10	vdocuments.mx Internet	17 palabras — < 1 %
11	qdoc.tips Internet	16 palabras — < 1 %
12	the-eye.eu Internet	15 palabras — < 1 %
13	www.exp.uji.es Internet	13 palabras — < 1 %
14	file.scirp.org Internet	10 palabras — < 1 %
15	fr.slideshare.net Internet	10 palabras — < 1 %
16	ecuaciones.org Internet	9 palabras — < 1 %
17	eprints.uanl.mx Internet	9 palabras — < 1 %
18	karin.fq.uh.cu Internet	9 palabras — < 1 %
19	cimec.org.ar Internet	8 palabras — < 1 %
20	livrosdeamor.com.br Internet	8 palabras — < 1 %
21	vdoc.pub Internet	8 palabras — < 1 %
22	www.un-ilibrary.org Internet	7 palabras — < 1 %

23

oldri.ues.edu.sv
Internet

6 palabras — < 1%

24

www.auger.org.ar
Internet

6 palabras — < 1%

EXCLUIR CITAS	ACTIVADO	EXCLUIR FUENTES	DESACTIVADO
EXCLUIR BIBLIOGRAFÍA	ACTIVADO	EXCLUIR COINCIDENCIAS	< 5 PALABRAS