

# UN MÉTODO PARA UNIR LAS DINÁMICAS CLÁSICA Y CUÁNTICA

por

Luis Sandoval<sup>1,2</sup> & Diógenes Campos<sup>1,3</sup>

## Resumen

**Sandoval L., & Campos D.:** Un método para unir las dinámicas clásica y cuántica. Rev. Acad. Colomb. Cienc. 24(93): 529-534, 2000. ISSN 0370-3908.

Se describe un método que relaciona operadores del espacio de Hilbert con operadores que actúan sobre funciones de onda definidas sobre el espacio de fase. El procedimiento se vale de las propiedades del operador de Weyl, extendido al plano complejo, y de la introducción de una función  $S(Q, P, t)$  que está relacionada de manera estrecha con la acción clásica. Al transformar el hamiltoniano del sistema al espacio de fase y expandirlo en potencias de la constante de Planck, se hacen explícitas las contribuciones cuánticas al problema y se identifica una dinámica clásica subyacente que permite trayectorias complejas. En el límite clásico, la ecuación de Schrödinger en el espacio de fase se convierte en una ecuación de Liouville para la función de onda. El artículo concluye con la aplicación del método al estudio de la dinámica de un oscilador cuártico.

**Palabras clave:** Espacio de fase, trayectorias complejas, oscilador cuártico, función de Husimi.

## Abstract

We describe a method that links Hilbert-space and phase-space operators. This procedure use Weyl's operator with complex parameters of position  $Q$  and momentum  $P$  and a function  $S(Q, P, t)$  related with the classical action. The phase-space Hamiltonian of the system is expanded as a sum of differential operators depending of Planck's constant  $\hbar$ . This allows to identify the leading quantum contribution and define a complex classical dynamics. In the limit  $\hbar \rightarrow 0$ , the Schrödinger equation is transformed in a Liouville's equation for the phase-space wavefunction. The article ends with the application of the method to study the dynamics of a quartic oscillator.

**Key words:** Phase space, complex trajectories, quartic oscillator, Husimi function.

<sup>1</sup> Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá

<sup>2</sup> E-mail: luiss@168.176.8.55

<sup>3</sup> E-mail: dcamposr@168.176.9.40

## 1. Introducción

Es bien conocido que la tecnología avanza hacia la miniaturización a escalas atómicas y moleculares, cayendo así en el dominio de la mecánica cuántica. Tal proceso involucra necesariamente la indagación acerca de la forma en la que las dinámicas cuántica y clásica se relacionan.

De acuerdo con el principio de correspondencia, la mecánica cuántica debe reducirse a la dinámica clásica en el límite en el que la constante de Planck tiende a cero. Por lo tanto un análisis de las características dinámicas y estructurales que intervienen en este límite sugiere que ambas dinámicas se enmarquen dentro de estructuras matemáticas comunes. La mecánica clásica hamiltoniana se formula en el espacio de fase, lo cual sugiere la conveniencia de representar la mecánica cuántica en término de cantidades definidas en este espacio. Esta metodología es crucial, más aún considerando que la integrabilidad es la excepción dentro de los sistemas mecánicos clásicos y que, por razones teóricas y tecnológicas, es importante investigar las manifestaciones cuánticas del caos clásico.

Entre los métodos para formular la mecánica cuántica en el espacio de fase son de mencionarse los siguientes: Por un lado, el de las funciones de distribución cuánticas [1], [2], [3] en las que el estado se representa por una función que se asemeja en cierto grado a las distribuciones de la mecánica estadística clásica, a los observables se asocian funciones definidas en el espacio de fase y las ecuaciones de movimiento son liouvillianas. Por otro lado, los métodos de vectores de estado [4],[5], [6], en los cuales al estado cuántico se le asocia una función de onda definida en el espacio de fase, los observables se representan por operadores diferenciales y las ecuaciones de movimiento son del tipo Schrödinger.

El presente artículo se enmarca en el método de vectores de estado y hace uso de una formulación reciente [6]. La sección 2 trata la forma de asociar a una función del operador posición (o del operador momentum) el correspondiente operador diferencial que actúa sobre funciones de onda definidas en el espacio de fase. En la sección 3 se construye la imagen de la ecuación de Schrödinger en el espacio de fase y se especifica la dinámica clásica asociada con el problema cuántico, en lo que se ha denominado el proceso de *clásicalización* [6]. En la sección 4 se generaliza el concepto de estado coherente recurriendo al campo de los números complejos. En la sección 5 se hace uso del método para estudiar la dinámica clásica asociada al oscilador armónico cuántico

y de doble pozo. Finalmente en la sección 6 se presentan algunas conclusiones.

## 2. Correspondencia entre operadores

En lo que sigue se denota con  $\mathcal{H}$  el espacio de Hilbert de un sistema mecánico-cuántico unidimensional, y se designan por  $\hat{q}$  y  $\hat{p}$  los operadores básicos de posición y momentum, respectivamente. Se introduce el operador de Weyl [6]

$$\hat{D}(Q, P) := \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (P\hat{q} - Q\hat{p}) \right], \quad (1)$$

con parámetros de posición  $Q$  y momentum  $P$  que pertenecen, en general, al campo de los números complejos  $\mathcal{C}$ . El inverso del operador de Weyl está dado por

$$\hat{D}^{-1}(Q, P) = \hat{D}(-Q, -P). \quad (2)$$

Introducimos ahora una función arbitraria  $S(Q, t)$ , bien comportada, que depende de la variable de posición  $Q$  y del tiempo  $t$ , pero es independiente del impulso  $P$ . Definimos igualmente un operador de Weyl modificado,  $\hat{S}(Q, P, t)$ , a través de la expresión

$$\hat{S}(Q, P, t) := \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \left( S(Q, t) - \frac{1}{2}QP \right) \right] \hat{D}^{-1}(Q, P). \quad (3)$$

Esta entidad al actuar sobre los operadores fundamentales de posición e impulso genera las siguientes relaciones que establecen conexiones entre operadores en el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  y operadores en el espacio de fase complejo  $\Omega_{QP}$ :

$$\hat{S}(Q, P, t)\hat{q} = \check{Q}_+\hat{S}(Q, P, t), \quad (4)$$

$$\hat{S}(Q, P, t)\hat{p} = \check{P}_+\hat{S}(Q, P, t). \quad (5)$$

En  $\Omega_{QP}$  actúan los operadores diferenciales

$$\check{Q}_+ := Q + i\hbar \frac{\partial}{\partial P}, \quad (6)$$

$$\check{P}_+ := \frac{\partial S}{\partial Q} - i\hbar \frac{\partial}{\partial Q} \quad (7)$$

que obedecen la relación de conmutación canónica

$$[\check{Q}_+, \check{P}_+] = i\hbar. \quad (8)$$

Al usar (4) y (5) de manera iterativa se obtiene

$$\hat{S}(Q, P, t)F(\hat{q}) = F(\check{Q}_+)\hat{S}(Q, P, t), \quad (9)$$

$$\hat{S}(Q, P, t)F(\hat{p}) = F(\check{P}_+)\hat{S}(Q, P, t), \quad (10)$$

donde  $F(x)$  es una función arbitraria que se puede desarrollar en series de potencias de la variable  $x$ , la cual

se puede substituir por el operador básico de posición  $\hat{q}$  (o de impulso  $\hat{p}$ ).

### 3. Ecuación de Schrödinger en $\Omega_{QP}$

En esta sección se considera la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un sistema con hamiltoniano  $H(\hat{q}, \hat{p}, t)$  y estado  $|\psi(t)\rangle$  en el instante de tiempo  $t$ . Se quiere formular la ecuación de movimiento en el espacio de fase  $\Omega_{QP}$ .

Para esto definimos un ket  $|\psi_+(Q, P, t)\rangle$  que asociamos al estado  $|\psi(t)\rangle$  por medio de la transformación

$$|\psi_+(Q, P, t)\rangle := \hat{S}(Q, P, t)|\psi(t)\rangle, \quad (11)$$

calculamos el conmutador

$$\left[ \hat{S}(Q, P, t), \frac{\partial}{\partial t} \right] = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S(Q, t)}{\partial t} \hat{S}(Q, P, t) \quad (12)$$

y nos restringimos a sistemas cuyo Hamiltoniano es del tipo *standard* (energía cinética más energía potencial),

$$H(\hat{q}, \hat{p}, t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}, t). \quad (13)$$

Al multiplicar la ecuación de Schrödinger por la izquierda con el operador  $\hat{S}(Q, P, t)$ , obtenemos

$$i\hbar \hat{S}(Q, P, t) \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{S}(Q, P, t) H(\hat{q}, \hat{p}, t) |\psi\rangle. \quad (14)$$

Como consecuencia de (9), (10) y (12) la ecuación anterior se puede escribir en la forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_+(Q, P, t)\rangle = \left[ \frac{\partial S(Q, t)}{\partial t} + H(\check{Q}_+, \check{P}_+, t) \right] |\psi_+(Q, P, t)\rangle. \quad (15)$$

El operador  $\check{H}_+ = H(\check{Q}_+, \check{P}_+, t)$ , que es la imagen del hamiltoniano  $H(\hat{q}, \hat{p}, t)$  en el espacio de fase, se puede descomponer como la suma de tres contribuciones,

$$\check{H}_+ = K + \hbar \check{L} + \check{D}_+, \quad (16)$$

que se expresan por los siguientes operadores definidos en el espacio de fase  $\Omega_{QP}$ :

$$K := H\left(Q, \frac{\partial S}{\partial Q}, t\right) - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial Q^2}, \quad (17)$$

$$\check{L} := -i \left[ \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial Q} \frac{\partial}{\partial Q} - \frac{\partial V}{\partial Q} \frac{\partial}{\partial P} \right], \quad (18)$$

$$\check{D} := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(i\hbar)^n}{n!} \frac{\partial^n V}{\partial Q^n} \frac{\partial^n}{\partial P^n}. \quad (19)$$

Nótese que  $K(Q, p, t)$ , con  $p = \frac{\partial S(Q, t)}{\partial Q}$ , es un operador *multiplicación* que se puede interpretar como el hamiltoniano que describe un sistema clásico subyacente al sistema cuántico (ver 24 y 25). El operador  $\check{L}$  es el análogo al operador de Liouville y  $\check{D}$  conlleva las contribuciones en la constante de Planck de orden  $\hbar^n$ ,  $n \geq 2$ .

En lo anterior hemos considerado una función  $S(Q, t)$  bien comportada, pero arbitraria. Una gran simplificación se logra en la teoría (ver 15) al elegir  $S(Q, t)$  de tal manera que satisfaga la ecuación

$$\frac{\partial S}{\partial t} + K\left(Q, \frac{\partial S}{\partial Q}, t\right) = 0, \quad (20)$$

o, de manera más explícita,

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(Q, \frac{\partial S}{\partial Q}, t\right) - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial Q^2} = 0. \quad (21)$$

Es de anotar que en el límite  $\hbar \rightarrow 0$  la ecuación (21) se reduce a la ecuación clásica de Hamilton-Jacobi. Por lo tanto, con el propósito de tener una dinámica hamiltoniana, se debe escoger como condición inicial de (21)  $S(Q, t_0) = P_0 Q$ , donde  $(Q_0, P_0) := (Q(t_0), P(t_0))$  son valores iniciales de posición e impulso. Debido a la similitud con el caso clásico, la ecuación (21) se denomina *ecuación cuántica de Hamilton-Jacobi*.

Con la elección anterior de  $S(Q, t)$ , la imagen de la ecuación de Schrödinger en el espacio de fase se reduce a la forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_+(Q, P, t)\rangle = [\hbar \check{L} + \check{D}] |\psi_+(Q, P, t)\rangle, \quad (22)$$

con una condición inicial consistente con la transformación (11) y con los valores iniciales  $(Q_0, P_0)$ .

En el límite  $\hbar \rightarrow 0$ , la ecuación (22) se reduce a

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi_+(Q, P, t)\rangle = -i \check{L} |\psi_+(Q, P, t)\rangle. \quad (23)$$

A diferencia de la mecánica estadística clásica donde una distribución de probabilidad obedece la ecuación de Liouville, la ecuación (23) es de Liouville pero gobierna la evolución temporal del estado vectorial  $|\psi_+(Q, P, t)\rangle$  o, si el lector lo prefiere, de la amplitud de probabilidad (elegir una representación).

Es de anotar que las características de la ecuación (21) son dadas por las *ecuaciones generalizadas de Hamilton* [6]:

$$\dot{Q} = \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial Q}, \quad (24)$$

$$\dot{P} = -\frac{\partial V}{\partial Q}, \quad (25)$$

las cuales determinan *trayectorias* en el espacio de fase y estas trayectorias son, en general, complejas. Trayectorias de estas características aparecen también en otros métodos teóricos [7]. En el límite  $\hbar \rightarrow 0$ , (24) y (25) reproducen las trayectorias reales convencionales descritas por las ecuaciones de Hamilton, ya que  $P = \partial S(Q, t)/\partial Q$ .

#### 4. Representación de estados coherentes

Para aplicar la teoría antes expuesta es necesario adoptar una representación, la cual elegimos como los estados coherentes de Glauber [8], [9], excepto que permitimos su extensión al plano complejo:

$$|Z\rangle \equiv \hat{D}(Q^*, P^*)|0\rangle, \quad Z \in \mathcal{C}. \quad (26)$$

El asterisco (\*) indica conjugación compleja y  $|0\rangle$  es el estado base de un oscilador armónico unidimensional. El estado (26) lo podemos expresar como

$$|Z\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\left(\frac{Q^*}{q_0}\right)^2 + \left(\frac{P^*}{p_0}\right)^2\right)\right] \times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{Z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle, \quad (27)$$

con

$$Z = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Q^*}{q_0} + i\frac{P^*}{p_0}\right) \quad (28)$$

y  $q_0 p_0 = \hbar$ .

La representación del estado  $|\psi_+(Q, P, t)\rangle$  en el espacio de fase se hace mediante la la función de onda

$$\psi_+(Q, P, t) := \langle 0|\psi_+(Q, P, t)\rangle. \quad (29)$$

La forma de la ecuación de Schrödinger (22) queda inmodificada, excepto por el cambio  $|\psi_+\rangle \rightarrow \psi_+(Q, P, t)$ .

La cantidad en que estamos interesados es la *función de Husimi* extendida al plano complejo, la cual definimos mediante la expresión

$$\rho_H(Q, P, t) := |\langle Z|\psi(t)\rangle|^2. \quad (30)$$

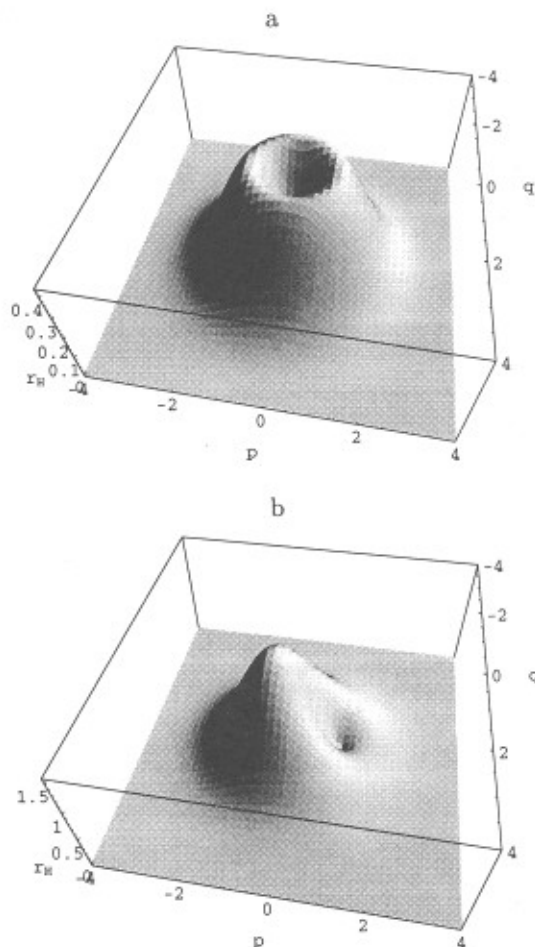
Es de observar la relación

$$|\psi_+(Q, P, t)|^2 = \exp\left[\frac{2}{\hbar} \text{Im}\left(S - \frac{QP}{2}\right)\right] \rho_H(Q, P, t) \quad (31)$$

que constituye un puente entre la función de Husimi y la imagen  $\psi_+(Q, P, t)$ .

La definición (30) coincide con el concepto estándar de función de Husimi, la cual se restringe a argumentos reales  $Q$  y  $P$ . Tal como se ilustra en la figura 1, la generalización a valores complejos de  $Q$  y  $P$  permite la emergencia de una mayor diversidad de paquetes de onda. En la figura 1. se representa la función de Husimi

para el estado  $|1\rangle$  de un oscilador armónico unidimensional, generando la figura así: (a) con valores reales de  $Q$  y  $P$ , (b) con una contribución imaginaria de la posición  $Q$ .



**Figura 1.** Función de Husimi para el estado  $|1\rangle$  del oscilador armónico, generada como sigue: (a) con la parte real del espacio de fase complejo,  $\rho_H(\text{Re}Q, \text{Re}P, t_0)$ , (b) con contribución no nula de la parte imaginaria de la posición,  $\rho_H(\text{Re}Q + i, \text{Re}P, t_0)$ .

#### 5. Ejemplos

Considerar el Hamiltoniano

$$H(\hat{q}, \hat{p}, t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + A\hat{q}^4 + B\hat{q}^2, \quad (32)$$

el cual, según los valores de  $A$  y  $B$ , incluye como casos particulares los siguientes sistemas: oscilador armónico, cuártico y doble pozo. En lo que sigue mostramos la

dinámica clásica que conllevan las ecuaciones de Hamilton generalizadas, (24) y (25).

### a. Oscilador armónico

Considerar  $A = 0$  y  $B = m\omega^2/2$ . La solución de la ecuación cuántica de Hamilton-Jacobi (21) es dada por

$$S(Q, P_o, t) = -\frac{P_o^2}{2m\omega} \tan(\omega t) + P_o \sec(\omega t) Q - \frac{m\omega}{2} \tan(\omega t) Q^2 + \frac{i\hbar}{2} \ln[\cos(\omega t)], \quad (33)$$

que puede expresarse como

$$S(Q, P_o, t) = S_{cl}(Q, P_o, t) + \frac{i\hbar}{2} \ln(\omega t), \quad (34)$$

donde  $S_{cl}$  denota la función acción clásica. El último sumando no depende de  $Q$  o  $P$  y, por lo tanto, (24) y (25) generan la dinámica clásica estándar, siempre y cuando se cumpla la condición inicial  $S(Q, 0) = P_o Q$ , con  $P_o, Q_o \in \mathcal{R}$ .

La solución del oscilador armónico sugiere que, en general, la condición inicial para la función  $S(Q, t)$  determina el carácter estándar, o no, de la dinámica clásica asociada con las ecuaciones de Hamilton generalizadas. Al elegir  $S(Q, 0) = P_o Q$ , con  $P_o, Q_o \in \mathcal{R}$ , se garantiza que en la etapa inicial la evolución temporal está gobernada por una transformación canónica real, y que para tiempos posteriores a  $t_0$  la parte real de la dinámica coincide con la estándar. En lo que sigue mostramos este comportamiento en el caso de los osciladores cuántico y de doble pozo.

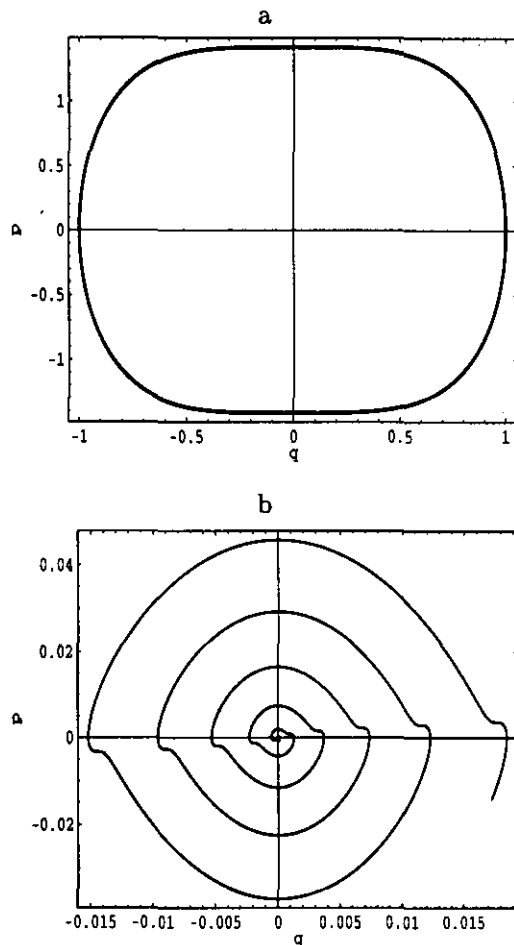
### b. Oscilador cuántico

Con el propósito de realizar el experimento numérico fijamos en (32)  $A = 1$  y  $B = 0$ . En las figs. 2a. y 2b. presentamos la parte real e imaginaria de la trayectoria generada por las ecuaciones de Hamilton generalizadas, considerando condiciones iniciales reales. Al tomar la parte real de la trayectoria compleja se obtiene la trayectoria clásica estándar que sería generada por las ecuaciones de Hamilton. Nótese que en el instante inicial  $t_0$  la parte imaginaria de la trayectoria se anula por la elección de la condición inicial para  $S(Q, t_0)$ .

Si las condiciones iniciales fueran complejas, la parte real de la trayectoria diferiría de la estándar, lo cual se ilustra en las figs. 3a. y 3b.

### c. Oscilador de doble pozo

En este caso elegimos en (32)  $A = 0.5$  y  $B = -10$ . Mostramos en las figuras 4a y 4b la proyección de la trayectoria en la parte real e imaginaria del espacio de

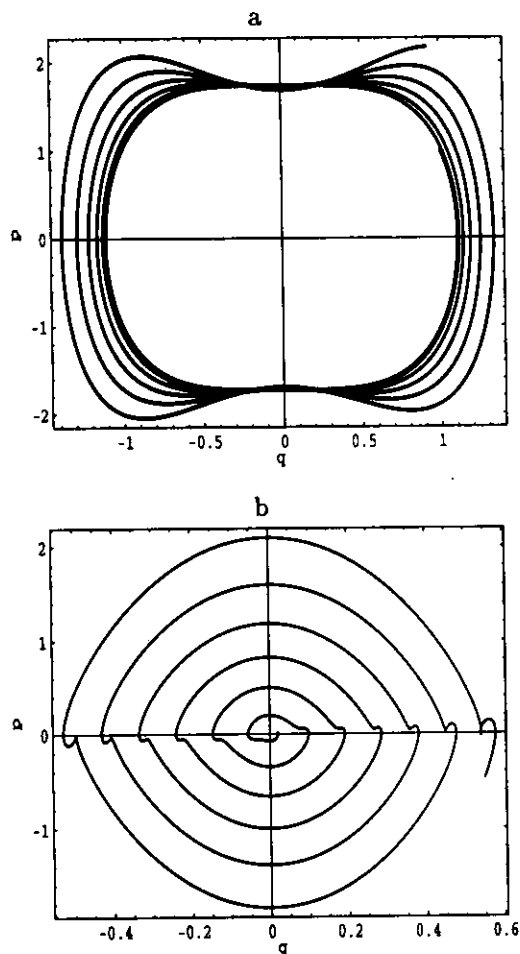


**Figura 2.** Oscilador cuántico ( $\hbar = 1, m = 1$ ) (a) Parte real de la trayectoria con condición inicial  $Q_0 = (1, 0)$  y  $P_0 = (0, 0)$ . (b) Parte imaginaria de la misma trayectoria.

fase, respectivamente, para una condición inicial real que determina confinamiento clásico en un pozo. Una vez más se obtiene que la parte real de la trayectoria coincide con la estándar.

## 6. Conclusiones

En el presente artículo hemos ilustrado el procedimiento de *clásicalización* [6] que permite asociarle un sistema clásico a un sistema cuántico. Se ha visto que ese sistema obedece las *ecuaciones de Hamilton generalizadas* en lugar de las ecuaciones de Hamilton estándar. Sin embargo, los ejemplos muestran que las trayectorias generadas por estas últimas se obtienen de las primeras tomando la parte real de  $(Q(t), P(t))$ . La parte imaginaria de la trayectoria genera una modificación en la

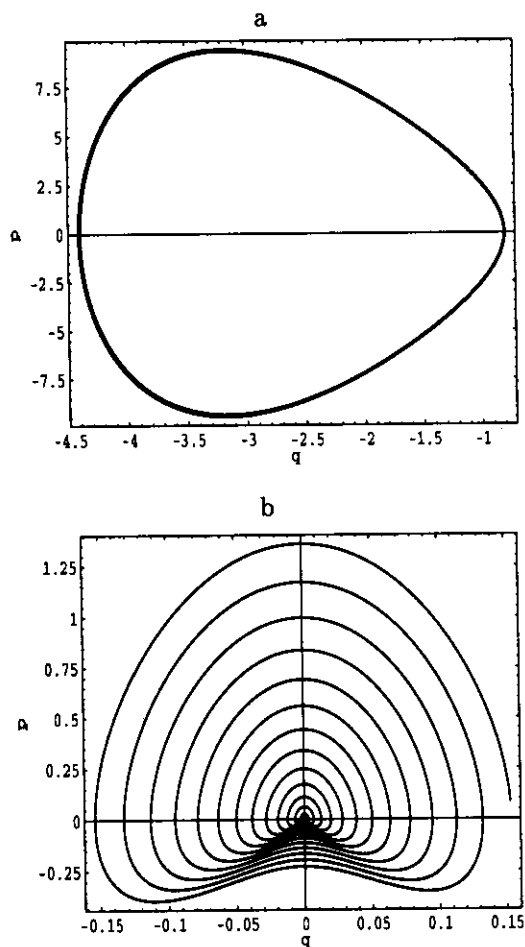


**Figura 3 .** Oscilador cuártico ( $\hbar = 1, m = 1$ ) (a) Parte real de la trayectoria con condición inicial  $Q_0 = (1, 0.02)$  y  $P_0 = (1, 0.02)$ . (b) Parte imaginaria de la misma trayectoria.

estructura de la función de Husimi flexibilizando su comportamiento y dando posibilidades de mayor riqueza en cálculos cuánticos. Estos temas serán explorados en próximos trabajos.

#### Agradecimientos.

Los autores agradecen a a Carlos Viviescas por estimulantes discusiones sobre el tema y al Prof. D Bogoya por su apoyo al Grupo de Caos y Complejidad (C&C).



**Figura 4.** Oscilador de doble pozo ( $\hbar = 1, m = 1$ ): (a) Parte real de la trayectoria con condición inicial  $Q_0 = (-4.4, 0)$  y  $P_0 = (0, 0)$ . (b) Parte imaginaria de la misma trayectoria.

#### REFERENCIAS

- [1] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. Scully y E. P. Wigner, Phys. Rep. 106, 121 (1984)
- [2] H. Lee, Phys. Rep. 259, 147 (1995)
- [3] D. Campos, Momento 6, 5 (1992)
- [4] D. Campos, Momento 9, 3 (1995)
- [5] K. B. Moller, T. Jorgensen y G. Torres-Vega, J. Chem. Phys. 106, 7228 (1997)
- [6] D. Campos, J. D. Urbina y C. Viviescas, J. Phys. A: Math. Gen. 33, 6129-6158 (2000)
- [7] A. L. Xavier Jr. y Marcus A. M. de Aguiar, Ann. Phys. 252, 458 (1996)
- [8] R. Glauber, Phys. Rev. 131, 2766 (1963)
- [9] W. Zhang, D. H. Feng y R. Gilmore, Rev. Mod. Phys. 62, 867 (1990)