



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**TRANSFORMACIONES CANONICAS Y SU REPRESENTACION EN
MECANICA CUANTICA, OSCILADOR ARMONICO Y
POTENCIAL DE MORSE.**

T E S I S

Que para obtener el Título de

F I S I C O

P r e s e n t a

GUSTAVO ESPINOSA RELLO



México, D. F.

1985



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE

INTRODUCCION	1
PARTE I	
Sección I.1.- <u>La representación de Dirac.</u>	4
Sección I.2.- <u>Transformaciones no biyectivas y el espfn de ambigüedad.</u>	11
Sección I.3.- <u>El oscilador armónico. Un nuevo punto de vista.</u>	16
PARTE II	
Sección II.1.- <u>Problema de Morse</u>	21
Sección II.2.- <u>Estructura de espacio Fase</u>	23
Sección II.3.- <u>La representación en Mecánica Cuántica</u>	27
a) Resolución de la Ecuación de Schrödinger con potencial de Morse.	31
b) Ecuaciones de M.M. y Representación Cuántica de la Transformación Canónica Clásica.	39
CONCLUSIONES	49
APENDICE I.-	50
APENDICE II.	52
REFERENCIAS	60

INTRODUCCION

Este trabajo es consecuente de estudios realizados por M. Moshinsky, T.H. Seligman y colaboradores sobre el tema de la representación en mecánica cuántica de transformaciones canónicas a variables de ángulo y acción (ref. 1,2,6,7,8). En ellos se logró encontrar la representación correspondiente para una amplia gama de hamiltonianos.

Este trabajo se divide en dos partes:

En la primera se obtuvo la representación en mecánica cuántica de la transformación canónica clásica a variables de ángulo y acción para el potencial de oscilador armónico atractivo; esto se llevó a cabo desde un nuevo punto de vista, que consiste en separar ó descomponer la transformación en varias transformaciones distintas puntuales y lineales. Estas se analizan por separado. Este procedimiento dió lugar a una expresión simple para la representación.

En la segunda parte se halló la representación cuántica de la transformación canónica a variables de ángulo y acción para el potencial de Morse. Dicho potencial es interesante porque su espectro de energías posee una región continua y otra discreta con un número finito de niveles. Este es el primer caso exactamente soluble de este tipo para el cual se ha determinado la representación de la transformación canónica a variables de ángulo y acción.

El contenido de las dos partes es el siguiente:

Primera Parte:

En la sección I.1 se esboza el método de determinación de la representación en mecánica cuántica de transformaciones canónicas clásicas propuesto por Dirac, (ref. 5), y se señalan sus limitaciones. Además se consideran transformaciones canónicas clásicas dadas en forma implícita, ya que frecuentemente es difícil, sino es que imposible, encontrar operadores cuánticos bien definidos que correspondan a las transformaciones canónicas clásicas implícitas. Posteriormente se presentan las ecuaciones diferenciales, llamadas de Mello-Moshinsky (MM) (ref. 1,8) que determinan la representación cuántica de las transformaciones canónicas clásicas. Se resuelven además dos ejemplos de aplicación de dichas ecuaciones que son: El caso general de las transformaciones canónicas lineales y el de transformaciones canónicas puntuales biyectivas.

En la sección I.2 se explican métodos conocidos (ref. 1,2,6,7,8) de hallar la representación cuántica de transformaciones no biyectivas, para el ejemplo interesante de transformación puntual.

$$q' = \tan(q'')$$

$$p' = p'' \cos^2(q'')$$

y se demuestra la unitariedad de la representación obtenida.

En la Sección 1.3 se obtiene la representación de la transformación canónica clásica a variables de ángulo y acción para el potencial de oscilador armónico atractivo, considerándola como la composición de transformaciones puntuales y lineales.

Segunda Parte.

En la Sección II.1 de la segunda parte se considera el hamiltoniano clásico con el potencial de Morse. Posteriormente se extiende la definición de la variable de acción a la región de órbitas no ligadas y se encuentra la variable de ángulo correspondiente siguiendo la ref. 2.

En la sección II.2 se determina la manera en que se mapean entre sí los espacios fase, ángulo-acción y posición-momento, bajo la transformación canónica, (ref. 2).

Se obtiene en la sección III.3 la representación en mecánica cuántica de la transformación canónica a variables de ángulo y acción, siguiendo los pasos delineados en Ref. 1:

- a) Se resuelve la ecuación de Schrödinger con el potencial de Morse. Se encuentran los operadores de ascenso y descenso para la región del discreto y su generalización al continuo.
- b) Usando dichos operadores y considerando su límite clásico, se construyen las ecuaciones de M.M. convenientes para las regiones del discreto y del continuo. Con estas es posible encontrar la forma explícita de la representación cuántica de la transformación canónica a variables de ángulo y acción.

PARTE I

Sección I.1.- La Representación de Dirac.

Una formulación clara de este problema se debe a Dirac (ref. 5), la cual describimos brevemente a continuación.

Considerando por simplicidad únicamente problemas de un solo grado de libertad, y consecuentemente un espacio fase bidimensional, una transformación canónica está dada por dos variables nuevas \bar{q}, \bar{p} , definidas como funciones de las canónicas originales q, p

$$\begin{aligned}\bar{q} &= \bar{q}(q, p) \\ \bar{p} &= \bar{p}(q, p)\end{aligned}\tag{I.1.1}$$

de manera que el paréntesis de Poisson mantiene su valor igual a la unidad, es decir,

$$\left\{ \bar{q}, \bar{p} \right\}_{q,p} \equiv \frac{\partial \bar{q}}{\partial q} \frac{\partial \bar{p}}{\partial p} - \frac{\partial \bar{q}}{\partial p} \frac{\partial \bar{p}}{\partial q} = 1\tag{I.1.2}$$

Dirac establece, para operadores con espectro de $-\omega$ a $+\omega$ no degenerados, que en mecánica cuántica podemos encontrar un operador unitario, U , tal que transforma los operadores originales, q, p en los nuevos \bar{q}, \bar{p} por medio de las expresiones

$$\bar{q} = U q U^{-1}, \quad \bar{p} = U p U^{-1},\tag{I.1.3}$$

por lo cual, escogiendo una base en la cual la coordenada original es diagonal

$$q|q'\rangle = q'|q'\rangle \quad , \quad (I.1.4)$$

la representación de la transformación canónica será, en esta base,

$$\langle q'|U|q\rangle \quad . \quad (I.1.5)$$

Este procedimiento propuesto por Dirac, para determinar U , se generaliza trivialmente si los espectros de \bar{q} y \bar{p} , interpretados como operadores en un espacio de Hilbert, son los mismos que los de q y p respectivamente. Pero cuando esto no sucede (es decir, cuando los espectros de los operadores asociados a \bar{q} y \bar{p} no coinciden con los de los operadores q y p), Dirac no indica cual es el camino a seguir. Así, una de las cuestiones importantes a las que se dió respuesta en los artículos ya mencionados (Ref. 1,2,6,7,8), fue interpretar las expresiones (I.1.3), además de obtener un procedimiento para determinar explícitamente la representación de transformaciones canónicas en el caso expuesto.

Frecuentemente, surge el problema de encontrar expresiones para las variables canónicas (originales y nuevas) que tengan operadores en mecánica cuántica bien definidos. En estos casos es conveniente definir la transformación canónica clásica implícitamente

$$\begin{aligned} H(q, p) &= \bar{H}(\bar{q}, \bar{p}) \quad , \\ G(q, p) &= \bar{G}(\bar{q}, \bar{p}) \quad , \end{aligned} \quad (I.1.6)$$

de modo que resulte claro cómo se escriben los operadores correspondientes en mecánica cuántica. H, G y \bar{H}, \bar{G} , como fun-

ciones de q , p y \bar{q} , \bar{p} respectivamente, satisfacen una condición que se deriva como sigue: De (I.1.6) tenemos

$$\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial H}{\partial \bar{q}} \frac{\partial \bar{q}}{\partial q} + \frac{\partial H}{\partial \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial q} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}} \frac{\partial \bar{q}}{\partial q} + \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial q} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}}$$

y relaciones similares para $\frac{\partial H}{\partial p}$, $\frac{\partial G}{\partial q}$, $\frac{\partial G}{\partial p}$. De donde

se tiene

$$\begin{aligned} \{H, G\}_{q,p} &= \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial G}{\partial q} \\ &= \{ \bar{H}, \bar{G} \}_{\bar{q}, \bar{p}} \cdot \{ \bar{q}, \bar{p} \}_{q,p} . \end{aligned} \quad (I.1.7)$$

La expresión (I.1.7) establece que si \bar{q} , \bar{p} son variables canónicas conjugadas, H , G y \bar{H} , \bar{G} deben de ser tales que

$$\{H, G\}_{q,p} = \{ \bar{H}, \bar{G} \}_{\bar{q}, \bar{p}} . \quad (I.1.8)$$

La condición (I.1.8) es por tanto una condición necesaria para que (I.1.6) definan una transformación canónica. Dicha condición es suficiente también, ya que si (I.1.8) se satisface obtenemos directamente que $\{ \bar{q}, \bar{p} \} = 1$.

Las ecuaciones que determinan la representación en mecánica cuántica de las transformaciones canónicas clásicas implícitas, fueron encontradas (ref. 1,8) a partir de las expresiones

$$H(q,p)U = U\bar{H}(q,p) , \quad (I.1.9)$$

$$G(q,p)U = U\bar{G}(q,p) ,$$

que a su vez se obtienen por medio de (I.1.6) y (I.1.3); se encuentra que las ecuaciones buscadas, llamadas de M.M. (Mello-Moshinsky), son:

$$H(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}) \langle q' | U | q'' \rangle = \left[H^*(q'', \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q''}) \right]^* \langle q' | U | q'' \rangle, \quad (I.1.10a)$$

$$G(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}) \langle q' | U | q'' \rangle = \left[G^*(q'', \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q''}) \right]^* \langle q' | U | q'' \rangle. \quad (I.1.10b)$$

Como los operadores que aparecen en (I.1.10) son lineales,

$\langle q' | U | q'' \rangle$ está determinada hasta un factor constante, el cual puede ser determinado hasta una fase mediante las condiciones de unitariedad,

$$\begin{aligned} \int \langle q' | U | q''' \rangle dq''' \langle q''' | U^\dagger | q'' \rangle &= \delta(q' - q''), \\ \int \langle q' | U^\dagger | q''' \rangle dq''' \langle q''' | U | q'' \rangle &= \delta(q' - q''). \end{aligned} \quad (I.1.11)$$

Como ejemplo apliquemos ahora los resultados de arriba al caso de transformaciones canónicas lineales (ref. 12). Consideramos la transformación

$$\begin{aligned} H &= aq + bP, & \bar{H} &= \bar{q}, \\ G &= cq + dP, & \bar{G} &= \bar{P}, \end{aligned} \quad (I.1.12)$$

con a, b, c, d constantes.

Entonces las ecuaciones (I.1.10) se escriben como

$$\begin{aligned} \left[aq' - ib \frac{\partial}{\partial q'} \right] \langle q' | U | q'' \rangle &= q'' \langle q' | U | q'' \rangle, \\ \left[cq' - id \frac{\partial}{\partial q'} \right] \langle q' | U | q'' \rangle &= i \frac{\partial}{\partial q''} \langle q' | U | q'' \rangle, \end{aligned} \quad (I.1.13)$$

donde se escogieron unidades tales que $\hbar = 1$.

Para resolver las ecuaciones (I.1.13) proponemos una solución de la forma

$$\langle q' | U | q'' \rangle = C e^{i(\alpha q'^2 + \beta q' q'' + \gamma q''^2)} \quad (I.1.14)$$

donde α, β, γ son constantes.

Substituyendo esta última en las ecuaciones (I.1.13) se encuentra que

$$\alpha = -\frac{a}{2b}, \quad \beta = \frac{1}{b}, \quad \gamma = -\frac{d}{2b} \quad (I.1.15)$$

El coeficiente C se determina mediante la condición de unitariedad, (I.1.11); obtenemos que la representación unitaria es, hasta una fase,

$$\langle q' | U | q'' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi b}} e^{-\frac{i}{2b}(a q'^2 - 2q' q'' + d q''^2)} \quad (I.1.16)$$

para la transformación canónica lineal general (I.1.12).

Otro caso interesante de representaciones es el de transformaciones canónicas puntuales y biyectivas. Consideremos una transformación del tipo

$$q' = \phi(q''), \quad p' = \frac{p''}{\phi'(q'')} \quad (I.1.17)$$

donde $\phi = \phi(q'')$ es una función biyectiva tal que $\phi'(q'') = \frac{\partial \phi}{\partial q''}$ está definida.

Las ecuaciones (I.1.10) se escriben como

$$q' \langle q' | U | q'' \rangle = \phi(q'') \langle q' | U | q'' \rangle \quad (I.1.18a)$$

$$i \frac{\partial}{\partial q'} \langle q' | U | q'' \rangle = -\frac{i}{2} \left[i \frac{\partial}{\partial q'} \phi'(q'') + i \phi''(q'') \frac{\partial}{\partial q'} \right] \langle q' | U | q'' \rangle \quad (I.1.18b)$$

De (I.1.18a) tenemos

$$\langle q' | U | q'' \rangle \sim e^{i\chi(U, q', q'')} \delta(q' - \phi(q'')) \quad (I.1.19)$$

La condición de unitariedad

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle q' | U | q''' \rangle dq''' \langle q''' | U^\dagger | q'' \rangle = \delta(q' - q'') \quad (I.1.20)$$

implica que

$$\langle q' | U | q'' \rangle = \phi'^{1/2} e^{i\chi(U, q', q'')} \delta(q' - \phi(q'')) \quad (I.1.21)$$

donde se usó el hecho de que

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q' - \phi(q''')) \delta(q'' - \phi(q''')) dq'' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial q''}{\partial q'''} \right) \delta(q' - \phi(q''')) \delta(q'' - \phi(q''')) dq'' \\ &= \frac{1}{\phi'} \delta(q' - q'') \end{aligned}$$

Aplicamos (I.1.18b) a (I.1.21):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial q'} \left[\phi'^{1/2} e^{i\chi(U, q', q'')} \delta(q' - \phi(q'')) \right] \\ &= -\frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial q''} \phi'^{-1} + \phi'^{-1} \frac{\partial}{\partial q''} \right] \left[\phi'^{1/2} e^{i\chi(U, q', q'')} \delta(q' - \phi(q'')) \right] \end{aligned}$$

de donde

$$\begin{aligned} & \phi'^{1/2} \left[\left(i \frac{\partial}{\partial q'} \chi(U, q', q'') \right) \delta(q' - \phi(q'')) + \frac{\partial}{\partial q'} \delta(q' - \phi(q'')) \right] e^{i\chi(U, q', q'')} \\ &= -\frac{1}{2} \left[-\frac{\phi''}{\phi'^2} \cdot \phi'^{1/2} e^{i\chi(U, q', q'')} \delta(q' - \phi(q'')) \right. \\ & \quad \left. + 2 \phi'^{-1} \left\{ \frac{1}{2} \phi'^{-1/2} \phi'' e^{i\chi(U, q', q'')} \delta(q' - \phi(q'')) \right\} \right] \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} &+ \phi^{1/2} \left(i \frac{\partial}{\partial q''} \chi(U, q', q'') \right) e^{i\chi(U, q', q'')} \delta(q' - \phi(q'')) \\ &+ \phi^{1/2} e^{i\chi(U, q', q'')} \frac{\partial}{\partial q''} \delta(q' - \phi(q'')) \end{aligned} \right\} ,$$

$$\begin{aligned} &\phi^{1/2} \left(i \frac{\partial}{\partial q'} \chi(U, q', q'') \right) \delta(q' - \phi(q'')) + \phi^{1/2} \left(\frac{\partial}{\partial q'} \delta(q' - \phi(q'')) \right) \\ &= \frac{1}{2} \frac{\phi''}{\phi^{3/2}} \delta(q' - \phi(q'')) - \phi^{-1} \left\{ \frac{\phi'^{-1/2}}{2} \phi'' \delta(q' - \phi(q'')) \right. \\ &\quad \left. + \phi^{1/2} \left(i \frac{\partial}{\partial q''} \chi(U, q', q'') \right) \delta(q' - \phi(q'')) \right\} \\ &\quad - \phi^{-1/2} \left(\frac{\partial}{\partial q''} \delta(q' - \phi(q'')) \right) . \end{aligned}$$

(I.1.22)

Haciendo ahora $\delta' \equiv \frac{\partial}{\partial q'} \delta(q' - \phi(q''))$ y reconociendo que el último término del segundo miembro de (I.1.22) no es más que

$$- \phi^{-1/2} \left(- \frac{\partial \phi}{\partial q''} \right) \delta = \phi^{1/2} \delta' ,$$

y simplificando obtenemos

$$\left[\frac{\partial \chi(U, q', q'')}{\partial q'} \right] \delta(q' - \phi(q'')) = - \phi^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial q'} \chi(U, q', q'') \right] \delta(q' - \phi(q'')) . \quad (I.1.23)$$

Esta expresión es una condición general para la fase χ , impuesta por la segunda ecuación de M.M. (I.1.10b).

Debido a la presencia de la "delta" $\delta(q' - \phi(q''))$ en la expresión (I.1.23), podemos considerar solo funciones

tales que

$$\begin{aligned}\chi &= \chi(U, q'') \\ &= \chi(U, \phi(q''), q''),\end{aligned}\tag{I.1.24}$$

es decir, que χ solo depende de q'' en la forma expresada en (I.1.24). Entonces la expresión (I.1.23), implica que

$$\frac{d}{dq''} \chi(U, \phi(q''), q'') = 0 \quad ,\tag{I.1.25}$$

por lo cual χ es constante.

Escobiendo $\chi = 0$ obtenemos

$$\langle q' | U | q'' \rangle = \phi'^{1/2}(q'') \delta(q' - \phi(q'')) \quad ,\tag{I.1.26}$$

es la representación de transformaciones canónicas puntuales y biyectivas del tipo (I.1.17).

Sección I.2.- Transformaciones No-Biyectivas y el Spin de Ambigüedad:

Para tratar este tema usaremos el ejemplo siguiente de transformación canónica clásica

$$\begin{aligned}q' &= \tan(q'') \quad , \\ p' &= p'' \cos^2(q'') \quad ,\end{aligned}\tag{I.2.1}$$

el cual resulta de invertir la transformación canónica

$$\begin{aligned}q'' &= \text{Arctan}(q') \quad , \\ p'' &= p'(1 + q'^2) \quad ,\end{aligned}\tag{I.2.2}$$

La transformación (I.2.1) es no biyectiva, ya que todos los puntos de la forma $(q'' + 2\pi n, p'')$, con n entero, se mapean en un mismo punto del espacio fase primado. Notemos que esta transformación es de punto.

Para recuperar la biyectividad de la transformación (I.2.1) usaremos el método propuesto por Moshinsky y colaboradores (ref. 1,2,8).

El grupo de transformaciones, T_m , que conecta a todos los puntos sobre el espacio fase (q'', p'') que son mapeados por (I.2.1) en un mismo punto es el de traslaciones, definidas por

$$q'' \xrightarrow{T_m} q'' + 2\pi m, \quad p'' \xrightarrow{T_m} p'', \quad (I.2.3)$$

con m entero.

El conjunto de transformaciones T_m , se llama el grupo de ambigüedad correspondiente a la transformación (I.2.1). Las representaciones irreducibles de este grupo son

$$e^{i2\pi\lambda m}, \quad 0 \leq \lambda < 1, \quad (I.2.4)$$

donde λ caracteriza la representación.

Conviene recordar ahora que una función definida sobre el espacio fase (q'', p'') arbitraria, $f = f(q'', p'')$, puede escribirse en términos de sus partes irreducibles, f^λ , con respecto al grupo ambigüedad (I.2.3)

$$f(q'', p'') = \int f^\lambda(q'', p'') d\lambda, \quad (I.2.5)$$

donde

$$f^\lambda(q'', p'') = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp[i2\pi\lambda m] f(q'' + 2\pi m, p''). \quad (1.2.6)$$

Ahora bien, para recuperar la biyectividad de la transformación (I.2.1), consideramos en vez de funciones $g = g(q', p')$, definidas sobre el espacio fase (q', p') , "espinores" (g^λ) , (donde cada componente de dicho espinor está dada por λ). La transformación (I.2.1) debe entonces mapear en espinores (g^λ) , definidos sobre el espacio (q', p') , las funciones sobre el espacio fase (q'', p'') . El espinor que es mapeado por la transformación (I.2.1) en una función definida en el espacio (q'', p'') , es único. Por lo cual la ambigüedad es removida. Aquí λ es llamado "espín" de ambigüedad.

Pasemos ahora al dominio de la mecánica cuántica. Lo asentado arriba referente al grupo y espín de ambigüedad es igualmente válido en el terreno cuántico.

Apliquemos ingenuamente el resultado (I.1.26) correspondiente a transformaciones canónicas biyectivas y de punto, a la transformación (I.2.1); obtenemos que su representación en mecánica cuántica es

$$\langle q' | U | q'' \rangle = \delta(\text{Arctan}(q') - q'') \sqrt{\frac{1}{1+q'^2}}. \quad (1.2.7)$$

Esta representación es claramente incorrecta ya que la transformación no es biyectiva. Además recordemos que para que el resultado (I.1.26) fuera válido era necesario pedir que la fase dependiera únicamente de q'' . Ahora bien, en caso general la fase depende de q' y q'' ; más específicamente de $(\text{Arctan } q' - q'')$.

El caso más simple es el de dependencia lineal:

Proponemos entonces

$$\langle \lambda q' | U | q'' \rangle = \delta(\text{Arctan}(q') - q'') \sqrt{\frac{1}{1+q'^2}} e^{i\lambda(\text{Arctan } q' - q'')} \quad , \quad (1.2.8)$$

(donde λ es el espín de ambigüedad definido arriba) como la representación en mecánica cuántica de la transformación (I.2.1).

La expresión (I.2.8) es congruente con las ecuaciones M.M. (I.1.10). La primera (I.1.18a) se satisface de manera directa. La segunda en efecto se satisface: En este caso el lado izquierdo de la ecuación (I.1.23) se escribe como

$$\frac{i\lambda}{1+q'^2} \delta(\text{Arctan}(q') - q'') \quad ,$$

y el miembro derecho es

$$\frac{1}{\sec^2 q''} i\lambda \delta(\text{Arctan}(q') - q'') \quad .$$

Estas dos últimas expresiones son iguales (en el sentido de igualdad de distribuciones), por lo cual la representación (I.2.8) es consistente con las ecs. M.M.. Apliquemos la representación (I.2.8) a un elemento arbitrario, $\Omega(q'')$, del espacio de Hilbert generado por $|q''\rangle$:

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \lambda q' | U | q'' \rangle \Omega(q'') dq'' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dq'' \left[\delta(\text{Arctan}(q') - q'') \sqrt{\frac{1}{1+q'^2}} e^{i\lambda(\text{Arctan } q' - q'')} \Omega(q'') \right] \end{aligned} \quad (1.2.9)$$

La función delta que aparece en el integrando no es simple, es decir, en realidad representa un número infinito de deltas, debido a la ambigüedad presente en su argumento. Para reducir

este problema al de una sola delta hacemos lo siguiente:

$$I = \sqrt{\frac{1}{1+q^2}} e^{i\lambda \operatorname{Arctan}(q)} \int_{-\pi}^{\pi} d\bar{q}'' \left[\delta(\operatorname{Arctan}(q') - \bar{q}'') \cdot e^{-i\lambda \bar{q}''} \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi n} \Omega(q'' + 2\pi n) \right] \quad (1.2.10)$$

Es interesante reconocer al factor

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi n} \Omega(q'' + 2\pi n) \quad , \quad (1.2.11)$$

como la componente irreducible, Ω^λ , de $\Omega(q'')$, con respecto al grupo de translaciones (1.2.3), es decir, al grupo de ambigüedad correspondiente a la transformación (1.2.1). Notemos además que

$$\begin{aligned} T_{2\pi k} \Omega^\lambda(q'') &= \Omega^\lambda(q'' + 2\pi k) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\lambda 2\pi n} \Omega(q'' + 2\pi(n+k)) \quad , \end{aligned}$$

haciendo $m = n + k$, tenemos

$$\begin{aligned} T_{2\pi k} \Omega^\lambda(q'') &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\lambda 2\pi(m-k)} \Omega(q'' + 2\pi m) \\ &= e^{i2\pi\lambda k} \Omega^\lambda(q'') \quad . \quad (1.2.12) \end{aligned}$$

Es decir, $\Omega^\lambda(q'')$ se transforma como $e^{i\lambda \bar{q}''}$, de modo que la expresión

$$e^{-i\lambda \bar{q}''} \Omega^\lambda(q'') = \Omega^{0,\lambda}(q'') \quad , \quad (1.2.13)$$

no varía su valor ante las translaciones $T_{2\pi k}$. Por lo cual, la expresión (1.2.10) muestra una definición conveniente de

la transformación representada por (I.2.7). De otra manera se tendría que integrar una serie infinita de deltas de Dirac, conllevando esto, problemas de convergencia de la integral.

En el apéndice I se muestra que la representación (I.2.8) es en efecto unitaria.

Sección I.3.- El Oscilador Armónico. Un Nuevo Punto de Vista.

La transformación canónica clásica T , a variables de ángulo y acción para el oscilador armónico atractivo está definida por

$$T: \begin{cases} \bar{q} = \frac{1}{2} \left(|q| q + \frac{q}{|q|} p^2 \right) \\ \bar{p} = \text{Arctan} \left(\frac{p}{|q|} \right) \end{cases}, \quad (I.3.1)$$

donde las unidades son tales que $m=1$.

Esta definición se escoge en vez de (ref. 1, ec. 6.1)

$$T: \begin{cases} |q| = \frac{1}{2} (p^2 + q^2) \\ \frac{q}{|q|} \bar{p} = \text{Arctan} \left(\frac{p}{q} \right) \end{cases}, \quad (I.3.2)$$

porque (I.3.1) da lugar únicamente al grupo de ambigüedad de translaciones T_n , definido por $T_n: \bar{p} \rightarrow \bar{p} + 2\pi n, \bar{q} \rightarrow \bar{q}, n$

entero, mientras que (I.3.2) además de esta ambigüedad tiene una inversión tanto para \bar{q}, \bar{p} como para q, p , que son ambigüedades espurias en el sentido de que expresan en realidad dos transformaciones distintas. Una de ellas es (I.3.1) en donde \bar{q} y \bar{p} tienen el mismo signo que q y p respectivamente, y la otra difiere de (I.3.1) por un signo en \bar{q} y \bar{p} .

La transformación puede verse como la composición de una sucesión de transformaciones distintas

$$T = T_{IV} T_{III} T_{II} T_I \quad , \quad (I.3.3)$$

en donde

$$T_I : \begin{cases} q' = \frac{|q|}{2} q \\ p' = \frac{p}{|q|} \end{cases} \quad , \quad (I.3.4)$$

$$T_{II} : \begin{cases} q'' = p' \\ p'' = -q' \end{cases} \quad , \quad (I.3.5)$$

$$T_{III} : \begin{cases} q''' = \text{arctan } q'' \\ p''' = p'' (1 + q''^2) \end{cases} \quad , \quad (I.3.6)$$

$$T_{IV} : \begin{cases} q^{IV} = -p''' \\ p^{IV} = q''' \end{cases} \quad , \quad (I.3.7)$$

donde $p^{IV} \equiv \bar{p}$, $q^{IV} \equiv \bar{q}$.

Consideremos ahora las representaciones en mecánica cuántica de las transformaciones $T_I, T_{II}, T_{III}, T_{IV}$:

La transformación T_I , (I.3.4), es de punto (en q) y biyectiva, por lo que es aplicable el resultado de la sección I.1. En este caso la representación, $\langle q' | U_I | q \rangle$ de T_I es:

$$\langle q' | U_I | q \rangle = F(q) \delta(q' - \frac{|q|}{2} q) \quad , \quad (I.3.8)$$

donde

$$F(q) = \sqrt{\frac{1}{2|q|}} (|q|^2 + q)^{1/2} \quad . \quad (I.3.9)$$

La transformación T_{II} , es de Fourier

$$\langle q'' | U_{II} | q' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i q'' q'} \quad (I.3.10)$$

La tercera transformación, T_{III} , es idéntica a la de la sección I.2, de modo que su representación en mecánica cuántica es:

$$\langle q''' | U_{III} | q'' \rangle = \delta(\text{Arctan}(q''') - q'') \sqrt{\frac{1}{1+q''^2}} \cdot e^{-i \lambda (\text{Arctan} q'' - q''')} \quad (I.3.11)$$

T_{IV} corresponde a una transformación de Fourier:

$$\langle q'''' | U_{IV} | q''' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i q'''' q'''} \quad (I.3.12)$$

Por lo anterior, la representación en mecánica cuántica de T ,

$$\text{es } I = \langle q'''' | U | q' \lambda \rangle \quad (I.3.13)$$

$$= \int \langle q'''' | U_{IV} | q''' \rangle dq''' \langle q''' | U_{III} | q'' \lambda' \rangle dq'' d\lambda'$$

$$\cdot \langle q'' \lambda' | U_{II} | q' \lambda \rangle dq' d\lambda' \langle q' \lambda' | U_I | q \lambda \rangle, \quad (I.3.14)$$

$$\text{donde } \langle q'' \lambda' | U_{II} | q' \lambda \rangle = \langle q'' | U_{II} | q' \rangle \delta(\lambda' - \lambda), \quad (I.3.15)$$

$$\langle q' \lambda' | U_I | q \lambda \rangle = \langle q' | U_I | q \rangle \delta(\lambda' - \lambda). \quad (I.3.16)$$

De manera que

$$I = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i q^{IV} q'''} d q''' \delta(\text{Arctan}(q'') - q''') \sqrt{\frac{1}{1+q''^2}} e^{-i \lambda'' (\text{Arctan}(q'') - q''')} d q'' \cdot d \lambda \frac{e^{-i q'' q'}}{\sqrt{2\pi}} \delta(\lambda'' - \lambda) d q' d \lambda' F(q) \delta(q' - \frac{19}{2} q) \delta(\lambda' - \lambda) \quad (I.3.17)$$

Integrando sobre λ'' y λ' tenemos

$$I = \frac{1}{2\pi} \int e^{i q^{IV} q'''} d q''' \delta(\text{Arctan}(q'') - q''') \sqrt{\frac{1}{1+q''^2}} e^{-i \lambda (\text{Arctan}(q'') - q''')} d q'' e^{-i q'' q'} d q' F(q) \delta(q' - \frac{19}{2} q) \quad (I.3.18)$$

ahora integrando sobre q' :

$$I = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i q^{IV} q'''} d q''' \delta(\text{Arctan}(q'') - q''') \sqrt{\frac{1}{1+q''^2}} \cdot e^{-i \lambda (\text{Arctan}(q'') - q''')} d q'' e^{-i q'' \frac{19}{2} q} F(q) \quad (I.3.19)$$

otra vez tenemos el problema de integrar un número infinito de deltas de Dirac; por el mismo argumento utilizado arriba tenemos:

$$I = \frac{F(q)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i q^{IV} (q''' + 2\pi n)} \delta(\text{Arctan}(q'') - q''' - 2\pi n) \cdot$$

$$\sqrt{\frac{1}{1+q''^2}} e^{-i \lambda (\text{Arctan}(q'') - q''' - 2\pi n)} d q''' e^{-i q'' \frac{19}{2} q} d q'' \quad (I.3.20)$$

$$I = \frac{F(q)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i q^{IV} q'''} e^{i \lambda q'''} \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i q^{IV} 2\pi n} e^{i \lambda 2\pi n} \right)$$

$$\cdot \delta(\text{Arctan}(q'') - q''') d q''' e^{-i \lambda \text{Arctan}(q'')} \sqrt{\frac{1}{1+q''^2}} e^{-i q'' \frac{19}{2} q} d q'' \quad (I.3.21)$$

haciendo la integral sobre q'' :

$$I = \frac{F(q)}{2\pi} \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i2\pi n(q''+\lambda)} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dq'' \left[e^{i q'' \arctan q''} \sqrt{\frac{1}{1+q''^2}} \cdot e^{-i q'' \frac{|q|}{2} q} \right] \quad (I.3.22)$$

el cual es el resultado final.

PARTE II

Sección II.1.- Problema de Morse.

Consideremos el hamiltoniano clásico con potencial de Morse, siguiendo (ref. 2).

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0(1 - e^{-\alpha q})^2, \quad (\text{II.1.1})$$

dicho potencial se muestra en la figura 1:

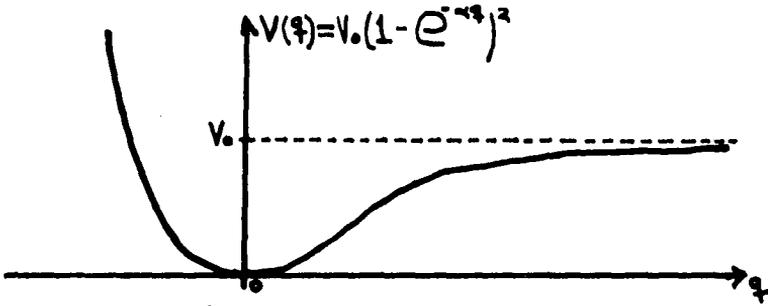


Fig.-1

La acción, J , se define para los valores, $H < V_0$, como

$$\begin{aligned} J(H) &= \frac{1}{2\pi} \oint p \, dq \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{q_-(H)}^{q_+(H)} \left[2m \left[H - V_0(1 - e^{-\alpha x})^2 \right]^{1/2} \right] dx, \quad (\text{II.1.2}) \end{aligned}$$

donde $q_{\pm}(H)$ son los puntos de retorno y están dados por

$$q_{\pm}(H) = -\frac{1}{\alpha} \ln \left[1 \mp \left(\frac{H}{V_0} \right)^{1/2} \right], \quad (\text{II.1.3})$$

de manera que

$$J(H) = \frac{1}{\alpha} (2mV_0)^{1/2} - \frac{(2m)^{1/2}}{\alpha} \cdot (V_0 - H)^{1/2}. \quad (\text{II.1.4})$$

La definición de acción puede extenderse para $H \geq V_0$, de la manera siguiente

$$J(H) = \frac{(2mV_0)^{1/2}}{\alpha} + \frac{(2m)^{1/2}}{\alpha} (H - V_0)^{1/2} \quad (II.1.5)$$

Esta definición es razonable ya que extiende el concepto de acción de modo continuo y liso en el punto $H = V_0$, además que es creciente y continua para todos los valores de H .

La variable de ángulo, Φ , que es canónica conjugada a J , satisface

$$\begin{aligned} 1 &= \{J, \Phi\} \\ &= \left(-\frac{\partial J}{\partial H} \frac{\partial \Phi}{\partial T} + \frac{\partial J}{\partial T} \frac{\partial \Phi}{\partial H} \right) \{H, -T\} \end{aligned} \quad (II.1.6)$$

donde $\{ \}$ son los paréntesis de Poisson y T es la variable conjugada de H :

$$T \equiv \int_{q_-(H)}^q \left(\frac{m}{2} \right)^{1/2} [H - V(x)]^{-1/2} dx \quad (II.1.7)$$

y $q_-(H)$ es el punto donde $V(q)$ toma el valor de H .

Pero J es función de H solamente, entonces de (II.1.6) tenemos

$$\Phi(q, p) = -T(q, p) \left(\frac{\partial H}{\partial J} \right) \quad (II.1.8)$$

De (II.1.4,5 y II.1.8) tenemos que

$$J = \begin{cases} J_0 - J_0 \left[1 - \left(\frac{H}{V_0} \right) \right]^{1/2} & , \text{ para } H \leq V_0, & (II.1.9a) \\ J_0 + J_0 \left[\left(\frac{H}{V_0} \right) - 1 \right]^{1/2} & , \text{ para } H > V_0. & (II.1.9b) \end{cases}$$

$$\Phi(q, p) = \begin{cases} -i \ln \left[\frac{1}{\sqrt{H V_0}} \left[(H - V_0) e^{i q} + V_0 \right] - i (2m H V_0)^{-\frac{1}{2}} (V_0 - H)^{\frac{1}{2}} p e^{i q} \right] & \text{para } H \leq V_0, \\ -\ln \left[\frac{1}{\sqrt{H V_0}} \left[(H - V_0) e^{i q} + V_0 \right] + (2m H V_0)^{-\frac{1}{2}} (H - V_0)^{\frac{1}{2}} p e^{i q} \right] & \text{para } H > V_0, \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{(II.1.10a)} \\ \text{(II.1.10b)} \end{matrix}$$

donde $J_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\alpha}$. (II.1.11)

Proponemos la transformación canónica:

$$|Q| = J[H(q, p)] \quad \text{(II.1.12a)}$$

$$\frac{Q}{|Q|} P = \Phi[q, p] \quad \text{(II.1.12b)}$$

Sección II.2.- Estructura del Espacio Fase.

Consideremos la región $H < V_0$, es decir, la de órbitas ligadas. en esta zona los movimientos son periódicos, de manera que una observable $f = f(q, p)$ arbitraria puede expresarse en función de Φ y J como una expansión en serie de Fourier:

$$f(q, p) = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} a_{\tau}(J) e^{i\tau\Phi}, \quad \text{(II.2.1)}$$

es decir que f depende de Φ en la forma $e^{i\tau\Phi}$, τ entero.

En particular q y p mismas pueden ser expresadas así. Este mismo hecho puede verse también examinando las ecuaciones

(II.1.9) y II.1.10) para $H \leq V_0$ y recordando que H es función de q y p .

Por lo cual la transformación (II.1.12) no es biyectiva, ya que es invariante ante las transformaciones

$$Q \xrightarrow{T_m} Q, \quad P \xrightarrow{T_m} P + 2m\pi, \quad m \text{ entero}$$

$$Q \xrightarrow{I} -Q, \quad P \xrightarrow{I} -P, \quad (\text{II.2.2})$$

es decir, que todos los puntos del espacio fase (Q, P) unidos por las transformaciones T_m e I (I.1.10) son mapeados en un sólo punto del espacio fase (q, p) ver Fig. 2.

Es claro que la región de órbitas ligadas con el espacio fase (Q, P) está definida por $J_0 \leq |Q|$.

La región del espacio fase (q, p) que se mapea sobre la de órbitas ligadas, del espacio (Q, P) es la interior a la línea continua de la Fig. 2, y corresponde a la órbita para la cual la acción es $J = J_0$. Dicha línea es la que mapea (II.1.12) sobre las líneas $Q = -J_0$ y $Q = J_0$. Ver Fig. 2. Los puntos de retorno para esta órbita son

$$q_- = -\frac{1}{\alpha} \ln [2], \quad q_+ = \infty, \quad (\text{II.2.3})$$

ya que $H = V_0$.

Esto quiere decir que p es igual a cero sólomente en el punto q_- y tiende a cero asintóticamente cuando $q \rightarrow \infty$. En la línea $Q = 0$ del espacio fase (Q, P) se mapea el punto $(0, 0)$ del espacio (q, p) .

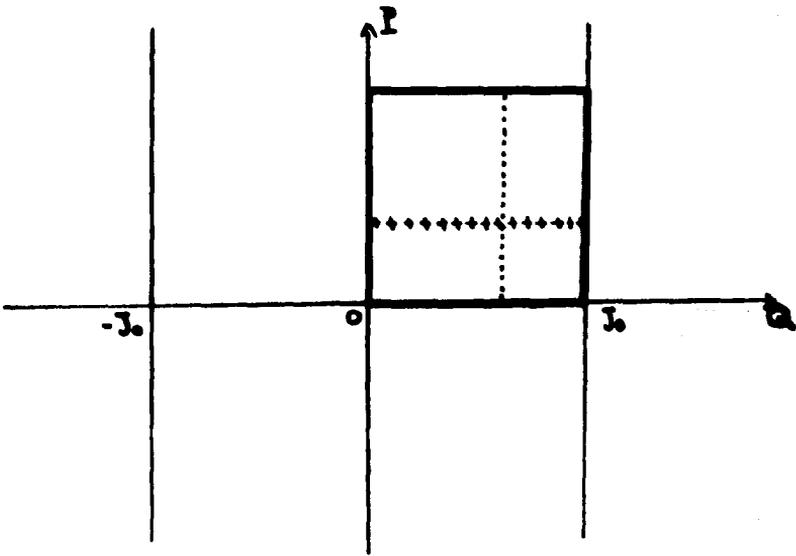
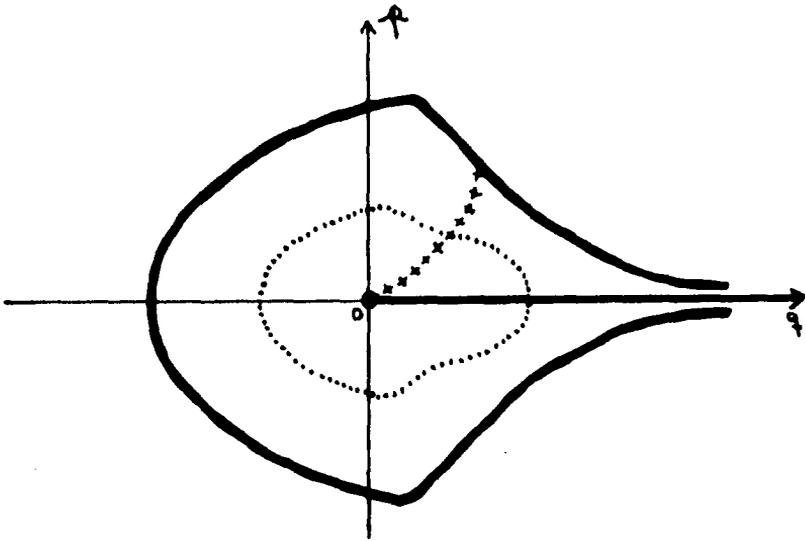


Fig. - 2

La línea $\mathcal{P} = 0$ corresponde a la línea $\mathcal{P} = 0$ del espacio fase (Q, \mathcal{P}) , ya que si $\mathcal{P} = 0$ entonces $q_-(H) = q$ y como T está dado por (II.1.7) tenemos luego $T = 0$. Por lo cual, de (II.1.8), $\Phi(q, 0) = 0$.

El rectángulo $0 \leq Q \leq J_0$, $0 \leq \mathcal{P} \leq 2\pi$ se mapea sobre toda la región interior de la línea continua, del espacio fase (q, \mathcal{P}) , que corresponde al caso cuando $J = J_0$. En la figura, las líneas punteadas y de cruces se corresponden entre sí.

Lo mismo sucede con cada rectángulo definido por $0 \leq Q \leq |J_0|$, $2\pi n \leq \mathcal{P} \leq 2\pi(n+1)$, con n entero. De manera que tenemos dos conjuntos infinitos numerables de regiones en el espacio fase (Q, \mathcal{P}) sobre los cuales se mapea toda la región de órbitas ligas del espacio (q, \mathcal{P}) ; podemos hacer un corte, señalado en la Fig. 2 por la línea gruesa, a lo largo del eje q , desde $q = 0$ hasta $q = \infty$, por el cual se alcanzan nuevas hojas en la región de órbita cerrada del espacio (q, \mathcal{P}) cuando cruzamos las líneas $\mathcal{P} = 2\pi m$, m entero, del espacio (Q, \mathcal{P}) en la región $|Q| \leq J_0$. Dichas hojas están conectadas en el punto $(q, \mathcal{P}) = (0, 0)$ que ya vimos corresponde a la línea $Q = 0$ en el espacio (Q, \mathcal{P}) .

De modo que podemos obtener la biyectividad de la transformación (II.1.12) en la región $|Q| \leq J_0$, cambiando el plano (q, \mathcal{P}) por una especie de superficie de Riemann.

La región exterior a la línea continua correspondiente a $J = J_0$, del espacio fase (q, \mathcal{P}) , se mapea completa en cada una de las regiones $Q < -J_0$ y $Q > J_0$ del espacio fase

(Q, P) . Por lo cual se requieren dos hojas en el plano (Q, P) , para obtener la biyectividad de la transformación (II.1.12) en esta zona. Una de dichas hojas del exterior se une con el primer conjunto infinito de hojas de la región interior a lo largo del límite $J = J_0$. La otra hoja exterior tiene la misma frontera, $J = J_0$, con el segundo conjunto infinito de hojas de la región interior.

Antes de tratar el problema de la determinación de la representación en Mecánica Cuántica de la transformación dada por (II.1.9,10,12), es conveniente recordar brevemente la forma alternativa de obtener la biyectividad de esta, en el terreno de la Mecánica Clásica, utilizado por Moshinsky y colaboradores.

El grupo de transformaciones definido por (II.2.2) es el llamado de ambigüedad correspondiente a la transformación (II.1.12) para $J \leq J_0$. Claramente es igual al producto semidirecto, TAI , del grupo de translaciones T_m por $2m\pi$ y el de inversiones I . Las representaciones irreducibles de este grupo están caracterizadas por dos índices: Un número real λ que varía en el intervalo $0 \leq \lambda < 1$, que etiqueta a las representaciones irreducibles del grupo T , y otro, σ , que toma dos valores ± 1 , para especificar el renglón de la representación (ref. 1;2). Estos $\lambda \sigma$, son los índices de espín de ambigüedad.

Con la ayuda de los conceptos anteriores se puede encontrar la forma de mapear sin ambigüedades cualquier función $F(Q, P)$ definida sobre el espacio fase (Q, P) ,

$$F: AC(Q, P) \longrightarrow \mathbb{R}$$

Esto se realiza si se descompone $F(Q, P)$ en sus partes irreducibles con respecto al grupo $T \wedge I$, usando técnicas de proyección (ref. 1,10) y mapeando cada una de estas partes caracterizadas por λ y σ en funciones f , definidas sobre el espacio fase (q, p) . Se puede ver esto como el mapeo que manda $F(Q, P)$ a un "espinor" $\{f_{\lambda, \sigma}(q, p)\}$, cuyas funciones componentes están caracterizadas por el índice de espín de ambigüedad, λ, σ , y el cual está definido sobre el espacio fase (q, p) , de una sola hoja.

Cuando $J > J_0$, el grupo de ambigüedad es el de inversiones I ya que (Q, P) y $(-Q, -P)$ se mapean en el mismo punto (q, p) . El espín de ambigüedad toma los valores $\sigma = \pm 1$.

Procedemos ahora a encontrar la representación en Mecánica Cuántica de la transformación canónica dada por (II.1.9,10,12).

Sección II.3.- La Representación en Mecánica Cuántica.

Para encontrar la representación en Mecánica Cuántica de la transformación canónica (II.1.9,10,12) seguimos el método empleado por Moshinsky y colaboradores en las referencias 1,2.

La representación se determina por separado en las regiones de órbitas ligadas y no ligadas.

Cuando $J < J_0$, la representación en mecánica cuántica es del tipo, (ref. 2),

$$\langle q' \lambda' \sigma' | U | Q' \rangle = \sum_{n=0}^{N-1} \psi_n(q') \delta[Q' - \sigma'(n+\lambda')\hbar] \quad (11.3.1)$$

$$0 \leq |Q'| \leq N\hbar, \quad \sigma' = \pm 1, \quad 0 \leq \lambda' \leq 1,$$

donde λ', σ' son los índices del espín de ambigüedad correspondiente al grupo de ambigüedad $T\lambda I$; el índice σ' , caracteriza al renglón, y λ la representación irreducible de dicho grupo. Las $\psi_n(q')$, son las eigenfunciones normalizadas del hamiltoniano (II.1.1), cuando $H \leq V_0$.

El número N , de estados ligados es finito, como se verá más adelante, y es igual a la mínima cota superior entera de J_0/\hbar (ver regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld), (ref. 9).

Las $\delta[Q' - \sigma'(n+\lambda')\hbar]$ son eigenfunciones del operador Q , con los eigenvalores $\sigma'(n+\lambda')$. Así (II.3.1) transforma entre sí los conjuntos de eigenfunciones de H y de Q , asignando la eigenfunción $\psi_n(q')$ de H , que tiene el eigenvalor E_n , con todas las de Q que tienen su eigenvalor en los intervalos $n\hbar \leq Q' \leq (n+\lambda')\hbar$ y $-n\hbar \geq Q' > -(n+\lambda')\hbar$.

Por lo anterior, puede interpretarse a (II.3.1) como la representación de una transformación que lleva, sin ambigüedad, elementos del espacio de Hilbert generado por $|Q'\rangle$ (las eigenfunciones de Q), a elementos del espacio de Hilbert generado por los "espinores" $|q' \lambda' \sigma'\rangle$, donde λ' y σ' son índices que etiquetan los componentes de estos "espinores".

De manera análoga, para la región $J > J_0$, la representación en Mecánica Cuántica es del tipo (ver ref. 2)

$$\begin{aligned} \langle q' \sigma' | U | Q' \rangle &= \int_{N\hbar}^{\infty} \psi_{\nu}(q') \delta(Q' - \sigma'\nu) d\nu \\ &= \psi_{|Q'|}(q') \delta_{\sigma', \frac{Q'}{|Q'|}}, \end{aligned} \quad (11.3.2)$$

$$N\hbar \leq Q' \leq \infty, \quad \sigma' = \pm 1,$$

donde σ' es el índice de espín ambigüedad, es decir, que caracteriza la representación irreducible del grupo ambigüedad, que en esta región es el de inversiones I . Las $\Psi_{\nu}(\mathcal{Q}')$ son las eigenfunciones de (II.1.1) para la región de espectro continuo; el índice ν está relacionado con la energía, E , por

$$\nu = J(E) - J(V_0) + N\hbar, \quad (II.3.3)$$

donde $J(E)$ está dada por (II.1.5) cuando $H = E$.

Podemos reunir las representaciones (II.3.1;2) en una sola expresión, introduciendo una variable τ' que toma valores en el intervalo

$$0 \leq \tau' \leq 1, \quad (II.3.4)$$

de manera que $\tau' = 1$ etiqueta el caso cuando $J > J_0$.

Podemos escribir

$$\langle \mathcal{Q}' \tau' \sigma' | U | \mathcal{Q}' \rangle = \begin{cases} \langle \mathcal{Q}' \lambda' \sigma' | U | \mathcal{Q}' \rangle & , \text{ si } \tau' = \lambda' \\ & 0 \leq \lambda' < 1 \\ & 0 \leq |\mathcal{Q}'| \leq (N-\mathcal{Z})\hbar \\ \langle \mathcal{Q}' \sigma' | U | \mathcal{Q}' \rangle & , \text{ si } \tau' = 1 \\ & (N-\mathcal{Z})\hbar < |\mathcal{Q}'| < \infty, \end{cases} \quad (II.3.5)$$

con \mathcal{Z} en el intervalo $0 \leq \mathcal{Z} < 1$. (El número \mathcal{Z} es determinado por el potencial que se considere).

Donde al tomar productos escalares que involucren $\mathcal{Q}' \tau' \sigma'$,

además de hacer la integración sobre \mathcal{Q}' en el intervalo

$-\infty < \mathcal{Q}' < \infty$, τ' en el intervalo $0 \leq \tau' \leq 1$ y sumar sobre

$\sigma = \pm 1$, hay que introducir la medida

$$dM(\tau) = [1 + \delta(1-\tau)] d\tau \quad (II.3.6)$$

De la completéz del conjunto de las funciones $\Psi_n(q)$,
 $\Psi_n(q)$ y a partir de las expresiones (II.3.2,3) tenemos

$$\begin{aligned} \langle Q' | U^\dagger U | Q'' \rangle &= \sum_{\sigma=\pm 1} \int_0^1 dM(\tau) \int_{-\infty}^{\infty} dq \langle q' \tau \sigma | U | Q' \rangle \langle q' \tau \sigma | U | Q'' \rangle \\ &= \delta(Q' - Q'') \end{aligned} \quad (II.3.7)$$

para la relación inversa tenemos $\| \langle q' \tau \sigma' | U U^\dagger | q'' \tau'' \sigma'' \rangle \|$

$$= \left(\begin{array}{c} \left[\sum_{n=0}^{N-1} \Psi_n(q') \Psi_n^*(q'') \right] \| \delta(\lambda' - \lambda'') \delta_{\sigma', \sigma''} \| \\ \left[\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n(q') \Psi_n^*(q'') dv \right] \| \delta_{\sigma', \sigma''} \| \end{array} \right) , \quad (II.3.8)$$

donde las expresiones entre paréntesis cuadrados, [], son los elementos de matriz de los operadores de proyección para estados de energías mayores (segundo renglón) y menores (primer renglón) que V_0 .

Así, para dar la expresión explícita de la representación (II.3.5), hay que obtener las eigenfunciones $\Psi_{\sigma}(q), \Psi_n(q)$ para el potencial de Morse.

a) Resolución del problema de Morse.

La ecuación de Schrödinger con potencial de Morse es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + V_0(1 - e^{-\alpha q})^2 \right] \psi = E \psi \quad (II.3.9)$$

$$\begin{aligned} \text{Haciendo} \quad b^2 &\equiv \frac{3mV_0}{\alpha^2 \hbar^2}, \\ \epsilon &\equiv \frac{2mE}{\alpha^2 \hbar^2}, \\ \eta &\equiv 2b e^{-\alpha q}, \end{aligned} \quad (II.3.10)$$

la ecuación (II.3.9) se escribe como:

$$\left\{ -\eta \frac{d}{d\eta} - \eta^2 \frac{d^2}{d\eta^2} + b^2 \left(1 - \frac{\eta}{2b} \right)^2 \right\} \psi = \epsilon \psi \quad (II.3.11)$$

$$\text{Con el ansatz} \quad \psi(\eta) \equiv \frac{f(\eta)}{\eta^{1/2}}, \quad (II.3.12)$$

obtenemos la ecuación diferencial

$$\left[\frac{d^2}{d\eta^2} + \frac{\frac{1}{4} - (b^2 - \epsilon)}{\eta^2} + \frac{b}{\eta} - \frac{1}{4} \right] f(\eta) = 0 \quad (II.3.13)$$

Comparando esta expresión con la ecuación (9.220.1) de la referencia 11

$$\frac{d^2 W}{dz^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{z} + \frac{\frac{1}{4} - \mu^2}{z^2} \right) W = 0,$$

cuyas soluciones son (ec. 9.220.4, ref. 11), las funciones de Whittaker $W_{\lambda, \mu}(z)$, $W_{-\lambda, \mu}(z)$ donde

$$W_{\lambda, \mu}(z) = \frac{\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} - \mu - \lambda)} M_{\lambda, \mu}(z) + \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} + \mu - \lambda)} M_{\lambda, -\mu}(z), \quad (II.3.14)$$

y (ec. 9.220.2, ref. 11).

$$M_{\lambda, \mu}(z) = z^{\mu+1/2} e^{-z/2} \Phi\left(\mu - \lambda + \frac{1}{2}, 2\mu + 1; z\right), \quad (II.3.15)$$

donde la serie

$$\Phi(\alpha, \beta; z) = 1 + \frac{\alpha}{\beta} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)} \frac{z^2}{2!} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{\beta(\beta+1)(\beta+2)} \frac{z^3}{3!} + \dots, \quad (II.3.16)$$

es conocida como función hipergeométrica degenerada (ec. 9.210.1 p. 1058, ref. 11), tenemos las identificaciones

$$\begin{aligned} \lambda &= b \\ \mu &= s \equiv (b^2 - c)^{1/2} \\ z &= 1 \end{aligned} \quad (II.3.17)$$

La solución $W_{-\lambda, \mu}(-z)$ se descarta debido a que diverge como $e^{z/2}$, cuando $\eta \rightarrow \infty$, es decir, $z \rightarrow \infty$ (ver ec. 9.227, p. 1061, ref. 11).

En la región $E < V_0$, s es real. En este caso hay que cortar la serie en (II.3.15), ya que ésta va como

$\Phi(\alpha, \beta; z) \sim e^z$, de modo que tendríamos $W_{\lambda, \mu}(z) \sim e^{z/2}$ lo cual haría diverger a $\Psi(\eta)$ para $\eta \rightarrow \infty$ es decir, para $\eta \rightarrow \infty$ (ver II.3.12 y 17). Para esto hacemos

$$\mu - \lambda + \frac{1}{2} = -n \quad (II.3.18)$$

donde n es cero ó un número natural. Por lo cual para la región del discreto tenemos las soluciones

$$\begin{aligned} f_n^b(\eta) &= A_{n,s} W_{n+b+1/2, s}(\eta) \\ &= A_{n,s} (-1)^n e^{-1/2 \eta^{3+1/2}} L_n^{2s}(\eta) \end{aligned} \quad (II.3.19)$$

donde se usó la ecuación (9.237.2 de ref. 11). $A_{n,s}$ es una constante de normalización y $L_n^{\alpha}(\eta)$ es un polinomio de Laguerre definido por (ec.8:970.1, p. 1037 ref. 11),

$$L_n^{\alpha}(x) = \frac{1}{n!} e^x x^{-\alpha} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha})$$

$$= \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n+\alpha}{n-m} \frac{x^m}{m!} \quad . \quad (\text{II.3.20})$$

Los niveles de energía están determinados por la condición (II.3.18), la cual con las identificaciones (II.3.17) se escribe

$$n = b - s - \frac{1}{2} \quad , \quad (\text{II.3.21})$$

de las expresiones (II.3.10, 21) se sigue

$$E_n = b - \frac{1}{4} - n^2 + 2(b - \frac{1}{2})n \quad (\text{II.3.22})$$

$$\text{con } n = 0, 1, 2, \dots, [b - \frac{1}{2}] \quad ,$$

donde $[b - \frac{1}{2}]$ es la parte entera del número $b - \frac{1}{2}$.

De modo que los niveles de energía se distribuyen como se muestra en la gráfica de la figura 3 .

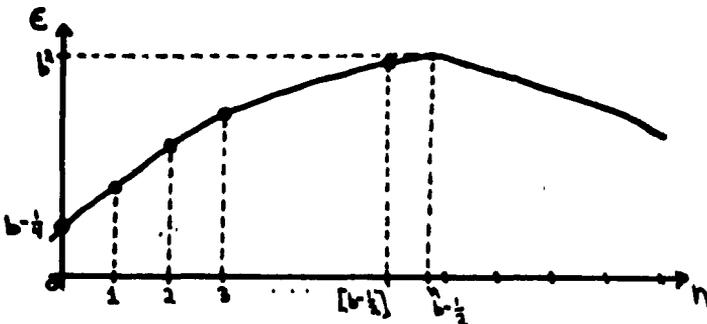


Fig.-3

tenemos que la función de onda para el discreto es

$$\Psi_n^b(\eta) = A_{n,s} e^{-\frac{1}{2}\eta^2} \eta^{2s} L_n^{2s}(\eta^2) \quad (II.3.23)$$

De la definición de l tenemos

$$d\eta = -\frac{1}{\alpha\eta} dl \quad (II.3.24)$$

por lo cual, la condición de normalización se escribe

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^{b*}(\eta) \Psi_n^b(\eta) d\eta \\ &= \frac{A_{n,s}^2}{\alpha} \int_0^{\infty} e^{-l} \eta^{2s-1} [L_n^{2s}(\eta^2)]^2 dl \quad (II.3.25) \end{aligned}$$

evaluando la integral mediante la ec. 7.414.2, ref. 11, se obtiene

$$A_{n,s} = \left[\frac{n! \alpha \Gamma(2s+1)}{\Gamma(2s)\Gamma(2s+n+1)} \right]^{1/2} \quad (II.3.26)$$

Para la región del continuo tenemos, $E > V_0$,

$$b^2 - \epsilon < 0 \quad (II.3.27)$$

por lo cual S es un número imaginario puro: $S = i\tau$

$$\text{donde } \tau \equiv (\epsilon - b^2)^{1/2} \quad (II.3.28)$$

De modo que la solución de la ecuación (II.3.13) es:

$$\begin{aligned} W_{b,i\tau}(2b e^{-\eta^2}) &= \frac{\Gamma(2i\tau)}{\Gamma(\frac{1}{2} - b + i\tau)} \cdot M_{b,i\tau}(2b e^{-\eta^2}) \\ &+ \frac{\Gamma(-2i\tau)}{\Gamma(\frac{1}{2} - b - i\tau)} \cdot M_{b,-i\tau}(2b e^{-\eta^2}) \quad (II.3.29) \end{aligned}$$

Para normalizar la función de onda en el continuo (ref. 9) consideramos la representación asintótica para $W_{\lambda, \mu}(z)$ cuando $z \rightarrow 0$, caso que corresponde a $\eta \rightarrow \infty$ (ver ecs. II.3.10 y 17). A partir de las expresiones (II.3.14, 15 y 16) obtenemos:

$$W_{\lambda, \mu}(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} \frac{\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} - \mu - \lambda)} z^{\mu + \frac{1}{2}} + \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} + \mu - \lambda)} z^{-\mu + \frac{1}{2}}, \quad (\text{II.3.30})$$

por lo cual

$$W_{b, i\tau}(2be^{-\alpha\eta}) \xrightarrow{\eta \rightarrow \infty} (2be^{-\alpha\eta})^{\frac{1}{2}} \left\{ \frac{\Gamma(-2i\tau)(2b)^{i\tau}}{\Gamma(\frac{1}{2} - b - i\tau)} \cdot e^{i\tau\alpha\eta} + \frac{\Gamma(2i\tau)(2b)^{-i\tau}}{\Gamma(\frac{1}{2} - b + i\tau)} \cdot e^{-i\tau\alpha\eta} \right\}, \quad (\text{II.3.31})$$

$$W_{b, i\tau}(2be^{-\alpha\eta}) \xrightarrow{\eta \rightarrow \infty} 2(2be^{-\alpha\eta})^{\frac{1}{2}} \left| \frac{\Gamma(2i\tau)}{\Gamma(\frac{1}{2} - b + i\tau)} \right| \cos(\theta + \varphi), \quad (\text{II.3.32})$$

donde $\theta = -\tau (\ln(2b) + \alpha\eta)$, (II.3.33)

$$\varphi = \text{Arg} \left[\frac{\Gamma(2i\tau)}{\Gamma(\frac{1}{2} - b + i\tau)} \right]. \quad (\text{II.3.34})$$

Haciendo $k \equiv \alpha (\epsilon - b^2)^{\frac{1}{2}} = \alpha\tau$, (II.3.35)

$$\delta \equiv -\varphi + \tau \ln(2b), \quad (\text{II.3.36})$$

la expresión (II.3.32) se escribe

$$W_{b,iz}(2be^{-\alpha q}) \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 2(2be^{-\alpha q})^{1/2} \left| \frac{\Gamma(2i\tau)}{\Gamma(\frac{1}{2}-b+i\tau)} \right| \cos(kq+\delta). \quad (\text{II.3.37})$$

De modo que:

$$\frac{W_{b,iz}(2be^{-\alpha q})}{(2be^{-\alpha q})^{1/2}} \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 2 \left| \frac{\Gamma(2i\tau)}{\Gamma(\frac{1}{2}-b+i\tau)} \right| \cos(kq+\delta). \quad (\text{II.3.38})$$

Para normalizar en el sentido de "delta" de la energía una función de onda del movimiento infinito en un sólo sentido ($q \rightarrow \infty$), seguimos la regla dada por Landau, (ref. 9) la cual señala que una vez representada la expresión asintótica de la función de onda como suma de dos ondas planas que se mueven en sentidos opuestos, hay que elegir el coeficiente de normalización de tal manera que la densidad de probabilidad en la onda que se mueve hacia el origen de coordenadas (ó que se aparta de este) sea igual a $\frac{1}{2\pi\hbar}$. Esto en nuestro caso se logra haciendo

$$\psi_{\tau}^b(q) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar p}} \left| \frac{\Gamma(\frac{1}{2}-b+i\tau)}{\Gamma(2i\tau)} \right| \frac{W_{b,iz}(2be^{-\alpha q})}{(2be^{-\alpha q})^{1/2}}, \quad (\text{II.3.39})$$

donde m y p son la masa y el momento respectivamente de la partícula considerada.

Recordando $p = \hbar k$, donde k está dada por (II.3.35) tenemos

$$\psi_{\tau}^b(q) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2 k}} \left| \frac{\Gamma(\frac{1}{2}-b+i\tau)}{\Gamma(2i\tau)} \right| \frac{W_{b,iz}(2be^{-\alpha q})}{(2be^{-\alpha q})^{1/2}}. \quad (\text{II.3.40})$$

A nosotros nos va a interesar conocer la función de onda $\psi_{|Q|}^b$, para el problema de Morse normalizada a una "delta" de la acción, $|Q|$, definida clásicamente por la ecuación (II.1.9), tenemos pues

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{|Q|}^b \psi_{|Q'|}^{b*} dQ = \delta(Q' - Q) \quad (II.3.41)$$

Para que esto suceda se puede mostrar que

$$\psi_{\tau(E)}^b = \frac{1}{\sqrt{\left| \frac{dE}{dQ} \right|}} \cdot \psi_{|Q|}^b \quad (II.3.42)$$

donde E se identifica con H en la expresión (II.1.9). Por lo cual

$$E = V_0 \left[1 + \left(\frac{|Q|}{J_0} - 1 \right)^2 \right] \quad (II.3.43)$$

$$\text{así } \left| \frac{dE}{dQ} \right| = \frac{\alpha^2 \tau \hbar}{m} \quad (II.3.44)$$

donde se usó el hecho de que

$$|Q| = J_0 + \tau \hbar \quad (II.3.45)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} \psi_{|Q|}^b &= \sqrt{\left| \frac{dE}{dQ} \right|} \psi_{\tau}^b \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi\hbar}} \left| \frac{\Gamma(\frac{1}{2} - b + i\tau)}{\Gamma(2i\tau)} \right| \frac{W_{b,i\tau}(2b e^{-\alpha Q})}{(2b e^{-\alpha Q})^{1/2}} \quad (II.3.46) \end{aligned}$$

Serán de interés, como más adelante se explicará, los operadores de ascenso y descenso.

Para el discreto se tienen los operadores Q_+^D y Q_-^D , ver apéndice II, tales que

$$Q_{\pm}^D \psi_n^b = \psi_{n \pm 1}^b \quad (II.3.47)$$

Se muestra en apéndice II que estos operadores son:

$$Q_+^D = \frac{(M)^+}{2s} e^{\alpha q} \left[\frac{1}{2b} \frac{d}{dq} - \frac{s}{2b} + \frac{e^{-\alpha q} b}{2s-1} \right] \quad (II.3.48a)$$

$$Q_-^D = \frac{(M)^- 8(2s+1)^2 (s+1)}{(2s+1)^2 - 4b^2} e^{\alpha q} \left[\frac{1}{2b} \frac{d}{dq} + \frac{s}{2b} - \frac{e^{-\alpha q} b}{2s+1} \right] \quad (II.3.48b)$$

en donde

$$(M)^+ = \frac{2(b-n-1)}{(2b-n-1)} \left[\frac{(2b-2n-3)(2b-n-2)(2b-2n-1)}{(n+1)} \right]^{1/2} \quad (II.3.49a)$$

$$(M)^- = \frac{(2b-n)}{2(b-n)} \left[\frac{n}{(2b-2n+1)(2b-2n-1)(2b-n-1)} \right]^{1/2} \quad (II.3.49b)$$

Para la región del continuo son de interés los operadores

Q_+^c y Q_-^c tales que

$$Q_+^c \psi_{|a|}^b = \psi_{|a|+i\hbar}^b \quad (II.3.50a)$$

$$Q_-^c \psi_{|a|}^b = \psi_{|a|-i\hbar}^b \quad (II.3.50b)$$

En el apéndice II se demuestra que

$$Q_+^c = \Omega_+ \left\{ e^{\alpha q} \frac{d}{dq} + \frac{2\alpha b^2}{(2i\epsilon - 1)} - i\epsilon \alpha e^{\alpha q} \right\}, \quad (\text{II.3.51a})$$

$$Q_-^c = \Omega_- \left\{ e^{\alpha q} \frac{d}{dq} - \frac{2\alpha b^2}{(2i\epsilon + 1)} + i\epsilon \alpha e^{\alpha q} \right\}, \quad (\text{II.3.51b})$$

donde

$$\Omega_+ = \frac{|2i\epsilon - 1| |2i\epsilon - 2| (2i\epsilon - 1)}{|i\epsilon + b + \frac{1}{2}| (i\epsilon - \frac{1}{2} + b) 2\alpha b}, \quad (\text{II.3.52a})$$

$$\Omega_- = \frac{(2i\epsilon + 1)}{|2i\epsilon| |2i\epsilon + 1| 2\alpha b}. \quad (\text{II.3.52b})$$

b) Nos ocuparemos ahora en la determinación explícita de la representación en Mecánica Cuántica de la transformación canónica clásica (II.1.9, 10 y 12). Para esto hay que elegir convenientemente las ecuaciones de M.M. En la región de espectro discreto las ecuaciones escogidas son:

$$\hat{J} \left[\hat{H}(q, \frac{p}{2\alpha}) \right] \langle q' \lambda' \sigma' | U | q \rangle = [(|q'\rangle)^\dagger]^* \langle q' \lambda' \sigma' | U | q \rangle, \quad (\text{II.3.53a})$$

$$e^{i\hat{H}(q, \frac{p}{2\alpha})} \langle q' \lambda' \sigma' | U | q \rangle = [(e^{i\hat{H}(q', \frac{p}{2\alpha})})^\dagger] \hat{Q}_c \langle q' \lambda' \sigma' | U | q \rangle, \quad (\text{II.3.53b})$$

donde \hat{P}_k es el operador de proyección para estados de acción, $|q\rangle$, menor que $(N-1)\hbar$:

$$\langle q' | \hat{P}_k | q'' \rangle = \sum_{n=0}^{M-2} \psi_n^b(q') \psi_n^{b*}(q'') \quad (II.3.54)$$

Las ecs. (II.3.53a y b) junto con las condiciones de unitariedad

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle \lambda' \sigma' q' | U | q'' \rangle dQ' \langle q' | U^\dagger | \lambda'' \sigma'' q'' \rangle = \delta(q' - q'') \delta(\lambda' - \lambda'') \delta_{\sigma', \sigma''} \quad (II.3.55a)$$

$$\sum_{\sigma''=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda'' \int_{-\infty}^{\infty} \langle q' | U^\dagger | \lambda'' \sigma'' q'' \rangle dq'' \langle q'' | \lambda' \sigma' | U | q' \rangle = \delta(Q' - Q'') \quad (II.3.55b)$$

determinan la representación hasta una fase.

Encontrar la solución a la ecuación (II.3.53a) es equivalente a resolver la ecuación de Schrödinger con el potencial de Morse, ec. (II.3.9), es decir que

$$\langle q' | \lambda' \sigma' | U | q' \rangle \sim \psi_n^b(q') \quad (II.3.56)$$

en donde las ψ_n^b son las funciones de onda en el discreto para el potencial de Morse, dadas por la expresión (II.3.23).

Consideremos ahora la segunda ecuación de M.M. (expresión (II.3.53b)). El operador hiperdiferencial que aparece en el miembro derecho tiene el siguiente efecto:

$$\begin{aligned} \left[\left(e^{\frac{\partial}{\partial Q}} \right)^\dagger \right]^* \langle q' | \lambda' \sigma' | U | q' \rangle &= e^{\frac{\partial}{\partial Q} \hbar} \frac{d}{dq} \langle q' | \lambda' \sigma' | U | q' \rangle \\ &= \langle q' | \lambda' \sigma' | U | q' + \frac{\partial}{\partial Q} \hbar \rangle \quad (II.3.57) \end{aligned}$$

Esto es debido al hecho de que

$$e^{\frac{d}{dx}\alpha} [g(x)] = g(x+\alpha) \quad . \quad (II.3.58)$$

Es decir que el efecto de dicho operador es el de subir la variable de acción de $|Q|$ a $|Q|+\hbar$.

La consideración de (II.3.57) y del hecho de que

$$\hat{J} \psi_n^b = |Q| \psi_n^b \quad , \quad (II.3.59)$$

nos lleva a suponer que el operador del miembro izquierdo de la ecuación (II.3.53b) es esencialmente el operador de ascenso,

Q_+^D , dado por (II.3.48a). Esta conjetura resulta conveniente ya que la cuantización de la expresión (II.3.53b) resulta ambigua.

En efecto, si consideramos la forma asintótica de Q_+^D en el límite cuando $b-n \gg 1$ y $n \gg 1$, tenemos de las ecs. (II.3.48a y 49a)

$$\begin{aligned} Q_+^D &\longrightarrow \frac{-2(b-n)}{\sqrt{n(2b-n)}} \left[-\frac{(-i)(-i)}{2b} e^{\frac{d}{dx}} - \frac{(b-n)}{2b} e^{\frac{d}{dx}} + \frac{b}{2(b-n)} \right] \\ &\longrightarrow \frac{2(b-n)}{\sqrt{n(2b-n)}} \left[\frac{i}{2b} \hat{p} + \frac{(b-n)}{2b} e^{\frac{d}{dx}} - \frac{b}{2(b-n)} \right] , \quad (II.3.60) \end{aligned}$$

en donde se tomaron unidades tales que $\alpha=1$, $\hbar=1$. Por otra parte, la expresión para el operador que aparece en el miembro izquierdo de la ecuación (II.3.53b), se escribe, a partir de la ecuación (II.1.10b), como

$$\hat{\Delta} = e^{i\hat{Q}[\hat{q}', \frac{d}{d\hat{q}'}]} \\ = \left\{ e^{\hat{q}' \frac{(\hat{H}-V_0)}{\sqrt{\hat{H}V_0}} + \sqrt{\frac{V_0}{\hat{H}}} - i e^{\hat{q}' \hat{p}} \sqrt{\frac{V_0-\hat{H}}{2V_0\hat{H}}}} \right\}, \quad (\text{II.3.61})$$

donde las unidades son tales que $\alpha=1$, $\hbar=1$, $m=1$.
considerando el límite semiclásico de este operador, y usando las relaciones

$$b = \sqrt{2V_0}, \quad 2E = b - \frac{1}{4} - n^2 + 2(b - \frac{1}{2})n, \quad (\text{II.3.62})$$

cuando $n \gg 1$ y $2E \approx -n^2 + 2bn$, obtenemos

$$\hat{\Delta} \approx -\frac{(n-b)^2}{b\sqrt{(2b-n)n}} e^{\hat{q}'} + \frac{b}{\sqrt{(2b-n)n}} - \frac{i(n-b)}{b\sqrt{(2b-n)n}} e^{\hat{q}' \hat{p}} \\ \approx \frac{2(b-n)}{\sqrt{n(2b-n)}} \left[-\frac{(b-n)}{2b} e^{\hat{q}'} + \frac{b}{2(b-n)} + \frac{i e^{\hat{q}' \hat{p}}}{2b} \hat{p} \right], \quad (\text{II.3.63})$$

expresión idéntica a (II.3.60). Además de (II.3.54) tenemos que la aplicación

$$\left[\left(e^{i\hat{q}' \hat{p}} \right)^{\dagger} \right]^* \hat{Q}_- \psi_{n-1}^b = 0, \quad (\text{II.3.64})$$

tiene el mismo efecto que Q_+ .

Así, la segunda ecuación de M.M., (II.3.53b), es una identidad, por lo cual la representación en mecánica cuántica, (II.1.9,10,12) está dada por la ecuación (II.3.1)

$$\langle \hat{q}' \lambda' \sigma' | U | Q' \rangle = \sum_{n=0}^{N-1} \psi_n^b(\hat{q}') \delta[Q' - \sigma'(n+\lambda)'], \quad (\text{II.3.1})$$

donde las ψ_n^b están definidas por la expresión (II.3.23) y $N-1$ es la cota inferior entera máxima del número $b^{-\frac{1}{2}}$.

Para la región de espectro continuo las ecuaciones de M.M. son

$$\hat{J}[\hat{H}(q, \frac{h}{2} \frac{\partial}{\partial q})] \langle q' \sigma' | U | q \rangle = [|q' \rangle]^* \langle q' \sigma' | U | q \rangle, \quad (\text{II.3.65a})$$

$$e^{-\hat{K}[q, \frac{h}{2} \frac{\partial}{\partial q}]} \langle q' \sigma' | U | q \rangle = [(e^{-\hat{K}_1 \bar{E}})^*] \hat{P} \langle q' \sigma' | U | q \rangle, \quad (\text{II.3.65b})$$

donde \hat{P} es el operador de proyección para estados de acción $|q|$, mayor que $(N-1) \frac{h}{2}$:

$$\langle q' | \hat{P} | q'' \rangle = \int_{N\frac{h}{2}}^{\infty} \psi_{|q'|}^b(q') \psi_{|q''|}^b(q'') d|q|. \quad (\text{II.3.66})$$

De nuevo, la primera ecuación de M.M., expresión (II.3.65a), es equivalente a la de Schrödinger con potencial de Morse. Por lo cual

$$\langle q' \sigma' | U | q \rangle \sim \psi_{|q'|}^b, \quad (\text{II.3.67})$$

donde $\psi_{|q|}^b$ es la función de onda en la región del espectro continuo, dada por la expresión (II.3.46).

Consideremos ahora el efecto del operador hiperdiferencial que aparece en el miembro derecho de la segunda ecuación de M.M.

$$\begin{aligned} \left[\left(e^{-\frac{Q'}{|\dot{Q}'|} \hat{P}} \right)^+ \right]^* \langle \dot{q}' \sigma' | U | \dot{Q}' \rangle &= e^{-\frac{Q'}{|\dot{Q}'|} i \hbar \frac{d}{dQ'}} \langle \dot{q}' \sigma' | U | \dot{Q}' \rangle \\ &= \langle \dot{q}' \sigma' | U | \dot{Q}' - \frac{Q'}{|\dot{Q}'|} i \hbar \rangle \end{aligned} \quad (II.3.68)$$

Así, de (II.3.50b, 67 y 68) tenemos que el operador del miembro derecho de la ecuación (II.3.65b) es esencialmente el de descenso Q_-^c , dado por la expresión (II.3.51b), ya que "baja" la variable de acción $|Q|$ a $|Q| - i\hbar$.

Consideremos el límite clásico, de Q_-^c :

$$Q_-^c \xrightarrow[\hbar \gg 1]{\epsilon \gg 1} \frac{\alpha \hbar}{4(E-V_0)(2mV_0)^{1/2}} \left\{ (E-V_0) e^{\alpha q} + V_0 + (E-V_0)^{1/2} \frac{e^{\alpha q} \hat{p}}{\sqrt{2m}} \right\}. \quad (II.3.69)$$

Este límite difiere del límite clásico para el operador $e^{-\frac{Q'}{|\dot{Q}'|} \hat{P}}$ ver ec. (II.1.10b),

$$e^{-\frac{Q'}{|\dot{Q}'|} \hat{P}} = \frac{1}{\sqrt{4mV_0}} \left[(E-V_0) e^{\alpha q} + V_0 + \frac{(E-V_0)^{1/2}}{\sqrt{2m}} \hat{p} e^{\alpha q} \right], \quad (II.3.70)$$

por un factor que es función de la energía, H .

A causa del logaritmo en la ecuación (II.1.10b), la omisión de dicho factor nos da lugar a otra transformación clásica que difiere de la original por un sumando que depende únicamente de la acción:

$$T' : \begin{cases} |Q| = \int [H(q, p)] & (II.3.71a) \\ \frac{Q}{|\dot{Q}|} P = \Phi'(q, p) = \Phi(q, p) + \ln[\chi(|Q|)], & (II.3.71b) \end{cases}$$

donde

$$\chi(|Q(H)|) = \ln(H - V_0) - \frac{1}{2} \ln(H) - \ln\left(\frac{\alpha \hbar}{4(2m)^{1/2}}\right), \quad (\text{II.3.72})$$

y recordando que

$$|Q| = J_0 + J_0 \left[\frac{H}{V_0} - 1 \right]^{1/2},$$

donde $J_0 = \frac{(2mV_0)^{1/2}}{\alpha}$, tenemos

$$\frac{2m}{\alpha^2} (H - V_0) = (|Q| - J_0)^2, \quad (\text{II.3.74})$$

$$\frac{(2m)^{1/2}}{\alpha} H^{1/2} = \left[(|Q| - J_0)^2 + J_0^2 \right]^{1/2}, \quad (\text{II.3.75})$$

de modo que

$$\begin{aligned} \chi(|Q|) &= 2 \ln\{|Q| - J_0\} - \frac{1}{2} \ln\{(|Q| - J_0)^2 + J_0^2\} \\ &\quad - \ln\left(\frac{\hbar}{4}\right) \end{aligned} \quad (\text{II.3.76})$$

$$y \int_{J_0}^{|Q|} \chi(|Q'|) d|Q'| =$$

$$\begin{aligned} &(|Q| - J_0) \left[2 \ln(|Q| - J_0) - \frac{1}{2} \ln(|Q|^2 + 2J_0[|Q| - J_0]) - 1 - \ln\left(\frac{\hbar}{4}\right) \right] \\ &- J_0 \left[\text{Arctg}\left(\frac{|Q| - J_0}{J_0}\right) - n\pi \right] \end{aligned} \quad (\text{II.3.77})$$

La transformación T^1 se puede escribir en la forma implícita

$$|Q\rangle = J[H(q, p)] \quad , \quad (II.3.78a)$$

$$e^{-\frac{q}{i\hbar}P} = \psi^1(q, p) \quad , \quad (II.3.78b)$$

cuyas ecuaciones de M.M. son

$$\hat{J}\langle q' \sigma' | U(T) | Q \rangle = [(|Q\rangle)^{\dagger}]^* \langle q' \sigma' | U(T) | Q' \rangle \quad , \quad (II.3.79a)$$

$$\begin{aligned} Q^c \langle q' \sigma' | U(T) | Q \rangle &= [(e^{-\frac{q}{i\hbar}P})^{\dagger}]^* \langle q' \sigma' | U(T) | Q' \rangle \\ &= \langle q' \sigma' | U(T) | Q' - \frac{q}{i\hbar} i\hbar \rangle \quad . \quad (II.3.79b) \end{aligned}$$

Por la definición del operador de "descenso" Q^c , se tiene que la representación dada por (II.3.66) cumple con estas ecuaciones.

Usando las ecuaciones (2.8) y (2.3) de la ref. 2, se observa que se necesita un factor de fase del tipo $\exp\left\{\frac{i\hbar}{2} \int_{J_0}^{J_1} \chi(|Q|) d|Q|\right\}$ para obtener una representación de la transformación original (ec. II.1.9, 10 y 12).

Usando (II.3.77) se obtiene explícitamente

$$\begin{aligned} \langle q' \sigma' | U | Q \rangle &= \langle q' \sigma' | U(T) | Q \rangle \exp\left\{\frac{i\hbar}{2} \int_{J_0}^{J_1} \chi(|Q|) d|Q|\right\} \\ &= \psi_{|Q|}^1(q) \delta_{\sigma', \frac{q}{i\hbar}} \exp\left\{\frac{i\hbar}{2} \left[(|Q| - J_0) \left[2 \ln(|Q| - J_0) - \frac{1}{2} \ln(|Q|^2 + 2J_0(|Q| - J_0)) - 1 - \ln\left(\frac{q}{i\hbar}\right) \right] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - J_0 \left[\ln \left(\frac{|Q| - J_0}{J_0} \right) - \pi \right] \right] \right\} \quad . \quad (II.3.80) \end{aligned}$$

Por lo tanto, para la región del continuo, la representación en mecánica cuántica de la transformación canónica clásica (II.1.9,10 y 12) está dada por la expresión (II.3.2)

$$\begin{aligned} \langle \sigma' | U | \sigma \rangle &= \int_{(N-\sigma)}^{\infty} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{\sigma'}^{|\sigma|} \chi(|\alpha|) d|\alpha|\right\} \psi_{\nu}^b(\sigma') \delta(\sigma' - \sigma' \nu) d\nu \\ &= \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{\sigma'}^{|\sigma|} \chi(|\alpha|) d|\alpha|\right\} \psi_{\nu}^b(\sigma') \delta_{\sigma', \frac{\sigma'}{|\sigma|}} \end{aligned} \quad (II.3.81)$$

donde las $\psi_{|\alpha|}^b$ son las funciones de onda en el continuo, expresión (II.3.46), para el potencial de Morse; N es la cota superior entera mínima del número $b - \frac{1}{2}$ y $\sigma = \pm 1$, es el espín de ambigüedad correspondiente a las representaciones irreducibles del grupo de ambigüedad que en este caso es el de inversiones, I .

Escribiendo la representación sintéticamente, a la manera de la expresión (II.3.5), tenemos

$$\begin{aligned} \langle \sigma' | U | \sigma \rangle &= \sum_{n=0}^{N-1} A_n \exp\left\{-b e^{-\sigma'}\right\} (2b e^{-\sigma'})^{N-n-\frac{1}{2}} L_n(2b e^{-\sigma'}) \delta(\sigma' - \sigma' (n+\frac{1}{2})) \\ &= \begin{cases} \frac{\sqrt{\sigma}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left| \frac{\Gamma(\frac{1}{2} - b + i\sigma)}{\Gamma(2i\sigma)} \right| \frac{W_{b, i\sigma}(2b e^{-\sigma'})}{(2b e^{-\sigma'})^{1/2}} \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{\sigma'}^{|\sigma|} \chi(|\alpha|) d|\alpha|\right\} \left\{ -\ln(|\sigma|^2 + 2J_0[\sigma_0 - |\sigma|]) - 1 - \ln\left(\frac{\sigma}{\hbar}\right) - J_0 \left[\ln \left(\frac{|\sigma| - J_0}{J_0} \right) - n\pi \right] \right\} \\ \text{si } \sigma' = \lambda, 0 \leq \lambda < 1, 0 \leq |\sigma| \leq (N - \frac{1}{2} + P)\hbar \\ \text{si } \sigma' = 1, (N - \frac{1}{2} + P)\hbar \leq |\sigma| < \infty, \end{cases} \end{aligned} \quad (II.3.82)$$

donde $S = b - n - \frac{1}{2}$, $A_{n,s}$ está dada por la expresión (II.3.26), ρ es tal que $J_0 = b\hbar = (N - \frac{1}{2} + \rho)$ y $0 \leq \rho < \frac{1}{2}$ (ver regla de Bohr - Sommerfeld, p. 28).

La expresión II.3.82 es el resultado final.

CONCLUSIONES

En la primera parte se muestra la manera en que un problema complicado, de transformación canónica, se puede descomponer en transformaciones lineales y puntuales. Pudiéndose de este modo obtener las representaciones cuánticas de éstas por separado para luego reunir las y lograr la representación de la transformación completa. el problema de encontrar la representación en mecánica cuántica de cualquier transformación que se pueda aproximar por una sucesión de transformaciones puntuales y lineales queda resuelto por el método ejemplificado. Conjeturamos que esta aproximación siempre se puede hacer.

En la segunda parte al usar los métodos de ref.1,2,6,7,8 para el problema de Morse, se tuvieron que formular con cuidado los operadores cuánticos en las ecuaciones de M.M. implícitas, para poder usar trucos como el de las ecs. 2.8 y 2.3 de ref. 2, para obtener la fase de la representación.

APENDICE I

La representación (I.2.8) es en efecto unitaria:

$$\begin{aligned} \Pi &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \lambda' q' | U | q' \rangle \langle q'' | U^\dagger | q''' \lambda''' \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d q'' \left\{ \delta(\text{Arctan}(q') - q'') \sqrt{\frac{1}{1+q'^2}} e^{i \lambda' (\text{Arctan}(q') - q'')} \langle q'' | U^\dagger | q''' \lambda''' \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.1.1})$$

utilizando el mismo argumento que para la expresión (I.2.10),

tenemos:

$$\begin{aligned} \Pi &= \frac{1}{\sqrt{1+q'^2}} e^{i \lambda' \text{Arctan}(q')} \int_{-\pi}^{\pi} d \bar{q}'' \left[\delta(\text{Arctan}(q') - \bar{q}'') e^{-i \lambda' \bar{q}''} \right. \\ &\quad \left. \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i \lambda' 2 \pi n} \langle \bar{q}'' + 2 \pi n | U^\dagger | q''' \lambda''' \rangle \right], \end{aligned} \quad (\text{A.1.2})$$

pero

$$\langle \bar{q}'' + 2 \pi n | U^\dagger | q''' \lambda''' \rangle = \delta(\text{Arctan}(q''') - \bar{q}'') \sqrt{\frac{1}{1+q'''^2}} e^{-i \lambda''' (\text{Arctan}(q''') - \bar{q}'')} \quad (\text{A.1.3})$$

por lo cual

$$\begin{aligned} \Pi &= \frac{1}{\sqrt{1+q'^2}} e^{i \lambda' \text{Arctan}(q')} \int_{-\pi}^{\pi} d \bar{q}'' \left[\delta(\text{Arctan}(q') - \bar{q}'') e^{-i \lambda' \bar{q}''} \right. \\ &\quad \left. \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i \lambda' 2 \pi n} \delta(\text{Arctan}(q''') - \bar{q}'' - 2 \pi n) \sqrt{\frac{1}{1+q'''^2}} e^{-i \lambda''' (\text{Arctan}(q''') - \bar{q}'' - 2 \pi n)} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.1.4})$$

Integramos

$$\begin{aligned} \Pi &= \frac{1}{\sqrt{1+q'^2}} e^{i \lambda' \text{Arctan}(q')} \left[e^{-i \lambda' \text{Arctan}(q')} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i \lambda' 2 \pi n} \right. \\ &\quad \left. \cdot \delta(\text{Arctan}(q''') - \text{Arctan}(q')) \cdot \sqrt{\frac{1}{1+q'''^2}} e^{i \lambda''' (\text{Arctan}(q''') - \text{Arctan}(q'))} \cdot e^{i \lambda' 2 \pi n} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+q'^2}} \sqrt{\frac{1}{1+q'''^2}} \delta(\text{Arctan}(q''') - \text{Arctan}(q')) \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i 2 \pi n (\lambda' - \lambda''')} \quad (\text{A.1.5}) \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\text{II} = \delta(q'' - q') \delta(\lambda'' - \lambda'') \quad (\text{A.I.6})$$

Por otro lado

$$\begin{aligned} \text{III} &= \int_0^1 \int_{-\infty}^{\infty} \langle q'' | U^\dagger | q''' \lambda''' \rangle dq''' d\lambda''' \langle q''' \lambda''' | U | q' \rangle \\ &= \int_0^1 \int_{-\infty}^{\infty} dq''' d\lambda''' \left[\delta(\text{Arctan}(q''') - q'') \sqrt{\frac{1}{1+q'''^2}} e^{-i\lambda'''(\text{Arctan}(q''') - q'')} \right. \\ &\quad \left. \cdot \delta(\text{Arctan}(q''') - q'') \sqrt{\frac{1}{1+q'''^2}} \cdot e^{i\lambda'''(\text{Arctan}(q''') - q'')} \right], \quad (\text{A.I.7}) \end{aligned}$$

haciendo

$$Y \equiv \text{Arctan}(q'''), \quad dq''' = \sec^2 Y dY,$$

obtenemos

$$\begin{aligned} \text{III} &= \int_0^1 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \delta(Y - q'') \sqrt{\frac{1}{1+\tan^2 Y}} e^{-i\lambda'''(Y - q'')} \delta(Y - q'') \sqrt{\frac{1}{1+\tan^2 Y}} e^{i\lambda'''(Y - q'')} \\ &\quad \cdot \sec^2 Y dY d\lambda''' \\ &= \int_0^1 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \delta(Y - q'') \delta(Y - q'') e^{i\lambda'''(q'' - q')} \sec^2 Y \sec^2 Y dY d\lambda''' \\ &= \int_0^1 \delta(q'' - q') e^{i\lambda'''(q'' - q')} d\lambda''' \\ &= \delta(q'' - q') \int_0^1 d\lambda''', \end{aligned}$$

por lo cual

$$\begin{aligned} \text{III} &= \int_0^1 \int_{-\infty}^{\infty} \langle q'' | U^\dagger | q''' \lambda''' \rangle dq''' d\lambda''' \langle q''' \lambda''' | U | q' \rangle \\ &= \delta(q'' - q') \end{aligned}$$

(A.I.8)

De (A.I.6 y A.I.8), se concluye la unitariedad de la representación (I.2.8)

APENDICE II

OPERADORES DE ASCENSO Y DESCENSO

Caso ligado.- Escribimos la función de onda (II.3.23), como

$$\psi_n^b(\eta) = (-1)^n A_n \eta^{-1/2} M_{b,s}(\eta) \quad , \quad (\text{A.II.1})$$

donde

$$A_n = \frac{A_n (2b-2n)_n}{n!} \quad , \quad (\text{A.II.2})$$

$$A_n = \left[\frac{(2b-2n-1)\alpha n!}{\Gamma(2b-n-1)} \right] \quad . \quad (\text{A.II.3})$$

A_n es igual a $A_{n,s}$, expresión (II.3.26), con $s = b - n - 1/2$, y se utilizaron las relaciones (II.3.15),

$$\begin{aligned} L_n^s(\eta) &= \frac{(2s+1)_n}{n!} \Phi(-n; 2s+1; \eta) \\ &= \frac{(2b-2n)_n}{n!} \Phi(-n; 2(b-n); \eta) \quad , \quad (\text{A.II.4}) \end{aligned}$$

donde $\Phi(\alpha; \gamma; z)$ es la función hipergeométrica confluyente (ver ecs. 9.220.2, 9.210.1, ref. 11), y el símbolo $(a)_n$ es el

de Pochhammer definidor por

$$(a)_n = a(a+1)\dots(a+n-1) \quad ,$$

$$(a)_0 = 0 \quad , \quad (\text{A.II.5})$$

para n entero.

Buscamos operadores Q_+^2, Q_-^2 tales

$$Q_{\pm}^2 \psi_n^b = \psi_{n\pm 1}^b \quad , \quad (\text{A.II.6})$$

es decir

$$\begin{aligned} Q_{\pm}^{\alpha} \left[\eta^{-\frac{1}{2}} M_{b,s} \right] &= (-1) \Theta^{\pm} \eta^{-\frac{1}{2}} M_{b, s \mp 1}(\eta) \\ &= (-1) \Theta^{\pm} \eta^{-\frac{1}{2}} e^{-\eta/2} \eta^{s+\frac{1}{2} \mp 1} \Phi \left((s \mp 1) - b + \frac{1}{2}; 2(s \mp 1) + 1; \eta \right), \end{aligned} \quad (\text{A. II.7})$$

donde

$$\Theta^{\pm} = \frac{A_{n \pm 1}}{A_n} \quad . \quad (\text{A. II.8})$$

Para esto consideramos la siguiente relación (ec.

9.212.3, ref. 11)

$$\begin{aligned} \Phi(\alpha-1; \gamma-2; \eta) &= \frac{1}{(\gamma-1)(\gamma-2)} \left[\alpha(\alpha-1) \Phi(\alpha+1; \gamma; \eta) + 2(\alpha-1)(\gamma-\alpha-1) \cdot \right. \\ &\quad \left. - \Phi(\alpha; \gamma; \eta) + (\gamma-\alpha)(\gamma-\alpha+1) \Phi(\alpha-1; \gamma; \eta) \right], \end{aligned} \quad (\text{A. II.9})$$

haciendo $\alpha \equiv s - b + \frac{1}{2}$, $\gamma \equiv 2s + 1$, tenemos

$$\begin{aligned} \Phi(s-b-\frac{1}{2}; 2s-1; \eta) &= \frac{1}{2s(2s-1)} \left[(s-b-\frac{1}{2})(s-b+\frac{1}{2}) \Phi(s-(b-1)+\frac{1}{2}; \right. \\ &\quad 2s+1; \eta) + 2(s-b-\frac{1}{2})(s+b-\frac{1}{2}) \Phi(s-b+\frac{1}{2}; 2s+1; \eta) + \\ &\quad \left. (s+b+\frac{1}{2})(s+b-\frac{1}{2}) \Phi(s-(b+1)+\frac{1}{2}; 2s+1; \eta) \right], \end{aligned} \quad (\text{A. II.10})$$

de (II.3.15) obtenemos

$$\begin{aligned} M_{b, s-1}(\eta) &= \frac{\eta^i}{2s(2s-1)} \left[(s-b-\frac{1}{2})(s-b+\frac{1}{2}) M_{b-1, s}(\eta) + 2(s-b-\frac{1}{2}) \cdot \right. \\ &\quad \left. (s+b-\frac{1}{2}) M_{b, s}(\eta) + (s+b+\frac{1}{2})(s+b-\frac{1}{2}) M_{b+1, s}(\eta) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A. II.11})$$

Tenemos además que

$$M_{b \pm 1, s}(\eta) = \frac{1}{s \pm b + \frac{1}{2}} \left[\eta \frac{d}{d\eta} + b \mp \frac{1}{2} \eta \right] M_{b, s}(\eta) \quad , \quad (\text{A. II. 12})$$

por lo cual (A. II. 11) se puede escribir como

$$M_{b, s-1}(\eta) = \left[\frac{1}{2s} \frac{d}{d\eta} + \frac{2s-1}{4s\eta} - \frac{b}{2s(2s-1)} \right] M_{b, s}(\eta) \quad , \quad (\text{A. II. 13})$$

Sustituyendo (A. II. 13) en (A. II. 7), considerando

á Q_+^D :

$$Q_+^D \left[\eta^{-\frac{1}{2}} M_{b, s}(\eta) \right] = -\frac{(\mathcal{H})^+}{2s} \left[\frac{d}{d\eta} + \frac{s}{\eta} - \frac{b}{2s-1} \right] \left[\eta^{-\frac{1}{2}} M_{b, s} \right] \quad ,$$

$$\therefore Q_+^D = -\frac{(\mathcal{H})^+}{2s} \left[\frac{d}{d\eta} + \frac{s}{\eta} - \frac{b}{2s-1} \right] \quad (\text{A. II. 14})$$

Consideremos ahora la expresión (ec. 9.212.2, ref. 11):

$$\begin{aligned} \Phi(\alpha+1; \gamma+2; \eta) &= \frac{\gamma(\gamma+1)}{\eta^2} \left[\Phi(\alpha+1; \gamma; \eta) - 2\Phi(\alpha; \gamma; \eta) \right. \\ &\quad \left. + \Phi(\alpha-1; \gamma; \eta) \right] \quad , \quad (\text{A. II. 15}) \end{aligned}$$

haciendo $\alpha \equiv s - b + \frac{1}{2}$, $\gamma \equiv 2s + 1$, tenemos

$$\begin{aligned} \Phi((s+1) - b + \frac{1}{2}; 2(s+1) + 1; \eta) &= \frac{2(2s+1)(s+1)}{\eta^2} \left[\Phi(s - (b-1) + \frac{1}{2}; 2s+1; \eta) \right. \\ &\quad \left. - 2\Phi(s - b + \frac{1}{2}; 2s+1; \eta) + \Phi(s - (b+1) + \frac{1}{2}; 2s+1; \eta) \right] \quad , \quad (\text{A. II. 16}) \end{aligned}$$

Como

$$M_{b,s+1}(\eta) = e^{-\eta/2} \eta^{s+3/2} \Phi((s+1)-b+1/2; 2(s+1)+1; \eta), \quad (\text{A.II.17})$$

entonces de (A.II.16)

$$M_{b,s+1}(\eta) = \frac{2(2s+1)(s+1)}{\eta} \left[M_{b-1,s}(\eta) - 2M_{b,s}(\eta) + M_{b+1,s}(\eta) \right], \quad (\text{A.II.18})$$

y mediante (A.II.12) obtenemos

$$M_{b,s+1}(\eta) = \frac{8(2s+1)(s+1)}{(2s+1)^2 - 4b^2} \left[(2s+1) \frac{d}{d\eta} - \frac{2(s+1/2)^2}{\eta} + b \right] M_{b,s}(\eta). \quad (\text{A.II.19})$$

Así, utilizando (A.II.19) y (A.II.7) para Q_-^D tenemos

$$Q_-^D = -\textcircled{H}^- \frac{8(2s+1)^2(s+1)}{(2s+1)^2 - 4b^2} \left[\frac{d}{d\eta} - \frac{s}{\eta} + \frac{b}{2s+1} \right]. \quad (\text{A.II.20})$$

Determinamos ahora \textcircled{H}^\pm . De las expresiones (A.II.2,3 y 8) obtenemos

$$\textcircled{H}^+ = \frac{2(b-n-1)}{(2b-n-1)} \left[\frac{(2b-2n-3)(2b-n-2)(2b-2n-1)}{(n+1)} \right]^{1/2}, \quad (\text{A.II.21a})$$

$$\textcircled{H}^- = \frac{(2b-n)}{2(b-n)} \left[\frac{n}{(2b-2n+1)(2b-2n-1)(2b-n-1)} \right]^{1/2}. \quad (\text{A.II.21b})$$

Recordando ahora que $\eta \equiv 2b e^{-\alpha \tau}$, tenemos

$$Q_+^D = -\frac{\textcircled{H}^+}{2s} e^{\alpha \tau} \left[-\frac{1}{2b} \frac{d}{d\tau} + \frac{s}{2b} - \frac{e^{-\alpha \tau} b}{2s-1} \right], \quad (\text{A.II.22a})$$

$$Q_-^b = -\textcircled{H} \frac{\theta(2s+1)^2(s+1)}{(2s+1)^2 - 4b^2} e^{as} \left[-\frac{1}{2b} \frac{d}{dz} - \frac{s}{2b} + \frac{e^{as} b}{2s+1} \right], \quad (\text{A.II.22b})$$

las cuales son las expresiones (II.3.48, 49), que se querían demostrar.

Caso no ligado. - La función de onda para el continuo es:

$$\Psi_{|Q|}^b(q) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi\hbar}} \left| \frac{\Gamma(\frac{1}{2} - b + iz)}{\Gamma(2iz)} \right| \frac{W_{b,iz}(2be^{-aq})}{(2be^{-aq})^{1/2}}. \quad (\text{II.3.46})$$

Buscamos operadores tales que

$$\begin{aligned} Q_{\pm}^c \Psi_{|Q|}^b &= \Psi_{|Q| \pm i\hbar}^b \\ &= B_{b, \tau \pm i} \frac{W_{b, \tau \pm i}(2be^{-aq})}{(2be^{-aq})^{1/2}}, \end{aligned} \quad (\text{A.II.23})$$

donde

$$B_{b, \tau} = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi\hbar}} \left| \frac{\Gamma(\frac{1}{2} - b + iz)}{\Gamma(2iz)} \right|. \quad (\text{A.II.24})$$

Para determinar Q_{\pm}^c utilizamos las relaciones 9.234, 3, 4, 5, ref. 11:

$$\begin{aligned} z \frac{d}{dz} W_{\lambda, \mu}(z) &= (\lambda - \frac{1}{2} z) W_{\lambda, \mu}(z) \\ &\quad - \left[\mu^2 - (\lambda - \frac{1}{2})^2 \right] W_{\lambda-1, \mu}(z) \end{aligned}, \quad (\text{A.II.25})$$

$$\begin{aligned} &\left[\left(\mu + \frac{1-z}{2} \right) W_{\lambda, \mu}(z) - z \frac{d}{dz} W_{\lambda, \mu}(z) \right] \left(\mu + \frac{1}{2} + \lambda \right) \\ &= \left[\left(\mu + \frac{1+z}{2} \right) W_{\lambda, \mu+1}(z) + z \frac{d}{dz} W_{\lambda, \mu+1}(z) \right] \left(\mu + \frac{1}{2} - \lambda \right), \end{aligned} \quad (\text{A.II.26})$$

$$\left(\frac{3}{2} + \lambda + \mu\right)\left(\frac{1}{2} + \lambda + \mu\right)z W_{\lambda, \mu}(z) = z(z + 2\mu + 1) \frac{d}{dz} W_{\lambda+1, \mu+1}(z) \\ + \left[\frac{1}{2}z^2 + (\mu - \lambda - \frac{1}{2})z + 2\mu^2 + 2\mu + \frac{1}{2}\right] W_{\lambda+1, \mu+1}(z) \quad .$$

(A. II.27)

Para obtener:

$$W_{\lambda, \mu-1}(z) = \frac{1}{\mu - \frac{1}{2} + \lambda} \left[(1-2\mu) \frac{d}{dz} + \lambda - \left\{ z(\mu-1)^2 + 2(\mu-1) + \frac{1}{2} \right\} z^{-1} \right] W_{\lambda, \mu}(z) \quad ,$$

(A. II.28)

de donde se tiene que

$$z^{-\frac{1}{2}} W_{\lambda, \mu-1}(z) = \frac{1}{\mu - \frac{1}{2} + \lambda} \left\{ (1-2\mu) \frac{d}{dz} - \frac{\mu(2\mu-1)}{z} + \lambda \right\} z^{-\frac{1}{2}} W_{\lambda, \mu}(z) \quad .$$

(A. II.29)

Así, de (A. II.23) y (A. II.29) tenemos, haciendo $z \equiv qb e^{-\alpha \tau}$,

$$\mathcal{Q}_+ \left[B_{b, \tau} \frac{W_{b, i\tau}(z)}{z^{1/2}} \right] \\ = \frac{\Omega_+}{\mu - \frac{1}{2} + \lambda} \left\{ (1-2\mu) \frac{d}{dz} - \frac{\mu(2\mu-1)}{z} + \lambda \right\} \cdot B_{b, \tau} z^{-\frac{1}{2}} W_{b, i\tau}(z) \\ = B_{b, \tau + i} \frac{W_{b, i\tau-1}(z)}{z^{1/2}} \quad ,$$

(A. II.30)

donde $\mu \equiv i\tau$, $\lambda \equiv b$. Por lo cual

$$\Omega_+ = \frac{B_{b, \tau + i}}{B_{b, \tau}} \quad ,$$

(A. II.31)

usando la definición de $B_{b,z}$, (A.II.24), se obtiene

$$\Omega_+ = \frac{|2iz-1||2iz-2|}{|iz-b-\frac{1}{2}|} \quad . \quad (A.II.32)$$

Para determinar Q_-^c usamos las relaciones (A.II.25, 26, 27), para obtener

$$\left(\frac{2^{\mu+1}}{\mu+\frac{1}{2}-\lambda} \right) \left\{ \frac{\mu}{z} - \frac{\lambda}{2^{\mu+1}} - \frac{d}{dz} \right\} \frac{W_{\lambda,\mu}(z)}{z^{1/2}} = \frac{W_{\lambda,\mu+1}(z)}{z^{1/2}} \quad . \quad (A.II.35)$$

Con las identificaciones

$$\begin{aligned} \lambda &= b, \\ \mu &= iz \\ z &= 2b e^{-\alpha\varphi}, \end{aligned} \quad , \quad (A.II.36)$$

la expresión (A.II.35) se escribe como

$$\begin{aligned} & \left(\frac{2iz+1}{iz+\frac{1}{2}-b} \right) \cdot \left\{ \frac{iz e^{\alpha\varphi}}{2b} - \frac{b}{2iz+1} + \frac{e^{\alpha\varphi}}{2b\alpha} \frac{d}{d\varphi} \right\} \frac{W_{b,iz}(2b e^{-\alpha\varphi})}{(2b e^{-\alpha\varphi})^{1/2}} \\ &= \frac{W_{b,iz+1}(2b e^{-\alpha\varphi})}{(2b e^{-\alpha\varphi})^{1/2}} \quad . \quad (A.II.37) \end{aligned}$$

Por lo cual

$$Q_-^c = \Omega_- \cdot \left\{ e^{\alpha\varphi} \frac{d}{d\varphi} - \frac{2\alpha b^2}{(2iz+1)} + iz\alpha e^{\alpha\varphi} \right\} \quad , \quad (A.II.38)$$

donde

$$\Omega_- = \frac{(z|\bar{z}+1)}{2\alpha b(i\bar{z} + \frac{1}{2} - b)} \cdot \Omega_-^* \quad , \quad (\text{A.II.39})$$

y

$$\Omega_-^* = \frac{B_{b, \bar{z}-i}}{B_{b, \bar{z}}} = \frac{|\frac{1}{2} - b + i\bar{z}|}{|z\bar{z}+1||z\bar{z}|} \quad . \quad (\text{A.II.40})$$

Con las expresiones (A.II.32, 34, 38 y 40) queda demostrado que los operadores $\mathcal{Q}_{\pm}^{\epsilon}$ están dados por (II.3.51).

REFERENCIAS

1. M. Moshinsky and T.H. Seligman, Ann. Phys. (N.Y.) 114, (1978), 243.
2. J. Deenen, M. Moshinsky and T.H. Seligman, Ann. Phys. (N.Y.) 127 (1980), 458.
3. H. Goldstein, "Classical Mechanics", Adison Wesley, Reading, Mass., 1957.
4. P.A. M. Dirac, "The Principles of Quantum Mechanics", Oxford Univ. Press, London / New York , 1947.
5. M. Moshinsky and T.H. Seligman, Ann. Phys. (N.Y.) 120 (1979), 402.
6. M. Moshinsky and T.H. Seligman, J. Phys. A12 (1979), L135.
7. P.A. Mello and M. Moshinsky, J. Math. Phys. 16 (1975), 2017.
8. L.D. Landau and E.M. Lifshitz, "Quantum Mechanics" Oxford Univ. Press, London/New York, 1959.
9. E.P. Wigner, "Group Theory", Academic Press, New York, 1959.
10. I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzik, "Tables of Integrals, Series and Products", Academic Press, New York, 1965.
11. Group Theory and its Applications in Physics-1980, Ed. Thomas H. Seligman. American Institute of Physics, New York. (1981) p. 312.