UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

# SISTEMAS CUANTICOS CON VELOCIDAD ESTOCASTICA NULA

T E S I S

Que para obtener el título de

F I S I C O

presenta

GERARDO CARMONA RUIZ

219

Deseo expresar mi agradecimiento al Dr. Luis de la Peña A. por la dirección de esta Tésis y al Dr. Tomás A. Brody por sus sugerencias.

## Introducción.

Siempre que ha sido posible observar fluctuaciones en el comportamiento de objetos estudiados por la física (el ejemplo más claro son las partículas Brownianas), ha resultado natural suponer que estas fluctuaciones obedecen a ciertas causas ocultas aveces por diferentes razones. En el caso del movimiento Browniano el postular la interacción estocástica de la partícula con el medio que le rodea, ha conducido a la explicación del fenómeno en sí, además de un conocimiento adicional del medio. El tratamiento de este problema parte de suponer válidas las ecuaciones de movimiento clásicas para una partícula introduciendo en ellas la supuesta interacción con el medio, obteniendo finalmente la ecuación de Langevin. En este problema resulta aún natural hablar de la existencia de la trayectoria, aunque esta no sea continua y se acepta de hecho que las fluctuaciones tanto de la posición de la partícula como de su velocidad se debe a la interacción de ésta con el medio subyacente. Así sí el método para tratar el problema es estadístico ello se debe a la naturaleza del problema, puesto que interviene una gran cantidad de variables.

Por otro lado y a diferencia de lo anterior ha surgido la mecánica cuántica como una teoría que sólo proporciona predicciones estadísticas. Probabilidades de que suceda tal o cual cosa sin dar cabida a preguntas como: de qué manera y porqué se llevó a cabo tal o cual fenómeno.

Existen varias interpretaciones de la formulación de la mecánica cuántica. Para la interpretación ortodoxa $|\Psi(\underline{x},t)|^2 d\underline{x}$ es la probabilidad de encontrar al microsistema dentro del intervalo $d\underline{x}$ y centrado en $\underline{x}$, cuando una medida de su posición se lleva a cabo, y no la probabilidad de que el sistema se encuentre en $d\underline{x}$. Las relaciones de incertidumbre son barreras insuperables de conocimiento impuestas por las características irreducibles e incontrolables de las mediciones. Para la interpretación estadística $\Psi$ se asocia a un conjunto de sistemas similares. Desde este punto de vista la descripción es incompleta puesto que para acontecimientos o fenómenos de sistemas individuales sólo es posible asociar probabilidades. Aquí surge la interpretación de las relaciones de incertidumbre como una consecuencia del tratamiento estadístico.

Sin embargo es necesario hacer ciertas suposiciones, que estas interpretaciones no hacen, acerca del origen de las irregularidades presentes en la teoría.

Por otro lado la formulación de la mecánica cuántica que hace Feynman parte de considerar todas las trayectorias posibles. Esto es, a grandes rasgos, considera que la amplitud de probabilidad de ir del punto $(x_1 t_1)$ a $(x_2 t_2)$ es resultado de la contribución de todas las posibles trayectorias que pasan por dichos puntos. A continuación postula la manera en que cada una de éstas contribuye. todas las trayectorias contribuyen pero en diferentes fases.. La fase de la contribución de una trayectoria dada es la Acción para dicha trayectoria en unidades de $\hbar$. Esto es

$$K(x_2t_2, x_1t_1) = \sum_{\substack{\text{sobre todas las} \\ \text{trayectorias de} \\ (x_1t_1)\text{ a }(x_2t_2)}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}$$

Acerca de esto podríamos decir que Feynman introduce la estocasticidad al tomar en cuenta todas las trayectorias posibles, solo que ha sido introducida en el nivel de amplitudes de probabilidad. Norbert Wiener(*) ha tratado el problema del movimiento Browniano con un método análogo. Pero a diferencia del método de Feynman postula una distribución Gaussiana para todas las posibles trayectorias de la partícula Browniana. Introduce la estocasticidad en el nivel de las distribuciones de probabilidad.

Es posible construir una teoría de procesos estocásticos, donde la facultad de hablar de posibles trayectorias

---

(*) Nonlinear problems in Random theory. Norbert Wiener the M.I.T. Press tenga sentido. Correspondería entonces suponer la existencia de variables ocultas que describan al sistema individual para más tarde hacer consideraciones estadísticas. El resultado final serán leyes que dan predicciones estadísticas donde las variables ocultas dispersivas no aparecen, esto es, la teoría de procesos estocásticos formulada por De la Peña recientemente aparecido en la literatura (nota pág 11).

El primer capítulo de esta tesis intenta relacionar las afirmaciones estadísticas de la mecánica cuántica y los procesos estocásticos, obteniendo como resultado la construcción formal de una probabilidad condicional, donde esta última corresponde a un proceso de Markoff.

En el segundo capítulo se expone la teoría de procesos estocásticos mencionada anteriormente, de donde es posible bajo ciertas condiciones obtener, por un lado, la ecuación de Schrödinger y el formalismo de la mecánica cuántica y por otro la teoría de movimiento Browniano.

En El tercer capítulo se trabaja con las ecuaciones de la teoría estocástica imponiendo la condición $\underline{u} = 0$ esto es velocidad estocástica nula. Esta condición es equivalente a exigir por un lado que en las ecuaciones de

Ehrenfest se sustituye la variable en lugar del valor esperado de ésta, las ecuaciones describen el movimiento del centro de masa del paquete. Por otro lado es también equivalente a aquellos casos donde la Acción es una función cuadrática, obteniendo finalmente los propagadores de Feynman para estos casos.

En este primer capítulo se muestra que si la mecánica cuántica es un proceso estocástico es posible construir una probabilidad condicional mecánico-cuántica que corresponde a un proceso de Markoff (1). Con este propósito definimos una función real $\chi(x,t)$ que está relacionada en forma simple con la densidad de probabilidad y con la función de onda. Esto es

$$\chi(x,t) = e^{R(x,t) - S(x,t)},$$

donde las funciones $R(x,t)$ y $S(x,t)$ se obtienen de la solución de la ecuación de Schroedinger,

$$\psi(x,t) = e^{R(x,t) + iS(x,t)},$$

y donde la densidad de probabilidad cuántica está dada por

$$W(x,t) = \psi^*(x,t)\psi(x,t) = e^{2R(x,t)}.$$

Se exige que $\chi(x,t)$ satisfaga una relación integral a través de la cual se define la función real $\varphi(x_1t_1; x_2t_2)$. Las definiciones de $\chi$ y $\varphi$ se verán justificadas por los resultados. Con la relación integral y la densidad de probabilidad se construye una probabilidad condicional que satisface los requisitos que definen un proceso de Markoff. Obtenemos así la relación entre la función $\varphi(x_1t_1; x_2t_2)$ y la probabilidad condicional cuántica.

Por otro lado considerando la relación entre la función $\chi(x,t)$ y la función de onda, se construye otra función $K(x_2t_2|x_1t_1)$ que tiene las mismas propiedades integrales que el propagador de Feynman. Obtenemos así la relación entre la función $\varphi$ y el propagador $K$.

---

(1) de la Peña L. y Cetto A.M. (1967) Preprint. UNAM, no publicado.

A partir del hecho que la densidad de probabilidad satisface la ecuación de Fokker-Planck y la función de onda la ecuación de Schroedinger se obtiene una ecuación diferencial para $\chi$.

Un proceso estocástico $x(t)$ es un proceso en el cual la variable $x(t)$ (que puede ser la posición o la velocidad de una partícula) no depende de una manera completamente definida de la variable independiente $t$ (tiempo), como sucede en un proceso determinístico. Obtenemos para diferentes observaciones diferentes funciones $x(t)$. Nos vemos obligados entonces a tratar con distribuciones de probabilidad.

Un proceso estocástico se describe completamente por el siguiente conjunto de distribuciones de probabilidad(2):

$W_1(xt)\,dx =$ probabilidad de encontrar a $x$ en el intervalo $(x, x+dx)$ al tiempo $t$.

$W_2(x_1t_1; x_2t_2)\,dx_1dx_2 =$ probabilidad de encontrar a $x$ en el intervalo $(x_1, x_1+dx_1)$ al tiempo $t_1$ y en $(x_2, x_2+dx_2)$ al tiempo $t_2$.

$\vdots$

$W_n(x_1t_1; x_2t_2; \ldots x_nt_n)\,dx_1dx_2\ldots dx_n =$ probabilidad de encontrar a $x$ en $(x_1, x_1+dx_1)$ al tiempo $t_1$ y de encontrar ...

Este conjunto de distribuciones debe satisfacer las condiciones

$$W_n \geq 0,$$

$$W_k(x_1t_1; \ldots x_kt_k) = \int\cdots\int dx_{k+1}\cdots dx_n\, W_n(x_1t_1; \ldots x_nt_n).$$

(2) Ming chen Wang y G.E. Uhlenbeck (1945) Rev. Mod. Phy. 17, 2, 3. Reimpreso en "Selected Papers on Noise and Stochastic Processes". edit. N. Wax.

Un proceso estocástico es puramente estocástico cuando los valores sucesivos de $x(t)$ no están relacionados. Esto es donde toda la información acerca del proceso esta contenida en la distribución $W_1$. A diferencia de este caso es posible que escista una correlación entre los valores de $x(t)$ a diferentes tiempos. El caso más simple es cuando toda la información del proceso esta contenida en la distribución $W_2$. Esto es un proceso de Markoff. Para una definición precisa es necesario introducir la noción de probabilidad condicional. Sea

$$W_2(x_1t_1;x_2t_2)\,dx_1dx_2 = W_1(x_1t_1)\,P_2(x_1t_1|x_2t_2)\,dx_1dx_2, \qquad (1)$$

donde

$P_2(x_1t_1|x_2t_2)\,dx_2 =$ probabilidad que dado $x_1$ al tiempo $t_1$ se encuentre $x$ en el intervalo $(x_2, x_2+dx_2)$ al tiempo $t_2$. $t_2 \geq t_1$.

La probabilidad condicional debe satisfacer ciertas relaciones que se siguen de las propiedades que satisfacen $W_1$ y $W_2$. Estas son

$$P_2(x_1t_1|x_2t_2) \geq 0, \qquad (2)$$

$$\int P_2(x_1t_1|x_2t_2)\,dx_2 = 1, \qquad (3)$$

$$W_1(x_2t_2) = \int W_1(x_1t_1)\,P_2(x_1t_1|x_2t_2)\,dx_1. \qquad (4)$$

De las propiedades anteriores podemos obtener la ecuación de Smoluchowski. De la ecuación (4)

$$W_1(x_2t_2) = \int_{x_1}\int_{x_0} W_2(x_0t_0;x_1t_1)\,P_2(x_1t_1|x_2t_2)\,dx_0dx_1,$$

donde $t_0$ es tal que $t_0 \leq t_1 \leq t_2$. Con ayuda de la ecuación (1) obtenemos

$$W_1(x_2t_2) = \int_{x_1}\int_{x_0} W_1(x_0t_0)\, P_2(x_0t_0|x_1t_1)\, P_2(x_1t_1|x_2t_2)\, dx_0\, dx_1.$$

Pero

$$W_1(x_2t_2) = \int_{x_0} W_1(x_0t_0)\, P_2(x_0t_0|x_2t_2)\, dx_0.$$

De donde obtenemos que

$$P_2(x_0t_0|x_2t_2) = \int P_2(x_0t_0|x_1t_1)\, P_2(x_1t_1|x_2t_2)\, dx_1, \qquad (5)$$

para todos los valores de $t_1$ tales que $t_0 \leq t_1 \leq t_2$. La ecuación (5) es la ecuación de Smoluchowski que se ha obtenido sobre la base de suponer un proceso de markoff

Con objeto de encontrar la probabilidad condicional mecanico-cuántica, podemos definir una función real $\chi(x,t)$, donde $x$ es la posición y $t$ el tiempo, cuya relación con la teoría de procesos estocásticos y la mecánica cuántica es simple. Sea

$$\chi(x,t) = \exp\{R(x,t) - S(x,t)\}, \qquad (6)$$

donde $R(x,t)$ y $S(x,t)$ las podemos conocer a través de la solución de la ecuación de Schroedinger:

$$\psi(x,t) = \exp\{R(x,t) + i\, S(x,t)\}. \qquad (7)$$

Definiremos la función real $\varphi(x_2t_2; x_1t_1)$ tal que

$$\chi(x_2t_2) = \int \chi(x_1t_1)\, \varphi(x_2t_2; x_1t_1)\, dx_1, \qquad (8)$$

para $t_1 \leq t_2$. Podemos obtener de lo anterior una propiedad que $\varphi$ debe satisfacer y de la cual obtendremos expresiones conocidas. De la ecuación (8) podemos escribir

$$\chi(x_1 t_1) = \int \chi(x_0 t_0)\, \varphi(x_1 t_1 ; x_0 t_0)\, dx_0, \qquad (8')$$

para $t_0 \leq t_1$, y

$$\chi(x_2 t_2) = \int \chi(x_0 t_0)\, \varphi(x_2 t_2 ; x_0 t_0)\, dx_0, \qquad (8'')$$

para $t_0 \leq t_2$. Sustituyendo (8') en (8) e igualando con (8'') obtenemos que

$$\varphi(x_2 t_2 ; x_0 t_0) = \int \varphi(x_2 t_2 ; x_1 t_1)\, \varphi(x_1 t_1 ; x_0 t_0)\, dx_1 \qquad (9)$$

para $t_0 \leq t_1 \leq t_2$.

El describir la mecánica cuántica como un proceso estocástico markoffiano implica la existencia de una probabilidad condicional función de las coordenadas al tiempo $t_1$ y al tiempo $t_2$, $t_1 \leq t_2$. Supondremos la existencia de una probabilidad condicional cuántica tal que

$$W_1(x_2 t_2) = \int W_1(x_1 t_1)\, P(x_1 t_1 | x_2 t_2)\, dx_1. \qquad (10)$$

Debemos entonces identificar a $W_1(xt)$ con la densidad de probabilidad cuántica. Esto es

$$W_1(x_1 t_1) = \Psi^*(x_1 t_1)\, \Psi(x_1 t_1) = \exp\{2R(x_1 t_1)\}. \qquad (11)$$

Podemos encontrar la relación entre $\chi(xt)$ y $W(xt)$ con ayuda de las ecuaciones (6) y (11).

$$\chi(x,t) = W_1(x,t)\, \exp-\{R(x,t) + S(x,t)\}. \qquad (12)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación (8) encontramos

$$W_1(x_2t_2)\exp-\{R(x_2t_2)+S(x_2t_2)\} = \int W_1(x_1t_1)\exp-\{R(x_1t_1)+S(x_1t_1)\}\cdot$$
$$\varphi(x_2t_2, x_1t_1)\, dx_1$$

de donde

$$W_1(x_2t_2) = \int W_1(x_1t_1)\left\{\exp\left[R(x_2t_2)-R(x_1t_1)+S(x_2t_2)-S(x_1t_1)\right]\cdot \varphi(x_2t_2,x_1t_1)\right\}dx_1$$

e identificando con la ecuación (10), resulta que la probabilidad condicional cuántica

$$P(x_1t_1|x_2t_2) = e^{R(x_2t_2)-R(x_1t_1)}\, e^{S(x_2t_2)-S(x_1t_1)}\, \varphi(x_2t_2|x_1t_1). \qquad (13)$$

De lo anterior y de la ecuación (9) obtenemos que la probabilidad condicional cuántica satisface la ecuación de Smoluchowski.

$$P(x_0t_0|x_2t_2) = \int P(x_0t_0|x_1t_1)\, P(x_1t_1|x_2t_2)\, dx_1.$$

Por otro lado la función de onda de un sistema cuántico en terminos de $\chi(x,t)$ es

$$\chi(x,t) = \Psi(x,t)\, \exp-\{(1+i)S(x,t)\}. \qquad (14)$$

Sustituyendo lo anterior en la ecuación (8) obtenemos

$$\psi(x_1t_2)\, e^{-(1+i)S(x_2t_2)} = \int \psi(x_1t_1)\, e^{-(1+i)S(x_1t_1)}\, \varphi(x_2t_2, x_1t_1)\, dx_1$$

$$\psi(x_2t_2) = \int \psi(x_1t_1) \left\{ e^{(1+i)[S(x_2t_2)-S(x_1t_1)]}\, \varphi(x_2t_2, x_1t_1) \right\} dx_1 .$$

La expresión entre corchetes en esta ecuación define una función $K(x_2t_2 | x_1t_1)$ con propiedades integrales idénticas a la del propagador de Feynman (3). Esto es

$$\psi(x_2t_2) = \int \psi(x_1t_1)\, K(x_2t_2 | x_1t_1)\, dx_1 , \qquad (15)$$

para $t_2 \geq t_1$, con

$$K(x_2t_2 | x_1t_1) = e^{(1+i)[S(x_2t_2)-S(x_1t_1)]}\, \varphi(x_2t_2, x_1t_1). \qquad (16)$$

Haciendo uso de las ecuaciones (8) y (15) obtenemos la propiedad de convolución del propagador.

$$K(x_2t_2 | x_1t_1) = \int K(x_2t_2 | x_1t_1)\, K(x_1t_1 | x_0t_0)\, dx_1 . \qquad (17)$$

De las ecuaciones (13) y (16) podemos encontrar la relación entre la probabilidad condicional cuántica y el propagador eliminando la función $\varphi$. Obtenemos

$$P(x_1t_1 | x_2t_2) = \frac{\psi^*(x_2t_2)}{\psi(x_1t_1)}\, K(x_2t_2 | x_1t_1) \qquad (18)$$

---

(3) Quantum Mechanics and Path Integrals. R.P. Feynman and A.R. Hibbs. Mc. Graw Hill.

Una de las condiciones que debe satisfacer la probabilidad condicional es que

$$\int P(x_1t_1|x_2t_2)\,dx_2 = 1.$$

Mediante la ecuación (18) veremos en qué condición se traduce ésta en términos del propagador.

$$\int P(x_1t_1|x_2t_2)\,dx_2 = \frac{1}{\psi^*(x_1t_1)}\int \psi^*(x_2t_2)\,K(x_2t_2|x_1t_1)\,dx_2 = 1.$$

$$\psi^*(x_1t_1) = \int \psi^*(x_2t_2)\,K(x_2t_2|x_1t_1)\,dx_2,$$

Para $t_2 \geq t_1$. Si comparamos ésta ecuación con la (15) se ve que la función $K(x_2t_2|x_1t_1)$ definida por (16) no sólo posee las propiedades integrales necesarias, sino tambien satisface la condición de Hermiticidad,

$$K(x_2t_2|x_1t_1) = K^*(x_1t_1|x_2t_2) \qquad (19)$$

que exige el tratamiento de Feynman.

Con objeto de conocer ya sea la probabilidad condicional o el propagador se obtendrá una ecuacion diferencial para la función $X(x,t)$ o, lo que es lo mismo, para $\varphi(x_2t_2,x_1t_1)$. Se ha dicho que $W_1(x,t)$ es una densidad de probabilidad y satisface entonces la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial W_1}{\partial t} + \nabla\cdot(v\,W_1) = 0, \qquad (20)$$

donde $v$ es la velocidad sistemática. De ésta ecuación es posible obtener la ecuación de Fokker-Planck (la cual se discute en el capítulo siguiente) si [4]

$$v = c - u = c - D\,\frac{\nabla W_1}{W_1},$$

donde c es la velocidad total y u la velocidad estocástica. Obtenemos

$$\frac{\partial W_1}{\partial t} + \nabla\cdot\left\{ cW_1 - D\nabla W_1 \right\} = 0.$$

Con ayuda de la ecuación (12) y sabiendo que $c = 2D\nabla(R+S)$ obtenemos para $\chi(x,t)$ la ecuación

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \chi\,\frac{\partial(R+S)}{\partial t} + D\left\{(\nabla R+\nabla S)^2 + \nabla^2 R + \nabla^2 S\right\}\chi - D\nabla^2\chi = 0 \qquad (21)$$

Por otro lado hemos supuesto que $\Psi(x,t) = \exp\{R(x,t) + iS(x,t)\}$ es solución de la ecuación de Schroedinger y a partir de ella obtenemos la ecuación que satisface la función $R+S$. De la ecuación

$$i\hbar\,\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi,$$

y haciendo $D = \hbar/2m$, obtenemos

$$\frac{\partial(R+S)}{\partial t} = D\left\{\nabla^2 R + (\nabla R)^2 - (\nabla S)^2 - \nabla^2 S - 2\nabla R\nabla S\right\} - \frac{V}{2mD}.$$

Sustituyendo la expresión en la ecuación (20) y simplificando, obtenemos

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = D\,\nabla^2\chi - 2D\left\{\nabla^2 R + (\nabla R)^2\right\}\chi + \frac{V}{2mD}\chi.$$

Pero $D = \hbar/2m$. Finalmente

$$\hbar\,\frac{\partial \chi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\chi - \frac{\hbar^2}{m}\left\{\nabla^2 R + (\nabla R)^2\right\}\chi + V\chi \qquad (22)$$

---

(4) de la Peña. (1969) Jour. Math. Phys. 10, 1620

Puesto que $\chi(x,t)$ satisface esta ecuación la función $\varphi(x_2t_2,x_1t_1)$ satisface la misma ecuación para las variables $x_2$ y $t_2$; esto es

$$\hbar \frac{\partial \varphi(x_2t_2;x_1t_1)}{\partial t_2} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\,\varphi(x_2t_2;x_1t_1) + V_{eff}\,\varphi(x_2t_2;x_1t_1). \quad (23)$$

Donde

$$V_{eff} = V - \frac{\hbar^2}{m}\left\{\nabla^2 R + (\nabla R)^2\right\},$$

es el potencial efectivo. El objeto de este capítulo ha sido mostrar de manera formal la posibilidad de construir una probabilidad condicional Markoffiana en la mecánica cuántica.

# CAPITULO II.

El objeto de este capítulo es presentar la teoría estocástica formulada por de la Peña (5). Las ideas principales para su construcción son:

a) la teoría debe ser una extensión de la mecánica newtoniana.

b) las velocidades y las fuerzas deben transformarse de acuerdo con ciertas reglas ante la inversión del tiempo.

Supondremos una partícula clásica sumergida en un medio con el que interacciona estocásticamente. Así la partícula está sujeta simultáneamente a la acción de una fuerza externa y otra de origen estocástico.

## CINEMATICA.

En mecánica clásica la velocidad y la coordenada de posición están relacionadas a través del operador derivada total con respecto al tiempo. En la teoría estocástica es necesario encontrar el operador que relacione la velocidad de la partícula con $\underline{x}(t)$ que es ahora una variable estocástica. El desplazamiento de la partícula durante el tiempo $\Delta t$ está dado por

$$\delta \underline{x}(t) = \underline{x}(t+\Delta t) - \underline{x}(t) \qquad (1)$$

Durante el intervalo $\Delta t$ ciertos parámetros físicos como la posición y la velocidad cambian bruscamente. La partícula sufre un gran número de desplazamientos individuales $\delta \underline{x}_i$ que contribuyen al desplazamiento total $\delta \underline{x}$

$$\delta \underline{x}(t) = \sum_i \delta \underline{x}_i .$$

Podemos suponer que si la partícula estuvo en $\underline{x}$ al tiempo $t$, entonces un tiempo $\Delta t$ posterior tendremos una probabilidad $w(\underline{x}, t; \delta \underline{x}, \Delta t)$ de encontrar a la partícula

---

5) de la Peña, L. (1969) Jour. Math. Phys. 10, 1620

en el punto $\underline{x}+d\underline{x}$. $W$ debe satisfacer

$$\int W(\underline{x},t;\delta\underline{x},\Delta t)\, d^3(\delta\underline{x}) = 1.$$

Los momentos de la distribución del cambio $\delta\underline{x}$ durante $\Delta t$ están dados por

$$\int (\delta\underline{x})^n W(\underline{x},t;\delta\underline{x},\Delta t)\, d^3(\delta\underline{x}) \quad ; n=1,2,\ldots$$

Supondremos que para $\Delta t\to 0$ sólo los dos primeros momentos son proporcionales a $\Delta t$ tal que los límites

$$\lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{\Delta t}\int (\delta\underline{x})\, W(\underline{x},t;\delta\underline{x},\Delta t)\, d^3(\delta\underline{x}),$$

$$\lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{\Delta t}\int (\delta\underline{x})^2 W(\underline{x},t;\delta\underline{x},\Delta t)\, d^3(\delta\underline{x}) \tag{2}$$

existen. El límite $\Delta t\to 0$ debe interpretarse en el sentido físico más que en el matemático. Esto es, $\Delta t$ tiene a un tiempo muy pequeño, tal que tenga sentido el proceso de límite, pero lo bastante grande para tener la información estocástica del medio. La suposición de que es posible encontrar $\Delta t$ tal que satisfaga este criterio es uno de los postulados fundamentales de la teoría. Por comodidad las ecuaciones (2) las escribiremos como

$$\lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{\Delta t} E\{\delta\underline{x}\} \quad ; \quad \lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{\Delta t} E\{(\delta\underline{x})^2\},$$

dando aquí un sentido físico al operador $E\{\ \}$ el cual corresponde al valor esperado sobre el espacio de configuración de la partícula.

Definimos la velocidad en $\underline{x}$ al tiempo t por

$$\underline{c}(\underline{x},t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} E\{\delta \underline{x}\}.$$

El desplazamiento total durante el intervalo de tiempo $\Delta t$ es

$$\delta \underline{x}(t) = \underline{c}\,\Delta t + \Delta \underline{x},$$

donde $\Delta \underline{x}$ es tal que

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} E\{\Delta \underline{x}\} = 0.$$

De esta manera toda la información acerca de la interacción de la partícula con el medio estocástico y con el campo externo está incluida en $\underline{c}(\underline{x},t)$

Definimos la derivada hacia adelante de la función $f(\underline{x},t)$ por

$$\mathcal{D}f(\underline{x},t) = \lim_{\Delta t \to 0} E\left\{\frac{f(\underline{x}(t+\Delta t), t+\Delta t) - f(\underline{x}(t),t)}{\Delta t}\right\}, \qquad (3)$$

en donde el proceso de pasar al límite se entiende en el sentido "físico" explicado anteriormente. Se pretende encontrar la forma explícita de $\mathcal{D}f(\underline{x},t)$ donde $\underline{x}(t)$ es un proceso estocástico. Supongamos que $f(\underline{x},t)$ admite un desarrollo en serie de Taylor alrededor del punto $(\underline{x},t)$. Se obtiene entonces que

$$f(\underline{x}(t+\Delta t), t+\Delta t) - f(\underline{x}(t),t) = \frac{\partial f(\underline{x}(t),t)}{\partial t}\Delta t +$$
$$+ \sum_i (x_i(t+\Delta t) - x_i(t)) \frac{\partial}{\partial x_i} f(\underline{x}(t),t) +$$
$$+ \frac{1}{2}\sum_{i,j} (x_i(t+\Delta t) - x_i(t))(x_j(t+\Delta t) - x_j(t)) \frac{\partial^2 f(\underline{x}(t),t)}{\partial x_i \partial x_j} + \dots \quad (4)$$

La expresión para la derivada de $f(\underline{x}(t),t)$ es entonces

$$\mathcal{D}f(\underline{x},t)=\left[\frac{\partial}{\partial t}+\sum_i{}' c_i\frac{\partial}{\partial x_i}+\sum_{i,j}{}' D_{ij}\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}+\cdots\right]f(\underline{x},t), \qquad (5)$$

donde

$$c_i=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}E\{\delta x_i\}, \qquad (6)$$

la componente $i$ de la velocidad $\underline{c}$, y

$$D_{ij}=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}E\left\{\frac{1}{2}\delta x_i\,\delta x_j\right\}, \qquad (7)$$

es el segundo momento de la distribución.

En el límite newtoniano, cuando $D_{ij}$ y todos los coeficientes de orden superior son cero, $\mathcal{D}f(\underline{x},t)$ se reduce a la derivada total con respecto del tiempo. Es justificado pensar que el medio estocástico es isotrópico en cuyo caso el coeficiente $D_{ij}=D\,\delta_{ij}$. Ya que hemos supuesto que sólo los dos primeros momentos existen (proceso de Markoff) tenemos que la ecuación (5) se transforma en

$$\mathcal{D}f(\underline{x},t)=\left[\frac{\partial}{\partial t}+\underline{c}\cdot\nabla+D\nabla^2\right]f(\underline{x},t). \qquad (8)$$

Entonces $\mathcal{D}$ será la derivada con respecto al tiempo, hacia adelante.

Definimos la operación inversión del tiempo a través de la transformación $\underline{x}\to\underline{x}$ y $t\to -t$, denotándola por $\hat{T}$. Al actuar $\hat{T}$ sobre una función de las coordenadas y el tiempo el efecto será cambiar de $f(\underline{x},t)$ a $f(\underline{x},-t)$; esta última la denotaremos por $\tilde{f}$. Esto es

$$\hat{T}f=\tilde{f} \qquad (9)$$

Los efectos de la transformación $\hat{T}$ serán deacuerdo a la dependencia funcional. La transformación de las variables cinemáticas y dinámicas se deducirán de su definición. La velocidad clásica se define como el límite cuando $\Delta t \to 0$ de $\Delta x / \Delta t$. Esta velocidad cambia de signo al aplicarle $\hat{T}$.

Suponemos que la velocidad $\underline{c}$ de la partícula puede escribirse como la suma de una velocidad sistemática $\underline{v}$ y una velocidad estocástica $\underline{u}$.

$$\underline{c} = \underline{v} + \underline{u}. \qquad (10)$$

El comportamiento de estas velocidades ante $\hat{T}$ es

$$\begin{aligned} \tilde{\underline{v}} &\equiv \hat{T}\underline{v} = -\underline{v} \\ \tilde{\underline{u}} &\equiv \hat{T}\underline{u} = \underline{u}. \end{aligned} \qquad (11)$$

En el límite newtoniano, cuando la fuerza estocástica tiende a cero, es necesario recobrar la mecánica newtoniana. El comportamiento de $\underline{u}$ ante $\hat{T}$ indica que necesariamente en dicho límite $\underline{u} = 0$, ya que $\tilde{\underline{c}} = -\underline{c}$. De lo anterior se observa que por la forma como las velocidades se transforman, estas son variables esencialmente diferentes.

Usando el operador $\hat{T}$ podemos encontrar la expresión para la derivada hacia atrás.

$$T(\mathcal{D}\tilde{f}) = \tilde{\mathcal{D}} f = \left(-\frac{\partial}{\partial t} + \tilde{\underline{c}}\cdot\nabla + \tilde{D}\nabla^2\right) f. \qquad (12)$$

$\tilde{\mathcal{D}}$ representa el negativo de la derivada hacia atrás.

Tenemos entonces que

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &= \frac{\partial}{\partial t} + \underline{c}\cdot\nabla + D\nabla^2, \\ \tilde{\mathcal{D}} &= -\frac{\partial}{\partial t} + \tilde{\underline{c}}\cdot\nabla + \tilde{D}\nabla^2. \end{aligned} \qquad (13)$$

Aplicando las ecuaciones (13) a la variable $\underline{x}$ tenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\underline{x} &= \underline{c}, \\ \tilde{\mathcal{D}}\underline{x} &= \tilde{\underline{c}}. \end{aligned} \qquad (14)$$

De esta manera se ha obtenido la relación entre la coordenada de posición y la velocidad de la partícula a través del operador $\mathcal{D}$. Podemos introducir otros operadores que relacionan la posición de la partícula con las velocidades sistemática y estocástica. De las ecuaciones (10) y (14) se obtiene

$$\underline{v} = \frac{1}{2}(\mathcal{D} - \tilde{\mathcal{D}})\underline{x} = \mathcal{D}_c \underline{x}, \qquad (15)$$

$$\underline{u} = \frac{1}{2}(\mathcal{D} + \tilde{\mathcal{D}})\underline{x} = \mathcal{D}_s \underline{x},$$

donde $\mathcal{D}_c$ y $\mathcal{D}_s$ son los operadores derivada sistemática y derivada estocástica, respectivamente. La forma explícita de estos operadores es

$$\mathcal{D}_c = \frac{1}{2}(\mathcal{D} - \tilde{\mathcal{D}}) = \frac{\partial}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla - D_- \nabla^2, \qquad (16)$$

$$\mathcal{D}_s = \frac{1}{2}(\mathcal{D} + \tilde{\mathcal{D}}) = \underline{u} \cdot \nabla + D_+ \nabla^2.$$

Aquí usamos las definiciones

$$D_+ = \frac{1}{2}(\tilde{D} + D), \qquad (17)$$

$$D_- = \frac{1}{2}(\tilde{D} - D).$$

En el límite newtoniano estas derivadas se reducen a $\mathcal{D}_s = 0$ y $\mathcal{D}_c = d/dt$.

## DINAMICA.

En la mecánica newtoniana existe una relación directa entre fuerza y aceleración, de manera que si se desea hacer una extensión de la mecánica newtoniana debemos introducir una relación análoga. Sea $\underline{f}$ la fuerza total por unidad de masa y $\underline{a}$ la aceleración. Definimos la aceleración por

$$\underline{a} = \mathcal{D}\underline{c}, \qquad (18)$$

que es la derivada hacia adelante de la velocidad $\underline{c}$.

POSTULADO.– La fuerza total (por unidad de masa) que actúa sobre la partícula es igual a la aceleración (ec. 18).

$$\underline{f} = \underline{a} \,. \qquad (19)$$

Con ayuda de las ecuaciones (10) y (15), la ecuación (18) se escribe como

$$\underline{a} = \mathcal{D}_c \underline{v} + \mathcal{D}_s \underline{u} + \mathcal{D}_c \underline{u} + \mathcal{D}_s \underline{v} \qquad (20a)$$

Podemos en general suponer que la fuerza total que actúa sobre la partícula tiene dos componentes $\underline{f}^+$ y $\underline{f}^-$ que ante la inversión del tiempo permanece invariante y cambia de signo respectivamente. Esto es

$$\underline{f} = \underline{f}^+ + \underline{f}^- ,$$

tal que

$$\hat{T} f^+ = f^+$$

$$\hat{T} f^- = -f^-$$

Consecuentemente la aceleración se comportará análogamente ante la inversión del tiempo

$$a = a^+ + a^- .$$

Observamos de la ecuación (20) que

$$\tilde{a} = \mathcal{D}_c \underline{v} + \mathcal{D}_s \underline{u} - \mathcal{D}_c \underline{u} - \mathcal{D}_s \underline{v} , \qquad (20b)$$

ya que $\mathcal{D}_c = -\tilde{\mathcal{D}}_c$ y $\mathcal{D}_s = \tilde{\mathcal{D}}_s$. ~~Para~~ De lo anterior identificamos los términos

$$\underline{a}^+ = \mathcal{D}_c \underline{v} + \mathcal{D}_s \underline{u} \qquad (21a)$$

$$a^- = \mathcal{D}_c \underline{u} + \mathcal{D}_s \underline{v} \qquad (21b)$$

En el límite newtoniano la ecuación (21a) se reduce a la segunda ley de Newton y la ecuación (21b) es cero ya que $\underline{u}$ y $D_s$ son cero. La ecuación (21a) le podemos escribir como

$$\underline{a} = \underline{a}_c + \underline{a}_s , \qquad (22)$$

donde $\underline{a}_c$ es la aceleración asociada con el cambio sistemático de la velocidad sistemática y $a_s$ es la aceleración asociada con el cambio estocástico de la velocidad estocástica. De la ecuación (21b) se observa, que los cambios sistemáticos de $\underline{u}$ y los cambios estocásticos de $\underline{v}$ están relacionados con la aceleración que invierte su signo ante $\hat{T}$. Aceleración sin análogo clásico y de origen estocástico.

Supondremos que la fuerza total sobre la partícula es una superposición de fuerzas externas e internas al sistema:

$$\underline{f}_{TOT} = \underline{f}_{ext} + \underline{f}_{int} .$$

Donde cada una en general tendrán componente sistemática y estocástica. Definimos las fuerzas internas como aquellas debidas a la interacción de la partícula con el medio. Un ejemplo claro de esta situación es el movimiento Browniano, donde tenemos una fuerza estocástica producto de la interacción de la partícula con el medio molecular en movimiento caótico. Además de esta fuerza existe otra de caracter sistemático que es la fricción debida al movimiento de la partícula en el medio; que para el caso cuántico vale cero. Cualquier otra fuerza que no sea resultado de la interacción Partícula-medio le llamaremos fuerza externa. Por simplicidad pensaremos que la fuerza externa es unicamente sistemática.

Clasificaremos ahora las fuerzas de manera diferente. Veremos cual es la transformación de la fuerza total ante la inversión del tiempo. De manera que la fuerza invariante ante $\hat{T}$: $f^{(+)}$ y la fuerza que invierte su signo ante $\hat{T}$: $f^{(-)}$, incluyan términos asociados al medio y al agente externo. En general ambas $f^{(+)}$ y $f^{(-)}$ son diferentes de cero. Es el caso de fuerzas que dependen de la velocidad.

$$\underset{\sim}{f}_{TOT} = \underset{\sim}{f}^{(+)} + \underset{\sim}{f}^{(-)}.$$

Ya que las situaciones a tratar no son tan generales para incluir $\underset{\sim}{f}^{(+)}$ y $\underset{\sim}{f}^{(-)}$ podemos imponer la condición $a = \tilde{a}$, invariancia de la aceleración y como consecuencia $f^{(-)} = 0$.

Escribiremos la fuerza $\underset{\sim}{f}^{(+)}$ en sus componentes sistemática y estocástica:

$$\underset{\sim}{f}_{TOT} = f^{(+)} = \underset{\sim}{f} + \underset{\sim}{f}_{est}. \qquad (23)$$

Por otro lado

$$\underset{\sim}{f}_{TOT} = \underset{\sim}{a} = \underset{\sim}{a}_c + \underset{\sim}{a}_s. \qquad (23a)$$

Podemos suponer que la fuerza estocástica es una superposición lineal de $\underset{\sim}{a}_s$ y $\underset{\sim}{a}_c$,

$$\underset{\sim}{f}_{est} = \lambda_1 \underset{\sim}{a}_c + \lambda_2 \underset{\sim}{a}_s, \qquad (24)$$

donde $\lambda_1$ y $\lambda_2$ son independientes del tiempo y de la posición. Si llevamos la expresión (24) al límite Newtoniano, $\underset{\sim}{f}_{est} = 0$ y $\underset{\sim}{a}_s = 0$; bajo estas condiciones y puesto que $\underset{\sim}{a}_c \neq 0$ el parametro $\lambda_1$ tiende a cero. Este hecho no garantiza que a $\lambda_1$ sea cero. Si suponemos que $\lambda_1 = 0$,

$$\underset{\sim}{f}_{est} = \lambda_2 \underset{\sim}{a}_s. \qquad (25)$$

La ecuación (23) toma la forma

$$\underset{\sim}{f}_{TOT} = \underset{\sim}{f} + \lambda_2 \underset{\sim}{a}_s . \qquad (26)$$

Con ayuda de (23a) podemos eliminar la fuerza total.

$$\underset{\sim}{f} = \underset{\sim}{a}_c + (1-\lambda_2)\underset{\sim}{a}_s .$$

Ya que $\lambda_2$ es una constante podemos escribir finalmente

$$\underset{\sim}{f} = \underset{\sim}{a}_c - \lambda \underset{\sim}{a}_s ,$$

donde $\lambda = \lambda_2 - 1$.

Las ecuaciones fundamentales serán entonces

$$\underset{\sim}{f} = \mathcal{D}_c \underset{\sim}{v} - \lambda \mathcal{D}_s \underset{\sim}{u} , \qquad (27)$$

$$\mathcal{D}_c \underset{\sim}{u} + \mathcal{D}_s \underset{\sim}{v} = 0 .$$

Y con ayuda de las ecuaciones (16) podemos escribir explícitamente las ecuaciones (27).

$$\frac{\partial \underset{\sim}{v}}{\partial t} + (\underset{\sim}{v}\cdot\nabla)\underset{\sim}{v} - D_- \nabla^2 \underset{\sim}{v} - \lambda \underset{\sim}{u}\cdot\nabla\underset{\sim}{u} - \lambda D_+ \nabla^2 \underset{\sim}{u} = \underset{\sim}{f} , \qquad (28)$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{u}}{\partial t} + (\underset{\sim}{v}\cdot\nabla)\underset{\sim}{u} + (\underset{\sim}{u}\cdot\nabla)\underset{\sim}{v} - D_- \nabla^2 \underset{\sim}{u} + D_+ \nabla^2 \underset{\sim}{v} = 0 .$$

Las dos velocidades $\underset{\sim}{v}$ y $\underset{\sim}{u}$ satisfacen un sistema de ecuaciones acopladas, esto es, no son independientes y por tanto la influencia de una sobre otra es compleja. El movimiento de una partícula que satisface las ecuaciones (28) difiere notablemente de lo que resulta en el caso Newtoniano.

Nos reduciremos a situaciones particulares. Supongamos que $D_+$ y $D_-$ dependen sólo del tiempo, que las velocidades $\underline{v}$ y $\underline{u}$ son irrotacionales y que además $\underline{f} = -\nabla V$. Con estas suposiciones las ecuaciones (28) toman la forma:

$$\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \nabla\left[\frac{1}{2}\underline{v}^2 - D_-\nabla\cdot\underline{v} - \frac{1}{2}\lambda\underline{u}^2 - \lambda D_+\nabla\cdot\underline{u}\right] = -\nabla V, \qquad (29a)$$

$$\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \nabla\left[\underline{v}\cdot\underline{u} + D_+\nabla\cdot\underline{v} - D_-\nabla\cdot\underline{u}\right] = 0. \qquad (29b)$$

## ECUACIÓN DE SCHROEDINGER.

Lo que se pretende ahora es obtener la ecuación de Schroedinger a partir de las ecuaciones (29). Se integrarán una vez las ecuaciones y bajo ciertas condiciones en los parámetros $\lambda$, $D_+$ y $D_-$ se podrán desacoplar y linearizar las ecuaciones. Debido al carácter irrotacional de $\underline{v}$ y $\underline{u}$ podemos escribirlas como

$$\underline{v} = 2D_0\nabla S, \qquad (30a)$$

$$\underline{u} = 2D_0\nabla R, \qquad (30b)$$

donde $R = R(\underline{x},t)$ y $S = S(\underline{x},t)$ son funciones reales y adimensionales de $\underline{x}$ y $t$. $D_0$ es una constante tal que

$$D_+ = D_0\eta_+,$$
$$D_- = D_0\eta_-, \qquad (31)$$

donde $\eta_+$ y $\eta_-$ son funciones del tiempo reales y adimensionales. A partir de las ecuaciones (29)

$$\frac{\partial(\underline{v}-i\underline{u})}{\partial t} + \nabla\left[\frac{1}{2}\underline{v}^2 - D_-\nabla\cdot\underline{v} - \frac{1}{2}\lambda\underline{u}^2 - D_+\lambda\nabla\cdot\underline{u} - i\underline{v}\cdot\underline{u} - iD_+\nabla\cdot\underline{v} + iD_-\nabla\cdot\underline{u}\right] = -\nabla V.$$

Y usando las ecuaciones (30) podemos integrar la ecuación anterior.

$$-2iD_0\frac{\partial(R+iS)}{\partial t}+2D_0^2\Big[(\nabla S)^2-2i\nabla S\cdot\nabla R-\lambda(\nabla R)^2-\eta_-\nabla^2 S-\eta_+\lambda\nabla^2 R+$$
$$+i\eta_-\nabla^2 R-i\eta_+\nabla^2 S\Big]=-V.$$

Si sumamos y restamos la cantidad

$$2D_0^2(\nabla R)^2+2D_0^2\left[\nabla^2(R+iS)+(\lambda-1)\eta_+\nabla^2 R\right],$$

podemos escribir

$$2iD_0\frac{\partial(R+iS)}{\partial t}=-2D_0^2\left[(\nabla R+i\nabla S)^2+\nabla^2(R+iS)\right]+$$
$$+2D_0^2\Big[\nabla^2(R+iS)-(\lambda-1)\left((\nabla R)^2+\eta_+\nabla^2 R\right)-\eta_+\nabla^2 R$$
$$-i\eta_+\nabla^2 S-\eta_-\nabla^2 S+i\eta_-\nabla^2 R\Big]+V.$$

Esto finalmente se transforma en

$$2iD_0\frac{\partial(R+iS)}{\partial t}=-2D_0^2\left[(\nabla R+i\nabla S)^2+\nabla^2(R+iS)\right]+$$
$$+2D_0^2\left[-(\lambda-1)\left((\nabla R)^2+\eta_+\nabla^2 R\right)\right]+$$
$$+2D_0^2\left[1-\eta_++i\eta_-\right]\nabla^2(R+iS)+V. \qquad (32)$$

Sea $\Psi$ una función compleja definida por

$$\Psi=\exp(R+iS). \qquad (33)$$

Se quiere ahora expresar la ecuación (32) en términos de la función $\Psi$. De la definición (33) encontramos las siguientes relaciones

$$\frac{1}{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\frac{\partial(R+iS)}{\partial t},$$

$$\frac{1}{\psi}\nabla^2\psi = (\nabla R + i\nabla S)^2 + \nabla^2(R+iS),$$

$$\nabla^2 \ln\psi = \nabla^2(R+iS).$$

Entonces la ecuación (32) se puede reescribir como

$$
\begin{aligned}
2iD_0\frac{\partial\psi}{\partial t} &= -2D_0^2\nabla^2\psi + V\psi \\
&\quad -2D_0^2(\eta_+ - 1 - i\eta_-)\psi\nabla^2\ln\psi \\
&\quad -2D_0^2(\lambda-1)\left[(\nabla R)^2 + \eta_+\nabla^2 R\right]\psi.
\end{aligned}
\tag{34}
$$

De la ecuación (33) y su complejo conjugado escribimos la derivada de R en términos de $\psi$ y $\psi^*$, esto es

$$
\begin{aligned}
(\nabla R)^2 + \eta_+\nabla^2 R &= \frac{1}{4}(\psi^{-1}\nabla\psi + \psi^{*-1}\nabla\psi^*)^2 + \frac{1}{2}\eta_+\nabla\cdot(\psi^{-1}\nabla\psi + \psi^{*-1}\nabla\psi^*), \\
&= (2D_0^2)^{-1}\left(\frac{1}{2}\underset{\sim}{u}^2 + D_+\nabla\cdot\underset{\sim}{u}\right)
\end{aligned}
$$

Donde $\underset{\sim}{u}$, evidentemente, depende de $\psi$ y de $\psi^*$. El resultado final es, pues,

$$2iD_0\frac{\partial\psi}{\partial t} = -2D_0^2\nabla^2\psi + (V + V_c + V_u)\psi, \tag{35}$$

donde

$$V_c = -2D_0^2(\eta_+ - 1 - i\eta_-)\nabla^2\ln\psi, \tag{36}$$

$$V_u = -(\lambda-1)\left(\frac{1}{2}\underset{\sim}{u}^2 + D_+\nabla\cdot\underset{\sim}{u}\right). \tag{37}$$

La ecuación (35) y su compleja conjugada están acopladas ~~~~ a través del potencial $V_u$ y debido a $V_c$ y $V_u$ no es lineal. Para conseguir una teoría lineal y desacoplar las ecuaciones es necesario hacer $V_c = V_u = 0$. Bajo la condición $V_c = 0$ se obtiene que $\eta_+ = 1$ y $\eta_- = 0$. De esta manera $D_+ = D_0$ y $D_- = 0$. De $V_u = 0$ obtenemos $\lambda = 1$. Con estos valores la ecuación (38) se reduce a :

$$2iD_0\frac{\partial\psi}{\partial t} = -2D_0^2\nabla^2\psi + V\psi, \tag{38}$$

donde V es el potencial asociado a f. La ecuación anterior puede formalmente identificarse con la ecuación de Schroedinger si $D_0 = \hbar/2m$. $D_- = 0$ implica que $D = \tilde{D}$ o sea que $D_0$ es invariante ante la inversión del tiempo.

En el límite newtoniano cuando $D = D_0 \to 0$ (en términos de $\hbar/2m$, $\hbar \to 0$ ó $m \to \infty$ pero $mV$ finita) la partícula realiza un movimiento clásico. Para $D_0 \neq 0$ el movimiento de la partícula no satisface las leyes de Newton, sino que esta gobernado por ecuaciones de naturaleza estocástica. Entonces las ecuaciones estocasticas para el caso cuántico son:

$$\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \frac{1}{2}\nabla \underline{v}^2 = -\nabla\left[V - \tfrac{1}{2}\underline{u}^2 - \frac{\hbar}{2m}\nabla\cdot\underline{u}\right], \tag{39}$$

$$\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \nabla\left[\underline{v}\cdot\underline{u} + \frac{\hbar}{2m}\nabla\cdot\underline{v}\right] = 0, \tag{40}$$

o equivalentemente la ecuación de Schroedinger, la cual es matematicamente más simple.

Se han encontrado los valores de los parámetros $\lambda$, $D_+$ y $D_-$ para el caso cuántico. Se verá que bajo otra situación el parámetro $\lambda$ toma un valor diferente, señalándonos así una diferencia en la naturaleza de la interacción.

Supongamos el caso clásico de una partícula que se mueve en un medio el cual ejerce sobre esta una fuerza viscosa $-m\beta\underline{c}$ y una fuerza estocástica de origen molecular $\underline{A}(t)$, tal que $\underline{A}(t)$ varíe mucho más rapidamente que $\underline{c}$. Sujetamos además la partícula a una fuerza externa $\underline{F}$. Este es el caso del Movimiento Browniano.

Tomaremos el caso límite cuando la aceleración de la partícula es cero. Entonces la ecuación (26) en términos de $\lambda$ es

$$\underset{\sim}{f}_{TOT} = \underset{\sim}{f} + (1+\lambda)\underset{\sim}{a}_s = 0.$$

Pero la fuerza sistemática $\underset{\sim}{f}$ y $\underset{\sim}{a}_s$ son linealmente independientes, además $\underset{\sim}{a}_s$ es diferente de cero. La ecuación anterior se satisface si $\underset{\sim}{f}=0$ y $\lambda=-1$ simultaneamente. Puesto que $\underset{\sim}{k}$ y $-m\beta\underset{\sim}{c}$ actúan sobre la partícula tenemos que

$$m\underset{\sim}{f} = \underset{\sim}{k} - m\beta\underset{\sim}{c} = 0,$$

de donde $\underset{\sim}{c} = \underset{\sim}{k}/m\beta$ y $\lambda=-1$, para el movimiento Browniano. Para obtener la ecuación de Schroedinger de este problema, en el caso partícula libre $\underset{\sim}{k}=0$, observamos que en la ecuación (35) sobrevive el potencial $V_U$ ya que $\lambda=-1$. Es claro que si $D_-=0$ el coeficiente de difusión es invariante ante la inversión temporal y si $D_+=D_0$ el potencial $V_c=0$. Obtenemos

$$2iD_0 \frac{\partial\psi}{\partial t} = -2D_0^2\nabla^2\psi + 2\left[\tfrac{1}{2}\underset{\sim}{u}^2 + D_0\nabla\cdot\underset{\sim}{u}\right]\psi,$$

para una partícula en movimiento Browniano, sin campo externo aplicado.

## Ecuación de Continuidad.

La primera integral de la ecuación (20b) puede interpretarse desde el punto de vista de la teoría estocástica derivando de ella una ecuación del tipo Fokker-Planck. Definimos la densidad de probabilidad

$$\rho = e^{2R(x,t)} = \psi^*(x,t)\,\psi(x,t) \qquad (41)$$

como es usual en mecánica cuántica. De la ecuación (30b) tenemos que

$$\underset{\sim}{u} = \nabla ( D_0 \ln \rho ) = D_0 \frac{\nabla \rho}{\rho} \qquad (42)$$

que es la velocidad osmótica obtenida por Einstein en la teoría de movimiento Browniano. Utilizando esta expresión la ecuación (29b) toma la forma:

$$2\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underset{\sim}{v} \cdot \frac{\nabla \rho}{\rho} + \eta_+ \nabla \cdot \underset{\sim}{v} - D_0 \eta_- \nabla \cdot \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right) = 0 .$$

y por la ecuación (41)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underset{\sim}{v} \cdot \nabla \rho + \eta_+ \rho \nabla \cdot \underset{\sim}{v} - D_0 \eta_- \rho \nabla \cdot \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right) = 0 .$$

Finalmente

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot ( \rho \underset{\sim}{v} ) - D_0 \eta_- \nabla^2 \rho = - \rho \left[ ( \eta_+ - 1 ) \nabla \cdot \underset{\sim}{v} + D_0 \eta_- \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)^2 \right] . \qquad (43)$$

Para el caso cuántico sabemos que $\eta_+ = 1$ y $\eta_- = 0$; con estos valores la ecuación (43) se reduce a

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot ( \underset{\sim}{v} \rho ) = 0 ,$$

donde

$$\underset{\sim}{v} \rho = - i D_0 \left[ \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right] . \qquad (44)$$

La ecuación (43) puede considerarse como la ecuación de continuidad para $\rho$, para cualquier $\eta_+(t)$ y $\eta_-(t)$. Esto justifica la identificación de $\rho$ con la densidad de probabilidad para un ensemble. Los sistemas que constituyen el ensemble están formados por partículas para las cuales el valor medio de la velocidad y de la energía son los mismos. Es posible reescribir la ecuación (43) de forma que sea posible identificarla con la ecuación de Fokker-Planck de procesos estocásticos. Usando la relación $\underline{v} = \underline{c} - \underline{u}$ y la ecuación (42) obtenemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left[ \rho \left( \underline{c} - D_0 \frac{\nabla \rho}{\rho} \right) \right] - D_0 \eta_- \nabla^2 \rho = -(\eta_+ - 1) \rho \nabla \left( \underline{c} - D_0 \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)$$

$$- D_0 \eta_- \rho \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)^2 .$$

Sucesivas transformaciones dan:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{c}) - \eta_+ D_0 \nabla^2 \rho + D_0 \eta_- \nabla^2 \rho = 2 D_0 \eta_- \nabla^2 \rho - (\eta_+ - 1) \rho \nabla \cdot \underline{c}$$

$$-(\eta_+ - 1) D_0 \rho \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)^2 - D_0 \eta_- \rho \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)^2 + \eta_- \rho \nabla \cdot \underline{c} - \eta_- \rho \nabla \cdot \underline{c} +$$

$$\eta_- D_0 \rho \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)^2 - D_0 \eta_- \rho \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)^2 .$$

Si definimos $D = D_+ - D_- = D_0 (\eta_+ - \eta_-)$ y $\eta = \frac{D}{D_0}$, entonces

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{c}) - D \nabla^2 \rho = -(\eta_+ - \eta_- - 1) \rho \left( \nabla \cdot \underline{c} + D_0 \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)^2 \right)$$

$$- 2 \eta_- \rho \left[ D_0 \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)^2 + \frac{1}{2} \nabla \cdot \underline{c} - D_0 \frac{\nabla^2 \rho}{\rho} \right] ,$$

o sea

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{c}) - D \nabla^2 \rho = -(\eta - 1) \rho \left[ \nabla \cdot \underline{c} + D_0 \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)^2 \right]$$

$$- 2 \eta_- \rho \left[ \frac{1}{2} \nabla \cdot \underline{c} - D_0 \nabla \left( \frac{\nabla \rho}{\rho} \right) \right] . \qquad (45)$$

Para el caso cuántico ($D_+ = D$, $D_- = 0$) la ec. (45) se reduce a

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla\cdot(\underline{c}\rho) + D\nabla^2\rho. \qquad (46)$$

La ecuación (46) es la ecuación de Fokker-Planck en el espacio de configuración con $\underline{c}$ y $D$ proporcionales a los primeros y segundos momentos de la distribución en $\delta x$ respectivamente. Los momentos de orden mayor divididos por $\Delta t$ son cero en el límite $\Delta t \to 0$. El hecho de incluir en el desarrollo de Taylor términos hasta de segundo orden, es equivalente a decir que todos los momentos de orden mayor de dos son proporcionales a $(\Delta t)^k$ con $k > 1$, tal que en el límite $\Delta t \to 0$ la razón de estos momentos con $\Delta t$ son cero. Es el caso de los procesos llamados Markoffianos. La ecuación (46) corresponde simultáneamente a la mecánica cuántica y a la teoría de procesos de Markoff en el espacio de configuración.

## ECUACIÓN DE ENERGÍA Y OPERADORES.

Denotaremos por $\langle A \rangle_{av}$ el promedio de A realizado sobre un ensemble de sistemas. Si $\rho$ es cero al infinito entonces el promedio sobre el ensemble de $\nabla\cdot\underline{u}$ puede exhibirse como

$$D_0 \langle \nabla\cdot\underline{u} \rangle_{av} = D_0^2 \int \rho \nabla\cdot\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right) d\underline{x}$$

$$= -D_0^2 \int \rho \left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right)^2 d\underline{x} = -\langle u^2 \rangle_{av} \qquad (47)$$

integrando por partes.

Podemos obtener la ecuación de la energía a partir de la primera integral de la ecuación (29a), esto es de

$$-2D_0\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2}\underline{v}^2 - D_-\nabla\cdot\underline{v} - \frac{1}{2}\lambda\underline{u}^2 - \lambda D_+\nabla\cdot\underline{u} + V. \qquad (48)$$

Introduciendo la ecuación (47) en el promedio sobre el ensemble de la ecuación (48), tenemos que

$$\langle -2D_0\frac{\partial S}{\partial t}\rangle_{av} = \langle \frac{1}{2}\underline{v}^2 - D_0\eta_-\nabla\cdot\underline{v} - \frac{\lambda}{2}\underline{u}^2 - D_0\lambda\eta_+\nabla\cdot\underline{u} + V\rangle_{av},$$

$$= \langle \frac{1}{2}\underline{v}^2 - D_0\eta_-\nabla\cdot\underline{v} - \frac{\lambda}{2}\underline{u}^2 + \lambda\underline{u}^2 + V\rangle_{av}.$$

Es decir

$$\langle -2D_0\frac{\partial S}{\partial t}\rangle_{av} = \langle \frac{1}{2}\underline{v}^2 + \frac{\lambda}{2}\underline{u}^2 + V - D_0\eta_-\nabla\cdot\underline{v}\rangle_{av}, \qquad (49)$$

lo que para el caso cuántico se reduce a

$$\langle -\hbar\frac{\partial S}{\partial t}\rangle_{av} = \langle \frac{1}{2}m\underline{v}^2 + \frac{1}{2}m\underline{u}^2 + U\rangle_{av}.$$

Este resultado nos dice que la energía total promedio está dada por $\langle -\hbar\partial S/\partial t\rangle_{av}$ que es igual a la energía cinética promedio $\frac{1}{2}m\langle \underline{v}^2 + \underline{u}^2\rangle_{av}$ más la energía potencial promedio $\langle U\rangle_{av}$. Se puede decir entonces que hay una componente sistemática y otra estocástica de la energía cinética. La energía total promedio está dada por

$$\epsilon = \langle -2\delta m\frac{\partial S}{\partial t}\rangle_{av}. \qquad (50)$$

Un operador lineal $\hat{A}(\underline{x})$ se dice que es Hermitiano si satisface la ecuación:

$$\int_{\Omega} \psi_1^*(\underline{x}) \left[ \hat{A}(\underline{x}) \psi_2(\underline{x}) \right] d\underline{x} = \int_{\Omega} \psi_2(\underline{x}) \left[ \hat{A}^*(\underline{x}) \psi_1^*(\underline{x}) \right] d\underline{x} \quad (51)$$

Aquí $\Omega$ es la región de definición de $\psi_1(\underline{x})$ y $\psi_2(\underline{x})$. $\psi_1$ y $\psi_2$ deben satisfacer ciertas condiciones de naturaleza muy general. Deben ser cuadráticamente integrables y finitas en $\Omega$.

A través de la propiedad de Hermiticidad podemos obtener de manera natural la conexión entre operadores y cantidades físicas medibles, esto es, identificamos el valor medio de la cantidad $A$ con el valor esperado del operador asociado a $A$.

$$\langle A \rangle_{av} = \langle A \rangle \equiv \int \psi^* A \psi \, d\underline{x} . \quad (52)$$

Aquí $\psi$ es la solución de la ecuación (38) que es la ecuación de Schroedinger. Si $\hat{A}$ es hermitiano, la ecuación (52) puede también escribirse como

$$\langle A \rangle_{av} = \int \psi \hat{A}^* \psi^* \, d\underline{x} = \langle A \rangle^*,$$

o sea

$$\langle A \rangle_{av} = \langle A \rangle = \langle A \rangle^* .$$

Aquellos operadores que representan cantidades físicas reales, deben satisfacer la propiedad de Hermiticidad.

Queremos encontrar el operador $\hat{\varepsilon}$ asociado a la energía. De observar la expresión para la energía total promedio, ecuación (50), se sugiere que el operador energía $\hat{\varepsilon} = \alpha \, \partial/\partial t$, donde $\alpha$ en general puede ser compleja. El valor esperado de $\hat{\varepsilon}$ es:

$$\langle\hat{\epsilon}\rangle = \int \psi^* \alpha \frac{\partial}{\partial t} \psi \, d\underline{x} = \alpha \langle \frac{\partial R}{\partial t} \rangle + \alpha i \langle \frac{\partial S}{\partial t} \rangle. \qquad (53)$$

Por otro lado podemos calcular $\langle \frac{\partial R}{\partial t} \rangle$ a partir de relaciones ya conocidas.

$$2\langle \frac{\partial R}{\partial t} \rangle = \int \psi^* \frac{\partial 2R}{\partial t} \psi \, d\underline{x} = \int \frac{\partial 2R}{\partial t} \, e^{2R} \, d\underline{x} = \frac{\partial}{\partial t} \int \rho \, d\underline{x}.$$

Pero

$$\int \rho \, d\underline{x} = 1.$$

Por tanto

$$\langle \frac{\partial R}{\partial t} \rangle = 0. \qquad (54)$$

Finalmente el valor esperado de $\hat{\epsilon}$ es

$$\langle\hat{\epsilon}\rangle = i\alpha \langle \frac{\partial S}{\partial t} \rangle. \qquad (55)$$

Identificando $\langle\hat{\epsilon}\rangle$ con la energía total promedio, ecuación (50),

$$\epsilon = \langle -2D_0 m \frac{\partial S}{\partial t} \rangle_{av},$$

resulta

$$\hat{\epsilon} = 2iD_0 m \frac{\partial}{\partial t}. \qquad (56)$$

El valor esperado del operador $\hat{\epsilon}$ coincide con la energía total promedio. De manera similar es posible introducir el operador asociado al momento lineal. De las ecuaciones (41) y (42) se sigue que

$$\langle \underline{u} \rangle_{av} = \int \underline{u} \rho \, d\underline{x} = D_0 \int \nabla \rho \, d\underline{x} = 0 \qquad (57)$$

Calculemos el valor esperado del operador $\nabla$.

$$\int \psi^* \nabla \psi \, d\underset{\sim}{x} = \int \psi^* (\nabla R + i \nabla S) \psi \, d\underset{\sim}{x}$$

$$= \langle \nabla R \rangle_{av} + i \langle \nabla S \rangle_{av} = i \langle \nabla S \rangle_{av} \, ,$$

pero $\underset{\sim}{v} = 2D_0 \nabla S$, de modo que

$$\int \psi^* \nabla \psi \, d\underset{\sim}{x} = i \langle \tfrac{1}{2D_0} \underset{\sim}{v} \rangle_{av} \, .$$

Finalmente tenemos que

$$\langle \underset{\sim}{v} \rangle_{av} = \int \psi^* (-2D_0 i \nabla) \psi \, d\underset{\sim}{x} = \langle -2D_0 i \nabla \rangle .$$

Que puede tambien escribirse como :

$$\langle \underset{\sim}{c} \rangle_{av} = \langle -2D_0 i \nabla \rangle .$$

El operador asociado al momento lineal debe ser tal que

$$\langle \hat{p} \rangle = \langle m \underset{\sim}{c} \rangle_{av} \, ,$$

y esta dado por

$$\hat{p} = -2iD_0 m \nabla . \qquad (50)$$

Es fácil hacer ver que los operadores $\hat{E}$ y $\hat{p}$ son hermitianos. Empezando con $\hat{E}$, sabemos que $\int \psi^* \psi \, d\underset{\sim}{x}$ es independiente del tiempo, por tanto

$$\frac{d}{dt} \int \psi^* \psi \, d\underset{\sim}{x} = 0,$$

$$\int \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) d\underset{\approx}{x} = 0,$$

$$\int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \, d\underset{\approx}{x} = \int \psi \left( -\frac{\partial}{\partial t} \right) \psi^* \, d\underset{\approx}{x}.$$

Multiplicando ambos lados por $2i\hbar_0 m$ tenemos

$$\int \psi^* \left( 2i\hbar_0 m \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi \, d\underset{\approx}{x} = \int \psi \left( -2i\hbar_0 m \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi^* d\underset{\approx}{x},$$

y de la expresión para el operador $\hat{\epsilon}$

$$\int \psi^* \hat{\epsilon} \, \psi \, d\underset{\approx}{x} = \int \psi \, \hat{\epsilon}^* \psi^* d\underset{\approx}{x}.$$

Esto establece que el operador asociado a la energía, $\hat{\epsilon}$, es hermitiano. Podemos mostrar que el operador $\hat{p}$, momento lineal es tambien hermitiano. Esto es

$$\int \psi^* \hat{p} \, \psi \, d\underset{\approx}{x} = -2i\hbar_0 m \int \psi^* \nabla \psi \, d\underset{\approx}{x}.$$

Integrando por partes

$$\int \psi^* \hat{p} \, \psi \, d\underset{\approx}{x} = -2i\hbar_0 m \left\{ \psi^* \psi \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int \psi \nabla \psi^* d\underset{\approx}{x} \right\}.$$

Imponiendo ahora la condición que la probabilidad de encontrar a la partícula en $\pm\infty$ es cero, obtenemos

$$\int \psi^* \hat{p} \, \psi \, d\underset{\approx}{x} = \int \psi \left( 2i\hbar_0 m \nabla \right) \psi^* d\underset{\approx}{x}$$

$$\int \psi^* \hat{p} \, \psi \, d\underset{\approx}{x} = \int \psi \, \hat{p}^* \psi^* d\underset{\approx}{x}.$$

Ahora en términos de estos operadores podemos escribir la ecuación (38),

$$2iD_0 m \frac{\partial}{\partial t}\psi = -2D_0^2 m \nabla^2\psi + Vm\psi,$$

de las expresiones (56) y (58)

$$\hat{\epsilon}\psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U\right)\psi,$$

donde $U = Vm$.

Para el caso cuántico cuando $D = \hbar/2m$, los operadores se reducen a la forma usual en mecánica cuántica.

$$\hat{\epsilon} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t},$$

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla.$$

Las relaciones de incertidumbre para las variables $\hat{x}$ y $\hat{p}$, $t$ y $\hat{\epsilon}$ se pueden obtener de los resultados anteriores y son una consecuencia de las propiedades estocásticas del ensemble. Del operador velocidad $\hat{c} = \hat{p}/m$ obtenemos que $\langle \hat{c} \rangle = \langle \underline{c} \rangle_{av}$ y $\langle \hat{\underline{c}}^2 \rangle = \langle \underline{v}^2 + \underline{u}^2 \rangle$. La relación de incertidumbre para $\hat{x}$ y $\hat{c}$ es

$$\left\langle (\Delta x_i)^2\right\rangle \left\langle (\Delta c_i)^2\right\rangle \geq D_0^2 = \frac{1}{4}\left[\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}E\left\{(\delta x_i)^2\right\}\right]^2$$

Aquí $\Delta x_i = x_i - \langle x_i\rangle_{av}$, $\Delta c_i = c_i - \langle c_i\rangle_{av}$ y $\delta x_i = x_i(t+\Delta t) - x_i(t)$. De esto se observa que la dispersión de una partícula debida a la interacción de ésta con el vacío nos da un límite inferior para el producto de las fluctuaciones de $x_i$ y $c_i$ en el ensemble:

## CAPITULO III

La derivada del valor esperado de un operador $\hat{A}$ está dada por la ecuación de Heisenberg.

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H},\hat{A}]\rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\rangle, \qquad (1)$$

donde $[\hat{H},\hat{A}] = \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}$ es el conmutador del operador $\hat{A}$ con el Hamiltoniano del sistema. Si el operador no depende explícitamente del tiempo, entonces

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H},\hat{A}]\rangle. \qquad (2)$$

Encontraremos ahora el análogo cuántico de las ecuaciones clásicas de movimiento a través de la ecuación de Heisenberg. $\hat{x}$ y $\hat{p}_x$ no contienen al tiempo explícitamente. En el caso $\hat{A} = \hat{x}$ encontramos

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H},\hat{x}]\rangle, \qquad (3)$$

donde

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x}). \qquad (4)$$

Puesto que $\hat{x}$ y $V(\hat{x})$ conmutan, la ecuación ~~en~~ (3) se reduce a

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{x}\rangle = \frac{i}{2m\hbar}\langle \hat{p}_x^2\,\hat{x} - \hat{x}\,\hat{p}_x^2\rangle.$$

Agregando al lado derecho de la ecuación $(\hat{p}_x x \hat{p}_x - \hat{p}_x x \hat{p}_x)$ y sabiendo que $\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x = -i\hbar$, obtenemos

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{x}\rangle = \frac{1}{m}\langle \hat{p}_x\rangle \qquad (5)$$

De manera análoga podemos calcular el cambio en el tiempo del valor esperado del operador momento lineal. Si ahora en la ecuación (2) $\hat{A} = \hat{p}_x$ y sabiendo que $\hat{p}_x$ conmuta consigo mismo, encontramos

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle V(\hat{x}) \hat{p}_x - \hat{p}_x V(\hat{x}) \rangle = - \langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \rangle. \qquad (6)$$

Con ayuda de las ecuaciones (5) y (6) obtenemos

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = - \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = \langle F(x) \rangle. \qquad (7)$$

Las ecuaciones (5) y (7) constituyen el teorema de Ehrenfest de acuerdo al cual las ecuaciones fundamentales de la mecánica clásica pueden generalizarse a la mecánica cuántica, reemplazando las variables clásicas por los valores esperados de los correspondientes operadores.

Si deseamos una transición de las ecuaciones de la mecánica cuántica a las ecuaciones clásicas es necesario comparar la segunda ley de Newton con su correspondiente en mecánica cuántica. La ley de Newton nos dice que

$$m \ddot{x} = F(x).$$

El valor esperado de la posición, $\langle x \rangle$, corresponde a la posición clásica. Podemos suponer que la ecuación mecánico-cuántica (7) será igual a la ecuación clásica si en su lugar tuviésemos

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = F(\langle x \rangle). \qquad (8)$$

Para obtener la transición es necesario establecer la relación entre $\langle F(x) \rangle$ y $F(\langle x \rangle)$. Podemos expresar la fuerza $F(x)$ en la forma

$$F(x) = F(\langle x \rangle + \Delta x),$$

donde $\Delta x = x - \langle x \rangle$ y desarrollar en series de Taylor alrededor de $\langle x \rangle$, obteniendo

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + \Delta x \, F'(\langle x \rangle) + \frac{\Delta x^2}{2} F''(\langle x \rangle) + \cdots \qquad (9)$$

Tomando el valor esperado de $F(x)$ y sabiendo que $\langle \Delta x \rangle = 0$, tenemos

$$\langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} \langle \Delta x^2 \rangle F''(\langle x \rangle) + \cdots, \qquad (10)$$

la expresión $\frac{1}{2} \langle \Delta x^2 \rangle F''(\langle x \rangle)$ es la corrección mecánico-cuántica a la ecuación de Newton. La condición que debe satisfacerse en la transición está expresada por la desigualdad

$$\langle \Delta x^2 \rangle \ll 2 \left| \frac{F(\langle x \rangle)}{F''(\langle x \rangle)} \right|. \qquad (11)$$

Pero la condición dada por (11) no es suficiente para aplicar los conceptos clásicos a la descripción del movimiento de la partícula. El valor de $\langle \Delta x^2 \rangle$ en (11) está restringido por la relación de incertidumbre. El valor esperado de la energía cinética es

$$\langle T(p_x) \rangle = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m}. \qquad (12)$$

En la transición de la mecánica cuántica a la clásica debemos tener

$$T(\langle p_x \rangle) = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m}. \qquad (13)$$

Podemos escribir la energía cinética como

$$T(p_x) = T(\langle p_x \rangle + \Delta p_x)$$

$$= \frac{1}{2m} \left( \langle p_x \rangle + \Delta p_x \right)^2 \qquad (14)$$

donde $\Delta p_x = p_x - \langle p_x \rangle$. Desarrollando el paréntesis y tomando el valor esperado resulta.

$$\langle T(p_x)\rangle = T(\langle p_x\rangle) + \frac{1}{2m}\langle(\Delta p_x)^2\rangle, \qquad (15)$$

ya que $\langle \Delta p_x\rangle = 0$. La condición que obtenemos para la transición es

$$\langle \Delta p_x^2\rangle \ll \langle p_x^2\rangle = 2m\,T(\langle p_x\rangle). \qquad (16)$$

Multiplicando la relación (11) por la (16) obtenemos la condición general para la validez de la ecuación (8):

$$\langle \Delta x^2\rangle\langle \Delta p_x^2\rangle \ll 4m\,T(\langle p_x\rangle)\left|\frac{F(\langle x\rangle)}{F''(\langle x\rangle)}\right|. \qquad (17)$$

Pero el producto de las desviaciones en x y en p está limitado por la relación de incertidumbre.

$$\langle \Delta x^2\rangle\langle \Delta p_x^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

así tenemos que

$$\frac{\hbar^2}{16} \ll m\,T(\langle p_x\rangle)\left|\frac{F(\langle x\rangle)}{F''(\langle x\rangle)}\right|. \qquad (18)$$

Trataremos los casos en los cuales la condición (18) se satisface para toda $\langle \Delta x^2\rangle$ y $\langle \Delta p_x^2\rangle$ que cumplan con la relación de incertidumbre. Esto es cuando $F''(\langle x\rangle)=0$. Cuando $F''(\langle x\rangle)=0$ el valor medio de x, posición de la partícula, satisface leyes clásicas, $F(\langle x\rangle) = m\langle \ddot{x}\rangle$. Esto sucederá cuando la fuerza dependa linealmente de la posición.

Por otro lado observamos que al exigir que la velocidad estocástica sea cero, las ecuaciones fundamentales conducen a una situación idéntica a la mencionada anteriormente.

Hagamos $u=0$ en las ecuaciones (28) del capítulo II para el caso cuántico. Obtenemos

$$\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + (\underline{v}\cdot\nabla)\underline{v} = \underline{f}_0, \qquad (19)$$

$$\nabla^2 \underline{v} = 0. \qquad (20)$$

La ecuación (20) impone una condición sobre la velocidad. Esta debe depender linealmente de la posición. Esta condición se refleja en la ecuación (19) en que los únicos casos posibles son aquellos donde la fuerza es también lineal en la posición. Esto es $F = ax+b$. Las tres situaciones son: partícula libre, fuerza constante y oscilador armónico.

Por otro lado sabemos que

$$v = \frac{\hbar}{m}\nabla S(x,t).$$

De donde escribimos la ecuación (19) como

$$\frac{\partial \hbar S(x,t)}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial \hbar S(x,t)}{\partial x}\right)^2 + V = 0,$$

que es la ecuación de Hamilton-Jacobi. La condición sobre la velocidad sólo permite tratar acciones cuadráticas.

La ecuación (20) restringe la dependencia $\underline{v}=\underline{v}(\underline{x},t)$ y sugiere una solución del tipo

$$v(x,t) = a(t)\,x + b(t), \qquad (21)$$

para una dimensión. De lo anterior la ecuación (19) toma la forma

$$(\dot{a}+a^2)\,x + \dot{b} + ab = f_0. \qquad (22)$$

## CASOS PARTICULARES.

I) Para el caso partícula libre ($f_0=0$) tenemos de (22)

$$\dot{a}+a^2=0,$$

$$\dot{b}+ab=0.$$

De la primera de las ecuaciones se obtiene que $a=1/(t+\beta)$ y de la segunda que $b=B/(t+\beta)$. Sustituyendo en la ecuación (21)

$$v=\frac{x+B}{t+\beta}.$$

Imponiendo las condiciones iniciales para $t=t_0$, $x=x_0$ y $v=v_0$, resulta

$$v_0=\frac{x_0+B}{t_0+\beta}.$$

Como $v_0$ es arbitraria podemos hacer $B=-x_0$ y $\beta=-t_0$. Finalmente

$$v=\frac{x_1-x_0}{t_1-t_0}, \qquad (23)$$

es decir la velocidad sistemática. Con ayuda de $v=\frac{\hbar}{m}\nabla S$, podemos encontrar la función $S=S(x,t)$

$$S=\frac{m}{\hbar}\int_{x_0}^{x_1} v\,dx_1=\frac{m}{2\hbar}\frac{(x_1-x_0)^2}{t_1-t_0}, \qquad (24)$$

La ecuación anterior está definida para dos puntos $x_0$ y $x_1$ y está especificada hasta una función aditiva del tiempo. La relación entre $S=S(x_0t_0,x_2t_2)$ y la solución de la ecuación de Schroedinger está dada por

$$\psi(x_0t_0,x_2t_2)=e^{R(t_0,t_2)}\,e^{iS(x_0t_0,x_2t_2)}. \qquad (25)$$

Sustituyendo (24) en (25) y denotando por $A(t_1-t_0)$ unicamente aquella parte dependiente del tiempo, obtenemos

$$\psi(x_0t_0, x_1t_1) = A(t_1-t_0)\exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_1-x_0)^2}{t_1-t_0}\right\}. \qquad (26)$$

Donde esto último es el propagador para partícula libre. Reescribiendo

$$\psi(x_0t_0, x_1t_1) = K(x_1, x_0).$$

$A(t_1-t_0)$ es una función que se determinará imponiendo la condición de convolución del propagador: Se ha visto que existen dos propiedades fundamentales que el propagador debe satisfacer:

$$K(x_2, x_0) = \int_{x_1} K(x_2, x_1)\, K(x_1, x_0)\, dx_1,$$

$$K(x_1t_1, x_0t_0) = K^*(x_0t_0, x_1t_1).$$

Para este propagador la condición de convolución es

$$K(x_2, x_0) = A(t)A(s)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{\frac{im}{2\hbar t}(x_2-x_1)^2\right\}\exp\left\{\frac{im}{2\hbar s}(x_1-x_0)^2\right\}dx_1,$$

donde $t = t_2-t_1$, $s = t_1-t_0$ y $T = s+t$. De la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{a(x_1-x)^2}e^{b(x_2-x)^2}dx = \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}}\exp\left\{\frac{ab}{a+b}(x_1-x_2)^2\right\},$$

obtenemos que

$$k(x_2,x_0) = A(t)\,A(s)\sqrt{\frac{2\pi i\hbar st}{mT}}\;\exp\left\{\frac{im}{2\hbar T}(x_2-x_0)^2\right\}.$$

Comparando este resultado con la ecuación (26) vemos que se debe cumplir

$$A(T) = A(t)\,A(s)\sqrt{\frac{2\pi i\hbar st}{T}}.$$

Si suponemos que en general $A(t)=\alpha/\sqrt{t}$ entonces resulta que

$$\alpha = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}.$$

Finalmente el propagador para una partícula libre es

$$k(x_1,x_0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2}\exp\left\{\frac{im}{2\hbar t}(x_1-x_0)^2\right\}. \qquad (27)$$

y la probabilidad de encontrar a la partícula en el intervalo $x$ y $x+dx$ al tiempo $t$ es

$$|k(x_1,x_0)|^2 dx = \frac{m}{2\pi\hbar t}\,dx = e^{2R(t)}\,dx.$$

II) Para el problema de una partícula sujeta a una fuerza constante, obtenemos las ecuaciones

$$(\dot a + a^2)x + \dot b + ab = \frac{f_0}{m}$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0.$$

De donde $v = ax+b$ y

$$\dot a + a^2 = 0,$$

$$\dot b + ab - \frac{f_0}{m} = 0.$$

De la primera ecuación tenemos que $a = 1/(t_1-t_0)$ y de la segunda

$$\dot{b} + \frac{b}{t_1-t_0} - \frac{f_0}{m} = 0,$$

que puede escribirse como

$$(t_1-t_0)\,db + \left(b - \frac{f_0}{m}(t_1-t_0)\right)dt_1 = 0,$$

que corresponde a la derivada total de una función $F = -x_0$, constante. Finalmente la expresión para la velocidad sistemática es

$$v = \frac{x_1-x_0}{t_1-t_0} + \frac{f_0}{2m}(t_1-t_0). \qquad (28)$$

Pero $v = \frac{\hbar}{m}\nabla S$. y la expresión para la función $S = S(x_1t_1, x_2t_2)$ es

$$S = \frac{m}{\hbar}\int_{x_0}^{x_1} v\,dx_1$$

$$= \frac{m}{\hbar}\left\{\int_{x_0}^{x_1}\frac{x_1-x_0}{t_1-t_0}\,dx_1 + \frac{f_0}{2m}(t_1-t_0)\int_{x_0}^{x_1}dx_1 + F(t_1-t_0)\right\},$$

donde $F(t)$ es nuevamente una función del tiempo no-especificada. Efectuando la integración y como se hizo anteriormente

$$K(x_1,x_0) = A(t_1-t_0)\,e^{iS(x_1t_1,x_2t_2)},$$

se tiene

$$K(x_1,x_0) = A(t_1-t_0)\exp\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m(x_1-x_0)^2}{2(t_1-t_0)} + \frac{f_0}{2}(t_1-t_0)(x_1-x_0) + F(t_1-t_0)\right\}.$$

La función anterior no satisface la relación $K(2,1) = K^*(1,2)$. Puesto que $S(x_1t_1, x_2t_2)$ está determinada hasta una función del tiempo, aditiva; $F(t_1-t_0)$ puede escribirse como:

$$F(t_1-t_0) = H(t_1-t_0) + f_0(t_1-t_0)x_0,$$

donde $H(t_1-t_0)$ es una función real. Entonces el propagador que se obtiene satisface: $K(2,1) = K^*(1,2)$. Si hacemos $T=t_1-t_0$:

$$K(x_1,x_0) = A(T)\exp\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m(x_1-x_0)^2}{2T} + \frac{f_0T}{2}(x_0+x_1)+H(T)\right\}.$$

Nuevamente la forma de determinar la función $H(T)$ y el coeficiente $A(T)$ es usando la propiedad de convolución del propagador.

$$K(x_2,x_0) = A(s)A(t)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m}{2}\left[\frac{(x_2-x_1)^2}{t}+\frac{(x_1-x_0)^2}{s}\right]+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{2}f_0\left[t(x_2+x_1)+s(x_1+x_0)\right]+H(t)+H(s)\right\}dx_1,$$

donde $t=t_2-t_1$, $s=t_1-t_0$ y $T=s+t$. Después de operaciones algebráicas, la anterior integral la escribimos como:

$$K(x_2,x_0) = A(s)A(t)\exp\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m}{2st}(x_2^2s+x_0^2t)+\frac{1}{2}f_0(x_2t+x_0s)+\right.$$

$$\left.+H(t)+H(s)\right\}\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\exp\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m}{2st}(s+t)x_1^2+\left[\frac{1}{2}f_0T-\frac{m}{st}(x_2s+x_0t)\right]x_1\right\}dx_1$$

La integral es inmediata ya que

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{ax^2+bx}dx = \sqrt{\frac{-\pi}{a}}\exp\left\{-\frac{b^2}{2a}\right\}.$$

Nuevamente efectuando operaciones algebráicas, el propagador es:

$$K(x_2,x_0) = A(t)A(s)\left(\frac{2\pi i\hbar st}{mT}\right)^{1/2}\exp\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m}{2}\frac{(x_2-x_0)^2}{T}+\frac{1}{2}f_0T(x_2+x_0)+\right.$$

$$\left.+H(t)+H(s)-\frac{f_0^2}{8m}stT\right\}.$$

Comparando este resultado con el propagador original y de resultados anteriores obtenemos

$$A(t) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2},$$

$$H(T) = H(t) + H(s) - \frac{f_0^2}{8m} st(s+t).$$

Si definimos $H(t) = \alpha t^n$, sustituyendo en la expresión anterior,

$$(t+s)^n = t^n - \frac{f_0^2}{8m\alpha} s^2 t - \frac{f_0^2}{8m\alpha} st^2 + s^n,$$

se satisface para $n=3$ y para $\alpha = -\frac{f_0^2}{24m}$, de modo que la expresión final para el propagador es:

$$K(x_1, x_0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2} \exp \frac{i}{\hbar}\left\{ \frac{m}{2}\frac{(x_1-x_0)^2}{T} + \frac{1}{2} f_0 T (x_1+x_0) - \frac{f_0^2 T^3}{24m}\right\}.$$

Para el caso de una carga en un campo eléctrico uniforme la fuerza sobre la partícula es $\vec{F} = e\vec{E}$ y el propagador es

$$K(x_1, x_0) = \left(\frac{m_e}{2\pi i\hbar (t_1-t_0)}\right)^{1/2} \exp\frac{i}{\hbar}\left\{ \frac{m_e}{2}\frac{(x_1-x_0)^2}{t_1-t_0} + \frac{1}{2} eE (t_1-t_0)(x_1+x_0) - \frac{e^2E^2}{24 m_e}(t_1-t_0)^3\right\}.$$

III) Para el caso de un oscilador armónico las ecuaciones fundamentales nos dan:

$$(\dot{a} + a^2)x + \dot{b} + ab = \frac{f_0}{m} = -\frac{k}{m}x,$$

escribiremos $\omega^2 = k/m$. Las ecuaciones que determinan a y b son:

$$\dot{a} + a^2 + \omega^2 = 0,$$

$$\dot{b} + ab = 0.$$

Integrando la primera de las ecuaciones resulta

$$a = \omega \cot \omega (t_1 - t_0),$$

y la segunda resulta

$$\dot{b} + \omega \cot \omega (t_1 - t_0) \cdot b = 0,$$

de donde obtenemos

$$b = \frac{k}{\operatorname{sen} \omega (t_1 - t_0)}.$$

Aquí $k$ es una constante que se determinará de las condiciones iniciales. De la expresión para la velocidad sistemática, $v = ax + b$, tenemos que

$$v \operatorname{sen} \omega(t_1 - t_0) = \omega x_1 \cos \omega (t_1 - t_0) + k.$$

Imponiendo las condiciones iniciales, para $t = t_0$, $x_1 = x_0$ y $v = v_0$, resulta que

$$k = -\omega x_0$$

Finalmente

$$v = \omega \left[ x_1 \cot \omega (t_1 - t_0) - \frac{x_0}{\operatorname{sen} \omega (t_1 - t_0)} \right].$$

La función $S(x_1 t_1, x_0 t_0)$ es

$$S = \frac{m}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} v \, dx_1$$

$$= \frac{m\omega}{\hbar} \cot \omega (t_1 - t_0) \int_{x_0}^{x_1} \left( x_1 - \frac{x_0}{\operatorname{sen} \omega (t_1 - t_0)} \right) dx_1 .$$

Integrando

$$S(x_1 t_1, x_0 t_0) = \frac{m\omega}{2\hbar \operatorname{sen}\omega T}\left[(x_1^2 - x_0^2)\cot\omega T + 2x_0^2 - 2x_0x_1 + F(T)\right].$$

Si $T = t_1 - t_0$ y $F(T)$ es

$$F(T) = H(T) + 2x_0^2(\cos\omega T - 1),$$

se garantiza que el propagador satisfaga la propiedad $K(2,1) = K^*(1,2)$. $H(T)$ es una función no especificada. Bajo la propiedad de convolución del propagador:

$$K(x_1, x_0) = A(t)A(s)\left(\frac{-2\pi\hbar}{m\omega i(\cot\omega t + \cot\omega s)}\right)^{1/2} \exp\frac{im\omega}{2\hbar \operatorname{sen}\omega T}\cdot\left[\right.$$

$$\left.(x_1^2 + x_0^2)\cos\omega T - 2x_1x_0 + H(t) + H(s)\right].$$

Comparando con el propagador original resulta que

$$A(T) = A(t)A(s)\left(\frac{2\pi i\hbar}{m\omega(\cot\omega t + \cot\omega s)}\right)^{1/2},$$

$$H(T) = H(t) + H(s).$$

Finalmente

$$A(t) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \operatorname{sen}\omega t}\right)^{1/2}$$

- Nonlinear Problems in Random theory. Norbert Wiener. the M.I.T. Press.
- de la Peña L. y Cetto A.M. (1967) Preprint. UNAM. no publicado
- Ming Chen Wang y G.E. Uhlenbeck (1945) Rev. Mod Phy 17, 2,3. Reimpreso en "Selected Papers on Noise and Stochastic Processes. Edit Wax.
- Quantum Mechanics and Path Integrals R.P. Feynman and A.R. Hibbs. Mc Graw Hill.
- de la Peña (1969) Jour. Math Phys: 10, 1620.
- Causalidad y azar en la física moderna. David Bohm.