

22  
20j



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO**

**FACULTAD DE CIENCIAS**

**UN EJEMPLO DE LA ECUACION NO LINEAL DE  
SCHRODINGER-WEINBERG**

**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE :

**F I S I C O**

P R E S E N T A :

**JAVIER GONZALEZ BELTRAN**

*DIRECTOR DE TESIS:*

**DR. MATIAS MORENO YNTRIAGO**



**MEXICO, D. F.**

**FACULTAD DE CIENCIAS 1997  
SECCION ESCOLAR**

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**



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 esta 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.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

M. en C. Virginia Abrín Batule  
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la  
Facultad de Ciencias  
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: "Un ejemplo de la ecuación no lineal de Schrödinger-Weinberg".

realizado por Javier González Beltrán

con número de cuenta 8601355-8 , pasante de la carrera de Física

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis  
Propietario

DR. FERNANDO MATIAS MORENO YNTRIAGO

*Matez Mon*

Propietario

DRA. MARIA DE LOS ANGELES ORTIZ FLORES

*Maria de los Angeles Ortiz Flores*

Propietario

DR. JUAN CARLOS D'OLIVO SAEZ

*J. Olivo*

Suplente

DRA. ROCIO JAUREGUI RENAUD

*Rocio Jauregui Renaud*

Suplente

DRA. ROSA MARIA MENDEZ VARGAS

*Rosa Maria Mendez Vargas*

*[Firma]*  
Consejo Departamental de Física  
DR. ROBERTO ALEJANDRO NÚÑEZ MAYERA

FACULTAD DE CIENCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

# Contenido

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1 Formalismo</b>	<b>3</b>
1.1 Funciones de onda y observables	3
1.2 Evolución Temporal	7
1.2.1 Simetrías en mecánica cuántica	7
1.2.2 Simetrías en la teoría no lineal	9
1.2.3 La ecuación de Weinberg	10
1.2.4 Cantidades conservadas	11
1.3 Eigenvalores	12
1.3.1 Estados estacionarios de la energía	12
1.3.2 Los estados propios como puntos estacionarios	13
1.3.3 Momentos y distribución de probabilidad	13
1.4 La partícula libre	14
1.4.1 La ecuación de Weinberg para sistemas continuos	14
1.4.2 Separabilidad de la ecuación de Weinberg	16
1.4.3 Sistema discreto de dos componentes	18
1.4.4 Cotas experimentales para el término no lineal	20
<b>2 Propiedades de invariancia en la dinámica no-relativista</b>	<b>22</b>
2.1 Nociones generales	22
2.1.1 Definiciones	22
2.1.2 Grupos de Lie	23
2.1.3 Las constantes de estructura del grupo	24
2.1.4 Álgebras de Lie	25
2.1.5 Realizaciones y representaciones	26
2.1.6 Ejemplos de realizaciones de grupos	27
2.1.7 Ejemplos de realizaciones de álgebras	28

2.2	El grupo de Galileo. . . . .	28
2.2.1	El grupo $T_3$ de traslaciones tridimensionales. . . . .	30
2.2.2	El grupo de rotaciones $R(3)$ . . . . .	31
2.2.3	El grupo Euclideo $E(3)$ . . . . .	33
2.2.4	El grupo de Galileo. . . . .	34
2.3	Algunos ejemplos de invariancia de Galileo. . . . .	35
2.3.1	La ecuación de Schrödinger para una partícula libre. . . . .	35
2.3.2	Sistemas continuos y campos multicomponentes. . . . .	44
2.4	La ecuación de Weinberg como un ejemplo de realización. . . . .	54
<b>3</b>	<b>Un ejemplo concreto de la ecuación de Weinberg</b>	<b>56</b>
3.1	Sistemas con una partícula en interacción . . . . .	56
3.2	La partícula en una caja y su solución numérica aproximada . . . . .	58
3.2.1	El potencial de interacción . . . . .	58
3.2.2	La ecuación lineal . . . . .	59
3.2.3	La ecuación no lineal . . . . .	63
3.2.4	La evolución en el tiempo . . . . .	64
3.3	Discusión . . . . .	71
	<b>Conclusiones</b>	<b>75</b>
<b>A</b>	<b>La Transformada de Fourier Acelerada</b>	<b>77</b>
A.1	Motivación . . . . .	77
A.2	El algoritmo FFT . . . . .	78
A.3	Un comparativo . . . . .	83
<b>B</b>	<b>El Método de Diferencias Finitas</b>	<b>88</b>
B.1	Descripción del método . . . . .	88
B.2	Otro comparativo . . . . .	90
<b>C</b>	<b>Bibliografía</b>	<b>94</b>

# Introducción

Este trabajo trata sobre una posible extensión no lineal de la mecánica cuántica ordinaria propuesta por S. Weinberg en 1989[1]. Creemos que un tema de esta naturaleza es importante por varias razones. En primer lugar porque es un tema de interés general, la literatura sobre ecuaciones tipo Schrödinger con términos no lineales es extensa y no hay una línea de trabajo bien definida. Nosotros enfocamos nuestra atención en la propuesta de Weinberg porque es un intento de sentar en una base teórica sólida una mecánica cuántica no lineal para luego confrontar sus predicciones directamente con el experimento y pasar más allá del ámbito puramente teórico.

Es importante además porque en una teoría no lineal el principio de superposición no es válido de entrada, y las paradojas a que da lugar este principio en mecánica cuántica ordinaria no llegarían a plantearse.

Por otro lado con una teoría no lineal lo suficientemente estructurada como para poder hacer predicciones teóricas susceptibles de comprobación experimental, estamos probando de una manera indirecta a la mecánica cuántica desde sus bases más profundas, puesto que cualquier predicción errónea de la generalización no lineal es al mismo tiempo un señalamiento hacia la naturaleza lineal de las cosas.

Comenzamos con una descripción del trabajo desarrollado por Weinberg, las ideas básicas, el formalismo y una breve descripción de los resultados de uno de los varios experimentos que desencadenó su propuesta. Una de las características más notables de esta teoría es que consta de una estructura básica suficientemente rica y formal como para poder obtener de una forma natural cantidades que se conservan por principios de simetría, y esto es

posible porque el contenido formal de la teoría permite introducir fácilmente álgebras de Lie como en mecánica cuántica. Otra de las características interesantes de la teoría no lineal es que los sistemas discretos resultan ser sistemas hamiltonianos clásicos.

Más adelante se hace notar como los conceptos de simetrías y teoría de grupos forman un lenguaje adecuado y poderoso con el que se puede obtener gran provecho de las ideas, por simples que estas parezcan. En particular se pone énfasis en el grupo de Galileo y se dan algunos ejemplos de invariancia de Galileo. El propósito de esto es hacer notar como la estructura formal de la teoría no lineal es tal que la teoría resulta invariante de Galileo, y ésta es una de las características principales que la diferencian de otras teorías no lineales.

Finalmente se discute un ejemplo concreto al cual se aplican las ideas de Weinberg con el fin de mostrar que tan diferente puede ser el punto de vista no lineal con respecto a la mecánica cuántica ordinaria. El problema particular es el de una partícula en un pozo de potencial unidimensional y sujeta a un campo magnético. A diferencia de los problemas tratados por Weinberg en los que sólo se toman en cuenta sistemas discretos, en este problema consideramos un sistema continuo y tratamos de resolver, de una forma aproximada, la ecuación no lineal resultante con dos métodos numéricos distintos, haciendo un análisis de la aplicabilidad de ambos.

# Capítulo 1

## Formalismo

El presente capítulo está basado completamente en un artículo de Steven Weinberg publicado en 1989[1] en el cual se presenta un marco general para introducir correcciones no lineales a la mecánica cuántica. Está escrito con la finalidad de introducir el formalismo básico de la teoría en la cual se basa el resto de este trabajo, mas no se pretende dar una descripción exhaustiva y completa del artículo original del que se tomó.

Se comienza definiendo las funciones de onda y los observables físicos y la manera en que estos se manipulan matemáticamente. Se propone entonces el operador de evolución temporal del cual se obtiene la generalización no lineal de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, comparando las similitudes y diferencias de esta teoría y la mecánica cuántica. Posteriormente se definen los estados propios y valores propios de un observable físico. En particular se muestra como es la dependencia temporal de un estado con un valor dado de la energía. Finalmente se obtiene la ecuación de Schrödinger no lineal que se aplica para una partícula libre y se muestran una clase de soluciones para las cuales se analiza el caso particular de un sistema de dos componentes.

### 1.1 Funciones de onda y observables.

Tanto en el formalismo desarrollado por Weinberg como en la mecánica cuántica, los estados físicos se representan por *rayos* en un espacio vectorial complejo y los observables por las funciones generadoras que transforman a estos rayos, pero estas transformaciones no son en general lineales en el nuevo formalismo.

Concretamente, el estado de un sistema físico se representa por una función de onda compleja  $\psi$ . Por el momento supondremos que  $\psi$  es función de una variable discreta  $k$  que toma valores  $1, 2, \dots, N$  sin tomar en cuenta los grados de libertad de desplazamiento espacial. <sup>1</sup> De esta manera la función de onda  $\psi$  queda determinada por el conjunto de componentes  $\psi_k$ .

En mecánica cuántica los observables se pueden representar por matrices hermiteanas ( $A_{ki}$ ), o equivalentemente por funciones reales bilineales: <sup>2</sup>

$$\langle A \rangle_\psi = \psi_k^* A_{ki} \psi_i \quad (1.1)$$

Esto se generaliza representando ahora a los observables por funciones reales  $a(\psi, \psi^*)$  no necesariamente bilineales, aunque es conveniente retener la característica especial de la mecánica cuántica de que para un número complejo arbitrario  $\lambda$  distinto de cero,  $\psi$  y  $\lambda\psi$  representan el mismo estado físico. Para esto es necesario que dichas funciones sean homogéneas de grado 1 en  $\psi$  y  $\psi^*$ , en el siguiente sentido:

$$a(\lambda\psi, \psi^*) = a(\psi, \lambda\psi^*) = \lambda a(\psi, \psi^*) \quad (1.2)$$

A este respecto hacemos notar que no es necesario que  $a(\psi, \psi^*)$  sea bilineal para ser homogénea. Por ejemplo, tómesese la función:

$$a(\psi, \psi^*) = \frac{\psi_k^* \psi_l \Gamma_{klmn} \psi_m \psi_n}{\psi_k \psi_k}$$

la cual es claramente homogénea de grado 1 y sin embargo  $a(\psi + \chi, \xi^*) \neq a(\psi, \xi^*) + a(\chi, \xi^*)$ , de modo que  $a$  no es bilineal.

<sup>1</sup> Es decir, tomamos un sistema de  $N$  componentes  $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}$  del cual se ha separado la dependencia espacial de la función de onda. Más tarde se considerará también el caso de una dependencia continua en la posición de la función de onda  $\Psi_k(\mathbf{x})$ . También una dependencia temporal queda implícita en  $\psi_k$ .

<sup>2</sup> En la ecuación (1.1) y subsecuentemente se toma la convención de que sumas sobre índices repetidos quedan implícitas. Esta ecuación, dentro del contexto en que se maneja no es más que el valor esperado del observable  $A$ :  $\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle$ , el cual es real para toda  $\psi$  y además, visto como función de  $\psi$  y  $\psi^*$  es claramente bilineal. Nótese que en el caso más general debemos reemplazar la ecuación 1.1 por:

$$\langle A \rangle_\psi = \int d^3x \Psi_i^*(\mathbf{x}) A_{ki} \Psi_l(\mathbf{x})$$

Puesto que  $\psi$  tiene componentes  $\psi_1, \dots, \psi_N$  podemos escribir:

$$a(\psi, \psi^*) = a(\psi_1, \dots, \psi_N, \psi_1^*, \dots, \psi_N^*)$$

entonces:

$$a(\lambda\psi, \psi^*) = a(\lambda\psi_1, \dots, \lambda\psi_N, \psi_1^*, \dots, \psi_N^*)$$

y su diferencial es:

$$da(\lambda\psi, \psi^*) = \frac{\partial a(\lambda\psi, \psi^*)}{\partial(\lambda\psi_k)} d(\lambda\psi_k) + \frac{\partial a(\lambda\psi, \psi^*)}{\partial\psi_k^*} d\psi_k^*$$

de modo que:

$$\frac{\partial a(\lambda\psi, \psi^*)}{\partial\lambda} = \psi_k \frac{\partial a(\lambda\psi, \psi^*)}{\partial(\lambda\psi_k)}$$

Por otra parte, usando la homogeneidad de  $a(\psi, \psi^*)$  (ecuación (1.2)) obtenemos:

$$\frac{\partial a(\lambda\psi, \psi^*)}{\partial\lambda} = a(\psi, \psi^*)$$

combinando estas dos últimas ecuaciones:

$$\psi_k \frac{\partial a(\lambda\psi, \psi^*)}{\partial(\lambda\psi_k)} = a(\psi, \psi^*) \quad (1.3)$$

multiplicando ambos lados de esta ecuación por  $\lambda$  y usando nuevamente (1.2) encontramos:

$$(\lambda\psi_k) \frac{\partial a(\lambda\psi, \psi^*)}{\partial(\lambda\psi_k)} = a(\lambda\psi, \psi^*)$$

ó en general:<sup>3</sup>

$$\psi_k \frac{\partial a(\psi, \psi^*)}{\partial\psi_k} = a(\psi, \psi^*)$$

El resultado análogo para  $\psi^*$  es:

$$\psi_k^* \frac{\partial a(\psi, \psi^*)}{\partial\psi_k^*} = a(\psi, \psi^*)$$

De esta manera la condición de homogeneidad (1.2) es equivalente a:

<sup>3</sup>Este mismo resultado se pudo haber obtenido de la ecuación (1.3) haciendo  $\lambda = 1$ , puesto que esta ecuación es válida para toda  $\lambda$ .

$$\psi_k \frac{\partial a(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k} = \psi_k^* \frac{\partial a(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k^*} = a(\psi, \psi^*) \quad (1.4)$$

Estas funciones  $a(\psi, \psi^*)$  forman un álgebra si se define la suma de funciones y la multiplicación de funciones por escalares de la manera usual:

$$(a + b)(\psi, \psi^*) \equiv a(\psi, \psi^*) + b(\psi, \psi^*)$$

$$(\xi a)(\psi, \psi^*) \equiv \xi a(\psi, \psi^*)$$

y además la composición de funciones como:

$$a * b \equiv \frac{\partial a}{\partial \psi_k} \frac{\partial b}{\partial \psi_k^*} \quad (1.5)$$

Esta última definición está motivada por la multiplicación matricial ordinaria, por ejemplo si  $a$  y  $b$  fueran bilineales:

$$a(\psi, \psi^*) = \psi_k^* A_{kl} \psi_l \quad (1.6)$$

$$b(\psi, \psi^*) = \psi_k^* B_{kl} \psi_l \quad (1.7)$$

entonces:

$$\frac{\partial a(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k} = \psi_m^* A_{mk}$$

$$\frac{\partial b(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k^*} = B_{kn} \psi_n$$

de modo que:

$$a * b = \frac{\partial a}{\partial \psi_k} \frac{\partial b}{\partial \psi_k^*} = \psi_m^* A_{mk} B_{kn} \psi_n$$

ó en forma matricial:

$$a * b = \psi^\dagger A B \psi$$

Así, vemos que la definición de producto de funciones (1.5) se reduce a la usual definición de composición de observables cuando  $a$  y  $b$  son las bilineales (1.6) y (1.7) de la mecánica cuántica.

Una función bilineal importante es la norma:

$$n(\psi, \psi^*) = \psi_k^* \psi_k \quad (1.8)$$

que actúa como elemento neutro del producto. Esto se puede verificar utilizando la homogeneidad de las funciones (ec. (1.4)):

$$n * a = \frac{\partial n}{\partial \psi_k} \frac{\partial a}{\partial \psi_k} = \psi_k^* \frac{\partial a}{\partial \psi_k} = a$$

$$a * n = \frac{\partial a}{\partial \psi_k} \frac{\partial n}{\partial \psi_k} = \psi_k \frac{\partial a}{\partial \psi_k} = a$$

por tanto:

$$n * a = a * n = a \quad (1.9)$$

El producto (1.5) no es conmutativo ni asociativo. De la no asociatividad se desprenden la mayoría de las diferencias entre este formalismo y la mecánica cuántica.

## 1.2 Evolución Temporal

### 1.2.1 Simetrías en mecánica cuántica

En mecánica cuántica, para un sistema físico descrito por el hamiltoniano  $H_{kl}$ , podemos usar la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d\psi_k}{dt} = H_{kl}\psi_l \quad (1.10)$$

y escribir el cambio en la función de onda para un desplazamiento temporal  $\epsilon$  infinitesimal como:

$$\psi_k(t + \epsilon) - \psi_k(t) = -\frac{i}{\hbar} \epsilon H_{kl}\psi_l$$

si definimos  $\epsilon \delta_H \psi_k \equiv \psi_k(t + \epsilon) - \psi_k(t)$ , la ecuación anterior es:

$$\epsilon \delta_H \psi_k = -\frac{i}{\hbar} \epsilon H_{kl}\psi_l \quad (1.11)$$

En general, dado un observable  $A$  que produzca un cambio infinitesimal en la función de onda podremos escribir una ecuación del tipo:

$$\epsilon \delta_A \psi_k = -\frac{i}{\hbar} \epsilon A_{kl}\psi_l \quad (1.12)$$

Por ejemplo, consideremos una función  $f$  de la posición  $\mathbf{x}$  en el espacio de configuración y desplazemos el vector de posición en una cantidad fija  $\mathbf{a}$  obteniendo una nueva función  $f(\mathbf{x} - \mathbf{a})$ :<sup>4</sup>

$$f(\mathbf{x}) \rightarrow f(\mathbf{x} - \mathbf{a})$$

Aplicando el teorema de Taylor a la función desplazada podemos escribirla como:

$$f(\mathbf{x} - \mathbf{a}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\mathbf{a} \cdot \nabla)^n}{n!} f(\mathbf{x})$$

Usando la definición  $\exp \hat{A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}$  y haciendo la identificación  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ , la ecuación anterior se transforma en:

$$f(\mathbf{x} - \mathbf{a}) = e^{\{-\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}\}} f(\mathbf{x})$$

vemos entonces que  $\hat{\mathbf{p}}$  es el generador de desplazamientos espaciales. En particular, para un desplazamiento infinitesimal ( $\mathbf{a} \rightarrow \epsilon \mathbf{a}$ ,  $\epsilon \ll 1$ ):

$$f(\mathbf{x} - \epsilon \mathbf{a}) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right) f(\mathbf{x})$$

de modo que:

$$\epsilon \delta_{\mathbf{p}} f \equiv f(\mathbf{x} - \mathbf{a}) - f(\mathbf{x}) = -\frac{i}{\hbar} \epsilon \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}} f(\mathbf{x})$$

Otro ejemplo lo constituyen las rotaciones del vector de posición alrededor de digamos el eje Z. En el caso de una rotación infinitesimal por un ángulo  $\epsilon\theta$  ( $\epsilon \ll 1$ ), las ecuaciones de transformación para  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  son:

$$\begin{cases} x = x' - \epsilon\theta y \\ y = y' + \epsilon\theta x \\ z = z' \end{cases}$$

y el desarrollo de la función  $f(\mathbf{x}')$  a primer orden en  $\epsilon$  es:

$$f(\mathbf{x}') = f(\mathbf{x}) - \epsilon\theta \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) f(\mathbf{x}) = \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon\theta L_z \right] f(\mathbf{x})$$

---

<sup>4</sup>En este tipo de ejemplos en donde los operadores  $\mathbf{a}$  a considerar solamente actúan sobre la parte espacial de las funciones, las matrices de estos operadores son diagonales. Por ejemplo, la matriz del operador de energía cinética  $\hat{\mathbf{H}} = \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) \nabla^2$ , tiene sus elementos de la forma:  $H_{kl} = \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) \delta_{kl} \nabla^2$  y la ecuación de Schrödinger se reduce a  $i\hbar \frac{d\psi_k}{dt} = \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) \nabla^2 \psi_k$ , por lo que se puede prescindir del índice  $k$  y tratar a la función de onda como si tuviera una sola componente  $\psi$ .

de manera que  $L_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$  es el generador de rotaciones infinitesimales alrededor del eje Z, esto es:

$$\epsilon \delta_{L_z} f \equiv f(\mathbf{x}') - f(\mathbf{x}) = -\frac{i}{\hbar} \epsilon \theta L_z f$$

### 1.2.2 Simetrías en la teoría no lineal

Para generalizar la ecuación (1.12) Weinberg postula que el cambio en la función de onda  $\psi_k$  asociado con una función infinitesimal  $\epsilon a(\psi, \psi^*)$  está dado por:<sup>5</sup>

$$\epsilon \delta_a \psi_k = -\frac{i}{\hbar} \epsilon \frac{\partial a(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k} \quad (1.13)$$

Entonces el cambio en alguna otra función  $b(\psi, \psi^*)$  inducido por  $\epsilon a(\psi, \psi^*)$  es:

$$\epsilon \delta_a b = \frac{\partial b}{\partial \psi_k} \epsilon \delta_a \psi_k + \frac{\partial b}{\partial \psi_k^*} \epsilon \delta_a \psi_k^*$$

Usando la ecuación (1.13) y su compleja conjugada:<sup>6</sup>

$$\begin{aligned} \epsilon \delta_a b &= \frac{\partial b}{\partial \psi_k} \left( -\frac{i}{\hbar} \epsilon \frac{\partial a}{\partial \psi_k} \right) + \frac{\partial b}{\partial \psi_k^*} \left( \frac{i}{\hbar} \epsilon \frac{\partial a}{\partial \psi_k^*} \right) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \epsilon \left( \frac{\partial a}{\partial \psi_k} \frac{\partial b}{\partial \psi_k^*} - \frac{\partial b}{\partial \psi_k} \frac{\partial a}{\partial \psi_k^*} \right) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \epsilon (a * b - b * a) \end{aligned}$$

ó más compactamente:

$$\delta_a b = \frac{i}{\hbar} [a, b] \equiv \frac{i}{\hbar} (a * b - b * a) \quad (1.14)$$

Este conmutador, definido por la ecuación anterior, es claramente anti-simétrico:

$$[a, b] = -[b, a]$$

Nótese que la norma  $n(\psi, \psi^*) = \psi_k^* \psi_k$  es invariante ante cualquier *deplazamiento* inducido puesto que conmuta<sup>7</sup> con cualquier función.

<sup>5</sup>Es fácil ver que esta definición se reduce a la ecuación (1.12) cuando tratamos (como en mecánica cuántica) con funciones bilineales  $a(\psi, \psi^*) = \psi_k^* A_{kl} \psi_l$ .

<sup>6</sup>Recuérdese que las funciones  $a(\psi, \psi^*)$ ,  $b(\psi, \psi^*)$ , etc. son por definición reales.

<sup>7</sup>Aquí y en el resto de este capítulo se habla del conmutador de dos observables en el sentido de las ecuaciones (1.14) y (1.5).

### 1.2.3 La ecuación de Weinberg

Para el caso de los desplazamientos temporales, Weinberg postula como función generadora a la *función hamiltoniano*  $h(\psi, \psi^*)$  definida por: <sup>8</sup>

$$\psi_k(t + \epsilon) - \psi_k(t) = \epsilon \delta_h \psi_k$$

de modo que:

$$\frac{d\psi_k(t)}{dt} = \delta_h \psi_k$$

y usando la definición (1.13) obtenemos la ecuación:

$$\frac{d\psi_k(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial h(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k} \quad (1.15)$$

Ésta es la generalización no lineal de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. La ecuación (1.15) y su compleja conjugada:

$$\frac{d\psi_k^*(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial h(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k^*} \quad (1.16)$$

muestran que éste es un sistema Hamiltoniano clásico, con p's y q's reales dadas por:

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (q_k + ip_k) \quad (1.17)$$

$$\psi_k^* = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (q_k - ip_k) \quad (1.18)$$

Esto es así puesto que de (1.17) y (1.18):

$$\frac{d\psi_k}{dt} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\dot{q}_k + i\dot{p}_k)$$

$$\frac{d\psi_k^*}{dt} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\dot{q}_k - i\dot{p}_k)$$

Ahora:

$$dh = \frac{\partial h}{\partial \psi_m} d\psi_m + \frac{\partial h}{\partial \psi_m^*} d\psi_m^*$$

---

<sup>8</sup> En este trabajo la letra  $h$  se usa exclusivamente para la denominación de la función hamiltoniano  $h(\psi, \psi^*)$ . En contraste, la letra  $\hbar$  se refiere siempre a la constante de Planck dividida por  $2\pi$ .

entonces:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial p_k} &= \frac{\partial h}{\partial \psi_k} \frac{\partial \psi_k}{\partial p_k} + \frac{\partial h}{\partial \psi_k^*} \frac{\partial \psi_k^*}{\partial p_k} = \\ &= \frac{\partial h}{\partial \psi_k} \left( \frac{i}{\sqrt{2\hbar}} \right) + \frac{\partial h}{\partial \psi_k^*} \left( \frac{-i}{\sqrt{2\hbar}} \right) = \\ &= \frac{i}{\sqrt{2\hbar}} \left[ \frac{\hbar d\psi_k^*(t)}{i} \frac{dt}{dt} + \frac{\hbar d\psi_k(t)}{i} \right] = \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2\hbar}} \left[ \frac{\dot{q}_k - i\dot{p}_k}{\sqrt{2\hbar}} + \frac{\dot{q}_k + i\dot{p}_k}{\sqrt{2\hbar}} \right] = \dot{q}_k \end{aligned}$$

es decir:

$$\frac{\partial h}{\partial p_k} = \dot{q}_k$$

y similarmente:

$$\frac{\partial h}{\partial q_k} = -\dot{p}_k$$

### 1.2.4 Cantidades conservadas

Cualquier función  $a$  de la función de onda  $\psi$  y su compleja conjugada que satisfagan las ecuaciones (1.15) y (1.16), tiene una dependencia temporal dada por :

$$\begin{aligned} \frac{da(\psi, \psi^*)}{dt} &= \frac{\partial a}{\partial \psi_k} \frac{d\psi_k}{dt} + \frac{\partial a}{\partial \psi_k^*} \frac{d\psi_k^*}{dt} = \\ &= \frac{\partial a}{\partial \psi_k} \left( -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial h}{\partial \psi_k^*} \right) + \frac{\partial a}{\partial \psi_k^*} \left( \frac{i}{\hbar} \frac{\partial h}{\partial \psi_k} \right) = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left( \frac{\partial a}{\partial \psi_k} \frac{\partial h}{\partial \psi_k^*} - \frac{\partial h}{\partial \psi_k} \frac{\partial a}{\partial \psi_k^*} \right) = \\ &= -\frac{i}{\hbar} (a * h - h * a) = -\frac{i}{\hbar} [a, h] \end{aligned}$$

es decir:

$$\frac{da(\psi, \psi^*)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [a, h] \quad (1.19)$$

como en mecánica cuántica. Nótese que tanto  $h(\psi, \psi^*)$  misma como la norma  $n(\psi, \psi^*)$  son cantidades conservadas.

### 1.3 Eigenvalores

En mecánica cuántica, el estado representado por la función de onda  $\psi_k$  tiene un valor dado  $\alpha$  para el observable representado por la matriz  $A_{kl}$  si  $\psi_k$  es eigenvector de  $A_{kl}$  con eigenvalor  $\alpha$ :

$$A_{kl}\psi_l = \alpha\psi_k \quad (1.20)$$

Weinberg generaliza esto postulando que el estado  $\psi_k$  tiene un valor dado  $\alpha$  para el observable  $a(\psi, \psi^*)$ , si y sólo si:

$$\frac{\partial a(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k} = \alpha\psi_k \quad (1.21)$$

Si  $a(\psi, \psi^*)$  es la bilineal  $\psi_k^* A_{kl} \psi_l$  estas dos últimas ecuaciones son idénticas. Contrayendo (1.21) con  $\psi_k^*$  y usando la homogeneidad de  $a(\psi, \psi^*)$  obtenemos:

$$\psi_k^* \frac{\partial a(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k} = a(\psi, \psi^*) = \alpha \psi_k^* \psi_k$$

lo cual nos permite expresar  $\alpha$  en términos de  $a(\psi, \psi^*)$  misma: <sup>9</sup>

$$\alpha = \frac{a(\psi, \psi^*)}{n(\psi, \psi^*)} \quad (1.22)$$

#### 1.3.1 Estados estacionarios de la energía

En caso de que  $a(\psi, \psi^*)$  sea un generador de simetrías, esto es:

$$\delta_t \psi_k = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial a(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k}$$

la ecuación (1.21) simplemente establece que:

$$\delta_a \psi_k = -\frac{i}{\hbar} \alpha \psi_k$$

es decir,  $\psi$  es invariante hasta una fase bajo la transformación generada por  $a(\psi, \psi^*)$ . En particular, un estado con un valor dado  $E$  de la energía tiene una dependencia temporal dada por (1.15) y (1.21), es decir:

$$\frac{d\psi_k(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E \psi_k$$

<sup>9</sup> En la ecuación (1.22)  $\psi$  se toma como el eigenvector que satisface (1.21). Nótese que  $\alpha$  es real puesto que  $a(\psi, \psi^*)$  y  $n(\psi, \psi^*)$  lo son.

esto es:

$$\psi_k(t) \propto e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (1.23)$$

que es una dependencia armónica como en mecánica cuántica.

### 1.3.2 Los estados propios como puntos estacionarios

Los eigenvectores de un observable representado por una función  $a(\psi, \psi^*)$  son los puntos estacionarios de la función:

$$\bar{a}(\psi, \psi^*) = \frac{a(\psi, \psi^*)}{n(\psi, \psi^*)} \quad (1.24)$$

y los eigenvalores son los valores que toma  $\bar{a}(\psi, \psi^*)$  en estos puntos estacionarios. Para ver esto diferenciamos (1.24) con respecto a  $\psi_k^*$  y  $\psi_k$ :

$$\frac{\partial \bar{a}}{\partial \psi_k^*} = \frac{1}{n} \frac{\partial a}{\partial \psi_k^*} - \frac{a}{n^2} \psi_k$$

$$\frac{\partial \bar{a}}{\partial \psi_k} = \frac{1}{n} \frac{\partial a}{\partial \psi_k} - \frac{a}{n^2} \psi_k^*$$

Si éstas se anulan entonces  $\psi$  es un eigenvector de  $a(\psi, \psi^*)$  con eigenvalor  $\frac{a}{n}$ . Por otra parte, si  $\psi$  es un eigenvector de  $a(\psi, \psi^*)$  con eigenvalor  $\alpha$  entonces de (1.21) y (1.22):

$$\frac{\partial a}{\partial \psi_k^*} - \alpha \psi_k = \frac{\partial a}{\partial \psi_k^*} - \frac{a}{n} \psi_k = 0$$

de modo que:

$$\frac{\partial \bar{a}}{\partial \psi_k^*} = \frac{\partial \bar{a}}{\partial \psi_k} = 0$$

### 1.3.3 Momentos y distribución de probabilidad

En mecánica cuántica se postula que en un estado representado por la función de onda  $\psi_k$ , cualquier medición de un conjunto de observables  $\{A, B, C, \dots\}$  que conmutan dará como valores promedio los valores esperados:

$$\frac{\psi_k^* A_{kl} \psi_l}{\psi_k^* \psi_k}, \quad \frac{\psi_k^* B_{kl} \psi_l}{\psi_k^* \psi_k}, \quad \text{etc.}$$

En la teoría no lineal se postula que en un estado representado por la función de onda  $\psi_k$ , la medición de un conjunto de observables  $\{A, B, C \dots\}$  representados por funciones reales y homogéneas  $\{a(\psi, \psi^*), b(\psi, \psi^*) \dots\}$  que conmutan (en el sentido generalizado) dará como valores promedio los valores esperados:

$$\langle a \rangle_\psi = \frac{a(\psi, \psi^*)}{n(\psi, \psi^*)} \quad , \quad \langle b \rangle_\psi = \frac{b(\psi, \psi^*)}{n(\psi, \psi^*)} \quad , \dots$$

Sin embargo, en mecánica cuántica el postulado para los valores esperados se puede usar para inferir la distribución de probabilidad de los valores que puede tomar cualquier observable en cualquier estado dado. Esto es porque cualquier observable conmuta con todas sus potencias, de modo que todas las potencias del observable se pueden medir simultáneamente y los valores esperados de éstas corresponden con los momentos de la distribución experimental. En contraste, en la teoría no lineal y como consecuencia de la falta de asociatividad, una función  $a(\psi, \psi^*)$  en general no va a conmutar con sus potencias  $a * a$ ,  $a * (a * a)$ , etc. De hecho, hay una ambigüedad en la definición de la  $n$ -ésima potencia del observable  $a$  para  $n > 2$ , de manera que no hay una forma de inferir una distribución de probabilidad partiendo de los valores esperados de las potencias de un observable, y esto representa un problema a superar en la teoría no lineal.

## 1.4 La partícula libre

### 1.4.1 La ecuación de Weinberg para sistemas continuos

En mecánica cuántica para una partícula libre de masa  $m$  descrita por la función de onda con componentes  $\Psi_k(\mathbf{x})$ , el valor esperado de la energía está dado por la función bilineal:

$$h_0 \equiv \langle H \rangle_\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \Psi_k^*(\mathbf{x}) \nabla^2 \Psi_k(\mathbf{x})$$

Como se supone aquí que los posibles términos no lineales en la ecuación de Schrödinger son muy pequeños, debería ser posible escribir cualquier observable  $a(\Psi, \Psi^*)$  en la forma:

$$a(\Psi, \Psi^*) = a_0(\Psi, \Psi^*) + \tilde{a}(\Psi, \Psi^*)$$

siendo  $a_0(\Psi, \Psi^*)$  la bilineal  $\int d^3x \Psi_k^*(\mathbf{x}) A_{kl} \Psi_l(\mathbf{x})$  usual de la mecánica cuántica y  $\tilde{a}(\Psi, \Psi^*)$  una perturbación pequeña no bilineal. En particular podemos

construir una función hamiltoniana no bilineal sumándole un término de energía interna  $\tilde{h}(\Psi, \Psi^*)$  a la energía cinética bilineal:

$$h(\Psi, \Psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \Psi_k^*(\mathbf{x}) \nabla^2 \Psi_k(\mathbf{x}) + \tilde{h}(\Psi, \Psi^*) \quad (1.25)$$

La posibilidad más simple es que  $\tilde{h}$  sea la integral sobre  $\mathbf{x}$  de una función escalar homogénea de  $\Psi_k(\mathbf{x})$  y  $\Psi_k^*(\mathbf{x})$ :

$$\tilde{h}(\Psi, \Psi^*) = \int d^3x \mathcal{H}(\Psi(\mathbf{x}), \Psi^*(\mathbf{x})) \quad (1.26)$$

donde:

$$\Psi_k \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Psi_k} = \Psi_k^* \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Psi_k^*} = \mathcal{H} \quad (1.27)$$

Con la función hamiltoniana total dada por (1.25) y (1.26) definimos:

$$\begin{aligned} \Phi_m(\epsilon) &\equiv h(\Psi_1, \dots, \Psi_N; \Psi_1^*, \dots, \Psi_m^* + \epsilon \delta \Psi_m^*, \dots, \Psi_N^*) = \\ &= \int d^3x \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi_k^*(\mathbf{x}) + \delta_{k,m} \epsilon \delta \Psi_k^*(\mathbf{x})) \nabla^2 \Psi_k(\mathbf{x}) + \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{H}(\Psi_1, \dots, \Psi_N; \Psi_1^*, \dots, \Psi_m^* + \epsilon \delta \Psi_m^*, \dots, \Psi_N^*) \right] \quad (1.28) \end{aligned}$$

con  $\epsilon$  un número real y  $\delta \Psi_m^*$  una función arbitraria de  $\mathbf{x}$ . Entonces la variación en  $h(\Psi, \Psi^*)$  respecto a una variación en la componente  $\Psi_m^*$  de la función de onda es:

$$\begin{aligned} \delta h &= \left[ \frac{d\Phi_m(\epsilon)}{d\epsilon} \right]_{\epsilon=0} = \\ &= \int d^3x \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \delta \Psi_m^* \nabla^2 \Psi_m + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Psi_m^*} \delta \Psi_m^* \right] = \\ &= \int d^3x \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_m(\mathbf{x}) + \frac{\partial \mathcal{H}(\Psi(\mathbf{x}), \Psi^*(\mathbf{x}))}{\partial \Psi_m^*} \right] \delta \Psi_m^*(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

De donde la derivada funcional de  $h$  respecto de  $\Psi_m^*$  es:

$$\frac{\delta h}{\delta \Psi_m^*} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_m(\mathbf{x}) + \frac{\partial \mathcal{H}(\Psi(\mathbf{x}), \Psi^*(\mathbf{x}))}{\partial \Psi_m^*} \quad (1.29)$$

De esta manera, la ecuación de Schrödinger no lineal para una partícula libre es:

$$i\hbar \frac{d\Psi_k}{dt} = \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\Psi_k^*} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_k + \frac{\partial\mathcal{H}(\Psi, \Psi^*)}{\partial\Psi_k^*} \quad (1.30)$$

Por ejemplo, podríamos tomar a  $\mathcal{H}$  de la siguiente forma:

$$\mathcal{H} = \sum_s \rho^{-s} \mathcal{H}_s \quad (1.31)$$

con  $s$  un entero que puede tomar valores  $0, 1, 2, \dots$ ; siendo  $\rho$  la densidad:

$$\rho(\Psi, \Psi^*) = \Psi_k^* \Psi_k \quad (1.32)$$

y  $\mathcal{H}_s$  una suma de términos proporcionales a  $1 + s$  factores de  $\Psi$ 's y  $\Psi^*$ 's, por ejemplo:

$$\mathcal{H}_0(\Psi, \Psi^*) = H_{kl} \Psi_k^* \Psi_l \quad (1.33)$$

$$\mathcal{H}_1(\Psi, \Psi^*) = G_{klmn} \Psi_k^* \Psi_l \Psi_m \Psi_n \quad (1.34)$$

etc. con  $H_{kl}, G_{klmn}$  constantes.

### 1.4.2 Separabilidad de la ecuación de Weinberg

Debido a la homogeneidad de  $\mathcal{H}$  (ecuación (1.27)), la ecuación de Schrödinger no lineal (1.30) admite soluciones separables:

$$\Psi_k(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) \psi_k(t) \quad (1.35)$$

Para ver esto sustituyamos directamente  $\Psi_k(\mathbf{x}, t)$  en (1.30), obtenemos:

$$i\hbar \left[ \frac{1}{\psi_k} \frac{d\psi_k}{dt} + \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi} \nabla^2 \phi + \frac{1}{\psi_k \phi} \frac{\partial\mathcal{H}(\Psi, \Psi^*)}{\partial\Psi_k^*} \quad (1.36)$$

ahora:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Psi_k} = \frac{\partial \psi_k^*}{\partial \Psi_k} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_k^*} = \frac{1}{\phi^*} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_k^*}$$

y usando la homogeneidad de  $\mathcal{H}$  vemos que:<sup>10</sup>

$$\mathcal{H}(\Psi, \Psi^*) = \mathcal{H}(\phi\psi, \phi^*\psi^*) = \phi^* \phi \mathcal{H}(\psi, \psi^*)$$

de modo que:

$$\frac{\partial \mathcal{H}(\Psi, \Psi^*)}{\partial \Psi_k} = \phi \frac{\partial \mathcal{H}(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k}$$

Entonces la ecuación (1.36) se puede reescribir como:

$$i\hbar \frac{1}{\psi_k} \frac{d\psi_k}{dt} - \frac{1}{\psi_k} \frac{\partial \mathcal{H}(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k^*} = \frac{1}{\phi} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi - i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \right] \quad (1.37)$$

lo que muestra que cada lado de esta ecuación es igual a una función de  $t$ , digamos  $f(t)$ :

$$i\hbar \frac{1}{\psi_k} \frac{d\psi_k}{dt} - \frac{1}{\psi_k} \frac{\partial \mathcal{H}(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k^*} = f(t) \quad (1.38)$$

$$\frac{1}{\phi} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi - i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \right] = f(t) \quad (1.39)$$

ahora podemos hacer el cambio de variable:

$$\phi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \phi(\mathbf{x}, t) y(t)$$

entonces (1.39) se transforma en:

$$\frac{1}{\phi} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi - i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \right] - i\hbar \frac{1}{y} \frac{\partial y}{\partial t} = f(t)$$

<sup>10</sup>Esta propiedad puede ser verificada fácilmente para  $\mathcal{H}$ 's con la forma particular (1.31), por ejemplo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\Psi, \Psi^*) &= \frac{\Psi_k^* \Psi_l G_{klmn} \Psi_m \Psi_n}{\Psi_l \Psi_k} = \\ &= \frac{(\phi^* \phi)^2 \psi_l^* \psi_l^* G_{klmn} \psi_m \psi_n}{\phi^* \phi \psi_l \psi_k} = \\ &= \phi^* \phi \mathcal{H}(\psi, \psi^*) \end{aligned}$$

vemos entonces que si escogemos  $g(t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int f(t) dt \right\}$  obtenemos:

$$\frac{1}{\phi} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi - i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \right] = 0$$

lo que muestra a su vez que podemos tomar  $f(t)$  idénticamente cero en (1.38) y (1.39) sin pérdida de generalidad. De esta manera obtenemos las ecuaciones:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi \quad (1.40)$$

$$i\hbar \frac{d\psi_k}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}(\psi, \psi^*)}{\partial \psi_k} \quad (1.41)$$

### 1.4.3 Sistema discreto de dos componentes

Como un primer ejemplo podemos aplicar el formalismo anterior a un sistema simple de dos componentes  $\psi_1, \psi_2$ , concentrándonos por el momento solamente en la ecuación (1.41). Para un sistema de dos componentes Weinberg[1] muestra que siempre es posible llevar a cabo una transformación:

$$\psi_k \rightarrow \tilde{\psi}_k(\psi, \psi^*)$$

tras la cual la densidad  $\mathcal{H}$  toma la forma simple:

$$\mathcal{H} = n \tilde{\mathcal{H}}(a) \quad (1.42)$$

donde:

$$n = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 \quad (1.43)$$

$$a = \frac{|\psi_2|^2}{n} \quad (1.44)$$

de esta manera la ecuación (1.41) toma la forma:

$$i\hbar \frac{d\psi_1(t)}{dt} = \psi_1 [\tilde{\mathcal{H}}(a) - a\tilde{\mathcal{H}}'(a)] \quad (1.45)$$

$$i\hbar \frac{d\psi_2(t)}{dt} = \psi_2 [\tilde{\mathcal{H}}(a) + (1-a)\tilde{\mathcal{H}}'(a)] \quad (1.46)$$

donde la prima denota diferenciación con respecto al argumento. Ahora mostraremos que los términos entre corchetes son independientes de  $t$ :

$$[a, \mathcal{H}] = \frac{\partial a}{\partial \psi_k} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_k^*} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_k} \frac{\partial a}{\partial \psi_k^*}$$

usando (1.44) obtenemos:

$$\frac{\partial a}{\partial \psi_k} = \frac{2|\psi_2| \psi_2^* \delta_{k,2}}{n} - \frac{|\psi_2|^2}{n^2} \psi_k^*$$

$$\frac{\partial a}{\partial \psi_k^*} = \frac{2|\psi_2| \psi_2 \delta_{k,2}}{n} - \frac{|\psi_2|^2}{n^2} \psi_k$$

de modo que:

$$\begin{aligned} [a, \mathcal{H}] &= \frac{2|\psi_2|}{n} \left( \psi_2^* \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_2^*} - \psi_2 \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_2} \right) = \\ &= \frac{4|\psi_2|}{n} \Im \left[ \psi_2 \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_2} \right] \end{aligned}$$

donde  $\Im [z]$  denota la parte imaginaria de  $z$ . Pero de (1.42):

$$\psi_2 \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_2} = \left[ \bar{\mathcal{H}}'(a) \left( 2|\psi_2| - \frac{|\psi_2|^2}{n} \right) + \bar{\mathcal{H}}(a) \right] \psi_2 \psi_2^*$$

lo que muestra que  $\psi_2 \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_2}$  es real, de manera que:

$$[a, \mathcal{H}] = 0$$

y por tanto  $a$  es independiente de  $t$  (cf. ecuación (1.19)). Similarmente:

$$\begin{aligned} [\bar{\mathcal{H}}(a), \mathcal{H}] &= [\bar{\mathcal{H}}(a), n\bar{\mathcal{H}}(a)] = \\ &= \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}}{\partial \psi_k} \frac{\partial (n\bar{\mathcal{H}})}{\partial \psi_k^*} - \frac{\partial (n\bar{\mathcal{H}})}{\partial \psi_k} \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}}{\partial \psi_k^*} = \\ &= \bar{\mathcal{H}} \left( \psi_k \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}}{\partial \psi_k} - \psi_k^* \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}}{\partial \psi_k^*} \right) = \\ &= 2\bar{\mathcal{H}} \Im \left[ \psi_k \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}}{\partial \psi_k} \right] = 0 \end{aligned}$$

Así vemos que las ecuaciones (1.45) tienen por solución:

$$\psi_k(t) = C_k e^{-i\omega_k(a)t} \quad (1.47)$$

con:

$$\hbar\omega_1 = \bar{\mathcal{H}}(a) - a\bar{\mathcal{H}}'(a) \quad (1.48)$$

$$\hbar\omega_2 = \bar{\mathcal{H}}(a) + (1-a)\bar{\mathcal{H}}'(a) \quad (1.49)$$

Nótese que las frecuencias dependen de las condiciones iniciales a través de  $a$ . Los eigenestados y eigenvalores de la energía los podemos encontrar aplicando el criterio de los puntos estacionarios, en este caso particular:

$$\frac{\partial \bar{\mathcal{H}}(a)}{\partial \psi_1} = -\frac{a}{n} \bar{\mathcal{H}}'(a) \psi_1$$

$$\frac{\partial \bar{\mathcal{H}}(a)}{\partial \psi_2} = \frac{(1-a)}{n} \bar{\mathcal{H}}'(a) \psi_2$$

Para  $\psi$  eigenestado de  $\mathcal{H}$  debemos tener:

$$\begin{cases} -\frac{a}{n} \bar{\mathcal{H}}'(a) \psi_1 = 0 \\ \frac{(1-a)}{n} \bar{\mathcal{H}}'(a) \psi_2 = 0 \end{cases}$$

Para todas las formas de la función  $\bar{\mathcal{H}}(a)$ , hay al menos dos soluciones:

$$A: \quad \psi_1 \neq 0, \quad \psi_2 = 0, \quad E = \bar{\mathcal{H}}(0)$$

$$B: \quad \psi_1 = 0, \quad \psi_2 \neq 0, \quad E = \bar{\mathcal{H}}(1)$$

#### 1.4.4 Cotas experimentales para el término no lineal

Considérese un sistema de dos componentes el cual en ausencia de correcciones no lineales tiene eigenvalores de la energía  $E_k$ ,  $k = 1, 2$ . Las ecuaciones (1.45) se pueden escribir como:

$$i\hbar \frac{d\psi_1(t)}{dt} = [E_1 + \bar{h}(a) - a\bar{h}'(a)] \psi_1 \equiv \hbar\omega_1(a) \psi_1$$

$$i\hbar \frac{d\psi_2(t)}{dt} = [E_2 + \bar{h}(a) + (1-a)\bar{h}'(a)] \psi_2 \equiv \hbar\omega_2(a) \psi_2$$

donde la prima denota diferenciación con respecto al argumento y  $\bar{h}(a)$  es no lineal en  $a$ , y las soluciones son también de la forma (1.47). La fase

relativa de las dos componentes de la función de onda (específicamente, la dependencia temporal de la coherencia  $\psi_1\psi_2^*$ ) evoluciona con una frecuencia:

$$\omega_p \equiv \omega_1(a) - \omega_2(a) = \omega_0 - \frac{1}{\hbar} \left( \frac{d\hbar}{da} \right)$$

donde  $\omega_0 = (E_1 - E_2)/\hbar$  es la frecuencia de transición atómica en ausencia de no-linealidades. Se puede introducir un parámetro  $\theta$  de la siguiente manera :

$$c_1 = \text{sen}(\theta/2) \quad , \quad c_2 = a^{\frac{1}{2}} = \text{cos}(\theta/2)$$

y puesto que un sistema de dos componentes es matemáticamente equivalente a un sistema de espín 1/2 en un campo magnético externo uniforme, donde  $\theta$  es el ángulo de inclinación del espín con respecto al campo y  $\omega_p$  es la frecuencia de precesión del espín alrededor del campo, el efecto de la corrección no lineal  $\left( \frac{d\hbar}{da} \right)$  es, hablando en el lenguaje del sistema equivalente, el de crear en la frecuencia de precesión  $\omega_p$  una dependencia en el ángulo  $\theta$ . En un trabajo experimental[2] se investigó la dependencia en  $\theta$  de la frecuencia de precesión en la transición hiperfina, referida como la transición de reloj :

$$(m_I, m_J) = \left( -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right) \rightarrow \left( -\frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right)$$

a  $\sim 303$  MHz en el estado base del ion  ${}^9\text{Be}^+$ . Con :

$$\psi_1 \equiv \left( -\frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right) \quad , \quad \psi_2 \equiv \left( -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right)$$

la forma más simple del término no lineal es :

$$\hbar(a) = 2\epsilon a^2$$

siendo  $\epsilon$  una medida de la intensidad de la corrección no lineal, lo que da lugar a una dependencia de  $\omega_p$  en  $\theta$  de la forma :

$$\omega_p = \omega_0 - 4 \left( \frac{\epsilon}{\hbar} \right) \text{cos}^2(\theta/2)$$

Los resultados que obtuvieron en la ref.[2] permiten establecer una cota superior de :

$$|\epsilon| < 2.4 \times 10^{-20} \text{eV}$$

para la contribución no lineal al hamiltoniano nuclear de  ${}^9\text{Be}^+$  que es menos de 4 partes en  $10^{27}$  de la energía de amarre por nucleón del núcleo de  ${}^9\text{Be}^+$ .

## Capítulo 2

# Propiedades de invariancia en la dinámica no-relativista

Este capítulo trata de las propiedades de sistemas dinámicos que pueden ser invariantes en un marco de descripción no-relativista. Las cantidades *conservadas* o cantidades que se mantienen invariantes bajo un grupo de transformaciones juegan un papel muy importante en la descripción de sistemas dinámicos, puesto que son el reflejo de las simetrías físicas del sistema y como tales, es necesario describirlas en un lenguaje matemático adecuado y funcional: la teoría de grupos. Para esto se explican muy brevemente las nociones básicas de teoría de grupos, grupos de Lie y álgebras de Lie, y posteriormente se describen como ejemplos al grupo de Galileo y los subgrupos que lo conforman. Seguiremos de cerca en estos temas la referencia [3]. A continuación se presenta un par de ejemplos de invariancia galileana: la ecuación de Schrödinger para una partícula libre y la teoría de campo galileana. Finalmente se muestra como la ecuación de Weinberg discutida en el capítulo anterior se puede presentar como un ejemplo más de invariancia galileana.

### 2.1 Nociones generales.

#### 2.1.1 Definiciones

Un grupo  $G$  es un conjunto con una composición binaria definida sobre sus elementos. Si  $a$  y  $b$  son cualesquiera dos elementos en  $G$ , entonces a la pareja ordenada  $a, b$  le corresponde un único elemento  $c$  en  $G$  denotado por  $c = ab$

y llamado el producto de  $a$  con  $b$ . La ley que determina  $c$  dados  $a$  y  $b$  se denomina la ley de composición del grupo y debe de tener las siguientes propiedades:

(i) Asociatividad: para cualesquiera tres elementos  $a, b, c \in G$  debemos tener :

$$(ab)c = a(bc)$$

(ii) Identidad: debe de existir un elemento único  $e \in G$ , llamado la identidad y tal que para todo  $a \in G$ :

$$ae = ea = a$$

(iii) Inversos: a todo  $a \in G$  le corresponde un elemento único  $a^{-1}$  llamado el inverso de  $a$  tal que:

$$aa^{-1} = a^{-1}a = e$$

Cualquier conjunto  $G$  con una ley de composición binaria con las propiedades anteriores se denomina grupo. Aún y cuando la ley de composición del grupo se requiere que sea asociativa, no es necesario que sea conmutativa; es decir, en general los elementos  $ab$  y  $ba$  no son el mismo. Si un grupo  $G$  es tal que todos sus elementos conmutan entre sí entonces se le llama un *grupo Abeliano*, de lo contrario es un grupo *no-Abeliano*. Un grupo  $G$  puede estar constituido por un número finito de elementos distintos, en cuyo caso se denomina un grupo finito; por otra parte si  $G$  tiene un número infinito de elementos distintos es un grupo infinito, y si sus elementos forman un conjunto no numerable se le denomina un grupo continuo.

### 2.1.2 Grupos de Lie

Muchos de los grupos de interés en Física son grupos con un conjunto de elementos infinito y no numerable tales como los grupos de rotaciones y traslaciones en el espacio tridimensional, el grupo Euclideo, el grupo de Galileo y el grupo de Lorentz. Como se mencionó grupos de este tipo son continuos en el sentido de que para *enumerar* sus elementos es necesario usar un número finito de parámetros reales o coordenadas que varían continuamente en ciertos intervalos. Queda claro que lo que tenemos aquí es una combinación de la idea de grupo con la idea matemáticamente distinta de continuidad; es entonces necesario introducir una definición precisa de la noción de continuidad en el contexto de la teoría de conjuntos para llegar a un tratamiento apropiado de estas ideas; es aquí en donde entran los conceptos de espacios topológicos, grupos topológicos y grupos de Lie entre otros. Para el propósito de este trabajo es suficiente establecer que un grupo  $G$  se

denomina grupo de Lie si se puede establecer una correspondencia uno-a-uno entre los elementos del grupo  $a \in G$  y vecindades de puntos dentro de una región abierta y acotada del espacio real Euclideo  $\mathfrak{R}^n$  para alguna  $n$ , de tal manera que dicha correspondencia es un mapeo continuo en ambas direcciones. De esta manera en un grupo de Lie somos capaces de asignar  $n$  variables reales como coordenadas a los elementos del grupo, el número  $n$  se denomina la dimensión del grupo de Lie y se supone que es finito. Los grupos emparentados con propiedades geométricas del espacio y tiempo tales como el grupo de rotaciones tridimensionales, el grupo Euclideo y los grupos de Galileo y de Lorentz son todos ellos grupos de Lie.

### 2.1.3 Las constantes de estructura del grupo

Considérese un grupo de Lie  $G$  en el cuál se han introducido coordenadas, entonces si  $a$  es un elemento de  $G$  corresponde a un punto en el espacio real euclideo  $n$ -dimensional con coordenadas:

$$a \rightarrow \alpha^1, \alpha^2, \dots, \alpha^n;$$

siendo la correspondencia entre  $a \in G$  y puntos en  $\mathfrak{R}^n$  uno-a-uno, conforme  $a$  varíe, los puntos  $\alpha^j$  variarán sobre alguna región de  $\mathfrak{R}^n$ . Se acostumbra suponer que a la identidad  $e$  le corresponde el origen en  $\mathfrak{R}^n$ :

$$e \rightarrow \alpha^j = 0, \quad j = 1, \dots, n.$$

Sea  $c = ab$  y designemos a las coordenadas de  $a, b, c \in G$  con  $\alpha^j, \beta^j$  y  $\gamma^j \in \mathfrak{R}^n$  respectivamente. La ley de composición del grupo se expresa dando las  $\gamma^j$  como funciones de  $\alpha, \beta$ :

$$c = ab \Rightarrow \gamma^j = f^j(\alpha^1, \dots, \alpha^n; \beta^1, \dots, \beta^n) = f^j(\alpha, \beta), \quad j = 1, \dots, n.$$

Se supone entonces que las  $f^j$  son funciones continuas en sus  $2n$  argumentos y que poseen derivadas parciales continuas con respecto a las  $\alpha$ 's y  $\beta$ 's hasta un orden dado. Como resultado de esta suposición resulta ser posible trasladar la propiedad de asociatividad de la multiplicación del grupo hacia una forma diferencial, es decir, en un sistema de ecuaciones diferenciales parciales para las  $f^j$ . A pesar de que las  $f^j$  son funciones de dos elementos del grupo, estas ecuaciones introducirán un conjunto de funciones de un sólo elemento del grupo, de tal forma que las  $f^j$  pueden ser determinadas en términos de ellas. La condición de que las ecuaciones diferenciales parciales

para las  $f^j$  tengan solución lleva a un conjunto de condiciones de integrabilidad. Resulta que estas condiciones muestran que la ley de multiplicación del grupo queda enteramente determinada en términos de un conjunto de constantes (números puros denotados  $c_{rs}^u$ ) llamados las constantes de estructura del grupo. Esto es, el grupo de Lie determina el conjunto de constantes de estructura y viceversa.<sup>1</sup> Desde luego, no cualquier conjunto de constantes  $c_{rs}^u$  puede servir como las constantes de estructura de algún grupo de Lie  $G$ , sino que deben de obedecer dos condiciones: la propiedad de antisimetría:

$$c_{rs}^u = -c_{sr}^u \quad (2.1)$$

y la identidad de Jacobi:

$$c_{pq}^j c_{jr}^k + c_{qr}^j c_{jp}^k + c_{rp}^j c_{jq}^k = 0 \quad (2.2)$$

Es apropiado mencionar que la existencia de las constantes de estructura  $c_{rs}^u$  junto con las propiedades anteriores son una consecuencia directa de la propiedad de asociatividad de la multiplicación del grupo. La afirmación recíproca también es cierta, lo que significa que la identidad de Jacobi para las constantes de estructura es equivalente a la asociatividad del producto del grupo: la identidad de Jacobi no es más que la expresión de asociatividad para elementos de  $G$ .

### 2.1.4 Álgebras de Lie

Ahora definiremos las álgebras de Lie. Una álgebra de Lie  $L$  es un espacio vectorial lineal finito  $n$ -dimensional<sup>2</sup> con elementos  $x, y, u, v, \dots$  en la cual se define un *paréntesis de Lie* el cual asocia con cada pareja ordenada de vectores  $x, y \in L$ , un tercer vector  $z \in L$ , escrito  $z = [x, y]$ , con las siguientes propiedades:

<sup>1</sup>Más precisamente, hay en general varios grupos de Lie, todos los cuáles dan lugar al mismo conjunto de constantes de estructura. Lo que es común a ellos es la estructura del grupo en una vecindad suficientemente pequeña de la identidad, esto es, para puntos suficientemente cerca del origen, y es esta estructura la que puede ser reconstruida a partir de las constantes de estructura.

<sup>2</sup>Aquí solo mencionaremos las álgebras de Lie reales sobre el campo de los números reales

1.  $[x, y] = -[y, x]$
2.  $[\lambda x + \mu x', y] = \lambda[x, y] + \mu[x', y]$
3. Para cualquiera tres vectores  $x, y, w$  la identidad de Jacobi se cumple:

$$[[x, y], w] + [[y, w], x] + [[w, x], y] = 0$$

Si  $e_i, i = 1, 2, \dots, n$  es una base para  $L$  como un espacio vectorial real, la propiedad de linealidad (2) muestra que el paréntesis de Lie de cualquier pareja  $x, y \in L$  puede ser determinado una vez conocidos los paréntesis de los vectores base  $e_i$  de unos con otros, puesto que estos se pueden expresar en términos de los mismos  $e_i$ :

$$[e_k, e_l] = c_{kl}^j e_j$$

y con las expresiones:  $x = x^k e_k, y = y^k e_k$  para  $x, y$ , tenemos:

$$z = [x, y] ; z^k = c_{lm}^k x^l y^m$$

Entonces las propiedades (1) y (3) del álgebra de Lie nos llevan de vuelta a las propiedades (2.1) y (2.2) respectivamente para las constantes de estructura  $c_{kl}^j$ . De esta manera, dado un grupo de Lie  $G$  éste conduce a su álgebra de Lie  $L$  asociada y recíprocamente. Ahora supóngase que lo que nos es dado es una álgebra de Lie  $L$ , las constantes de estructura  $c_{kl}^j$  que se necesitan para reconstruir el grupo surgen de escoger una base  $e_j$  para  $L$  o equivalentemente dados los paréntesis de Lie  $[u, v]$  de cualesquiera dos vectores  $u, v \in L$ . De esta manera es posible encontrar que los elementos del grupo  $G$  que se reconstruyen a partir de  $L$  se pueden escribir  $a = \exp(u), b = \exp(v), \dots$ , con  $u, v, \dots$  vectores en  $L$  y  $a, b, \dots \in G$ . Entonces para especificar la ley de composición para  $G$  bastará con dar una regla para escribir el producto  $\exp(u) \exp(v)$  como  $\exp(w)$  y calcular  $w$  a partir de  $u$  y  $v$ . De esta forma el grupo de Lie  $G$  se obtiene a partir de su álgebra de Lie asociada. <sup>3</sup>

### 2.1.5 Realizaciones y representaciones

Para nosotros, el interés principal en las álgebras de Lie y los grupos de Lie está en su relación con la Física. Nos interesa aprovechar las similitudes estructurales definiendo una correspondencia entre la dinámica y las

<sup>3</sup>De hecho muchos grupos de Lie  $G$  poseen la misma álgebra de Lie  $L$  asociada, lo que  $L$  determina de una forma única es un cierto grupo de Lie  $G$  denominado el grupo universal y que contiene todos aquellos grupos de Lie  $G$  que tienen a  $L$  como su álgebra.

álgebras de Lie, así como en la expresión de varios tipos de simetrías en un marco dinámico dado. Esto nos lleva a introducir los conceptos de realizaciones y representaciones. En los párrafos anteriores se describieron algunas propiedades de los grupos de Lie y las álgebras de Lie como estructuras matemáticas abstractas. Cualquier sistema matemático específico, con propiedades y operaciones apropiadas definidas en él se dice que proporciona una *realización* de un sistema abstracto (ya sea un grupo de Lie o una álgebra de Lie) si se puede definir un mapeo o correspondencia del sistema abstracto al sistema específico. Bajo este mapeo las relaciones u operaciones definidas en el sistema abstracto deben ser reflejadas por las operaciones definidas en el sistema matemático específico. En cualquier realización particular puede suceder que el sistema específico tenga más propiedades o más operaciones significativas definidas de las que son de hecho necesario para la realización; tales características *extra* son una manera de caracterizar la naturaleza de la realización. Así mismo, dado un sistema abstracto éste puede ser realizado de varias maneras esencialmente diferentes. Una representación es una clase particular de realización; por ejemplo, una realización del grupo  $SO(3)$  son las rotaciones ortogonales en el espacio tridimensional y una representación sería la obtenida con las matrices ortogonales tridimensionales.

### 2.1.6 Ejemplos de realizaciones de grupos

Tomemos un grupo  $G$  dado y denotemos sus elementos por  $a, b, \dots$ . Sea  $S$  algún conjunto con elementos  $\alpha, \beta, \dots$ . Si a cada  $a \in G$  se le puede asociar un mapeo  $T_a$  de  $S$  sobre  $S$  que es uno-a-uno e invertible, de tal forma que el producto de dos de estos mapeos  $T_a T_b$  es el mapeo  $T_{ab}$ :

$$T_a T_b = T_{ab} \tag{2.3}$$

entonces se dice que se tiene una realización de  $G$  por medio de transformaciones en  $S$ . Aquí la multiplicación de mapeos es la usual mientras que el producto de  $a$  con  $b$  está dado por la estructura del grupo. De esta manera se puede expresar el contenido de la ecuación (2.3) diciendo que la ley de multiplicación del grupo es preservada por los productos de los mapeos correspondientes. Nótese que debido a la asociatividad de la multiplicación de mapeos es posible hablar consistentemente de realizaciones de un grupo en la medida en que la propiedad de asociatividad de la multiplicación del grupo fué impuesta como una de las propiedades de definición del grupo. Una clase importante de realizaciones es la llamada representación o representación lineal. Esta surge cuando el conjunto  $S$  es un espacio vectorial lineal y

los mapeos  $T_a, T_b, \dots$  son transformaciones lineales en este espacio. Tales representaciones son los objetos que son de directa aplicación en mecánica cuántica. Las realizaciones de grupos que son relevantes en mecánica clásica hamiltoniana son realizaciones a través de transformaciones canónicas: aquí el conjunto  $S$  sería el espacio fase de algún sistema dinámico y los mapeos  $T_a, T_b, \dots$  transformaciones canónicas. *En lo siguiente tomaremos como sinónimos las palabras realización y representación.*

### 2.1.7 Ejemplos de realizaciones de álgebras

En lo que se refiere a álgebras de Lie, si se define el paréntesis de Lie de dos funciones en el espacio fase como su paréntesis de Poisson (PP), entonces se satisfacen todas las propiedades de una álgebra de Lie: tenemos linealidad y antisimetría así como la identidad de Jacobi. De esta manera los (PP) son una realización de los paréntesis de Lie y es la realización que es relevante en mecánica clásica. Otra realización de paréntesis de Lie es por medio de operadores diferenciales lineales de primer orden, con el conmutador  $[X, Y] = XY - YX$  sirviendo como definición del paréntesis de Lie de dos de tales operadores  $X$  y  $Y$ . Este uso del conmutador de dos operadores lineales como el paréntesis de Lie es la realización de dichos paréntesis relevante en mecánica cuántica. Otra forma para esta realización de importancia también en mecánica cuántica es una en donde se tienen matrices ( de dimensión finita o infinita ) que corresponden a operadores lineales en un espacio vectorial lineal, en donde de nuevo se adopta el conmutador  $AB - BA$  de dos matrices  $A, B$  como su paréntesis de Lie,  $AB$  representando el producto matricial de  $A$  y  $B$ .

## 2.2 El grupo de Galileo.

Como ejemplos de grupos de Lie de importancia física se describirán en esta sección los siguientes grupos: el grupo  $T_3$  de traslaciones en el espacio euclideo tridimensional, el grupo  $R(3)$  o  $SO(3)$  de rotaciones ortogonales propias en el espacio tridimensional, el grupo Euclideo  $E(3)$  constituido por una combinación de  $T_3$  y  $R(3)$ , y el grupo de Galileo que es el grupo de transformaciones en el espacio tiempo que describen la relatividad newtoniana. Estos grupos surgen de la siguiente manera. Una descripción de un sistema dinámico, ya sea un sistema de partículas o campos o cuerpos rígidos o una combinación de estos, siempre se da en relación a un sistema

de referencia particular en el espacio y el tiempo. Usualmente se asocia a un observador con cada sistema de referencia posible. Es posible escoger al sistema de referencia en infinitud de maneras y en general la forma de las ecuaciones dinámicas básicas depende del sistema elegido. Sin embargo, para un cuerpo dado de leyes físicas, a menudo sucede que una clase especial de sistemas de referencia se caracterizan porque las leyes básicas tienen la misma forma matemática en todos estos sistemas. Entonces se dice que estas leyes son invariantes con respecto a cambios en sistemas de referencia de un sistema a otro dentro de esta clase. En la práctica, son las propias leyes particulares las que deciden la manera en la cual la transformación de un sistema de referencia o marco de referencia a otro debe realizarse. Como ejemplos podemos mencionar que las ecuaciones newtonianas de movimiento bajo la acción de la gravedad no cambian yendo de un sistema inercial a otro si la relación entre las coordenadas de espacio-tiempo usadas en ambos sistemas es de la forma galileana. Similarmente las ecuaciones de Maxwell de la electrodinámica son invariantes si las coordenadas de espacio-tiempo de dos marcos inerciales están conectadas por las ecuaciones de transformación de Lorentz de la relatividad especial.

Con el objeto de describir la manera en la cual estas propiedades de invariancia son implementadas en un formalismo hamiltoniano, se deben relacionar los miembros del conjunto de sistemas de referencia *permitidos* unos con otros en términos matemáticamente apropiados. El conjunto de todas las transformaciones que se pueden hacer para ir de un sistema permitido a todos los otros tiene la estructura de un grupo, y dependiendo de cual familia de sistemas de referencia se está hablando se tiene uno u otro de los grupos mencionados antes. Este grupo es un objeto abstracto y tiene relevancia en ambas, la mecánica clásica y la mecánica cuántica. También se debe de entender en que forma la descripción de una situación o estado físico dado hecha por un observador permitido está relacionada a la descripción del mismo sistema físico por otro observador permitido. Dados dos observadores, el elemento del grupo de invariancia que conecta a sus sistemas coordenados está determinado, y este elemento debe entonces determinar la manera en la cual la descripción de un estado específico dada por un observador se debe traducir a la descripción dada por el otro observador. El hecho de que las leyes básicas tengan la misma forma matemática para ambos observadores implica lo siguiente: si existe una formulación lagrangiana ( y por ende una formulación hamiltoniana ) de las leyes para un observador, necesariamente debe de existir también para el otro. Esto implica que las reglas de transformación de un observador a otro no deben destruir la forma

hamiltoniana de las ecuaciones de movimiento.

Los primeros tres grupos mencionados anteriormente, los grupos de traslación, rotación y el grupo Euclideo, conciernen con lo que generalmente se denomina la *cinemática del sistema*; estos grupos relacionan las posibles elecciones de un sistema de referencia cartesiano y no involucran posibles cambios en la elección de la coordenada temporal. El grupo de Galileo, que contiene a los tres grupos cinemáticos  $T_3$ ,  $R(3)$ , y  $E(3)$  como subgrupos, describe un grupo de transformaciones espaciales y temporales que es relevante en el dominio no-relativista.

### 2.2.1 El grupo $T_3$ de traslaciones tridimensionales.

El grupo  $T_3$  describe las transformaciones entre todos aquellos sistemas co-ordenados cartesianos en el espacio tridimensional que difieren únicamente en la localización de su origen y no en la dirección de sus ejes. Dados dos de tales sistemas  $S$  y  $S'$ , la localización de  $S'$  relativa a  $S$  queda completamente determinada por el vector de desplazamiento con coordenadas  $a_j$  que va del origen  $O'$  de  $S'$  a  $O$  de  $S$ . Puesto que la transformación que lleva de  $S$  a  $S'$  se identifica como elemento de  $T_3$ , los elementos de  $T_3$  se identifican completamente por tres números reales  $(a_1, a_2, a_3)$ . Considerando transformaciones de un sistema fijo  $S$  a todos los sistemas posibles  $S'$ , se encuentran todos los posibles vectores de desplazamiento  $\mathbf{a}$ , y por ende todos los elementos de  $T_3$ . Si algún punto fijo  $P$  en el espacio tiene coordenadas  $x_j$  en  $S$ , tendrá coordenadas  $x'_j = x_j + a_j$  en  $S'$ . Si  $\mathbf{a}$  describe la transición de  $S$  a  $S'$  y  $\mathbf{b}$  de  $S'$  a  $S''$ , entonces la transición de  $S$  a  $S''$  que corresponde al producto de elementos  $a_j$  y  $b_j$  en  $T_3$ ,  $(b_j)(a_j)$ , tiene un vector de desplazamiento  $\mathbf{c}$  con componentes  $c_j = a_j + b_j$ . De esta manera la ley de composición del grupo  $T_3$  es lo mismo que la adición vectorial de los vectores de desplazamiento y  $T_3$  es Abeliano. El álgebra de Lie de  $T_3$  es de dimensión  $n = 3$  y, puesto que  $T_3$  es Abeliano, todas las constantes de estructura se anulan. Si se escoge como base para el álgebra de Lie los vectores de los subgrupos de traslación en las direcciones de los ejes cartesianos y llamando a estos vectores  $d_j$ , tenemos:

$$[d_j, d_k] = 0 \quad , \quad j, k = 1, 2, 3. \quad (2.4)$$

Si el vector de desplazamiento que va de  $S'$  a  $S$  tiene componentes  $a_j$ , se dice que el elemento de  $T_3$  correspondiente a este cambio de sistema de referencia es  $\exp(\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})$  y se escribe  $S' = \exp(\mathbf{a} \cdot \mathbf{d}) S$ . En esta notación la

ley de composición para  $T_3$  es:

$$\exp(u) \exp(v) = \exp(w) \quad , \quad w = u + v$$

$u, v, w$  son elementos del álgebra de Lie tridimensional, lo que es equivalente en este caso a ser vectores en el espacio tridimensional.

### 2.2.2 El grupo de rotaciones $R(3)$ .

El grupo  $R(3)$  consiste del conjunto de transformaciones que conectan a todos aquellos sistemas coordenados cartesianos  $S, S', \dots$ , los cuales tienen el mismo origen pero difieren en las direcciones de los tres ejes coordenados. La acción de  $R(3)$  en el espacio puede ser analizada de la siguiente manera: el sistema coordenado  $S$  con respecto al cual se miden las componentes de los vectores es sujeto a una rotación que lo lleva a un nuevo sistema  $S'$  mientras que los puntos del espacio se mantienen fijos (esta manera de describir las rotaciones se denomina la forma pasiva). Relativo al sistema original de ejes  $S$ , la orientación del sistema  $S'$  está completamente especificada al ser dados los cosenos directores de los tres ejes de  $S'$  con respecto a los ejes de  $S$ . Si  $e_j, e'_j$  son los vectores unitarios en la dirección de los ejes coordenados en  $S$  y  $S'$  respectivamente, entonces los cosenos directores están dados por:

$$A_{jk} = e'_j \cdot e_k \quad , \quad e'_j = A_{jk} e_k \quad , \quad e_k = A_{jk} e'_j \quad (2.5)$$

Si  $x$  es algún vector en el espacio tridimensional sus componentes  $x'_j$  en  $S'$  están dadas en términos de las componentes  $x_j$  en  $S$  por una transformación lineal involucrando los números  $A_{jk}$ :

$$x'_j = A_{jk} x_k$$

La matriz  $A$  consistente de los nueve elementos  $A_{jk}$  es una matriz ortogonal con determinante uno:

$$\det A = 1 \quad , \quad AA^T = A^T A = 1 \Rightarrow A_{jk} A_{j'k'} = \delta_{jj'} \quad , \quad A_{jk} A_{jk'} = \delta_{kk'} \quad (2.6)$$

Se puede pensar que estas matrices  $A$  proveen una representación matricial de  $R(3)$ . Se tiene un elemento  $a$  en el grupo abstracto  $R(3)$  correspondiente a cada matriz diferente  $A$  satisfaciendo (2.6) y viceversa. Sea  $a$  un elemento correspondiente a una matriz  $A$  que lleva de un sistema  $S$  a un sistema  $S'$ , y

sea  $b$  un elemento con matriz  $B$  que lleva del sistema  $S'$  al sistema  $S'' = bS'$ , con vectores unitarios  $e_j''$ , usando (2.5) obtenemos:

$$S'' = baS : e_j'' = B_{jl}e_l' = B_{jl}A_{lk}e_k = C_{jk}e_k \quad , \quad C_{jk} = B_{jl}A_{lk}$$

Entonces el elemento  $c = ba$  que lleva directamente de  $S$  a  $S''$  y es el producto de  $b$  con  $a$  corresponde a la matriz  $C$  la cual es el producto matricial de  $B$  con  $A$ :  $C = BA$ . Por tanto, la multiplicación del grupo corresponde a la multiplicación matricial en esta representación, y puesto que la multiplicación matricial no es conmutativa es claro que  $R(3)$  es no-Abeliano. El álgebra de Lie de  $R(3)$  es de dimensión  $n = 3$ . Si escogemos como base para ella los vectores  $l_1, l_2, l_3$  de los subgrupos de rotación alrededor del primero, segundo y tercer eje coordinado respectivamente, los paréntesis de Lie correspondientes son:

$$[l_1, l_2] = l_3 \quad , \quad [l_2, l_3] = l_1 \quad , \quad [l_3, l_1] = l_2;$$

ó:

$$[l_j, l_k] = \epsilon_{jkm}l_m \tag{2.7}$$

Si tomamos cualesquiera dos vectores  $\alpha = \alpha_j l_j$  y  $\beta = \beta_j l_j$  en el álgebra de Lie de  $R(3)$ , su paréntesis de Lie es:

$$[\alpha, \beta] = \alpha_j \beta_k [l_j, l_k] = \epsilon_{jkm} \alpha_j \beta_k l_m = (\alpha \times \beta)_j l_j$$

De modo que el proceso usual de tomar el producto vectorial de dos vectores en el espacio tridimensional resulta ser lo mismo que tomar el paréntesis de Lie de dos vectores en el álgebra de Lie de  $R(3)$ .

### Un ejemplo de realización de $R(3)$

En aplicaciones a la física  $R(3)$  es un grupo importante en parte por sí mismo y en parte porque aparece como un subgrupo en los otros grupos de transformaciones de espacio-tiempo. Como ilustración se presenta un ejemplo de realización de  $R(3)$  en mecánica clásica. Los paréntesis de Lie básicos para el álgebra de Lie de  $R(3)$  se resumen en (2.7). Una realización en paréntesis de Poisson (PP) de esta álgebra en un espacio fase con coordenadas  $p, q$  consiste de tres funciones  $J_j(p, q)$  satisfaciendo:

$$\{J_j(q, p), J_k(q, p)\} = \epsilon_{jkm} J_m(q, p) \tag{2.8}$$

donde  $\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial q_s} \frac{\partial B}{\partial p_s} - \frac{\partial A}{\partial p_s} \frac{\partial B}{\partial q_s}$ . La realización de  $R(3)$  más familiar es generada por la expresión para el momento angular de una partícula moviéndose en el espacio tridimensional. Con respecto a un sistema coordinado localizado en el espacio, una partícula se describe por tres pares de variables canónicas conjugadas  $(q_j, p_j)$ ,  $j = 1, 2, 3$ , las  $q$ 's son las coordenadas cartesianas y las  $p$ 's los momentos lineales cartesianos. Relativo a este sistema coordinado las componentes cartesianas del momento angular se definen como:

$$J_j(q, p) = \epsilon_{jkm} q_k p_m$$

Usando los (PP) básicos entre las  $q$ 's y las  $p$ 's se puede verificar que se tiene en efecto una realización del álgebra de Lie de  $R(3)$ :

$$\begin{aligned} \{J_j(q, p), J_k(q, p)\} &= \epsilon_{jmn} \epsilon_{krs} \{q_m p_n, q_r p_s\} = \\ &= \epsilon_{jmn} \epsilon_{krs} (q_m (-\delta_{nr}) p_s + p_n \delta_{ms} q_r) = \\ &= -\epsilon_{jmn} \epsilon_{kns} q_m p_s + \epsilon_{jmn} \epsilon_{krm} q_r p_n = \\ &= (\delta_{jk} \delta_{ms} - \delta_{js} \delta_{mk}) q_m p_s - (\delta_{jk} \delta_{nr} - \delta_{jr} \delta_{nk}) q_r p_n = \\ &= (\delta_{jr} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{kr}) q_r p_n = \\ &= \epsilon_{jkm} \epsilon_{mrn} q_r p_n \end{aligned}$$

de modo que:

$$\{J_j(q, p), J_k(q, p)\} = \epsilon_{jkm} J_m(q, p)$$

### 2.2.3 El grupo Euclideo $E(3)$ .

El grupo  $E(3)$  surge de combinar las operaciones de rotación de  $R(3)$  y las de traslación de  $T_3$ ; esto es, es el conjunto de transformaciones que conectan todos los posibles sistemas coordinados  $S, S', \dots$  en el espacio tridimensional. Si  $S$  y  $S'$  son dos de tales sistemas,  $S$  puede ser llevado a coincidir con  $S'$  en dos pasos: primero se aplica una rotación apropiada correspondiente a una matriz  $A$  para ir de  $S$  a  $S_1$ ,  $S_1$  con sus ejes paralelos a los de  $S'$ . Después se aplica una traslación a  $S_1$  para hacer que su origen coincida con el de  $S'$ . Si  $\mathbf{a}$  es el vector de posición que va del origen de  $S$  al de  $S'$ , este par de operaciones, primero un elemento de  $R(3)$  y luego uno de  $T_3$  se puede escribir:  $(A, \mathbf{a})$  y es un elemento general de grupo  $E(3)$ .

Si  $P$  es un punto fijo en el espacio con coordenadas  $x_j$  respecto a  $S$  y  $x'_j$  respecto a  $S'$ , entonces  $x'_j$  está relacionado con  $x_j$  de la manera siguiente:

$$x'_j = A_{jk} x_k + a_j$$

Puesto que para especificar un elemento de  $R(3)$  se necesitan tres parámetros, y tres más para especificar uno de  $T_3$ , se sigue que  $E(3)$  es un grupo de seis parámetros. Los seis vectores  $l_j, d_j$  definidos en las secciones anteriores forman una base para el álgebra de Lie de  $E(3)$ . La lista completa de paréntesis de Lie básicos para  $E(3)$  es:

$$\begin{aligned} [l_j, l_k] &= \epsilon_{jkm} l_m \\ [d_j, d_k] &= 0 \\ [l_j, d_k] &= \epsilon_{jkm} d_m \end{aligned} \quad (2.9)$$

Las proposiciones de la geometría Euclideana son aquellos enunciados concernientes a las relaciones entre objetos geométricos que son ciertas en todos los sistemas coordenados relacionados por elementos del grupo Euclideano.

### 2.2.4 El grupo de Galileo.

El grupo de Galileo es el grupo de transformaciones en el espacio y el tiempo que conectan a todos aquellos sistemas cartesianos que se denominan sistemas inerciales en mecánica newtoniana. La relación más general entre dos de tales sistemas es como sigue: el origen de la escala de tiempo en un sistema inercial  $S'$  puede estar recorrido comparado con aquel en  $S$ , la orientación de los ejes cartesianos en  $S'$  puede ser diferente a aquella en  $S$ , el origen del sistema cartesiano  $S'$  puede estarse moviendo en relación al origen de  $S$  con una velocidad uniforme. Se descartan las posibilidades de que los ejes en  $S'$  puedan estar sujetos a rotaciones dependientes del tiempo en relación a las direcciones de los ejes en  $S$  y que la velocidad del origen de  $S'$  en su movimiento pueda ser no uniforme. Esto es porque en cualquiera de estos casos  $S'$  no sería un sistema inercial si  $S$  lo fuera y las leyes de Newton no serían válidas en  $S'$ . Aparte de la forma misma de las ecuaciones de transformación, la suposición básica inherente en la relatividad newtoniana es que hay una escala absoluta de tiempo de modo que la única forma en que las variables de tiempo usadas por dos observadores inerciales pudieran diferir es que el cero de la escala para uno de ellos estuviera recorrido en relación al cero de la escala del segundo. La transición de un sistema inercial  $S$  a cualquier otro  $S'$  se puede alcanzar en cuatro pasos: primero se aplica una rotación espacial a  $S$  que nos da un sistema  $S_1$  y deja la coordenada temporal sin cambio. Segundo, se hace un cambio a un sistema  $S_2$  que tiene sus ejes espaciales paralelos a  $S_1$  pero que su origen se mueve con una velocidad uniforme  $\mathbf{v} = (v_j)$  relativa al origen de  $S_1$ , los orígenes de ambos

sistemas  $S_1$  y  $S_2$  coincidiendo al tiempo cero común a ellos. Tercero, se cambia la coordenada temporal de  $S_2$  en un monto  $b$  para llegar a un sistema  $S_3$  en el cual el tiempo se ha retrasado respecto a  $S_2$ . Finalmente, se va de  $S_3$  a  $S'$  por medio de una traslación espacial. En conjunto, la transición de  $S$  a  $S'$  involucra diez parámetros y entonces el grupo de Galileo es un grupo de diez parámetros. Siguiendo la secuencia de operaciones para ir de  $S$  a  $S'$  se puede escribir:

$$S' = (A, v_j, b, a_j) S$$

y se denota un elemento general del grupo por  $(A, v_j, b, a_j)$ . Si  $(x_j, t)$  y  $(x'_j, t')$  son las coordenadas de espacio-tiempo en  $S$  y  $S'$  respectivamente, la ley de transformación es:

$$x'_j = A_{jk} x_k - v_j t + a_j, \quad t' = t - b$$

y éstas son las ecuaciones de transformación básicas de la relatividad newtoniana.

Una base para el álgebra de Lie del grupo de Galileo consiste, aparte de los seis vectores  $l_j, d_j$ , del vector  $h$  de traslación temporal y de los tres vectores  $g_j$  correspondientes a los subgrupos de transformaciones de velocidad en las tres direcciones. Los paréntesis de Lie correspondientes son los siguientes:

$$\begin{aligned} [l_j, l_k] &= \epsilon_{jkm} l_m & [l_j, g_k] &= \epsilon_{jkm} g_m \\ [g_j, g_k] &= [h, d_k] = [d_j, d_k] = [l_j, h] = 0 & & (2.10) \\ & [l_j, d_k] &= \epsilon_{jkm} d_m \\ [g_j, h] &= d_j & [g_j, d_k] &= \mu \delta_{jk} \end{aligned}$$

donde  $\mu$  conmuta con todos los generadores.

## 2.3 Algunos ejemplos de invariancia de Galileo.

### 2.3.1 La ecuación de Schrödinger para una partícula libre.

Ahora ilustraremos los conceptos anteriores usando los principios de invariancia para determinar la forma de las ecuaciones de movimiento para un sistema particular. Supongamos que existe un marco teórico en el cual una partícula libre queda descrita por un campo complejo  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  que obedece una ecuación de movimiento lineal de primer orden de la forma:

$$i\hbar\dot{\Psi}(\mathbf{x}, t) = H_{op}\Psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.11)$$

donde  $H_{op}$  es un operador lineal hermiteano y  $\hbar$  es una constante. Las propiedades de invariancia pueden ser utilizadas para determinar la forma funcional del operador  $H_{op}$ . La ecuación de movimiento (2.11) puede ser obtenida de la acción :

$$A = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_{op} \right) \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.12)$$

variando independientemente  $\Psi$  y  $\Psi^*$ . La invariancia bajo traslaciones temporales y espaciales requiere que  $H_{op}$  no sea explícitamente dependiente ni de  $\mathbf{x}$  ni de  $t$ , mientras que la invariancia rotacional restringe a  $H_{op}$  a ser un operador escalar.

### El momento lineal total

Ahora es necesario construir el generador de transformaciones galileanas, para este propósito se necesita del generador de desplazamientos espaciales, que es el momento total. Para obtenerlo se aplica una traslación infinitesimal:

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \delta\mathbf{x}(t) \quad [\delta\mathbf{x}(t) \text{ independiente de } \mathbf{x}] \quad (2.13)$$

esto cambia los campos de la siguiente manera:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \Psi(\mathbf{x} - \delta\mathbf{x}(t), t) = \Psi(\mathbf{x}, t) - \delta\mathbf{x}(t) \cdot \nabla \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.14)$$

$$\Psi^*(\mathbf{x}, t) \rightarrow \Psi^*(\mathbf{x} - \delta\mathbf{x}(t), t) = \Psi^*(\mathbf{x}, t) - \delta\mathbf{x}(t) \cdot \nabla \Psi^*(\mathbf{x}, t) \quad (2.15)$$

la variación de la acción (2.12) es entonces, a primer orden en  $\delta\mathbf{x}(t)$ :

$$\begin{aligned} \delta A = & \left\{ \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) (-i\hbar \nabla) \Psi(\mathbf{x}, t) \right\} \cdot \delta\mathbf{x}(t) \Big|_{t_1}^{t_2} + \\ & + \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \left\{ -i\hbar \left( \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right) \delta\Psi(\mathbf{x}, t) - \right. \\ & \left. - \Psi^*(\mathbf{x}, t) H_{op} (\delta\Psi(\mathbf{x}, t)) + \delta\Psi^*(\mathbf{x}, t) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_{op} \right) \Psi(\mathbf{x}, t) \right\} \end{aligned}$$

donde :

$$\delta\Psi(\mathbf{x}, t) = \Psi(\mathbf{x} - \delta\mathbf{x}(t), t) - \Psi(\mathbf{x}, t) = -\delta\mathbf{x}(t) \cdot \nabla\Psi(\mathbf{x}, t)$$

$$\delta\Psi^*(\mathbf{x}, t) = \Psi^*(\mathbf{x} - \delta\mathbf{x}(t), t) - \Psi^*(\mathbf{x}, t) = -\delta\mathbf{x}(t) \cdot \nabla\Psi^*(\mathbf{x}, t)$$

Pero como  $H_{op}$  es hermiteano:

$$\int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) H_{op}(\delta\Psi(\mathbf{x}, t)) = \int d^3x (H_{op}\Psi(\mathbf{x}, t))^* \delta\Psi(\mathbf{x}, t)$$

y entonces:

$$\begin{aligned} \delta A = & \left\{ \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) (-i\hbar\nabla) \Psi(\mathbf{x}, t) \right\} \cdot \delta\mathbf{x}(t) \Big|_{t_1}^{t_2} + \\ & + \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \left\{ \left[ -i\hbar \left( \frac{\partial\Psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right) - \right. \right. \\ & \left. \left. - (H_{op}\Psi(\mathbf{x}, t))^* \right] \delta\Psi(\mathbf{x}, t) + \left[ \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_{op} \right) \Psi(\mathbf{x}, t) \right] \delta\Psi^*(\mathbf{x}, t) \right\} \end{aligned}$$

Puesto que se consideran a  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  y  $\Psi^*(\mathbf{x}, t)$  como independientes, vemos que si se exige que no haya variación en los puntos extremos  $t_1$  y  $t_2$ , la condición de extremo  $\delta A = 0$  lleva a las ecuaciones de movimiento:

$$i\hbar \frac{\partial\Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = H_{op}\Psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.16)$$

$$-i\hbar \frac{\partial\Psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = (H_{op}\Psi(\mathbf{x}, t))^* \quad (2.17)$$

como se afirmaba. Por otra parte, si permitimos variaciones en los puntos extremos  $t_1$  y  $t_2$  y suponemos las ecuaciones de movimiento (2.16) y (2.17) entonces:

$$\delta A = \left\{ \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) (-i\hbar\nabla) \Psi(\mathbf{x}, t) \right\} \cdot \delta\mathbf{x}(t) \Big|_{t_1}^{t_2} \quad (2.18)$$

lo que nos lleva a identificar el momento total del sistema como:

$$\mathbf{P} = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) (-i\hbar\nabla) \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.19)$$

Esto es una generalización de lo siguiente: considerese un sistema de  $N$  partículas con masa  $m$  y posiciones  $\mathbf{q}_i, i = 1, \dots, N$ , sujetas solo a fuerzas mutuas derivables de potenciales interpartícula  $v_{ij}$ . Se define la acción como:

$$A = \int_{t_1}^{t_2} L dt$$

con:

$$L(\mathbf{q}_j, \dot{\mathbf{q}}_j) \equiv \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{q}}_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|)$$

Si se hace un cambio infinitesimal en la trayectoria:

$$\mathbf{q}_i(t) \rightarrow \mathbf{q}_i(t) + \delta \mathbf{q}_i(t)$$

la variación en  $A$  a primer orden en  $\delta \mathbf{q}$  es:

$$\delta A = \int_{t_1}^{t_2} \left( \sum_{i=1}^N m \dot{\mathbf{q}}_i \cdot \delta \dot{\mathbf{q}}_i - \sum_{i \neq j} \nabla_i v_{ij} \cdot \delta \mathbf{q}_i \right) dt$$

Integrando por partes se tiene:

$$\delta A = \sum_{i=1}^N \left\{ m \dot{\mathbf{q}}_i \cdot \delta \mathbf{q}_i \right\}_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left( -m \ddot{\mathbf{q}}_i - \sum_{i \neq j} \nabla_i v_{ij} \right) \cdot \delta \mathbf{q}_i dt$$

si las partículas obedecen las ecuaciones de Newton entonces:

$$m \ddot{\mathbf{q}}_k = - \sum_{j \neq k} \nabla_k v_{kj}$$

y obtenemos:

$$\delta A = \sum_{i=1}^N \left\{ m \dot{\mathbf{q}}_i \cdot \delta \mathbf{q}_i \right\}_{t_1}^{t_2}$$

Si la transformación es una traslación dependiente del tiempo:

$$\delta \mathbf{q}_i(t) = \delta \mathbf{x}(t) \quad , \quad (\text{independiente de } i)$$

entonces:

$$\delta A = \left\{ \sum_{i=1}^N m \dot{\mathbf{q}}_i(t) \right\} \cdot \delta \mathbf{x}(t) \Big|_{t_1}^{t_2} = \mathbf{P}(t) \cdot \delta \mathbf{x}(t) \Big|_{t_1}^{t_2}$$

donde  $\mathbf{P}(t)$  es el momento total al tiempo  $t$ . De esta manera la transformación de coordenadas consistente en una traslación genera el momento total del sistema.

### La coordenada canónica conjugada

Ahora considérese lo que la transformación (2.13) hace con:

$$\mathbf{Q} \equiv \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.20)$$

El cambio en  $\mathbf{Q}$  es:

$$\delta Q_r = \int d^3x [\Psi^*(\mathbf{x}, t) x_r (-\nabla \Psi(\mathbf{x}, t)) + (-\nabla \Psi^*(\mathbf{x}, t)) x_r \Psi(\mathbf{x}, t)] \cdot \delta \mathbf{x}$$

haciendo uso de la identidad vectorial:

$$\nabla \cdot (\varphi \mathbf{F}) = (\nabla \varphi) \cdot \mathbf{F} + \varphi \nabla \cdot \mathbf{F}$$

obtenemos:

$$\begin{aligned} \int d^3x (-\nabla \Psi^*(\mathbf{x}, t)) \cdot (x_r \Psi(\mathbf{x}, t) \delta \mathbf{x}) = \\ = \int d^3x [\Psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \cdot (x_r \Psi(\mathbf{x}, t) \delta \mathbf{x}) - \nabla \cdot (\Psi^*(\mathbf{x}, t) x_r \Psi(\mathbf{x}, t) \delta \mathbf{x})] \end{aligned}$$

por el teorema de la divergencia la segunda integral es cero si suponemos que los campos se anulan en infinito, entonces:

$$\begin{aligned} \delta Q_r &= \int d^3x [\Psi^*(\mathbf{x}, t) x_r (-\nabla \Psi(\mathbf{x}, t)) \cdot \delta \mathbf{x} + \Psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \cdot (x_r \Psi(\mathbf{x}, t) \delta \mathbf{x})] = \\ &= \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \left( -x_r \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial x_s} \delta x_s + \frac{\partial}{\partial x_s} (x_r \Psi(\mathbf{x}, t) \delta x_s) \right) = \\ &= \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \left( -x_r \frac{\partial}{\partial x_s} + \frac{\partial}{\partial x_s} x_r \right) \Psi(\mathbf{x}, t) \delta x_s \end{aligned}$$

el operador diferencial  $\frac{\partial}{\partial x_s}$  actuando sobre todo lo que esté a su derecha. Haciendo explícitamente las derivadas encontramos:

$$\delta Q_r = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t) \delta x_s \delta_{rs} = \delta x_r \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t)$$

Ahora como  $\mathbf{P}$  dado por (2.19) es el generador de la transformación (2.13), debemos tener también:

$$\delta Q_r = -\{P_s, Q_r\} \delta x_s$$

de donde:

$$\{P_s, Q_r\} \delta x_s = -\delta x_r \int d^3x \Psi^* (\mathbf{x}, t) \Psi (\mathbf{x}, t) \quad (2.21)$$

la integral de la derecha es la integral de normalización y es una constante de movimiento. Esto puede ser verificado por medio de la transformación de *norma*:

$$\Psi (\mathbf{x}, t) \rightarrow e^{i\alpha} \Psi (\mathbf{x}, t) \quad (2.22)$$

$$\Psi^* (\mathbf{x}, t) \rightarrow e^{-i\alpha} \Psi^* (\mathbf{x}, t) \quad (2.23)$$

en forma infinitesimal esta transformación es:

$$\delta \Psi (\mathbf{x}, t) = i\delta\alpha \Psi (\mathbf{x}, t)$$

$$\delta \Psi^* (\mathbf{x}, t) = -i\delta\alpha \Psi^* (\mathbf{x}, t)$$

Suponiendo las ecuaciones de movimiento (2.16) y (2.17), la variación en la acción  $A$  para una  $\delta\alpha(t)$  dependiente del tiempo es:

$$\begin{aligned} \delta A &= i\hbar \int d^3x \Psi^* (\mathbf{x}, t) \delta \Psi (\mathbf{x}, t) \Big]_{t_1}^{t_2} = \\ &= -\hbar \delta\alpha (t) \int d^3x \Psi^* (\mathbf{x}, t) \Psi (\mathbf{x}, t) \Big]_{t_1}^{t_2} \end{aligned} \quad (2.24)$$

la integral de normalización aparece entonces como la generadora de la transformación (2.22) y (2.23). Pero esta transformación obviamente deja invariante a la acción, de donde la variación en  $A$  es cero:  $\delta A = 0$ . La ecuación anterior entonces muestra que la normalización es constante en el tiempo; ésta se acostumbra tomarla como igual a uno y, con esta elección, la ecuación (2.21) resulta:

$$\{P_s, Q_r\} = -\delta_{rs} \quad (2.25)$$

por tanto  $Q_r$  toma el papel de variable canónica conjugada de  $P_r$ .

## Relatividad galileana

El generador de la transformación de Galileo puede ser construido ahora:

$$\mathbf{G} = \mathbf{P}t - m\mathbf{Q} \quad (2.26)$$

éste describe una traslación proporcional al tiempo y satisface el (PP):

$$\{P_r, G_s\} = -m\delta_{rs} \quad (2.27)$$

como se requiere para una realización del álgebra de Lie del grupo vía el (PP). Ahora se pide que  $\mathbf{G}$  sea una constante de movimiento:

$$\left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial t}\right) - \{H, \mathbf{G}\} = 0 \quad (2.28)$$

para esto necesitamos el hamiltoniano  $H$ . Éste lo podemos obtener de la acción  $A$  haciendo una traslación temporal dependiente del tiempo:

$$t \rightarrow t + \delta t(t) \quad (2.29)$$

lo cual a su vez cambia los campos en:

$$\delta \Psi(\mathbf{x}, t) = -\delta t(t) \dot{\Psi}(\mathbf{x}, t)$$

$$\delta \Psi^*(\mathbf{x}, t) = -\delta t(t) \dot{\Psi}^*(\mathbf{x}, t)$$

en donde las derivadas temporales se evalúan en la trayectoria física. Nótese que la acción es cambiada cuando se aplica la transformación (2.29) puesto que depende del tiempo implícitamente a través de los campos, y también porque se tienen segmentos diferentes de trayectoria entre los tiempos marcados  $t_1$  y  $t_2$ . Esto último se remedia cambiando simultáneamente los puntos extremos en:

$$t_1 \rightarrow t'_1 = t_1 + \delta t(t_1) \quad , \quad t_2 \rightarrow t'_2 = t_2 + \delta t(t_2)$$

Entonces definiendo:

$$L = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_{op} \right) \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.30)$$

la variación en  $A$  es:

$$\begin{aligned}
\delta A &= \int_{t_1'}^{t_2'} L(t') dt - \int_{t_1}^{t_2} L(t) dt = \\
&= \int_{t_1'}^{t_1} L(t') dt + \int_{t_1}^{t_2} L(t') dt + \int_{t_2}^{t_2'} L(t') dt - \int_{t_1}^{t_2} L(t) dt = \\
&\int_{t_1}^{t_2} (L(t') - L(t)) dt + \int_{t_2}^{t_2'} L(t') dt - \int_{t_1}^{t_1'} L(t') dt
\end{aligned}$$

Considerando  $\delta t(t)$  infinitesimal, las dos últimas integrales son:

$$\int_{t_k}^{t_k'} L(t') dt \simeq L(t_k) (t_k' - t_k) = L(t_k) \delta t(t_k)$$

y entonces:

$$\delta A = \int_{t_1}^{t_2} (L(t') - L(t)) dt + L(t) \delta t(t) \Big]_{t_1}^{t_2} \quad (2.31)$$

la primera integral en (2.31) es la variación usual, suponiendo de nuevo las ecuaciones de movimiento (2.16) y (2.17), ésta se puede escribir:

$$\begin{aligned}
\int_{t_1}^{t_2} (L(t') - L(t)) dt &= i\hbar \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \delta \Psi(\mathbf{x}, t) \Big]_{t_1}^{t_2} = \\
&= -i\hbar \delta t(t) \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \Big]_{t_1}^{t_2} \quad (2.32)
\end{aligned}$$

Por tanto, de (2.31) y (2.32) y usando (2.30):

$$\delta A = -\delta t(t) \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) H_{op} \Psi(\mathbf{x}, t)$$

lo que identifica al generador de la transformación (2.29), el hamiltoniano como:

$$H = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) H_{op} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.33)$$

ahora:

$$\{H, \mathbf{G}\} = \{H, \mathbf{P}\} t - m \{H, \mathbf{Q}\} \quad (2.34)$$

el primero de estos (PP) se anula en virtud de invariancia traslacional. El segundo puede ser evaluado considerando el efecto de la traslación temporal (2.29) en  $\mathbf{Q}$ :

$$\delta \mathbf{Q} = -\delta t(t) \int d^3x \left\{ \Psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \left( \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right) \mathbf{x} \Psi(\mathbf{x}, t) \right\}$$

y usando las ecuaciones de movimiento (2.16) y (2.17) obtenemos:

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{Q} &= \left( \frac{i}{\hbar} \right) \delta t(t) \left\{ \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} H_{op} \Psi(\mathbf{x}, t) - \int d^3x (H_{op} \Psi(\mathbf{x}, t))^* \mathbf{x} \Psi(\mathbf{x}, t) \right\} = \\ &= \left( \frac{i}{\hbar} \right) \delta t(t) \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \{ \mathbf{x} H_{op} - H_{op} \mathbf{x} \} \Psi(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (2.35)$$

Por otro lado, siendo  $H$  el generador de la transformación (2.29) debemos tener

$$\delta \mathbf{Q} = -\{H, \mathbf{Q}\} \delta t \quad (2.36)$$

y como de (2.28):

$$\mathbf{P} - m \{H, \mathbf{Q}\} = 0 \quad (2.37)$$

usando (2.19), (2.35), (2.36) y (2.37) obtenemos:

$$\int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \left\{ -i\hbar \nabla_x - \frac{im}{\hbar} (H_{op} \mathbf{x} - \mathbf{x} H_{op}) \right\} \Psi(\mathbf{x}, t) = 0$$

y puesto que esto es para toda  $\Psi(\mathbf{x}, t)$ , debemos satisfacer la ecuación operacional:

$$-i\hbar \nabla_x - \frac{im}{\hbar} (H_{op} \mathbf{x} - \mathbf{x} H_{op}) = 0 \quad (2.38)$$

para encontrar  $H_{op}$  es conveniente pasar a una representación de Fourier:

$$\Psi(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3x e^{-i(\frac{t}{\hbar})\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.39)$$

esto transforma  $H_{op, \mathbf{x}}$  en  $H_{op}(\mathbf{p})$ ,  $-i\hbar \nabla_x$  en  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{x}$  en  $i\hbar \nabla_p$ . En esta representación (2.38) se transforma en:

$$\mathbf{p} = m (\nabla_p H_{op}(\mathbf{p}) - H_{op}(\mathbf{p}) \nabla_p) \quad (2.40)$$

o equivalentemente:

$$\mathbf{p} = m (\nabla_p H_{op}) \quad (2.41)$$

de donde:

$$H_{op}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu \quad (2.42)$$

siendo  $\mu$  una constante. Transformando al espacio de configuración obtenemos finalmente:

$$H_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu \quad (2.43)$$

De esta manera se ha determinado la forma de  $H_{op}$  y por ende la forma de las ecuaciones de movimiento. Nótese que no se hizo uso del contenido físico de la ecuación (2.11). Simplemente se usaron las especificaciones generales ( descripción del sistema por un campo complejo que satisface una ecuación de movimiento lineal ) para fijar la forma determinada que deben tomar las ecuaciones de movimiento si se ha de preservar la invariancia galileana.

### 2.3.2 Sistemas continuos y campos multicomponentes.

#### El campo escalar

Como otro ejemplo se discute primero el caso de un sistema involucrando un solo campo  $\phi(\mathbf{x}, t)$  en el espacio euclideo. Un campo escalar o un campo con una sola componente es una función única definida en el espacio euclideo. <sup>4</sup> Un cierto estado del campo queda descrito al dar el valor del campo en cada punto del espacio, en un sistema coordenado  $S$  esto se traduce en especificar una función  $\phi(\mathbf{x}, t)$ ,  $x_j$  siendo las coordenadas asignadas en  $S$  a un punto  $P$  en general. Supondremos que el sistema está descrito por un lagrangiano dependiente de  $\phi(\mathbf{x}, t)$  y  $\frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t)$  para toda  $\mathbf{x}$  y el instante  $t$ :

$$L \left[ \phi(\mathbf{x}, t), \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) \right] \quad (2.44)$$

Puesto que se tiene un continuo de coordenadas generalizadas  $\phi(\mathbf{x}, t)$  para toda  $\mathbf{x}$  y sus velocidades generalizadas  $\frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t)$ , el lagrangiano es una funcional de estas variables, y aunque la derivada temporal de  $\phi(\mathbf{x}, t)$  se trata como independiente de  $\phi(\mathbf{x}, t)$ , las derivadas espaciales  $\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}}$  no son nuevas

---

<sup>4</sup>Pos simplicidad suponemos que se trata de un campo real

cantidades independientes sino que son, en un sentido generalizado, funciones de las coordenadas básicas  $\phi(\mathbf{x}, t)$ . Esto es claro ya que si los valores numéricos de  $\phi(\mathbf{x}, t)$  estuvieran especificados para toda  $\mathbf{x}$  a un cierto tiempo  $t$ , entonces también se sabrían los valores de  $\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}}$  en ese tiempo. Ahora imaginemos alterar a  $\phi(\mathbf{x}, t)$  y  $\frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t)$  en  $L$  por pequeñas cantidades  $\delta\phi(\mathbf{x}, t)$  y  $\delta\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)$ , siendo estos incrementos independientes uno del otro en cualquier instante de tiempo, y calculemos el cambio en  $L$ . Siempre se puede escribir el cambio en  $L$  en la forma:

$$\delta L[\phi, \dot{\phi}] = \int d^3x \left( \frac{\delta L}{\delta\phi(\mathbf{x}, t)} \delta\phi(\mathbf{x}, t) + \frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} \delta\dot{\phi}(\mathbf{x}, t) \right). \quad (2.45)$$

Los coeficientes  $\left(\frac{\delta L}{\delta\phi}\right)(\mathbf{x}, t)$ ,  $\left(\frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}}\right)(\mathbf{x}, t)$  de los incrementos independientes  $\delta\phi$  y  $\delta\dot{\phi}$  se definen como las derivadas parciales funcionales de  $L$  con respecto a  $\phi(\mathbf{x}, t)$  y  $\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)$  respectivamente. Las ecuaciones de Euler-Lagrange entonces toman la forma:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} \right) - \frac{\delta L}{\delta\phi(\mathbf{x}, t)} = 0 \quad (2.46)$$

Se define ahora el momento canónico conjugado a  $\phi$  como:

$$\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} \quad (2.47)$$

y el hamiltoniano  $H$  es ahora una funcional escrita en términos de los campos canónicos conjugados  $\pi, \phi$ :

$$H[\phi, \pi] = \int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) \dot{\phi}(\mathbf{x}, t) - L[\phi, \dot{\phi}] \quad (2.48)$$

Los (PP) fundamentales entre las  $\phi$ 's y las  $\pi$ 's son:

$$\{\phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y})\} = \{\pi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y})\} = 0, \quad \{\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y})\} = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (2.49)$$

En el esquema hamiltoniano, una variable dinámica general  $F$  es una funcional de  $\phi, \pi$ , para tales variables el (PP) toma la forma:

$$\{F[\phi, \pi], G[\phi, \pi]\} = \int d^3x \left( \frac{\delta F}{\delta\phi(\mathbf{x}, t)} \frac{\delta G}{\delta\pi(\mathbf{x}, t)} - \frac{\delta F}{\delta\pi(\mathbf{x}, t)} \frac{\delta G}{\delta\phi(\mathbf{x}, t)} \right) \quad (2.50)$$

y la ecuación de movimiento general es:

$$\frac{d}{dt} F[\phi, \pi] = \{F[\phi, \pi], H[\phi, \pi]\} \quad (2.51)$$

En todas estas expresiones las derivadas funcionales con respecto a  $\phi$  y  $\pi$  que aparecen se definen de la misma manera en que  $\frac{\delta L}{\delta \phi}$  y  $\frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}}$  se definieron.

Para muchos sistemas de interés el lagrangiano  $\mathcal{L}$  es *local*; esto es, se expresa como una integral en el espacio tridimensional de una función  $\mathcal{L}$  del campo  $\phi$  y un número finito de sus derivadas parciales con respecto a ambos  $\mathbf{x}$  y  $t$  (aunque no aparecen derivadas parciales con respecto a  $t$  de un orden mayor al primero):

$$L[\phi, \dot{\phi}] = \int d^3x \mathcal{L}(\phi, \phi_j, \phi_{jk}, \dots; \dot{\phi}, \dot{\phi}_j, \dot{\phi}_{jk}, \dots) \quad (2.52)$$

donde :

$$\phi_j = \frac{d\phi}{dx_j}, \quad \phi_{jk} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_k}, \dots$$

En tal caso  $\mathcal{L}$  se denomina la *densidad lagrangiana* del sistema; nótese que de (2.47), si  $\mathcal{L}$  no depende de  $\phi_j, \dot{\phi}_{jk}, \dots$ , entonces:

$$\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{\delta L[\phi, \dot{\phi}]}{\delta \dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}}(\phi, \phi_j, \phi_{jk}, \dots; \dot{\phi}) \quad (2.53)$$

Por simplicidad supondremos aquí que el lagrangiano tiene la forma:

$$L[\phi, \dot{\phi}] = \int \mathcal{L}(\phi, \phi_j, \phi_{jk}, \dots; \dot{\phi}) d^3x \quad (2.54)$$

y que entonces (2.53) se cumple. Regresando al tratamiento hamiltoniano, se tienen las variables básicas  $\phi(\mathbf{x}, t)$ ,  $\pi(\mathbf{x}, t)$  satisfaciendo los (PP) fundamentales (2.49); el hamiltoniano  $H$  es la integral de una densidad  $\mathcal{H}$ :

$$H[\phi, \pi] = \int d^3x \mathcal{H}[\phi, \pi] \quad (2.55)$$

$$\mathcal{H}[\phi, \pi] = \pi(\mathbf{x}, t) \dot{\phi}(\mathbf{x}, t) - \mathcal{L}(\phi, \phi_j, \phi_{jk}, \dots; \dot{\phi}) \quad (2.56)$$

y las ecuaciones de movimiento del campo son:

$$\dot{\phi}(\mathbf{x}, t) = \{\phi(\mathbf{x}, t), H\} = \frac{\delta H}{\delta \pi(\mathbf{x}, t)} \quad (2.57)$$

$$\dot{\pi}(\mathbf{x}, t) = \{\pi(\mathbf{x}, t), H\} = -\frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x}, t)} \quad (2.58)$$

### El momento lineal

Ahora, la acción de una traslación espacial en las variables de campo  $\phi, \dot{\phi}$  es como sigue:

$$\phi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \phi(\mathbf{x} - \mathbf{a}, t) \quad , \quad \dot{\phi}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \dot{\phi}(\mathbf{x} - \mathbf{a}, t) \quad (2.59)$$

y puesto que para  $\mathbf{a} \ll 1$  tenemos:

$$\delta \phi(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{a} \cdot \nabla \phi(\mathbf{x}, t) \quad (2.60)$$

el principio extremo para la acción nos da:

$$-\int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) \nabla \phi(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{a} = cte.$$

de esta manera el tratamiento lagrangiano nos muestra cómo definir el momento lineal total del sistema:

$$\mathbf{P} = -\int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) \nabla \phi(\mathbf{x}, t) \quad (2.61)$$

Este es un caso particular de una regla general: considérese la acción:

$$A = \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt$$

en donde la integral se toma a lo largo de una curva  $C$  en el espacio de configuración. Si se hace una variación en las coordenadas generalizadas:

$$q'_s = q_s + \epsilon \phi_s(\mathbf{q}) \equiv q_s + \delta q_s \quad (2.62)$$

con  $\epsilon$  un parámetro pequeño y  $\phi_s(\mathbf{q})$  funciones específicas de  $q_r$  que caracterizan la transformación. Las velocidades generalizadas difieren por la derivada temporal de (2.62):

$$\delta \dot{q}_s = \frac{d}{dt} \delta q_s(t) = \sum_r \epsilon \frac{\partial \phi_s}{\partial q_r} \dot{q}_r(t) \quad (2.63)$$

entonces la variación en la acción está dada por:

$$\delta A = \sum_s \int_{t_1}^{t_2} dt \left( \frac{\partial L}{\partial q_s} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s} \right) \delta q_s(t) + \left[ \sum_s p_s \delta q_s(t) \right]_{t_1}^{t_2}$$

$$p_s = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s}$$

Si el lagrangiano  $L$  es invariante bajo la transformación (2.62) entonces  $\delta A = 0$  y:

$$-\sum_s \int_{t_1}^{t_2} dt \left( \frac{\partial L}{\partial q_s} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s} \right) \delta q_s(t) = \left[ \sum_s p_s \delta q_s(t) \right]_{t_1}^{t_2} \quad (2.64)$$

Si ahora  $C$  es una trayectoria física real en la cual las ecuaciones de movimiento se satisfacen:

$$\frac{\partial L}{\partial q_s} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s} = 0$$

entonces el factor entre paréntesis en el lado derecho de (2.64) tiene los mismos valores en  $t_1$  y  $t_2$  y por tanto para cualquier tiempo; usando (2.62) obtenemos entonces:

$$\sum_s p_s \phi_s(q) = \sum_s \phi_s(q) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s} = \text{cte. de mov.}$$

esto conduce a la ecuación (2.61) a partir de (2.53) y (2.60)

### El momento angular

Similarmente, si  $L$  es invariante ante rotaciones, esto es, no cambia cuando  $\phi$  y  $\dot{\phi}$  son cambiadas de la siguiente manera:

$$\phi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \phi(\mathbf{x} - \delta\theta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}, t) \quad , \quad \dot{\phi}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \dot{\phi}(\mathbf{x} - \delta\theta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}, t) \quad (2.65)$$

que corresponde a una pequeña rotación de los ejes coordenados en una cantidad  $\delta\theta$  alrededor del eje  $\hat{\mathbf{n}}$ , entonces:

$$\delta\phi(\mathbf{x}, t) = -\delta\theta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x} \cdot \nabla\phi(\mathbf{x}, t) = -\delta\theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x} \times \nabla\phi(\mathbf{x}, t)$$

de modo que:

$$-\int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \times \nabla\phi(\mathbf{x}, t) \cdot \delta\theta \hat{\mathbf{n}} = \text{cte}$$

lo que muestra como definir el momento angular total del sistema:

$$\mathbf{J} = - \int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \times \nabla \phi(\mathbf{x}, t) \quad (2.66)$$

### Los generadores del grupo de Galileo

Las expresiones para  $\mathbf{P}$  y  $\mathbf{J}$  en (2.61) y (2.66) escritas por componentes son:

$$P_j = - \int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial x_j} \phi(\mathbf{x}, t) \quad (2.67)$$

$$J_j = - \int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) \epsilon_{jkm} x_k \frac{\partial}{\partial x_m} \phi(\mathbf{x}, t) \quad (2.68)$$

estas expresiones dan una realización del grupo Euclideo  $E(3)$  vía (PP):

$$\begin{aligned} \{J_j(\mathbf{x}, t), J_k(\mathbf{x}, t)\} &= \epsilon_{jkm} J_m(\mathbf{x}, t) \\ \{P_j(\mathbf{x}, t), P_k(\mathbf{x}, t)\} &= 0 \\ \{J_j(\mathbf{x}, t), P_k(\mathbf{x}, t)\} &= \epsilon_{jkm} P_m(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (2.69)$$

Con el objeto de extender esto para obtener un conjunto de cantidades satisfaciendo las relaciones del álgebra de Lie del grupo galileano, se necesitan variables dinámicas adicionales  $G_j, H$  que representen a los elementos de dicha álgebra  $g_j, h$  respectivamente, tales que junto con  $J_j$  y  $P_j$  en (2.67) satisfagan las relaciones (2.10) vía (PP); esto es, junto con (2.69) debemos tener:

$$\begin{aligned} \{G_j(\mathbf{x}, t), G_k(\mathbf{x}, t)\} &= \{H(\mathbf{x}, t), P_k(\mathbf{x}, t)\} = \{J_j(\mathbf{x}, t), H(\mathbf{x}, t)\} = 0 \\ \{J_j(\mathbf{x}, t), G_k(\mathbf{x}, t)\} &= \epsilon_{jkm} G_m(\mathbf{x}, t), \quad \{G_j(\mathbf{x}, t), H(\mathbf{x}, t)\} = P_j(\mathbf{x}, t) \\ \{G_j(\mathbf{x}, t), P_k(\mathbf{x}, t)\} &= \delta_{jk} M \end{aligned} \quad (2.70)$$

donde  $M$  conmuta con todos los generadores. La siguiente construcción llena los requerimientos:

$$\begin{aligned} G_j &= m \int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) x_j \phi(\mathbf{x}, t) \\ H &= \frac{1}{2m} \int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) \nabla^2 \phi(\mathbf{x}, t) \\ M &= m \int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (2.71)$$

siendo  $m$  una constante fija positiva. Los generadores dados en (2.67) y (2.71) nos dan una realización del álgebra de Lie del grupo de Galileo vía (PP).

### Conexión con la descripción cuántica

Es ahora oportuno resaltar la conexión entre la teoría de campo galileana discutida aquí con una realización del grupo de Galileo vía operadores que surge en la descripción mecánico-cuántica de una partícula libre no-relativista de espín cero. Primero nótese que cada uno de los generadores en (2.67) y (2.71) se puede escribir de la forma:

$$A[\phi, \pi] = \int d^3x \pi(\mathbf{x}) a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x}) \quad (2.72)$$

siendo  $a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right)$  un operador diferencial parcial (o en algunos casos solo una función de  $\mathbf{x}$ ) correspondiente al generador particular  $A$ . De esta forma tenemos la correspondencia:

$$\begin{aligned} A = J_j &\rightarrow a = -(\mathbf{x} \times \nabla)_j \\ A = P_j &\rightarrow a = -\nabla_j \\ A = G_j &\rightarrow a = mx_j \\ A = H &\rightarrow a = \frac{1}{2m} \nabla^2 \\ A = M &\rightarrow a = m \end{aligned} \quad (2.73)$$

El hecho de que las  $A$ 's nos dan una realización del álgebra de Lie del grupo de Galileo vía (PP) está relacionado con el hecho de que las  $a$ 's dan una realización en términos de operadores y vía conmutadores de la misma álgebra. Si  $A$  y  $B$  son dos generadores con la forma (2.72), su (PP) puede ser calculado de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \{A, B\} &= \left\{ \int d^3x \pi(\mathbf{x}) a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x}), \int d^3y \pi(\mathbf{y}) b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \phi(\mathbf{y}) \right\} \\ &= \int d^3x \int d^3y \left\{ \pi(\mathbf{x}) a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y}) b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \phi(\mathbf{y}) \right\} \\ &= \int d^3x \int d^3y \left[ \pi(\mathbf{x}) \left\{ a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y}) b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \phi(\mathbf{y}) \right\} + \right. \\ &\quad \left. + \left\{ \pi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y}) b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \phi(\mathbf{y}) \right\} a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x}) \right] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int d^3x \int d^3y \left( \pi(\mathbf{x}) \left[ \pi(\mathbf{y}) \left\{ a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x}), b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \phi(\mathbf{y}) \right\} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left\{ a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y}) \right\} b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \phi(\mathbf{y}) \right] + \right. \\
&\quad \left. + \left[ \pi(\mathbf{y}) \left\{ \pi(\mathbf{x}), b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \phi(\mathbf{y}) \right\} + \left\{ \pi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y}) \right\} b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \phi(\mathbf{y}) \right] a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x}) \right)
\end{aligned}$$

Notando que de la definición (2.50) :

$$\begin{aligned}
\left\{ a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x}), b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \pi(\mathbf{y}) \right\} &= \int d^3z \frac{\delta a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x})}{\delta \phi(\mathbf{z})} \frac{\delta b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \pi(\mathbf{y})}{\delta \pi(\mathbf{z})} \\
&= \int d^3z a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \frac{\delta \phi(\mathbf{x})}{\delta \phi(\mathbf{z})} b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \frac{\delta \pi(\mathbf{y})}{\delta \pi(\mathbf{z})} \\
&= a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \int d^3z \frac{\delta \phi(\mathbf{x})}{\delta \phi(\mathbf{z})} \frac{\delta \pi(\mathbf{y})}{\delta \pi(\mathbf{z})} \\
&= a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \{ \phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y}) \}
\end{aligned}$$

y usando (2.49) obtenemos:

$$\begin{aligned}
\{A, B\} &= \int d^3x \int d^3y \left[ \pi(\mathbf{x}) \left( b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \phi(\mathbf{y}) \right) a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) - \right. \\
&\quad \left. - \left( a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x}) \right) \pi(\mathbf{y}) b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right] \\
&= \int d^3x \pi(\mathbf{x}) a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \left( \int d^3y \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \phi(\mathbf{y}) \right) - \\
&\quad - \int d^3y \pi(\mathbf{y}) b\left(\mathbf{y}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}\right) \left( \int d^3x \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \phi(\mathbf{x}) \right) \\
&= \int d^3x \pi(\mathbf{x}) \left[ a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) b\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) - b\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \right] \phi(\mathbf{x}) \\
\{A, B\} &= \int d^3x \pi(\mathbf{x}) [a, b]_- \phi(\mathbf{x}) \tag{2.74}
\end{aligned}$$

De modo que el (PP) de dos expresiones con la forma (2.72) es otra expresión de la misma forma con el conmutador de los operadores diferenciales individuales apareciendo como el operador diferencial en el resultado final. Puede verificarse directamente que los varios operadores  $a$ 's listados en (2.73) obedecen las mismas reglas de conmutación que el álgebra de Lie del grupo de Galileo, esto es:

$$\begin{aligned}
[-(\mathbf{x} \times \nabla)_j, -(\mathbf{x} \times \nabla)_k]_- &= \epsilon_{jkm} (-(\mathbf{x} \times \nabla)_m); \\
[-(\mathbf{x} \times \nabla)_j, -\nabla_k]_- &= \epsilon_{jkm} (-\nabla_m) \quad ; \quad [\nabla_j, \nabla_k]_- = 0; \\
[-(\mathbf{x} \times \nabla)_j, mx_k]_- &= \epsilon_{jkm} mx_m \quad ; \quad [mx_j, mx_k]_- = 0; \\
[-(\mathbf{x} \times \nabla)_j, \frac{\nabla^2}{2m}]_- &= [-\nabla_j, \frac{\nabla^2}{2m}]_- = 0; \\
[mx_j, \frac{\nabla^2}{2m}]_- &= -\nabla_j \quad ; \quad [mx_j, -\nabla_k]_- = m\delta_{jk}
\end{aligned} \tag{2.75}$$

Por ejemplo:

$$\begin{aligned}
[-(\mathbf{x} \times \nabla)_j, -\nabla_k]_- &= \left[ \epsilon_{jrs} x_r \frac{\partial}{\partial x_s}, \frac{\partial}{\partial x_k} \right]_- \phi(\mathbf{x}) \\
&= \epsilon_{jrs} x_r \frac{\partial}{\partial x_s} \frac{\partial}{\partial x_k} \phi(\mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial x_k} \epsilon_{jrs} x_r \frac{\partial}{\partial x_s} \phi(\mathbf{x}) \\
&= -\epsilon_{jrs} \frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial x_s} \delta_{rk} = -\epsilon_{jks} \frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial x_s} = \epsilon_{jkm} (-\nabla \phi(\mathbf{x}))_m
\end{aligned}$$

De esta manera, combinando estas reglas de conmutación con la fórmula general (2.74), hemos comprobado la validez de las expresiones (2.69) y (2.70).

Los operadores en (2.73) se dice que ofrecen una representación operacional *irreducible* del álgebra de Lie del grupo de Galileo, y salvo algunos factores de *i* ocasionales son precisamente los operadores que se usan para describir una partícula libre no-relativista de espín cero en mecánica cuántica.

### Campos multicomponentes

Ahora brevemente veremos como se extiende esta discusión a campos multicomponentes. Se tiene entonces la posibilidad de un campo multicomponente  $\phi_r(\mathbf{x}, t)$ ; suponiendo que a cada  $\phi_r(\mathbf{x})$  le corresponde un momento canónico conjugado  $\pi_r(\mathbf{x})$  de tal manera que los (PP) fundamentales son:

$$\begin{aligned}
\{\phi_r(\mathbf{x}), \phi_s(\mathbf{y})\} &= \{\pi_r(\mathbf{x}), \pi_s(\mathbf{y})\} = 0 \\
\{\phi_r(\mathbf{x}), \pi_s(\mathbf{y})\} &= \delta_{rs} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y})
\end{aligned} \tag{2.76}$$

El único cambio en los generadores es que  $J_j$  adquiere un término de espín:

$$\begin{aligned}
 J_j &= \int d^3x \left[ \pi_r(\mathbf{x}) (S_j)_{rs} \phi_s(\mathbf{x}) - \pi_r(\mathbf{x}) \epsilon_{jkm} x_k \frac{\partial}{\partial x_m} \phi_r(\mathbf{x}) \right] \\
 P_j &= - \int d^3x \pi_r(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_j} \phi_r(\mathbf{x}) \\
 H &= \frac{1}{2m} \int d^3x \pi_r(\mathbf{x}) \nabla^2 \phi_r(\mathbf{x}) \\
 G_j &= m \int d^3x \pi_r(\mathbf{x}) x_j \phi_r(\mathbf{x}) \\
 M &= m \int d^3x \pi_r(\mathbf{x}) \phi_r(\mathbf{x})
 \end{aligned} \tag{2.77}$$

suma sobre índices repetidos implícita. El generador  $J_j$  puede ser separado en dos términos:

$$J_j = L_j + S_j$$

con:

$$\begin{aligned}
 L_j &= - \int d^3x \pi_r(\mathbf{x}) \epsilon_{jkm} x_k \frac{\partial}{\partial x_m} \phi_r(\mathbf{x}) \\
 S_j &= \int d^3x \pi_r(\mathbf{x}) (S_j)_{rs} \phi_s(\mathbf{x})
 \end{aligned}$$

de modo que para satisfacer  $\{J_j, J_k\} = \epsilon_{jkm} J_m$ , las matrices de espín  $(S_j)$  deben ser tales que:

$$\begin{aligned}
 \{L_j, L_k\} &= \epsilon_{jkm} L_m \\
 \{S_j, S_k\} &= \epsilon_{jkm} S_m \\
 \{L_j, S_k\} &= 0
 \end{aligned} \tag{2.78}$$

Los generadores en (2.77) son de la forma general (2.72) con la diferencia de que los operadores diferenciales  $a\left(\mathbf{x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right)$  son al mismo tiempo matrices en el espacio de representación de  $R(3)$  ó  $E(3)$  según sea el caso. Estas matrices, salvo factores de  $i$ , actúan como generadores de las representaciones del grupo de Galileo vía operadores mecánico cuánticos asociados con la descripción cuántica de una partícula libre no-relativista con masa  $m$  y espín diferente de cero.

## 2.4 La ecuación de Weinberg como un ejemplo de realización.

Como se mostró en el capítulo anterior, para un sistema discreto el conmutador de Weinberg entre dos observables  $a(\psi, \psi^*)$ ,  $b(\psi, \psi^*)$  se define como:

$$[a, b] = a * b - b * a = \left( \frac{\partial a}{\partial \psi_k} \frac{\partial b}{\partial \psi_k^*} - \frac{\partial b}{\partial \psi_k} \frac{\partial a}{\partial \psi_k^*} \right) \quad (2.79)$$

la generalización de esto para sistemas continuos es:

$$[\alpha(\Psi, \Psi^*), b(\Psi, \Psi^*)] = \int d^3x \left( \frac{\delta \alpha}{\delta \Psi_k(\mathbf{x}, t)} \frac{\delta b}{\delta \Psi_k^*(\mathbf{x}, t)} - \frac{\delta b}{\delta \Psi_k(\mathbf{x}, t)} \frac{\delta \alpha}{\delta \Psi_k^*(\mathbf{x}, t)} \right) \quad (2.80)$$

Si hacemos la identificación:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}, t) &\rightarrow \phi(\mathbf{x}, t) \\ \Psi^*(\mathbf{x}, t) &\rightarrow \pi(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (2.81)$$

El conmutador (2.80) es formalmente idéntico al (PP) clásico (2.50) (apropiadamente generalizado para el caso de campos multicomponentes) de las dos funcionales  $a(\Psi, \Psi^*)$  y  $b(\Psi, \Psi^*)$ . De esta manera las funcionales  $a(\Psi, \Psi^*)$  que se definen como observables en el marco teórico de Weinberg, nos pueden dar una realización del álgebra de Lie del grupo de Galileo vía el conmutador (2.80) siempre y cuando se den funciones  $h, \mathbf{p}, \mathbf{j}$  y  $\mathbf{g}$ , todas ellas funcionales de  $\Psi$  y  $\Psi^*$  homogéneas de grado uno, que actúen como generadores del grupo satisfaciendo las relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [\mathbf{p}, h] &= [\mathbf{j}, h] = [g_i, g_j] = 0 \\ [\mathbf{g}, h] &= i\mathbf{p} \quad , \quad [g_i, p_j] = i\delta_{ij}M \\ [j_i, p_j] &= i\epsilon_{ijk}p_k \quad , \quad [j_i, g_j] = i\epsilon_{ijk}g_k \\ & \quad [j_i, j_j] = i\epsilon_{ijk}j_k \end{aligned} \quad (2.82)$$

(donde  $M$  conmuta con todos los generadores), que son las relaciones equivalentes a (2.69) y (2.70) para el caso en que se maneja como campo a los números complejos en vez de los números reales. Como se mencionó, cualquier generador en (2.82) tiene que ser una funcional homogénea de

grado uno en  $\Psi$  y  $\Psi^*$ , aunque no tienen por que ser bilineales en los campos (2.81) como lo son los generadores (2.77) de la teoría de campo galileana. Sin embargo la forma más sencilla de proceder es tomar a todos los generadores en (2.82), excepto al hamiltoniano  $h$ , como idénticos a los generadores bilineales (2.77):

$$\begin{aligned}
 \mathbf{j} &= \int d^3x \Psi_k^*(\mathbf{x}) [-i(\mathbf{x} \times \nabla) \delta_{kl} + \mathbf{S}_{kl}] \Psi_l(\mathbf{x}) \\
 \mathbf{p} &= -i \int d^3x \Psi_k^*(\mathbf{x}) \nabla \Psi_k(\mathbf{x}) \\
 \mathbf{g} &= m \int d^3x \Psi_k^*(\mathbf{x}) \mathbf{x} \Psi_k(\mathbf{x}) \\
 M &= m \int d^3x \Psi_k^*(\mathbf{x}) \Psi_k(\mathbf{x})
 \end{aligned} \tag{2.83}$$

Para el hamiltoniano, Weinberg escoge la forma:

$$h = \int d^3x \left[ -\frac{1}{2m} \Psi_k^*(\mathbf{x}) \nabla^2 \Psi_k(\mathbf{x}) + \mathcal{H}(\Psi(\mathbf{x}), \Psi^*(\mathbf{x})) \right] \tag{2.84}$$

con  $\mathcal{H}$  satisfaciendo la condición de homogeneidad:

$$\Psi_k \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Psi_k} = \Psi_k^* \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Psi_k^*} = \mathcal{H} \tag{2.85}$$

y tal que conmuta con  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{j}$  y  $\mathbf{g}$ , garantizando así la validez de (2.82) y proveyéndonos de una realización del álgebra galileana vía el conmutador (2.80). Con la función hamiltoniana dada por (2.84), la ecuación de movimiento (2.57) se traduce en:

$$i\hbar \frac{d\Psi_k}{dt} = \frac{\delta h}{\delta \Psi_k^*} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_k + \frac{\partial \mathcal{H}(\Psi, \Psi^*)}{\partial \Psi_k^*} \tag{2.86}$$

que es la ecuación de Weinberg presentada en el capítulo anterior.

De esta manera, Weinberg logra identificar la estructura formal de su generalización de la mecánica cuántica en su forma más simple con la propia de una teoría de campo galileana, y aunque ésta es la manera más sencilla de proceder, las diferencias entre esta forma de su teoría y la mecánica cuántica ordinaria pueden llegar a ser significativas (medibles) como se mencionó en el capítulo anterior. Es oportuno recalcar que las causas principales que originan estas diferencias son la manera en que se definen los observables en la teoría de Weinberg y la forma en que se combinan éstos, con un producto *no asociativo*, a diferencia de la mecánica cuántica ordinaria.

## Capítulo 3

# Un ejemplo concreto de la ecuación de Weinberg

En este capítulo se introducen interacciones en el sistema previamente discutido de la partícula libre. Nos restringimos a la clase de interacciones más simples que puedan mostrar efectos no lineales en la evolución del sistema. Se plantea un problema sencillo cuya ecuación se puede tratar en una sola dimensión y se propone un término no lineal consistente con las suposiciones generales y se introduce en la ecuación de evolución, resolviendo el problema con un método aproximado y comparando la evolución del sistema con aquella de la ecuación lineal.

### 3.1 Sistemas con una partícula en interacción

Ahora procedemos a discutir la posibilidad de tener un término de interacción en el hamiltoniano. Hacemos la suposición de que los generadores  $\mathbf{j}$ ,  $\mathbf{g}$ , y  $\mathbf{p}$  no alteran sus formas con la inclusión de interacciones, esto es, nos restringimos al caso en que son *cinemáticos*. Por simplicidad suponemos también que el término de interacción  $V$  en la función hamiltoniano  $h$  es la integral de alguna densidad local  $v$ , la cual es función de  $\Psi_k(\mathbf{x})$  y  $\Psi_k^*(\mathbf{x})$  solamente:

$$V[\Psi, \Psi^*] = \int d^3x v(\mathbf{x})$$

$$v(\mathbf{x}) \equiv v(\Psi(\mathbf{x}), \Psi^*(\mathbf{x}))$$

La invariancia de la ecuación de movimiento ante transformaciones de Galileo puras requiere que los conmutadores de  $V$  con  $g_j$  se anulen. Las condiciones

que surgen del anulamiento de  $[g_j, V]$  implican que  $v$  es una suma de términos cada uno consistiendo de un número igual de factores de  $\Psi_k$  y  $\Psi_k^*$ . Para ver esto calculemos  $[g_j, V]$  :

$$\begin{aligned} [g_j, V] &= \int d^3z \left( \frac{\delta g_j}{\delta \Psi_m} \frac{\delta V}{\delta \Psi_m^*} - \frac{\delta V}{\delta \Psi_m} \frac{\delta g_j}{\delta \Psi_m^*} \right) \\ &= \int d^3z \left( \frac{\partial(m\Psi_k^* x_j \Psi_k)}{\partial \Psi_m} \frac{\partial v}{\partial \Psi_m^*} - \frac{\partial v}{\partial \Psi_m} \frac{\partial(m\Psi_k^* x_j \Psi_k)}{\partial \Psi_m^*} \right) \\ &= m \int d^3z x_j \left( \Psi_m^* \frac{\partial v}{\partial \Psi_m^*} - \Psi_m \frac{\partial v}{\partial \Psi_m} \right) \end{aligned}$$

una forma de satisfacer la condición  $[g_j, V] = 0$  es escoger a la densidad  $v(\mathbf{x})$  homogénea, de grado 1 por ejemplo, en cuyo caso se tiene :

$$\Psi_m \frac{\partial v}{\partial \Psi_m} = \Psi_m^* \frac{\partial v}{\partial \Psi_m^*} = v$$

incidentalmente, con  $v(\mathbf{x})$  homogénea, la condición  $[M, V] = 0$  se satisface automáticamente:

$$[M, V] = m \int d^3x \left( \Psi_m^* \frac{\partial v}{\partial \Psi_m^*} - \Psi_m \frac{\partial v}{\partial \Psi_m} \right) = 0$$

Lo anterior nos lleva nuevamente a proponer a  $v$  de la siguiente forma :

$$v(\mathbf{x}) = \sum_s \rho^{-s} v_s(\mathbf{x}) \quad (3.1)$$

con  $s = 0, 1, 2, \dots$ ; siendo  $\rho$  la densidad:

$$\rho(\Psi, \Psi^*) = \Psi_k^* \Psi_k$$

y  $v_s$  una suma de términos proporcionales a  $1 + s$  factores de  $\Psi$ 's y  $\Psi^*$ 's, por ejemplo:

$$v_0(\mathbf{x}) = \Psi_k^* v_{kl} \Psi_k$$

$$v_1(\mathbf{x}) = \Psi_k^* \Psi_l^* v_{klmn} \Psi_m \Psi_n$$

etc, con  $v_{kl}, v_{klmn}$  constantes.

## 3.2 La partícula en una caja y su solución numérica aproximada

### 3.2.1 El potencial de interacción

La función hamiltoniana total del sistema en interacción es, ignorando las correcciones del hamiltoniano libre provenientes del término  $\mathcal{H}$ :

$$h = \frac{1}{i\hbar} \int d^3x \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_k^*(\mathbf{x}) \nabla^2 \Psi_k(\mathbf{x}) + v(\mathbf{x}) \right]$$

y la ecuación de Weinberg es:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_k(\mathbf{x})}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_k(\mathbf{x}) + \frac{\partial v(\mathbf{x})}{\partial \Psi_k^*} \quad (3.2)$$

Nosotros estamos interesados en esta ecuación porque es la parte del trabajo de Weinberg en que no se profundiza mucho (él está interesado principalmente en sistemas discretos). Por otro lado, como esta ecuación involucra grados de libertad discretos como el espín, y puesto que el espín se hace manifiesto a través de campos magnéticos, nos interesan sistemas con espín en interacciones magnéticas. Por simplicidad escogimos un sistema de dos componentes o de espín 1/2. Tenemos una partícula de espín 1/2 dentro de un pozo de potencial unidimensional y sujeta a un campo magnético. La forma más simple de proceder sería tomar al campo magnético uniforme. Sin embargo, Weinberg ha mostrado que para un campo magnético uniforme y débil, exigiendo invariancia rotacional de la densidad de interacción, ésta toma la forma:

$$v(\mathbf{x}) = \mu \Psi_m^*(\sigma)_{ml} \Psi_l \cdot \mathbf{B} \quad , \quad \left( s = \frac{1}{2} \right)$$

con  $\mu$  el momento magnético de la partícula y  $\sigma$  las matrices de Pauli, de donde se sigue que su ecuación (3.2) se reduce a la ecuación de Pauli en este caso particular, lo que muestra que no puede haber efectos no-lineales en la interacción de partículas de espín 1/2 con campos magnéticos uniformes débiles.

Con esto en mente, procedemos a tomar un campo magnético no uniforme. Específicamente, el problema estudiado es el siguiente. Una partícula neutra (un neutrón) dentro de un pozo de potencial infinito unidimensional:

$$v(x) = \begin{cases} 0 & , \quad 0 < x < l \\ \infty & , \quad x \leq 0, x \geq l \end{cases}$$

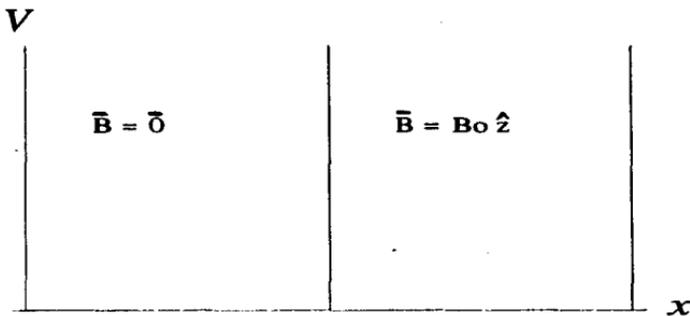


Figura 3.1 El potencial de interacción

y sujeto a un campo magnético externo con la forma:

$$\mathbf{B}(x) = \theta(x - l/2) B_0 \hat{z}$$

### 3.2.2 La ecuación lineal

Primero consideremos el problema lineal. La ecuación de Schrödinger dentro del pozo es:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left( \frac{p^2}{2m} + |\mu_n| B_0 \theta \left( x - \frac{l}{2} \right) \sigma_z \right) \Psi$$

con  $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$ , o escrita por componentes:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_k}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_k}{\partial x^2} + (-1)^{k+1} |\mu_n| B_0 \theta \left( x - \frac{l}{2} \right) \Psi_k \quad (3.3)$$

con  $k = 1, 2$ , y donde hemos sustituido a  $\sigma_z$  por sus eigenvalores ( $\pm 1$ ). Por tanto el problema es equivalente a tener un potencial efectivo dependiente de la componente de espín:

$$V_{eff}(x) = \begin{cases} (-1)^{k+1} |\mu_n| B_0 \theta \left( x - \frac{l}{2} \right) & , \quad 0 < x < l \\ \infty & , \quad x \leq 0, x \geq l \end{cases}$$

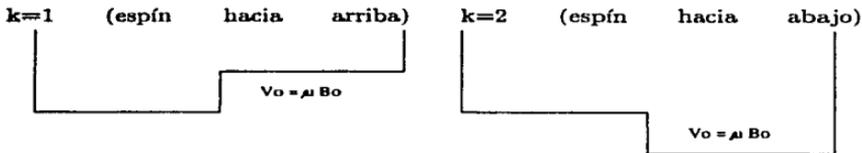


Figura 3.2 Potenciales efectivos para el problema lineal

Escogemos como tamaño del pozo:

$$l = 10^{-6} m$$

y para el campo magnético un valor de:

$$B_0 = 5 \times 10^3 \text{ Gauss} = 0.5 \text{ T}$$

que corresponde a:

$$V_0 \equiv |\mu_n| B_0 \approx 5 \times 10^{-27} J \approx 3 \times 10^{-8} eV$$

con estos valores hay, para cada componente, seis estados estacionarios del hamiltoniano lineal con energías tales que:

$$|E_n| < V_0 = 5 \times 10^{-27} J = 3 \times 10^{-8} eV$$

los cuales están dados por:

$$\Psi_{1,n}(x) = \begin{cases} A_n^{(1)} \text{sen}(k_n^{(1)} x) & , 0 \leq x \leq l/2 \\ B_n^{(1)} (e^{k_n^{(2)} x} - e^{2k_n^{(2)} l - k_n^{(2)} x}) & , l/2 \leq x \leq l \end{cases}$$

$$\Psi_{2,m}(x) = \begin{cases} A_m^{(2)} \text{senh}(k_m^{(1)} x) & , 0 \leq x \leq l/2 \\ B_m^{(2)} \text{sen}(k_m^{(2)} (x - a)) & , l/2 \leq x \leq l \end{cases}$$

donde:

$$k_s^{(1)} \equiv \sqrt{\frac{2m_n}{\hbar^2} |E_s|} \quad ; \quad k_s^{(2)} \equiv \sqrt{\frac{2m_n}{\hbar^2} (V_0 - |E_s|)}$$

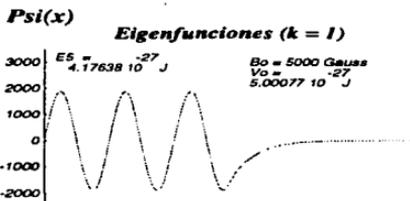
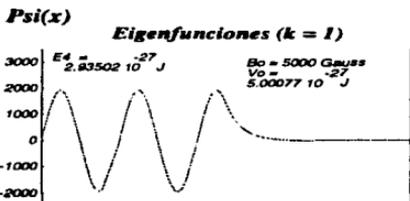
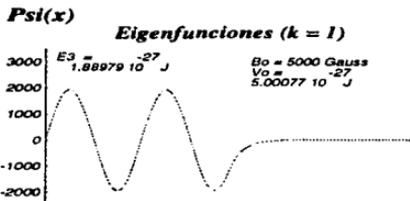
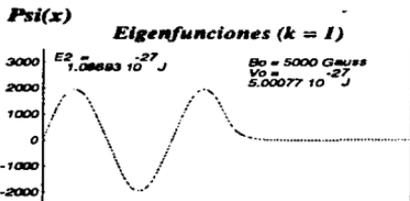
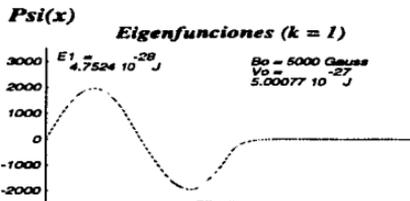
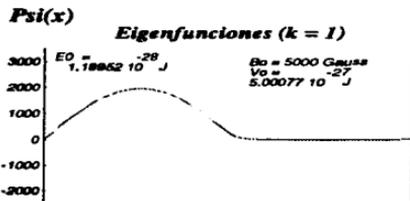


Figura 3.3 (a) Estados estacionarios para la componente  $k = 1$  de la solución a la ecuación lineal.

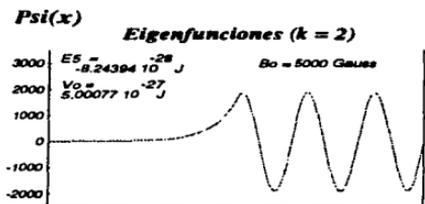
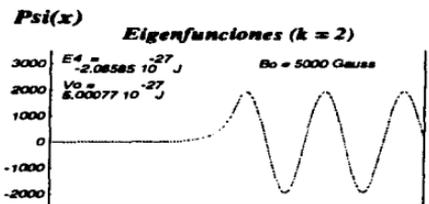
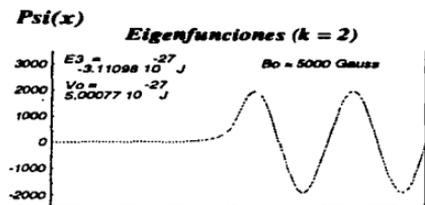
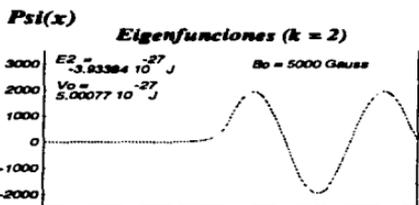
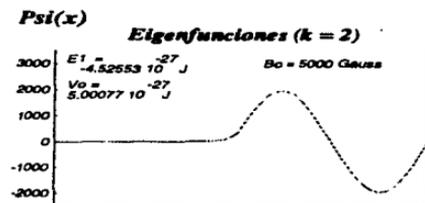
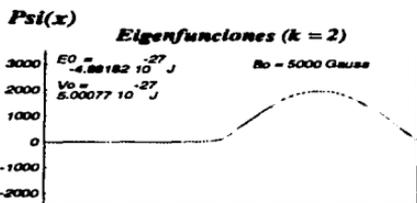


Figura 3.3 (b) Estados estacionarios para la componente  $k = 2$  de la solución a la ecuación lineal.

y  $A_s^{(k)}$ ,  $B_s^{(k)}$  ( $s = m, n$ ,  $s = 0, 1, \dots, 5$ ) son constantes determinadas por las condiciones de normalización y de continuidad de la función de onda y su derivada en  $x = l/2$ . Las energías están dadas en términos de las ecuaciones trascendentales:

para la componente  $k = 1$  ( $s = n$ ):

$$\tanh\left(\frac{1}{2}lk_n^{(2)}\right) = -\sqrt{\frac{V_0}{|E|} - 1} \tan\left(\frac{1}{2}lk_n^{(1)}\right) \quad , \quad 0 < E < V_0$$

para la componente  $k = 2$  ( $s = m$ ):

$$\tanh\left(\frac{1}{2}lk_m^{(1)}\right) = -\frac{1}{\sqrt{\frac{V_0}{|E|} - 1}} \tan\left(\frac{1}{2}lk_n^{(2)}\right) \quad , \quad -V_0 < E < 0$$

Los estados estacionarios se muestran gráficamente en la figura 3.3.

### 3.2.3 La ecuación no lineal

Ahora consideremos la ecuación no lineal (3.2). Proponemos para la densidad de interacción la siguiente forma:

$$v(x) = |\mu_n|B_0\theta\left(x - \frac{l}{2}\right)\Psi^\dagger\sigma_z\Psi + \epsilon\theta\left(x - \frac{l}{2}\right)\frac{(\Psi^\dagger\sigma_z\Psi)^2}{\Psi^\dagger\Psi}$$

siendo  $\epsilon$  el parámetro que mide la no linealidad, consecuentemente la ecuación de Weinberg es:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[\frac{p^2}{2m} + |\mu_n|B_0\theta\left(x - \frac{l}{2}\right)\sigma_z + \epsilon\theta\left(x - \frac{l}{2}\right)\left\{2\frac{\Psi^\dagger\sigma_z\Psi}{\Psi^\dagger\Psi}\sigma_z - \left(\frac{\Psi^\dagger\sigma_z\Psi}{\Psi^\dagger\Psi}\right)^2\right\}\right]\Psi$$

ó, escrita por componentes:

$$i\hbar\frac{d\Psi_k}{dt} = H_0\Psi_k + \epsilon\theta\left(x - \frac{l}{2}\right)\left\{(-1)^{k+1}2\left(\frac{|\Psi_1|^2 - |\Psi_2|^2}{|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2}\right) - \left(\frac{|\Psi_1|^2 - |\Psi_2|^2}{|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2}\right)^2\right\}\Psi_k \quad (3.4)$$

donde:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (-1)^{k+1} |\mu_n| B_0 \theta \left( x - \frac{l}{2} \right)$$

es el hamiltoniano lineal. La ecuación (3.4) es la ecuación que resolvemos numéricamente de una forma aproximada. Nótese que esta ecuación se puede ver como derivada de un potencial efectivo con un término que depende del tiempo a través de las componentes de la función de onda. Los métodos de solución numérica se discuten con cierto detalle en los apéndices.

### 3.2.4 La evolución en el tiempo

Con la ecuación (3.4) establecida procedemos a hacer evolucionar en el tiempo a la función de onda y hacer una comparación entre la evolución lineal dada por (3.3) y la no lineal dada por (3.4). Tomamos como condición inicial la superposición de los primeros dos eigenestados de la componente  $k = 1$ , más la superposición de los primeros dos eigenestados de la componente  $k = 2$ , correspondientes al hamiltoniano lineal. Si denotamos el eigenestado  $n$  del hamiltoniano lineal con energía  $E_n$  correspondiente a la componente  $k$  por  $\Psi_k^n$ , la condición inicial es:

$$\Psi_0 = (\Psi_1^0 + \Psi_1^1) + (\Psi_2^0 + \Psi_2^1)$$

En la figura 3.4 se muestran las gráficas de la densidad de probabilidad  $|\Psi(x, t)|^2$  como función del tiempo tomando, en el caso no lineal, un valor para el parámetro  $\epsilon$  de  $1.5V_0$ . Estas gráficas muestran la comparación entre la solución lineal exacta y la solución no lineal aproximada obtenida por dos métodos numéricos distintos: los de la columna de la izquierda por el método de la transformada de Fourier acelerada (FFT) y los de la columna de la derecha por el método de diferencias finitas (MDF); ambos métodos se discuten en los apéndices. En ambas columnas las gráficas muestran en un tono claro la densidad de probabilidad de la partícula como función de su posición y del tiempo de acuerdo con la ecuación de Schrödinger lineal y, en un tono oscuro, la correspondiente densidad de probabilidad obtenida con la ecuación no lineal (3.4). En todas la gráficas se muestran los valores del parámetro de no linealidad  $\epsilon$  y del tiempo en el cual se calcula la densidad de probabilidad.

Como es claro de la figura 3.4 los resultados obtenidos con los dos métodos aproximados comienzan a presentar diferencias evidentes en cuanto a la forma de la densidad de probabilidad una vez transcurrido un intervalo

$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



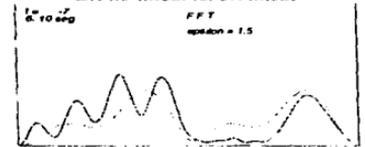
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



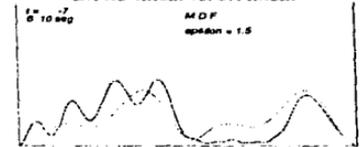
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



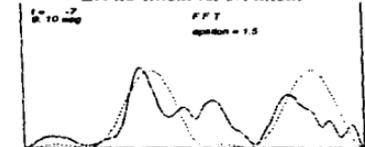
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal

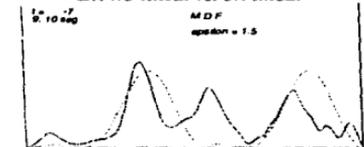


Figura 3.4 Comparativo entre la solución lineal exacta (en tono claro) y las soluciones aproximadas de la ecuación no lineal obtenidas con los métodos FFT y MDF.

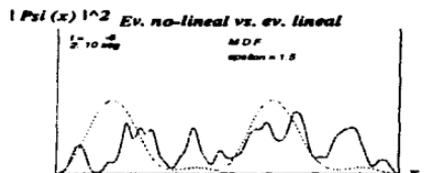
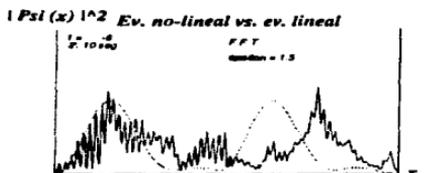
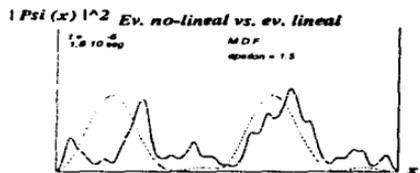
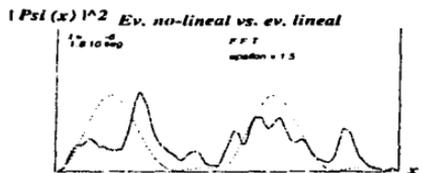
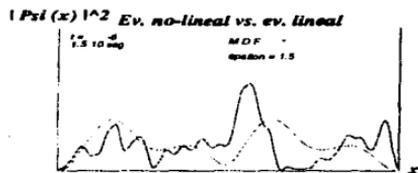
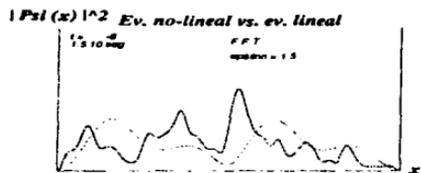
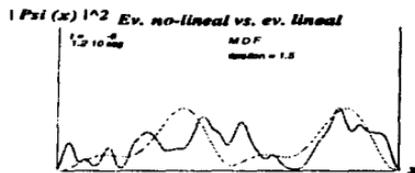
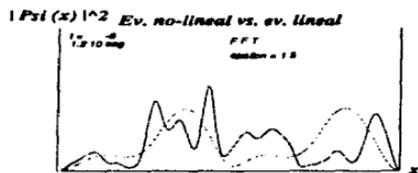


Figura 3.4 continuación.

de tiempo aproximadamente igual a un semiperiodo  $\tau/2$ , donde  $\tau$  se define como el periodo que presenta la evolución temporal de la densidad de probabilidad de acuerdo con la ecuación de Schrödinger lineal ( $\tau \simeq 1.8 \mu\text{seg}$ ). Mas aún, en el caso de la solución obtenida con el método FFT (columna de la izquierda) se presentan oscilaciones bruscas (picos), como por ejemplo en la última gráfica, y que no aparecen en el método MDF. Una discusión más detallada de esto se presenta en la siguiente sección, por ahora baste decir que tomaremos como más confiables a los resultados obtenidos con el método MDF, por lo que la siguiente figura (fig. 3.5) presenta con más detalle estos últimos: en esta figura se muestran de nuevo, pero ahora en la columna de la izquierda, las gráficas con la comparación entre la solución lineal exacta y la solución no lineal aproximada obtenida con el método MDF. Por otra parte, las gráficas en la columna de la derecha muestran la evolución no lineal de la función de onda por componentes, en un tono claro la contribución a la densidad de probabilidad total aportada por la componente  $k = 1$  o de espín en la dirección del campo, y en un tono algo más oscuro la correspondiente aportación de la componente  $k = 2$  o de espín en la dirección opuesta al campo, de manera que la suma de estas contribuciones es igual a la gráfica de la evolución no lineal adyacente en la columna de la izquierda.

### 3.3 Discusión

En el caso de la ecuación lineal los dos métodos de solución numéricos dan resultados correctos como se muestra en los apéndices, por lo que cabe preguntarse acerca de la validez de la extrapolación de los métodos para aplicarlos a la ecuación no lineal. Es nuestra opinión que, tratándose de la ecuación no lineal, debemos descartar el método FFT en favor del método de diferencias finitas y las razones para esto las exponemos brevemente a continuación, aunque también hay que mencionar que encontramos ciertos problemas de convergencia en el método MDF que exponemos al final de este apartado.

La suposición básica del método FFT es el *teorema de muestreo* (véase el apéndice A) que expone que una función  $h(t)$  continua queda completamente determinada al muestrearla discretamente si ocurre que su transformada de Fourier  $\tilde{h}(f)$  se anula fuera del intervalo  $-f_c < f < f_c$ , donde  $f_c$  es una frecuencia crítica determinada por el tamaño del intervalo de muestreo. Este es un teorema notable en el sentido de que muestra que el *contenido informativo* de una función *limitada en ancho de banda* es, en algún sentido,

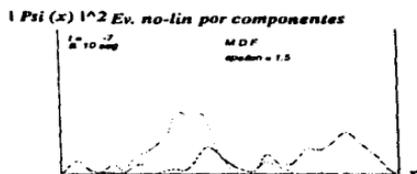
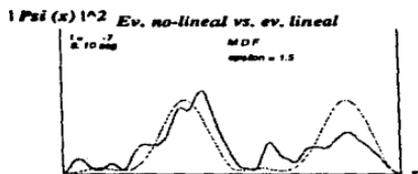
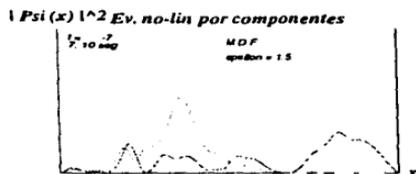
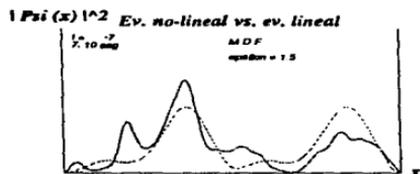
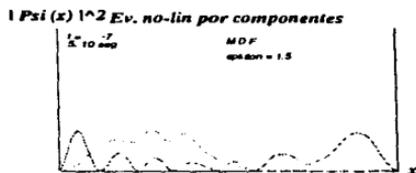
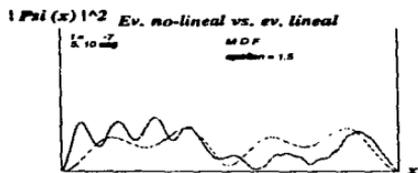
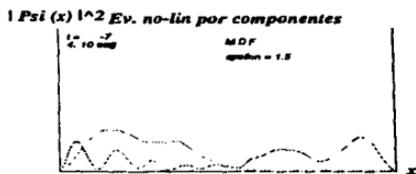
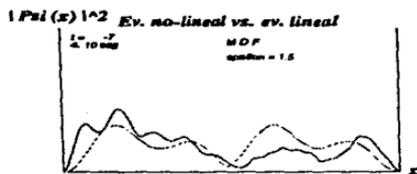
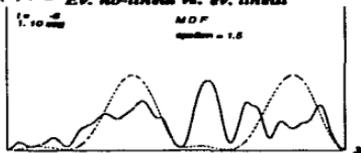
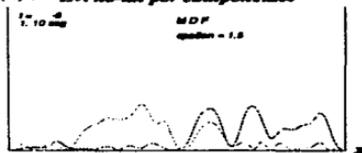


Figura 3.4 Comparativo entre la solución lineal exacta y la solución no lineal aproximada MDF. Para mayores detalles ver texto en la página 67 .

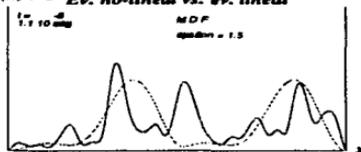
**$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal**



**$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes**



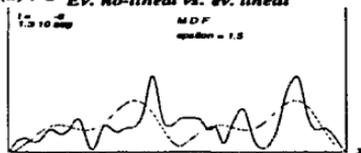
**$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal**



**$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes**



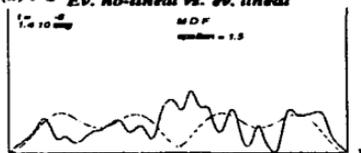
**$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal**



**$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes**



**$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal**

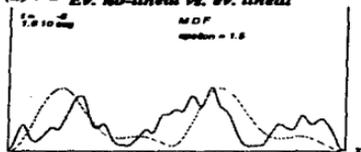


**$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes**



Figura 3.5 continuación.

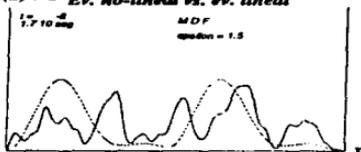
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes



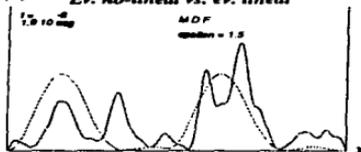
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



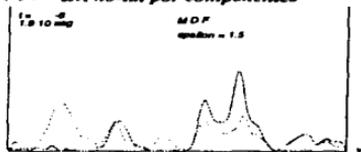
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes



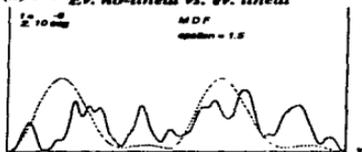
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes



$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal

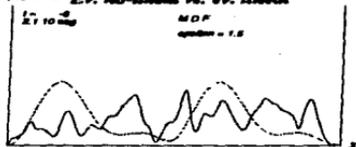


$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes

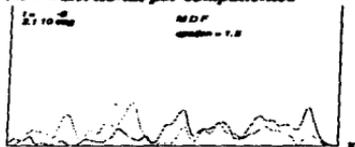


Figura 3.5 continuación.

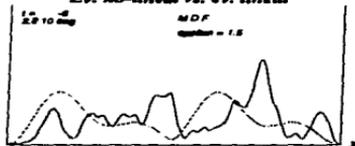
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



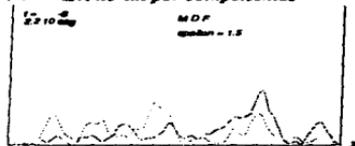
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes



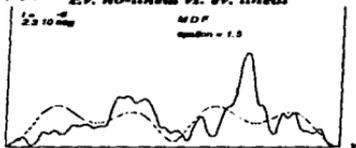
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



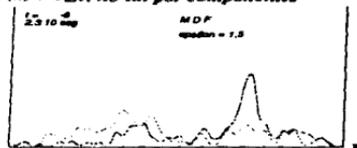
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes



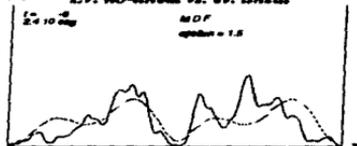
$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes



$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lineal vs. ev. lineal



$|\Psi(x)|^2$  Ev. no-lin por componentes



Figura 3.5 continuación.

infinitamente más pequeño que aquel de una función continua en general. El problema surge al tratar de muestrear una función continua que *no* está limitada en un ancho de banda por la frecuencia crítica  $f_c$ . En ese caso sucede que toda la densidad espectral que se encuentra fuera del rango de frecuencias  $-f_c < f < f_c$  es ilegítimamente trasladado (superpuesto) hacia ese intervalo por el simple hecho de muestrear discretamente. Para verificar si este fenómeno se hace presente en nuestras soluciones sin conocer la forma analítica de las mismas en el caso no lineal, podemos hacer la siguiente prueba. Tomamos la solución a un tiempo  $t$  arbitrario y estimamos su transformada de Fourier para verificar si ésta se acerca a cero conforme la frecuencia se acerca a  $f_c$  por debajo, o a  $-f_c$  por arriba. Si de lo contrario, la transformada se acerca a un valor finito, entonces probablemente hay componentes fuera del intervalo crítico que han sido superpuestas a la verdadera transformada *contaminando* la solución. Primero hacemos la prueba con la solución exacta a la ecuación lineal. La figura 3.6 muestra las partes real e imaginaria de la transformada de Fourier de una de las componentes de la función de onda a distintos tiempos. Nótese que la condición inicial ( $\Psi_k(t=0)$ ) está limitada en ancho de banda y las gráficas siguientes muestran que la función de onda lo sigue estando para  $t > 0$ . En contraste la figura 3.7 muestra que la transformada de Fourier de una de las componentes de la solución no lineal comienza a aproximarse a valores finitos en los extremos del intervalo crítico, y ésta es la razón por la que creemos que el método no es aplicable para resolver la ecuación no lineal; esto es, aún y cuando la condición inicial está limitada en ancho de banda, la evolución en el tiempo gobernada por la ecuación no lineal genera funciones de onda que no están limitadas en ancho de banda.

Finalmente discutimos brevemente la aplicabilidad del método MDF. Nuestra opinión es que la aplicación del método a la ecuación no lineal es admisible aunque la utilidad práctica es discutible porque creemos que el método converge lentamente; por ejemplo, dividiendo el intervalo de tiempo básico ( $\Delta t = 10^{-7}$  seg) entre gráfica y gráfica de manera que el algoritmo utilizara  $10^2$ ,  $10^3$  o  $10^4$  iteraciones para cubrir el intervalo  $\Delta t$ , los resultados obtenidos con  $10^3$  iteraciones comenzaban a diferir notablemente de aquellos obtenidos con  $10^2$  iteraciones ya en la cuarta gráfica ( $t = 4 \times 10^{-7}$  seg); mientras que aquellos con  $10^4$  iteraciones comenzaban a diferir de los de  $10^3$  iteraciones ya en la sexta gráfica ( $t = 6 \times 10^{-7}$  seg); en contraste, en el caso lineal bastó con dos mil iteraciones para obtener los resultados del apéndice B, lo que da una idea de la convergencia del método con la ecuación no lineal.

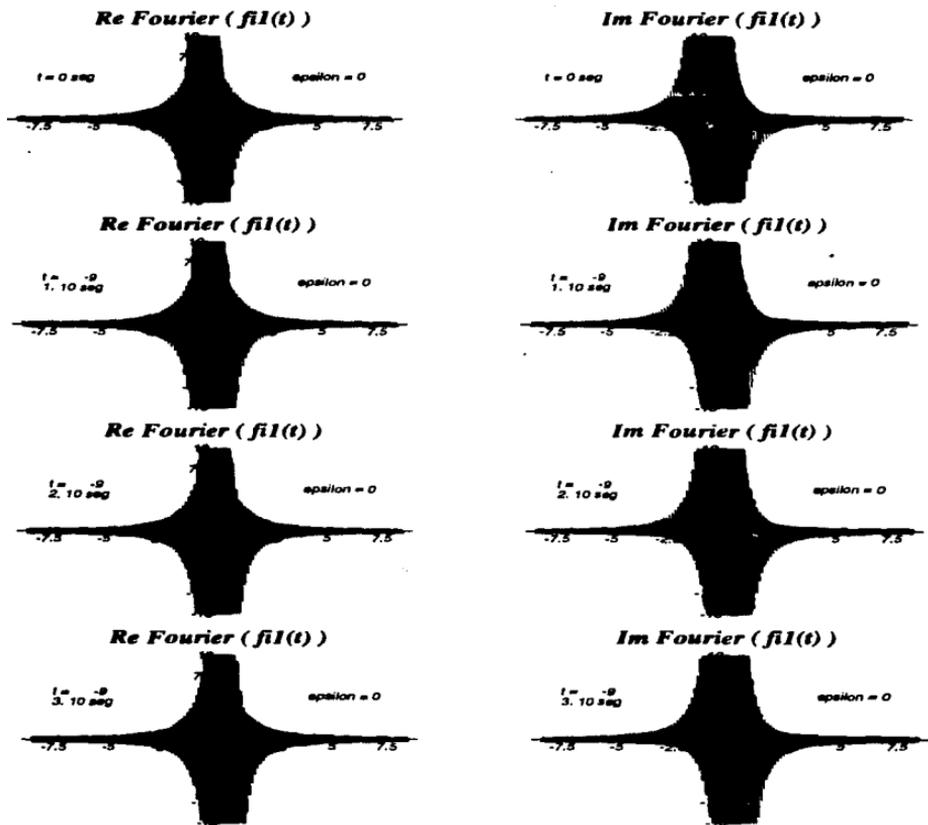


Figura 3.6 La transformada de Fourier de la componente  $k = 1$  de la solución exacta a la ecuación lineal. El momento crítico corresponde en la escala de la figura aprox. a 8.

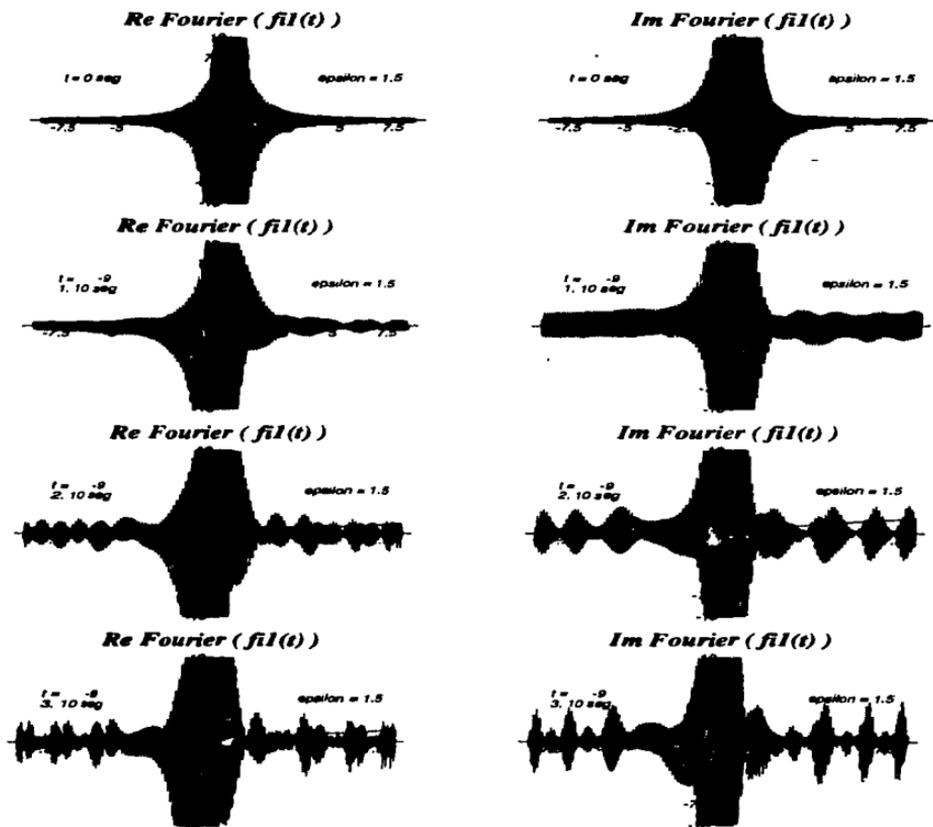


Figura 3.7 La transformada de Fourier de la componente  $k = 1$  de la solución aproximada FFT a la ecuación no lineal. El momento crítico en la escala de la figura es aprox. 8.

# Conclusiones

Hemos descrito una posible extensión no lineal de la mecánica cuántica, desarrollada por Weinberg[1], sus consecuencias directas y hemos aplicado sus ideas a un problema particular. Aunque la estructura formal de la teoría no lineal es muy completa, aún no es del todo aceptable. Existe por ejemplo, el problema de no poder inferir de manera única una distribución de probabilidad partiendo de los valores esperados de las potencias de un observable. La característica principal de la teoría no lineal es la no asociatividad en la composición de observables, y es de esta característica de donde se desprenden las diferencias más notables con la mecánica cuántica. Pero la no asociatividad también trae como consecuencia una ambigüedad en la definición de la  $n$ -ésima potencia de un observable, lo que lleva al problema mencionado arriba. Así pues, el rasgo que le da a la teoría no lineal su forma general (un producto no asociativo) parece ser el mismo del cual se desprenden los detalles no deseables del formalismo.

Hemos visto también como se conectan los conceptos y las ideas matemáticas de teoría de grupos con las respectivas de simetrías en física y como esto nos presenta una herramienta poderosa. La aplicación de esto en este trabajo resulta en la invariancia Galileana de la teoría no lineal, y es este hecho lo que hace de ella una teoría muy atractiva. Esto es así porque podríamos ahora sugerir una extensión hacia el dominio relativista esperando sacar provecho en general del nuevo punto de vista.

Finalmente, es plausible esperar que en la evolución del sistema físico las características principales de los efectos causados por el término no lineal se hagan evidentes para tiempos largos, una vez terminados los rasgos tran-

sitorios (si los hay) que pudieran no tener mucha importancia en el comportamiento asintótico del sistema. Desafortunadamente, en este trabajo no nos fue posible presentar los rasgos asintóticos de la evolución temporal puesto que nos encontramos con varias dificultades de carácter técnico, por así decirlo. Como se ha explicado, al tratar de resolver la ecuación no lineal con los métodos numéricos tradicionales no se obtuvieron resultados completamente satisfactorios, lo que muestra en cierto grado la complejidad y riqueza del problema. Tenemos que mencionar que tratamos con un sistema continuo, y como cualquier método numérico necesariamente discretiza en el proceso de solución, podríamos conjeturar que existe la posibilidad de que algunos rasgos esenciales que distinguen a los sistemas continuos de los discretos probablemente se estén perdiendo, junto con la información contenida en ellos, al discretizar.

Todo lo anterior es un indicio de que probablemente surgen diferencias fundamentales al pasar de un sistema discreto a uno continuo.

## Apéndice A

# La Transformada de Fourier Acelerada

Esta parte se ha escrito con el propósito de presentar de una manera breve la idea básica detrás del método numérico FFT utilizado para resolver de forma aproximada las ecuaciones estudiadas en este trabajo. Se hace incapié en lo que consiste específicamente la aproximación del método y en la descripción de sus fundamentos básicos. Así mismo se muestra una comparación entre soluciones aproximadas y exáctas para un ejemplo particular con el fin de dar una estimación de la precisión del método.

### A.1 Motivación

Considérese la ecuación de Schrödinger en una dimensión :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x,t)$$

si  $\hat{H}$  no depende explícitamente del tiempo la solución formal está dada por:

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \psi(x,0) \quad (\text{A.1})$$

considerando el desarrollo :

$$e^{\hat{A} + \hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]} \dots$$

si el hamiltoniano tiene la forma :

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

entonces la solución se puede escribir como :

$$\psi(x, t) = \left\{ e^{-k^2 t \frac{\hbar^2}{2m}} e^{-k^2 t V} e^{\frac{i^2}{4m\hbar^2} [\hat{p}^2, V]} \dots \right\} \psi(x, 0)$$

La aproximación del método consiste en suponer que al resolver numéricamente la ecuación anterior, el intervalo de tiempo  $\Delta t$  básico entre cada iteración puede hacerse lo suficientemente pequeño como para aproximar las exponenciales cuyos argumentos tienen factores de  $t$  a una potencia mayor o igual a dos, por la unidad. Entonces la solución aproximada es :

$$\psi(x, t) \simeq e^{-k^2 t V} e^{-k^2 t \frac{\hbar^2}{2m}} \psi(x, 0) \quad (\text{A.2})$$

Ahora, en el espacio de configuración la acción del operador  $e^{\alpha \hat{p}^2}$  sobre la función de onda  $\psi(x, 0)$  es equivalente, en el espacio de momentos, a multiplicar la transformada de Fourier de  $\psi(x, 0)$  por el número  $e^{\alpha \hat{p}^2}$ , donde  $p$  son los eigenvalores del operador  $\hat{p}$  :

$$e^{\beta^2} \psi(x) = \langle x | e^{\beta^2} | \psi \rangle = \langle x | e^{\beta^2} | p \rangle \langle p | \psi \rangle = e^{\beta^2} \langle x | p \rangle \langle p | \psi \rangle$$

o simbólicamente :

$$e^{\beta^2} \psi(x) = F^{-1} \{ e^{\beta^2} \psi(p) \} = F^{-1} \{ e^{\beta^2} F \{ \psi(x) \} \}$$

donde  $F$  y  $F^{-1}$  denotan a la transformada de Fourier y su inversa respectivamente, de modo que la solución aproximada es :

$$\psi(x, t) \simeq e^{-k^2 t V} \left( F^{-1} \left\{ e^{-k^2 t \frac{\hbar^2}{2m}} F \{ \psi(x, 0) \} \right\} \right) \quad (\text{A.3})$$

La importancia práctica en esto es que existe un algoritmo denominado *la transformada de Fourier acelerada* (FFT por sus siglas en inglés) bastante rápido para calcular la transformada de Fourier de una función previamente muestreada en un conjunto de puntos discreto.

## A.2 El algoritmo FFT

Comenzaremos por mencionar el siguiente *teorema de muestreo* : Si una función  $h(t)$  continua, muestreada en intervalos  $\Delta t$ , ocurre que está limitada a un ancho de banda de frecuencias menores en magnitud que la *frecuencia crítica de Nyquist* :

$$f_c \equiv \frac{1}{2\Delta t}$$

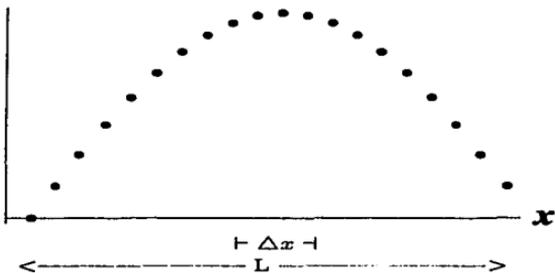
$f(x)$ 

Figura 1: Una función muestreada en intervalos  $\Delta x$ .

esto es,  $\tilde{h}(f) = 0$  para toda  $|f| > f_c$ , entonces la función  $h(t)$  está completamente determinada por sus muestras  $h_n = h(n\Delta t)$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots, N-1$ . Esto traducido al espacio de configuración es:

$$k_c \equiv \frac{2\pi}{2\Delta_x}$$

de donde el momento crítico es:

$$p_c = \frac{2\pi\hbar}{2\Delta_x} \quad (\text{A.4})$$

Entonces el teorema asegura que si una función continua  $\psi(x)$  muestreada en intervalos  $\Delta_x$  (ver fig. 1) es tal que  $\tilde{\psi}(p) = 0$  para todo  $|p| > p_c$ , entonces  $\psi(x)$  está completamente determinada por sus muestras  $\psi_k = \psi(k\Delta_x)$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, N-1$ , siendo  $N = L/\Delta_x$  el número de puntos de la muestra. El intervalo  $\Delta_p$  está dado entonces por:

$$\Delta_p = \frac{2p_c}{N} = \frac{2\pi\hbar}{N\Delta_x} = \frac{2\pi\hbar}{L} \quad (\text{A.5})$$

**ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA**

El siguiente paso es aproximar la transformada de Fourier por una suma discreta :

$$\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dx \approx \tilde{\psi}(p_n) = \sum_{k=0}^{N-1} \psi(x_k) e^{\frac{i}{\hbar} p_n x_k} \Delta x$$

en donde se define :

$$x_k \equiv k \Delta x$$

$$p_n \equiv \frac{2\pi \hbar n}{N \Delta x}, \quad n = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2}$$

Es fácil ver que con esta definición  $p_n$  corre desde  $-p_c$  hasta  $p_c$ , entonces :

$$p_n x_k = \frac{2\pi \hbar n}{N}$$

de modo que :

$$\tilde{\psi}(p_n) = \Delta x H_n$$

donde :

$$H_n \equiv \sum_{k=0}^{N-1} \psi(x_k) e^{\frac{2\pi i}{N} n k} \quad (\text{A.6})$$

es la transformada de Fourier discreta de  $N$  puntos  $\psi(x_k)$ . Nótese que  $H_{n+N} = H_n$ , i. e.  $H_n$  es periódica en  $n$  con periodo  $N$ . Defínase  $W = e^{\frac{2\pi i}{N}}$ , entonces (A.6) se puede escribir como :

$$H_n = \sum_{k=0}^{N-1} W^{nk} \psi_k \quad (\text{A.7})$$

donde :

$$\psi_k \equiv \psi(x_k)$$

como  $H_n$  es periódica en  $n$  de periodo  $N$ , podemos hacer correr  $n$  desde 0 hasta  $N-1$ , teniendo en cuenta que entonces momentos positivos ( $0 < p < p_c$ ) corresponden a  $1 \leq n \leq \frac{N}{2} - 1$ , momentos negativos ( $-p_c < p < 0$ ) a  $\frac{N}{2} + 1 \leq n \leq N-1$ , momento 0 a  $n = 0$  y finalmente para  $n = \frac{N}{2}$  corresponden ambos  $p = p_c$  y  $p = -p_c$ . La ecuación (A.7) se puede escribir entonces como una ecuación matricial :

$$\begin{pmatrix} H_0 \\ H_1 \\ \vdots \\ H_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}$$

donde la entrada  $a_{nk}$  de la matriz es la constante  $W$  elevada a la potencia  $n \times k$ . De esta manera el cálculo de las  $H_n$  aparentemente es un proceso que involucra  $N^2$  productos, es decir, es un algoritmo de orden  $N^2$ . Sin embargo, la ecuación (A.7) se puede manipular de la siguiente forma :

$$\begin{aligned} H_n &= \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i n \frac{k}{N}} \psi_k \\ &= \sum_{k=0}^{\frac{N}{2}-1} e^{2\pi i n \frac{2k}{N}} \psi_{2k} + \sum_{k=0}^{\frac{N}{2}-1} e^{2\pi i n \frac{2k+1}{N}} \psi_{2k+1} \\ &= \sum_{k=0}^{\frac{N}{2}-1} e^{2\pi i n \frac{k}{N/2}} \psi_{2k} + W^n \sum_{k=0}^{\frac{N}{2}-1} e^{2\pi i n \frac{k}{N/2}} \psi_{2k+1} \\ &= H_n^p + W^n H_n^i \end{aligned} \tag{A.8}$$

donde  $H_n^p$  denota la componente  $n$  de la transformada de Fourier de  $N/2$  puntos formada tomando las componentes pares de las  $\psi_k$ 's originales, mientras que  $H_n^i$  es la transformada correspondiente de los  $N/2$  puntos tomando las componentes impares. Obsérvese que aquí  $n$  va de cero hasta  $N-1$ , de modo que ambas  $H_n^p$  y  $H_n^i$  se repiten por dos ciclos para obtener todas las  $H_n$ . El punto importante de todo esto es que el algoritmo es recursivo, de tal forma que podemos definir :

$$H_n^{pp}, H_n^{pi} \quad y \quad H_n^{ip}, H_n^{ii}$$

como las respectivas transformaciones de  $N/4$  puntos pares e impares y así sucesivamente. Ahora supóngase que  $N = 2^\alpha$  para algún  $\alpha$  natural, entonces aplicando el algoritmo  $\alpha$  veces obtenemos :

$$H_n^{\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_\alpha} = \psi_j$$

para alguna  $j$ , en donde  $\sigma_i = p$  ó  $i$ . Nótese que  $\psi_j$  es independiente de  $n$ , por lo que podemos prescindir de este subíndice en la ecuación anterior :

$$H^{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_n} = \psi_j \quad (\text{A.9})$$

Ahora lo que resta por hacer es averiguar qué valor de  $j$  corresponde a cual combinación  $\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_n$  de  $p$ 's e  $i$ 's. La respuesta es : tómesese la combinación  $\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_n$  e inviértase el orden , substitúyase cada  $p$  con 0 y cada  $i$  con 1 y el resultado será igual a  $j$  expresado en binario :

$$j = \sigma_n \sigma_{n-1} \dots \sigma_2 \sigma_1$$

Entonces, ¿cuántas operaciones son en realidad necesarias para calcular  $H_n$ ? Consideremos un ejemplo particular :  $N = 2^2 = 4$ . Arreglemos los puntos  $\psi_j$  en un vector columna de acuerdo a su lugar :

$$\begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{ccc} j & R[j] & \\ 00 & \longrightarrow & 00 \\ 01 & \longrightarrow & 01 \\ 10 & \longrightarrow & 10 \\ 11 & \longrightarrow & 11 \end{array} \quad H^{R[j]} = \begin{pmatrix} H^{pp} \\ H^{pi} \\ H^{ip} \\ H^{ii} \end{pmatrix}$$

si reordenamos el vector columna de acuerdo con :

$$R[j] \equiv R[\sigma_2 \sigma_1] = \sigma_1 \sigma_2$$

obtenemos las  $H^{\sigma_1 \sigma_2}$  como en la ecuación (A.9). Ahora, combinando las entradas como se muestra a continuación :

$$\begin{pmatrix} H^{pp} \\ H^{pi} \\ H^{ip} \\ H^{ii} \end{pmatrix} \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \longrightarrow \\ \longrightarrow \\ \longrightarrow \end{array} \begin{matrix} H_n^p \\ H_n^i \end{matrix} \longrightarrow H_n$$

y usando las ecuaciones :

$$H_n^p = H^{ip} + W^n H^{pi}$$

$$H_n^i = H^{ip} + W^n H^{ii}$$

obtenemos  $H_n$  como :

$$\begin{aligned} H_n &= H_n^p + W^n H_n^i \\ &= H^{pp} + W^n (H^{pi} + H^{ip} + W^n H^{ii}) \end{aligned}$$

Por tanto, el número de operaciones multiplicativas que se requiere hacer para obtener  $H_n$  en este caso es  $2 = \log_2 N$ . Como esto se tiene que repetir  $N$  veces para obtener todas las  $H_n$ , el algoritmo total requiere de  $N \log_2 N$  operaciones. Esto de hecho ocurre en el caso más general : si  $N = 2^\alpha$ , entonces el algoritmo FFT es un algoritmo de orden  $N \log_2 N$ .

### A.3 Un comparativo

Finalmente mostramos a continuación una comparación entre las soluciones exacta y aproximada FFT para un problema particular. El problema resuelto se discute en detalle en el capítulo anterior y es el de una partícula neutra de espín  $1/2$  en un pozo de potencial infinito y sujeta a un campo magnético no homogéneo. Se resolvió la ecuación de Schrödinger lineal tomando como condición inicial la superposición de un número finito de eigenestados de la energía ( cuatro ) lo que permite tener la expresión exacta de la evolución temporal del sistema y compararla con la obtenida con el método aproximado. Las gráficas comparativas se muestran en la figura A2, que procedemos a explicar. Esta figura es un comparativo entre la solución exacta y la solución aproximada FFT al problema mencionado arriba. Todas las gráficas muestran la densidad de probabilidad de la partícula como función de su posición y del tiempo. Las figuras en la columna de la izquierda presentan la comparación directa de las dos soluciones, la aproximada en un tono algo más oscuro que la exacta. Las figuras en la segunda columna presentan a la solución aproximada por componentes, en un tono oscuro está la contribución a la densidad de probabilidad de la componente de espín hacia arriba y en un tono claro la respectiva de la componente de espín hacia abajo, de manera que la suma de estas dos contribuciones es igual a la gráfica de tono oscuro del lado izquierdo. En todas las gráficas se muestran el valor del campo magnético en el lado derecho de la caja (recuérdese que el campo es una función escalón a la mitad de la caja) y el tiempo en el cual se calcula la densidad de probabilidad, el cual corre hacia abajo de la figura. La primera gráfica a  $t = 0$  es desde luego idéntica para ambos métodos puesto que es la condición inicial; conforme avanza el tiempo es claro que se va perdiendo precisión en la solución aproximada, la cual por cierto corresponde a cien iteraciones por figura.

Nótese que la evolución es periódica en el tiempo, y de acuerdo con los tiempos mostrados en las gráficas el periodo de evolución es de aproximadamente  $1.8 \times 10^{-6}$  segundos. Como en la función de onda inicial tenemos

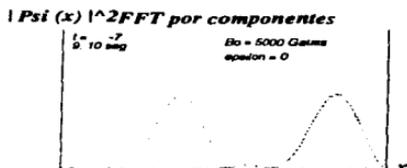
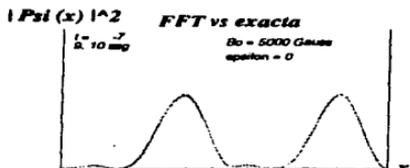
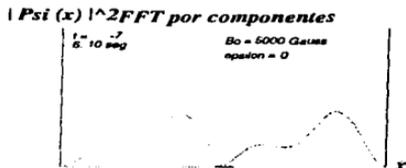
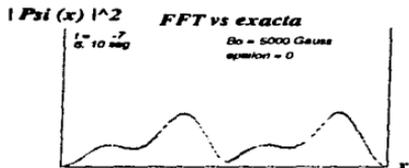
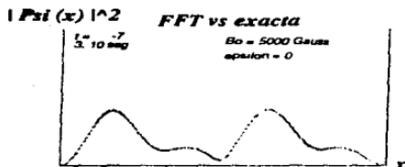


Figura A2 : Comparativo entre las soluciones exacta y aproximada (FFT).  
Para mayores detalles ver texto en la página 81.

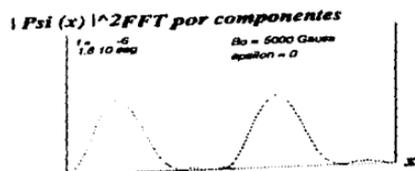
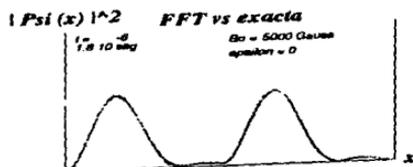
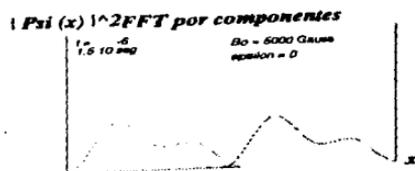
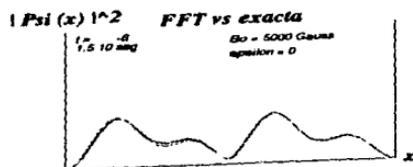
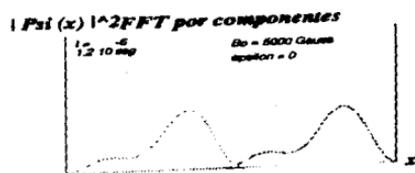
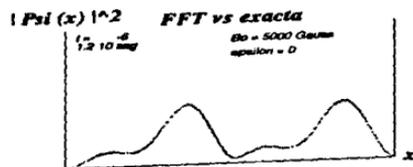


Figura A2 : Continuación.

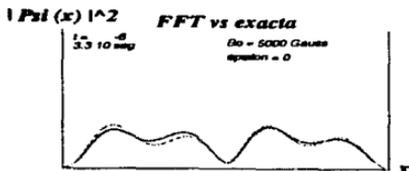
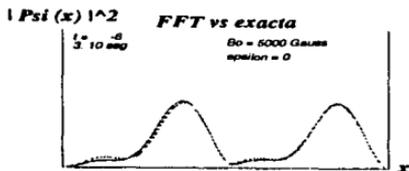
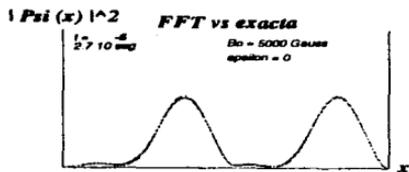
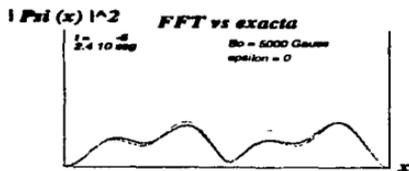


Figura A2 : Continuación.

la superposición de dos eigenestados de la energía por componente de espín, esperamos que el periodo de la evolución esté dado por la diferencia de energías de los eigenestados:

$$T = \frac{2\pi\hbar}{|E_1 - E_0|}$$

De la figura 3.3 del capítulo anterior encontramos que para ambas componentes :

$$|E_1 - E_0| = 3.56288 \times 10^{-28} J$$

de manera que :

$$T = 1.85975 \times 10^{-6} \text{ seg}$$

como se esperaba.

## Apéndice B

# El Método de Diferencias Finitas

Esta parte describe el segundo método de solución numérica (el método MDF) utilizado en este trabajo. Como en el apéndice anterior se describe en que consiste el algoritmo y se hace una comparación entre soluciones aproximadas y soluciones exactas a la ecuación lineal de Schrödinger.

### B.1 Descripción del método

Como se explico en el apéndice anterior, la solución formal a la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, t)$$

está dada por:

$$\psi(x, t) = e^{-i\delta \hat{H}} \psi(x, t_0) \quad (\text{B.1})$$

donde  $\delta = \frac{t-t_0}{\hbar}$ . Consideremos que el hamiltoniano tiene la forma :

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

y designemos el tiempo por un superíndice  $n$  y la posición espacial por un subíndice  $j$ :  $\psi(x, t) \rightarrow \psi_j^n$ . Los valores que toma la variable continua  $x$  son entonces muestreados y representados por  $j\epsilon$  donde  $\epsilon$  es el tamaño del intervalo de muestreo y  $j = 0, 1, 2, \dots$ . Similarmente, la variable temporal

se representa por  $n\delta$  siendo  $\delta$  el intervalo temporal básico y  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Considerese primero la variación espacial de la función de onda  $\psi_j$ ; para este propósito suprimimos el índice temporal  $n$ . Haciendo las expansiones en serie de Taylor:

$$\psi_{j+1} = \psi_j + \epsilon\psi'_j + \frac{1}{2}\epsilon^2\psi''_j + \frac{1}{6}\epsilon^3\psi'''_j + O(\epsilon^4)$$

$$\psi_{j-1} = \psi_j - \epsilon\psi'_j + \frac{1}{2}\epsilon^2\psi''_j - \frac{1}{6}\epsilon^3\psi'''_j + O(\epsilon^4)$$

Sumando estas expresiones y manipulando un poco obtenemos la expresión estandar :

$$\psi''_j \equiv \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_j = \frac{1}{\epsilon^2} [\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}] + O(\epsilon^4)$$

Esta expresión para la segunda derivada de  $\psi$  evaluada en el punto  $x = x_j = j\epsilon$  entonces reemplaza a  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$  en  $H\psi$  y :

$$\begin{aligned} -H\psi_j &= \left[ \left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x^2} - V \right) \psi \right]_j \\ &= \frac{1}{\epsilon^2} [\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}] - V_j \psi_j \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

siendo  $\epsilon^2 \equiv \frac{\hbar^2/2m}{\epsilon^2}$ . Para tratar la evolución en el tiempo reemplazamos el operador de evolución temporal  $e^{-i\delta H}$  por la aproximación unitaria conocida como la forma de Cayley[4] :

$$e^{-i\delta H} = \frac{1 - \frac{1}{2}i\delta H}{1 + \frac{1}{2}i\delta H}$$

Entonces la ecuación (B.1) :

$$\psi_j^{n+1} = e^{-i\delta H} \psi_j^n$$

se aproxima por:

$$\psi_j^{n+1} = \frac{1 - \frac{1}{2}i\delta H}{1 + \frac{1}{2}i\delta H} \psi_j^n$$

o:

$$\left(1 + \frac{1}{2}i\delta H\right) \psi_j^{n+1} = \left(1 - \frac{1}{2}i\delta H\right) \psi_j^n \quad (\text{B.3})$$

Expandiendo esta ecuación y usando (B.2) se obtiene la ecuación de diferencias :

$$\psi_{j+1}^{n+1} + (i\lambda - \varepsilon^2 V_j - 2) \psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1} = -\psi_{j+1}^n + (i\lambda + \varepsilon^2 V_j + 2) \psi_j^n - \psi_{j-1}^n \quad (\text{B.4})$$

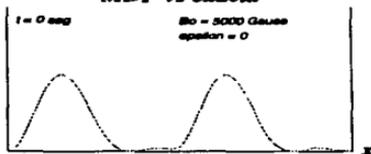
donde  $\lambda = 2\varepsilon^2/\delta$ . Esta ecuación de diferencias es estable y unitaria, aunque implícita. Existen varias técnicas para resolverla. La que adoptamos aquí involucra manipulaciones algebraicas y se describe en detalle en la referencia [5].

## B.2 Otro comparativo

Finalmente hacemos la misma comparación entre las soluciones exacta y aproximada ya realizado anteriormente pero esta vez con el método MDF. Los resultados se muestran en la figura B1, el número de iteraciones entre gráfica y gráfica es de dos mil y las condiciones del problema son exactamente las mismas que para el método FFT. Los resultados son igualmente satisfactorios para este caso lineal.

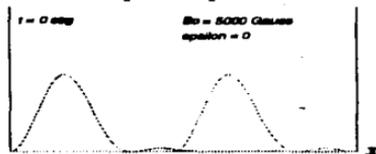
$|\Psi(x)|^2$

*MDF vs exacta*



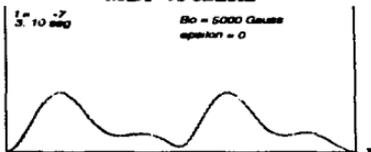
$|\Psi(x)|^2$

*MDF por componentes*



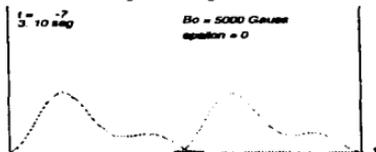
$|\Psi(x)|^2$

*MDF vs exacta*



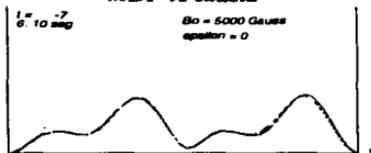
$|\Psi(x)|^2$

*MDF por componentes*



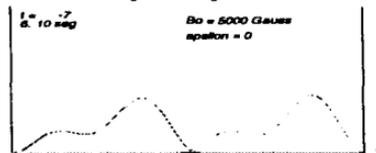
$|\Psi(x)|^2$

*MDF vs exacta*



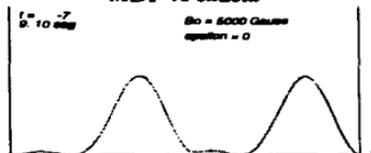
$|\Psi(x)|^2$

*MDF por componentes*



$|\Psi(x)|^2$

*MDF vs exacta*



$|\Psi(x)|^2$

*MDF por componentes*

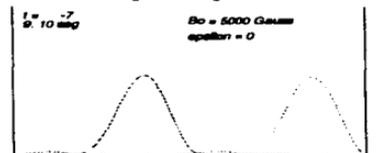
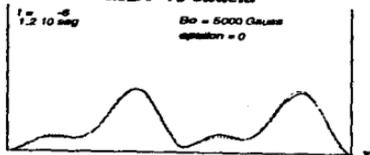


Figura B1 : Comparativo entre las soluciones exacta y aproximada (MDF).  
Para mayores detalles ver texto en la página 90.

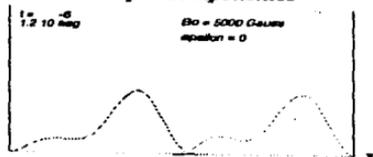
$|\Psi(x)|^2$

**MDF vs exacta**



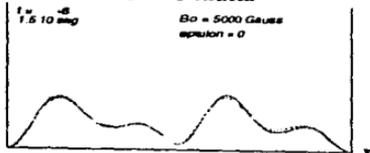
$|\Psi(x)|^2$

**MDF por componentes**



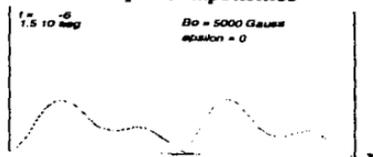
$|\Psi(x)|^2$

**MDF vs exacta**



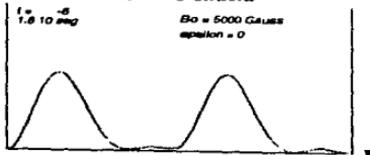
$|\Psi(x)|^2$

**MDF por componentes**



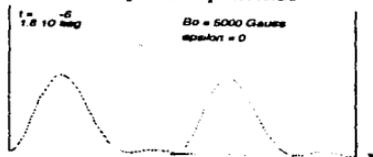
$|\Psi(x)|^2$

**MDF vs exacta**



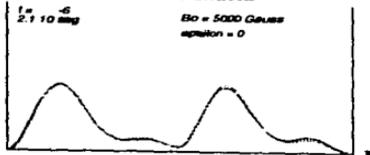
$|\Psi(x)|^2$

**MDF por componentes**



$|\Psi(x)|^2$

**MDF vs exacta**



$|\Psi(x)|^2$

**MDF por componentes**

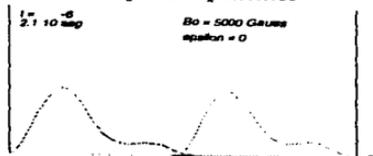


Figura B1 : Continuación.

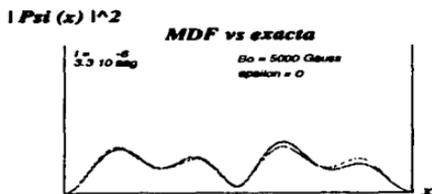
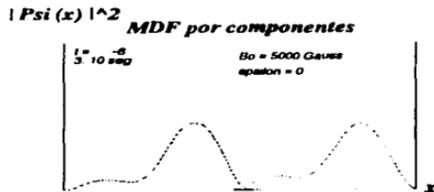
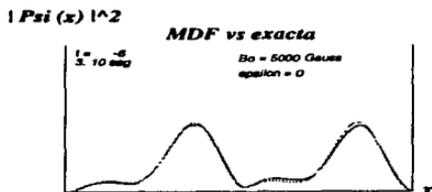
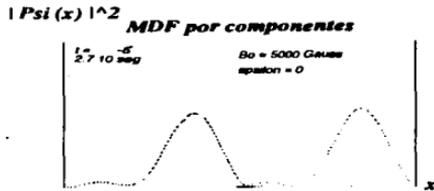
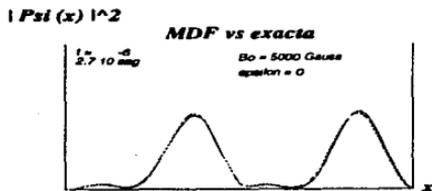
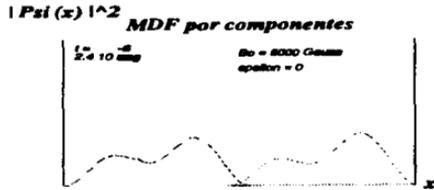
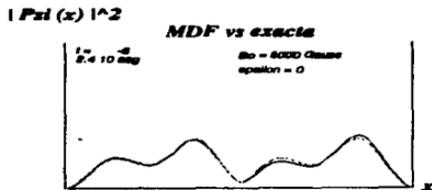


Figura B1 : Continuación.

## Bibliografía

- [1] S. Weinberg, *Ann. Phys.* **194**, 336 (1989);  
S. Weinberg, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 485 (1989)
- [2] J. J. Bollinger, et.al. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1031 (1989)
- [3] E. C. G. Sudarshan, N. Mukunda, *Classical Dynamics*  
John Wiley & Sons, 1974
- [4] W. H. Press, et. al. *Numerical Recipes in C*  
Cambridge University Press, 1988
- [5] Goldberg A. , et. al. *Am. Jour. Phys.* **35**,177 (1967)