

21
2.7.98



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**LA FORMULACION MATEMATICA DE LA
MECANICA CUANTICA Y UNA APLICACION:
EFECTO TUNEL EN ESPACIOS NO
SIMPLEMENTE CONEXOS**

283565

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
M A T E M A T I C O
P R E S E N T A :
CESAR OCTAVIO MALDONADO MERCADO

DIRECTOR DE TESIS:
Dr. DANIEL SUDARSKY SAIONZ



CIUDAD UNIVERSITARIA

JUNIO DE 1998



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.



VERDAD NACIONAL
AVANZA DE
MEXICO

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:

LA FORMULACION MATEMATICA DE LA MECANICA CUANTICA Y UNA APLICACION :
EFECTO TUNEL EN ESPACIOS NO SIMPLEMENTE CONEXOS

realizado por César Octavio Maldonado Mercado

con número de cuenta 9251771-4 , pasante de la carrera de Matemáticas

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario

Dr. Daniel Eduardo Sudarsky Saionz

Propietario

Dra. María de la Luz Jimena de Teresa de Oteyza

Propietario

Dr. Pablo Padilla Longoria

Suplente

Dr. Oscar Alfredo Palma Velasco

Suplente

Dr. José Alejandro Ayala Mercado

de Lucas
Díaz

Pablo Padilla L.

Consejo Departamental de Matemáticas
FACULTAD DE CIENCIAS
Mat. César Guevara Bravo

MATEMÁTICAS

*Quiero dedicar todo el esfuerzo que puse en esta tesis
a Luz María, mi mamá y
a Mario, mi papá,
quienes siempre me han dado todo el amor y apoyo posible.*

Agradezco a mis hermanos Mario, Julio y Rafa el haber sido siempre tres de mis mejores amigos y haber compartido conmigo 24 años de vida.

Tengo mucho que agradecer también a todas las siguientes personas:

a Adrián por ser mi cuarto hermano, a Alejandro por años de buena amistad, al maestro Alejandro y a Alex por tres años de entrenar juntos, a Alfonso por ayudarme a no volverme loco con las computadoras, a Carlo por años de amistad verdadera, a Carlos por sus correos electrónicos netos, a Claudia por las pláticas intensas, a Enrique por años de estar juntos en esto de la Física, a Esperanza por su amistad, a Joel por años de estar juntos en esto de las Matemáticas, a Karina por compartirme el mejor regalo posible, a Gabriel por años de amistad, a Juan por enseñarme que el mundo es un lugar mágico, a José Luis por mostrarme como es la vida fuera del sistema, a Mayam por su amistad, a Nayelli por el cuento de Dumbo, a Omar por ser mi cuarto hermano, a Patricia por darme ánimo cuando mas me hacía falta, a Paty por las canciones de Silvio, a Silvia por ser otra hereje, a Rubén por mostrarme la vida verdadera, a Uri por su amistad, a Yomar y a todos los amigos de la escuela por sus conocimientos, a Wallo por las pláticas profundas, a toda la banda del primer semestre (incluyendo a Gabriela) por meses de relajo, a todos los amigos de Monterrey por compartir la percepción unitaria, a todos los amigos del Universum, a todos los amigos del Clan y a todos los amigos que por razones de espacio no puedo incluir en esta lista.

También quiero agradecer a Alejandro, Lucero, Pablo y Oscar por haberse tomado tiempo para leer este trabajo y haber contribuido de manera importante para mejorarlo.

Agradezco de manera especial a Daniel por tantas horas de enseñanza y paciencia y por haber aceptado el reto de enseñarme Física.

índice

INTRODUCCIÓN	2
1 BASES FÍSICAS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA	4
§1.1 El Origen de la Mecánica Cuántica	5
2 BASES MATEMÁTICAS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA	11
§2.1 Espacios Vectoriales	12
§2.2 El Espacio de Hilbert	14
§2.3 Teoría de los Espacios de Hilbert	19
§2.4 Operadores Lineales y Continuos	23
§2.5 Operadores Lineales No Acotados y Teoría Espectral	27
3 LA FORMULACIÓN DE LA MECÁNICA CUÁNTICA	34
§3.1 La Ecuación de Schrödinger y la Mecánica Matricial	35
§3.2 La Formulación de la Mecánica Cuántica	42
§3.3 La Aproximación Semiclásica y las Integrales de Camino de Feynman	50
4 EL EFECTO TÚNEL	55
§4.1 Algunos Puntos Básicos Sobre el Efecto Túnel	55
§4.2 Nuevas Soluciones para la Ecuación de Schrödinger	60
§4.3 Efecto Túnel Multidimensional	66
5 EL EFECTO TÚNEL EN ESPACIOS NO SIMPLEMENTE CONEXOS	71
§5.1 Preliminares Geométricos y Topológicos	72
§5.2 El Efecto Túnel en el Círculo	81
§5.3 El Efecto Túnel en Tres Espacios No Simplemente Conexos	86

introducción

A lo largo del tiempo la interacción entre la física y las matemáticas ha sido una fuente de impulso para estas dos disciplinas. El hecho de que sea posible relacionar propiedades de objetos matemáticos con fenómenos físicos, hace inevitable que exista esta simbiosis. El desarrollo de la mecánica cuántica es uno de los mejores ejemplos de esto, ya que desde su comienzo el desarrollo conceptual de esta teoría se fué dando al parejo del desarrollo del formalismo matemático en el que se basa. Por todo esto, el estudio de la mecánica cuántica se encuentra al mismo tiempo dentro de las matemáticas y de la física.

Esta tesis ha sido escrita con la intención de acercarse a la mecánica cuántica desde distintos puntos de vista, como lo son el desarrollo histórico de sus ideas principales, sus bases matemáticas, su formulación en términos de postulados, su aplicación en un problema específico como lo es el efecto túnel y finalmente su relación con la topología del espacio.

Una de las razones para interesarse en el desarrollo histórico de la mecánica cuántica nace de que sus postulados tienen un nivel considerable de abstracción, de forma que de entrada no es fácil comprender las razones por las que los postulados tienen determinada forma. Conocer el proceso que culmina con los postulados nos ayuda a comprenderlos mejor y si bien es cierto que ellos no pueden ser demostrados ni deducidos en sentido estricto, sí es posible sugerirlos y con ello hacerlos más naturales. En todo caso, su validez no reside en esta posibilidad sino en que sus predicciones se confirman experimentalmente. En el primer capítulo y en el punto uno del tercer capítulo se hace un breve repaso de los experimentos e ideas que dieron forma a la mecánica cuántica.

Las teorías físicas tienen siempre como base un formalismo matemático al cual interpretan en determinada forma. Es indispensable conocer la estructura de este formalismo para comprender las interpretaciones que una

teoría física hace sobre de él. Esto implica conocer sus axiomas y objetos principales de estudio, así como los teoremas más importantes junto con sus demostraciones y corolarios. El tercer capítulo está dedicado a los espacios de Hilbert con los que se introduce la posibilidad de estudiar espacios vectoriales de dimensión infinita, mismos que tienen un papel importante en la mecánica cuántica. El plan adoptado en este estudio es el de exponer primero su definición para después continuar con el estudio de su estructura y de algunos teoremas importantes. Más tarde se trata lo referente a los operadores y se concluye con el teorema espectral, en el cual se fundamenta una parte importante de la mecánica cuántica.

No existe una lista de postulados de la mecánica cuántica en particular que sea la única reconocida, sin embargo, todas las existentes coinciden en cierto número de puntos básicos, como es el caso de la lista expuesta en este trabajo en el punto dos del tercer capítulo. Después de este punto, el interés de la tesis se traslada a estudiar cómo es que esta versión "acabada" de la mecánica cuántica se relaciona con ciertos aspectos concretos. El primero de ellos es ver cómo se representan las magnitudes observables de posición y momento. En el punto tres del tercer capítulo se estudia uno de los métodos aproximados para resolver la ecuación de evolución de la mecánica cuántica y además se presenta una introducción a las integrales de camino de Feynman.

El efecto túnel es sin duda uno de las implicaciones más extrañas de la mecánica cuántica y constituye un buen ejemplo para adentrarse más en una de sus aplicaciones concretas. El cuarto capítulo está dedicado a exponer algunas generalidades sobre este efecto y además un resumen de los resultados de la primera parte del artículo "Quantum Tunneling: a General Study in Multi-dimensional Potential Barriers With and Without Dissipative Coupling" de M. Razavy y A. Pimpale [14].

En el quinto capítulo se explora la relación entre la topología del espacio y el efecto túnel desde un punto de vista cercano al experimental, en el sentido de que no se exponen resultados generales, sino más bien un estudio de ejemplos que sugiera ciertas propiedades de este efecto que estén asociadas a la topología. Para este fin fue necesario hacer programas de computadora en MAPLE, los cuales se incluyen en el apéndice de la tesis.

capítulo 1

BASES FÍSICAS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

El nacimiento de la mecánica cuántica comienza con una suposición hecha por Max Planck para resolver una inconsistencia a la que daba lugar la física clásica, constituida por el entonces sólido marco teórico de la mecánica newtoniana, la teoría electromagnética de Maxwell y la física estadística. El fenómeno estudiado por Planck era el de la radiación del cuerpo negro. Este objeto tiene la propiedad -al menos teóricamente- de absorber toda la radiación incidente en él. Puede ser estudiado experimentalmente de manera bastante aproximada, usando una cavidad con una entrada chica en comparación con la cavidad misma. Por esto el cuerpo negro puede ser visto como algo que realmente existe en la naturaleza.

El problema de la física clásica con este fenómeno consiste en que élla conduce a la conclusión de que la energía interna del cuerpo negro es infinita, lo que automáticamente lo hace intratable desde el punto de vista de la misma física clásica. A esta conclusión se llega aplicando la física estadística a los grados de libertad del campo electromagnético dentro de la cavidad.

Este fenómeno fue uno de los muchos que se descubrieron al final del siglo XIX y a principios del siglo XX, que cuestionaban de manera profunda a la física de entonces. Otros de estos fenómenos fueron el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton, el espectro de emisión de los gases y la difracción de los electrones. Todos ellos generaron ideas creadas para explicarlos y finalmente fueron éstas el origen de la mecánica cuántica. (Este capítulo está basado principalmente en [8]).

§1.1 El Origen de la Mecánica Cuántica

Antes de que Planck realizara su investigación se conocían dos distintas leyes para el fenómeno de la radiación del cuerpo negro. La primera de ellas debida a Wien cuya importancia residió en su capacidad de descripción del fenómeno en frecuencias altas, mas que en los argumentos teóricos usados en su deducción. Esta ley predecía que la cantidad de energía por unidad de volumen, a una frecuencia $\nu + d\nu$ y a una temperatura T era

$$U(\nu, T) = \frac{\alpha \nu^3}{e^{\frac{\beta \nu}{T}}} d\nu \quad (1.1)$$

en donde α y β son constantes positivas.

Por otro lado se tenía la ley de Raleigh -que mas tarde sería corregida por Jeans- en la que se calcula el número de modos normales de vibración de la radiación electromagnética por unidad de volumen y de frecuencia y luego se multiplica por la energía de cada uno de éstos, para obtener la energía total por unidad de volumen y de frecuencia. Para esto Raleigh usó la estadística de Boltzman según la cual la energía promedio de cada modo está dada por

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \frac{\int_0^\infty dE E e^{-\frac{E}{K_B T}}}{\int_0^\infty dE e^{-\frac{E}{K_B T}}} = K_B T. \quad (1.2)$$

En esta fórmula está implícito que cada modo normal de vibración puede tener una energía con valores que varían de manera continua entre cero e infinito. Multiplicando por el número de modos nos queda la ahora llamada ley de Raleigh-Jeans

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} K_B T, \quad (1.3)$$

que coincide con los datos experimentales a bajas frecuencias. La inconsistencia viene del hecho de que la energía resulta ser infinita

$$U(T) = \int_0^\infty d\nu \frac{8\pi\nu^2}{c^3} K_B T = \infty. \quad (1.4)$$

Esta ley es teóricamente correcta desde el punto de vista de la física clásica y sin embargo conduce a un absurdo.

El trabajo de Planck consistió principalmente en encontrar primero una fórmula que coincidiera con las dos leyes mencionadas, en los rangos respectivos de su validez experimental y después en deducirla a partir de la física clásica con alguna modificación específica.

Dado que el denominador de la fórmula de la ley de Wien crece en forma exponencial es natural que restarle un uno, no afecte su comportamiento a grandes frecuencias y por lo tanto la conformidad de la ley con los datos experimentales, sin embargo para bajas frecuencias usando la serie de Taylor se tiene que

$$U(\nu, T) = \frac{\alpha \nu^3}{e^{\frac{h\nu}{T}} - 1} \quad (1.5)$$

y, a primer orden

$$= \frac{\alpha \nu^3}{1 + \frac{h\nu}{T} - 1} = \frac{\alpha T \nu^2}{\beta}, \quad (1.6)$$

lo cual es prácticamente la ley de Raleigh-Jeans. Ajustando las constantes se llega a la fórmula de Planck

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}, \quad (1.7)$$

en donde h es una constante que se ajusta experimentalmente. Mas tarde -cuando la teoría cuántica se desarrolla más- resulta ser una de las constantes fundamentales de la naturaleza.

La nueva idea que Planck introdujo en la física para poder deducir la fórmula fué suponer que la energía de cada modo normal de vibración de las ondas electromagnéticas de una cierta frecuencia ν tenía que ser de la forma $E = h\nu n$, con $n \in \mathbb{N}$. Por lo anterior la fórmula (1.2) fué reemplazada por

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}}} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}, \quad (1.8)$$

lo que multiplicado por el número de modos nos da la fórmula de Planck 1.7.

Otro hecho físico conocido en la época de Planck e inexplicable según la física clásica, es el efecto fotoeléctrico que consiste en que una placa de metal emite electrones cuando recibe radiación electromagnética. Experimentalmente se puede encontrar que el número de electrones emitidos es proporcional a la intensidad de la radiación que recibe. Además, esta emisión sólo se da cuando la frecuencia de las ondas electromagnéticas es mayor a cierto valor crítico (ν_0). La emisión no se debe al calentamiento de la placa puesto que es prácticamente instantánea y si la frecuencia de las ondas es menor que la crítica, no importa cuánto se aumente la intensidad y por lo tanto el

calor que recibe. La energía cinética de los electrones puede medirse si se usa un campo electromagnético y, se encuentra que ésta es proporcional a $\nu - \nu_0$ para ondas de frecuencia ν .

La explicación de Einstein para este efecto consistió en interpretar a las ondas electromagnéticas como partículas o más bien como paquetes de energía $E = h\nu$ y sin masa, que al incidir sobre la placa remueven a los electrones sólo si su energía es mayor que la que mantiene ligados a los electrones $E_c = h\nu_0$. Según su explicación, el resto de la energía se convierte en energía cinética del electrón liberado. Se obtiene así la fórmula

$$E_k = h\nu - h\nu_0, \quad (1.9)$$

la que resulta concordar con los datos experimentales.

Por otro lado el descubrimiento del llamado efecto Compton reforzó la idea propuesta por Einstein, acerca de que la luz presenta un comportamiento corpuscular, a pesar de que su comportamiento ondulatorio había sido plenamente demostrado mucho tiempo atrás. El efecto Compton consiste en que la radiación electromagnética incidente sobre un material, en parte se dispersa y en parte provoca una radiación secundaria en una dirección determinada y cuya longitud de onda depende del ángulo en esta misma dirección. Compton encontró que el efecto puede describirse correctamente si se piensa en fotones -paquetes de energía- y se les asigna un momento $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$ (donde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ y $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ es el número de onda) y una energía $E = h\nu$. Aplicando las leyes de conservación que se usan en los choques elásticos de partículas se encuentra el cambio de longitud de onda entre la radiación incidente y la reflejada en función del ángulo de dispersión.

Otro hecho físico descubierto a principios de siglo y también inexplicable para la física clásica es el de los espectros de los gases, que consisten en patrones de determinadas frecuencias de ondas electromagnéticas emitidas por los gases cuando se hace pasar una corriente eléctrica por ellos. A principios de siglo se contaba con fórmulas que al menos describían la distribución, medida en ese entonces, de las líneas espectrales. Ritz publicó en 1908

$$\nu_{m,n} = \frac{R}{n^2} - \frac{R}{m^2}, \quad m > n = 1, 2, \dots \quad (1.10)$$

fórmula que da las frecuencias de emisión del Hidrógeno, en donde R es una constante.

Para 1911 Rutherford ya había demostrado que los átomos están constituidos por un núcleo de carga positiva con casi toda la masa del átomo

y por electrones. El problema de los modelos que pretendían describir el movimiento de los electrones alrededor del núcleo era que según la electrodinámica clásica, los electrones como cargas en movimiento periódico debían emitir radiación y por lo tanto perder energía y caer al núcleo.

En 1913 Bohr propuso que la energía de los electrones girando alrededor del átomo está cuantizada en niveles que corresponden a estados estacionarios en los que los electrones no radían. Propuso también que los electrones saltan de un estado a otro emitiendo ondas electromagnéticas de frecuencia $\nu = \frac{|E_i - E_f|}{h}$. Además, dió la regla de cuantización el momento angular de los electrones debe ser múltiplo de \hbar , es decir,

$$l = mvr = n\hbar. \quad (1.11)$$

Por otro lado se sabe, según la mecánica clásica, que si un cuerpo tiene una órbita circular se debe cumplir que la fuerza de atracción debe ser siempre igual a la fuerza centrípeta de modo que, para un electrón girando circularmente en un campo coulombiano, se puede escribir

$$\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}. \quad (1.12)$$

De esta manera se tienen dos ecuaciones (la 1.11 y la 1.12), para encontrar v y r en términos de los enteros n y algunas constantes entre las que destaca \hbar . Resolviendo el sistema y calculando la energía correspondiente a cada nivel, se tiene

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (1.13)$$

Tomando en cuenta que el gas sólo emite en las frecuencias fijadas por Bohr, se obtiene la regla encontrada por Ritz.

En 1914 la existencia de los estados estacionarios fué confirmada por Frack y Hertz, mediante un dispositivo que pasaba una corriente eléctrica a través de un gas compuesto por moléculas con energía cinética promedio menor a la necesaria para cambiar de nivel a sus electrones. Las mediciones demostraron que la cantidad de corriente que atravesaba el gas, bajaba notablemente cuando el voltaje era el adecuado para subir de nivel a los electrones de los átomos del gas. Lo anterior queda explicado, si se piensa que la energía de los electrones de la corriente es absorbida por los electrones de los átomos subiendo su nivel de energía y que si esta energía cinética no es la suficiente para elevar estos niveles entonces no es absorbida.

Bohr propuso también que los niveles de energía de los átomos se saturan y que las etapas de llenado de estas capas corresponden a determinadas propiedades químicas. Con esto Bohr pretendía explicar los periodos en la tabla de elementos, conocidos gracias a Mendelejeff, los cuales dependen del peso atómico del elemento.

Las ideas propuestas por Bohr resultaron ser correctas, sin embargo sus razonamientos sirven sólo para las órbitas circulares, por lo que era obvia la necesidad de ampliarlas. En 1916 Wilson y Sommerfeld propusieron por separado que puesto que los problemas tratados por la entonces teoría de los cuantos tenían que ver con sistemas cuasi-periódicos, la regla de cuantización de Bohr podía extenderse a todos los llamados invariantes adiabáticos, con lo que se tiene

$$J_i = \oint p_i dq_i = nh \quad (1.14)$$

en donde la integral se toma sobre un ciclo completo del sistema.

Todo lo anterior es conocido como la vieja mecánica cuántica. Si bien es cierto que tuvo éxito en describir muchos de los fenómenos ajenos a la mecánica clásica según palabras de de Broglie "era necesaria una nueva mecánica en la que la cuantización estuviera en el centro de la teoría". Hasta entonces la cuantización aparecía como algo superpuesto a la mecánica clásica de manera artificial e inexplicada. Por otro lado ya se conocía la naturaleza dual de la luz de onda y partícula, de modo que cabía preguntarse si todos los fenómenos cuantizados estaban relacionados de alguna manera con una dualidad similar, en especial los electrones cuyo comportamiento en el átomo no era explicable clásicamente y por lo tanto no se podía asegurar su condición de partícula.

Fue de Broglie quien propuso la dualidad onda-partícula, que postula la naturaleza ondulatoria de la materia, lo que a la larga sería una de las ideas fundamentales de la mecánica cuántica moderna. De Broglie afirma haber tenido en cuenta al formular esta idea el claro parecido entre los principios variacionales de Maupertuis y de Fermat. El primero corresponde a la mecánica clásica y con él se puede encontrar la trayectoria de una partícula de masa m con energía E , entre dos puntos dados p_1, p_2 y en donde el potencial es V y las variables canónicas conjugadas son p, q

$$\delta \int_{p_1}^{p_2} \sqrt{2m(E - V)} dq = \delta \int_{p_1}^{p_2} p dq = 0. \quad (1.15)$$

El segundo da la trayectoria de un rayo de luz de frecuencia ν en un medio

$$\delta \int_{p_1}^{p_2} \frac{ds}{v(r)} = \delta \int_{p_1}^{p_2} \frac{ds}{\lambda(r, \nu)} = 0, \quad (1.16)$$

en donde $v(r)$ da la velocidad de la luz en el medio y $\lambda(r, \nu)$ la longitud de onda en función de la posición y de la frecuencia. Comparando estos dos principios puede verse que las trayectorias de las partículas pueden identificarse con los rayos de un problema de óptica si se propone que las ondas tienen una longitud de onda que cumple $p(r, E) = A(\nu)/\lambda(r, \nu)$, en donde $A(\nu)$ es una función que depende de la frecuencia. Basado en la similitud de estos dos principios y en el hecho de que la luz presenta en ciertos experimentos un comportamiento corpuscular y en otros un comportamiento ondulatorio, de Broglie postuló que cualquier móvil con momento p y energía E va acompañado de una onda con una frecuencia y una longitud de onda dadas por

$$\nu = \frac{E}{h}, \quad \lambda = \frac{h}{p}. \quad (1.17)$$

Una de las implicaciones de ésta hipótesis, es que la materia debe presentar un comportamiento ondulatorio. La existencia de ésto fue experimentalmente demostrada por Davisson y Germer, quienes hicieron pasar un haz de electrones a través de una rejilla de difracción, encontrando efectivamente patrones de difracción en forma de anillos.

El desarrollo adecuado de la mecánica cuántica requiere del uso de el análisis funcional, el cual es estudiado en sus ideas principales en el siguiente capítulo. La continuación formal de las ideas aquí expuestas se hace en el tercer capítulo.

capítulo 2

BASES MATEMÁTICAS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Uno de los conceptos matemáticos de mayor utilidad es el de espacio vectorial de dimensión finita que conecta nuestra intuición física con el formalismo del análisis matemático. Es posible generalizar la teoría de estos espacios de dimensión finita al caso en que la dimensión es infinita. Muchos de los teoremas y objetos matemáticos de la teoría de dimensión finita tienen sus análogos en el caso de dimensión infinita. Podría pensarse que el estudio de esta generalización tiene un interés estrictamente matemático, sin embargo, son estos espacios los que constituyen la base de la fundamentación matemática de la mecánica cuántica.

Basta recordar que la dimensión de un espacio vectorial es el número mínimo de vectores que generan mediante combinaciones lineales a todos los miembros del espacio, para darse cuenta de que en este nuevo caso será necesario tratar con sumas infinitas y por lo tanto es de esperarse que los nuevos axiomas traten acerca de la convergencia de sucesiones en el espacio. El nuevo conjunto de axiomas define lo que se llama un espacio de Hilbert y, aunque no hace referencia explícita a la dimensión, es el mínimo de suposiciones necesarias para definir correctamente un espacio vectorial de dimensión infinita en el que existan bases, producto interno, proyecciones, transformaciones lineales junto con sus matrices asociadas y demás objetos familiares al álgebra lineal.

§2.1 Espacios Vectoriales

Antes de empezar a exponer esta generalización es necesario recordar algunas definiciones y resultados de álgebra lineal, que o no hacen referencia a una dimensión en particular, o si lo hacen tienen su análogo en el caso de dimensión infinita. Denotaremos por E a los espacios vectoriales en general y por F a los de dimensión finita.

Definición 2.1 *Un espacio vectorial es un conjunto E al que está asociado un campo C , y con los que se definen 2 operaciones o funciones $\oplus : E \times E \rightarrow E$, $\cdot : E \times C \rightarrow E$, las cuales para todo $x, y, z \in E$ y $\alpha, \beta \in C$ cumplen:*

- i) $(x \oplus y) \oplus z = x \oplus (y \oplus z)$
- ii) $\exists 0 \in E$ tal que $x \oplus 0 = x$
- iii) $x \oplus y = y \oplus x$
- iv) $\alpha \cdot (x \oplus y) = \alpha \cdot x \oplus \alpha \cdot y$
- v) $(\alpha + \beta) \cdot x = \alpha \cdot x \oplus \beta \cdot x$
- vi) $\alpha \cdot (\beta \cdot x) = (\alpha\beta) \cdot x$
- vii) $1 \cdot x = x$
- viii) $0 \cdot x = 0$

Un subespacio vectorial es un subconjunto de E que es cerrado bajo las combinaciones lineales finitas de sus miembros. Un subconjunto finito de vectores se dice linealmente dependiente, si al menos uno de ellos puede expresarse como combinación lineal de los otros. Un espacio vectorial de dimensión finita se dice de dimensión n si contiene n vectores linealmente independientes tales que cualquier otro vector es combinación lineal de ellos. A este conjunto se le llama base del espacio. Una observación importante es que una vez que se elige una de las posibles bases, los coeficientes que representan a un vector dado son únicos. El ejemplo más natural de espacio vectorial es el espacio Euclidiano \mathbb{R}^n y su análogo complejo \mathbb{C}^n . Según puede demostrarse, todo espacio vectorial de dimensión finita F que tenga como campo asociado a los números reales o complejos, es isomorfo a estos dos últimos ejemplos. Es decir, existe una función biyectiva entre F y ellos que preserva toda la estructura. En adelante se toman en cuenta sólo espacios E cuyo campo asociado es \mathbb{C} .

Definición 2.2 *El producto escalar es una función $\langle \cdot | \cdot \rangle : E \times E \mapsto \mathbb{C}$, que para todo $x, y, z \in E$ y $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ cumple :*

- i) $\langle x|y \rangle = \langle y|x \rangle^*$
 ii) $\langle x|x \rangle \geq 0, x = 0 \iff \langle x|x \rangle = 0$
 iii) $\langle \alpha x + \beta y|z \rangle = \alpha^* \langle x|z \rangle + \beta^* \langle y|z \rangle$

en donde el símbolo $*$ denota a la conjugación en los complejos.

Definición 2.3 La norma de un espacio vectorial es una función $\|\cdot\| : E \mapsto \mathbb{R}^+$ que cumple:

- i) $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$
 ii) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$
 iii) $\|x\| = 0 \iff x = 0$

Además, una norma define una distancia en el espacio vectorial mediante $d(x, y) := \|x - y\|$.

Teorema 2.1 Todo espacio vectorial E con producto escalar cumple con las siguientes propiedades:

- i) la función $x \mapsto \sqrt{\langle x|x \rangle}$ es una norma.
 ii) la desigualdad de Cauchy: $|\langle x|y \rangle| \leq \|x\| \|y\|$
 iii) el análogo del teorema de Pitágoras:
 $\|x + y\|^2 = \|x\|^2 + \|y\|^2 + 2\text{Re}\langle x|y \rangle$
 iv) la identidad del paralelogramo:
 $\|x + y\|^2 + \|x - y\|^2 = 2\|x\|^2 + 2\|y\|^2$

Al respecto puede verse [2].

Definición 2.4 A un espacio vectorial E se le asocia otro espacio E' , llamado el dual de E que consiste en todas las funciones lineales y continuas $f : E \mapsto \mathbb{C}$.

E' es un espacio vectorial si se definen las operaciones como:

$$(f \oplus g)(x) := f(x) + g(x), (\alpha \cdot f)(x) := \alpha f(x) \quad (2.1)$$

Es posible definir una norma en este espacio mediante

$$\|f\| := \text{Sup}_{\|x\| \leq 1} \|f(x)\| \quad (2.2)$$

La función $x \mapsto \langle x_0|x \rangle$ con $x_0 \in E$ fijo, está en el dual. Se tiene así un subconjunto A de E' definido como sigue:

$$A := \{f \in E' | \exists x_f \in E \text{ tal que } f(x) = \langle x_f|x \rangle \quad \forall x \in E\} \quad (2.3)$$

A es cerrado bajo combinaciones lineales finitas por lo que es un subespacio. Cuando la dimensión del espacio es finita es fácil ver que $\dim A = \dim F$, por lo que se tiene así un resultado importante para el caso finito: $A = F'$ es decir F' es isomorfo a F . Por otro lado dos vectores se dicen ortogonales si su producto escalar es cero, un conjunto de vectores es ortogonal si sus elementos lo son entre sí, y ortonormal si además tienen norma uno.

Para terminar esta rápida revisión de álgebra lineal se consideran sólo espacios de dimensión finita y se recuerda un teorema cuyo análogo en dimensión infinita es fundamental para la mecánica cuántica. Dada una base, existe una relación de 1 a 1 entre las transformaciones lineales y las matrices $n \times n$. Si la matriz cumple $M_{ij} = M_{ji}^*$ la transformación que define se dice hermitiana. Un vector x es un vector propio de la transformación T si existe $\lambda \in \mathbb{C}$ tal que $Tx = \lambda x$.

Teorema 2.2 *Dada una transformación lineal hermitiana, existe una base compuesta por vectores propios de ella.*

La demostración de este teorema puede verse en [10].

§2.2 El Espacio de Hilbert

Sea H un espacio vectorial complejo con producto interno y supóngase que existe un conjunto de vectores infinito y ortonormal $\{\phi_i\}$ y sea $\{\alpha_i\}$ una sucesión de escalares con los que se forma la suma: $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i$, de tener sentido el vector construido mediante esta combinación lineal infinita, su norma al cuadrado será:

$$\left\langle \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i \mid \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^k \alpha_j \phi_j \right\rangle \quad (2.4)$$

En este punto es necesario permitirse algunas libertades respecto de el rigor matemático -que mas tarde serán aclaradas-, para así poder sugerir qué nuevo axioma es útil para tratar la convergencia en H . De modo que la expresión anterior queda por la continuidad de la función $x \mapsto \langle x_0 \mid x \rangle$ como:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^k \alpha_i^* \alpha_j \delta_{ij} = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2. \quad (2.5)$$

Esta serie converge sólo cuando la sucesión de las sumas parciales cumple con la propiedad de Cauchy:

Definición 2.5 Una sucesión $\{A_n\}$ en el espacio X con la métrica $d(x, y)$ es de Cauchy si $\forall \epsilon > 0 \exists n_0 \in \mathbb{N}$ tal que si $m, n \geq n_0$ entonces $d(A_n, A_m) < \epsilon$.

De lo anterior se desprende que hay combinaciones lineales infinitas que en principio construyen posibles vectores cuya norma no está definida por ser infinita, de modo que no son aceptables si se quiere conservar la definición de norma y junto con ella resultados tan intuitivos como el teorema 2.1.

Por otro lado, ¿qué significa que la sucesión definida por una combinación lineal infinita de vectores ortonormales en H sea de Cauchy?

Sea $\sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \phi_i$ tal que la sucesión de las sumas parciales es de Cauchy, entonces se debe cumplir que $\forall \epsilon > 0 \exists n_0 \in \mathbb{N}$ tal que si $m \geq n \geq n_0$ entonces sucede que

$$\epsilon > \left\| \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i - \sum_{i=1}^m \alpha_i \phi_i \right\| = \left\| \sum_{i=n}^m \alpha_i \phi_i \right\| \quad (2.6)$$

$$= \sqrt{\left\langle \sum_{i=n}^m \alpha_i \phi_i, \sum_{j=n}^m \alpha_j \phi_j \right\rangle} = \sqrt{\sum_{i=n}^m |\alpha_i|^2}, \quad (2.7)$$

esto pasa si y sólo si la sucesión de las sumas parciales de la serie $\sum_{i=n}^{\infty} |\alpha_i|^2$ es de Cauchy, que es precisamente la condición establecida después de la ecuación 2.5. En conclusión, es lo mismo pedir que una combinación lineal infinita de vectores ortonormales tenga norma finita, a pedir que la sucesión de las sumas parciales sea de Cauchy en el espacio vectorial. Esto sugiere que el axioma por agregar a la lista de axiomas de espacio vectorial es el de ser completo, es decir, que todas las sucesiones de Cauchy converjan dentro de H , con lo que se logra establecer qué combinaciones lineales son aceptables.

Definición 2.6 Un espacio de Banach es un espacio vectorial completo. Un espacio de Hilbert H es un espacio vectorial con un producto interno definido, que además es completo respecto a la norma que este producto induce.

El ejemplo de espacio de Hilbert de mayor trascendencia para la mecánica cuántica es el espacio de las funciones de valores complejos definidas en $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ y cuya norma al cuadrado es una función integrable:

$$L^2_{\mu}(\Omega) := \left\{ f \mid f : \Omega \mapsto \mathbb{C}, \int_{\Omega} |f|^2 d\mu < \infty \right\} \quad (2.8)$$

en donde μ es la medida definida en \mathbb{R}^n .

En este espacio se identifican a las funciones que difieren en un conjunto de medida cero.

Teorema 2.3 L^2_μ es un espacio de Hilbert.

En la demostración se utilizan 3 lemas.[3]

Lema 2.1 (Desigualdad de Hölder) Sean $f \in L^p_\mu, g \in L^q_\mu$ en donde $1 < p < \infty$ y $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ (y por lo tanto $p = \frac{q}{q-1}$) entonces $fg \in L^1_\mu$ y además $\int_\Omega |fg| \leq \|f\|_{L^p} \|g\|_{L^q}$.

Demostración. $\forall a, b \geq 0$ se cumple la llamada desigualdad de Young (para demostrarla basta recordar que la función logaritmo es cóncava):

$$ab \leq \frac{1}{p}a^p + \frac{1}{q}b^q \quad (2.9)$$

por lo que se tiene

$$|f(x)g(x)| \leq \frac{1}{p}|f(x)|^p + \frac{1}{q}|g(x)|^q \quad (2.10)$$

para todo $x \in \Omega$ y entonces se tiene $fg \in L^1_\mu$. Por lo tanto

$$\int |fg| \leq \frac{1}{p} \|f\|_{L^p}^p + \frac{1}{q} \|g\|_{L^q}^q. \quad (2.11)$$

Ahora se toma una nueva f definida como λf , ($\lambda > 0$) y se tiene

$$\int |fg| \leq \frac{\lambda^{p-1}}{p} \|f\|_{L^p}^p + \frac{1}{\lambda q} \|g\|_{L^q}^q \quad (2.12)$$

Se encuentra el mínimo del lado derecho respecto a λ . Se observa que en $\lambda = \|g\|_{L^q}^{q/p} / \|f\|_{L^p}$ este mínimo se alcanza y sustituyendolo en 2.13 se concluye que $\int_\Omega |fg| \leq \|f\|_{L^p} \|g\|_{L^q}$. ■

Lema 2.2 (Teorema de la convergencia monótona de Beppo-Levi) Sea $\{f_i\}$ una sucesión creciente de funciones reales:

$$f_1(x) < \dots < f_n(x) < \dots \quad \forall x \in \Omega \quad (2.13)$$

en L^1_μ tal que $\text{Sup}_i \int f_i d\mu < \infty$. Entonces, $\{f_i\}$ converge casi en todo punto a $f(x)$ y $f \in L^1_\mu$.

Lema 2.3 (Teorema de Lebesgue) Sea $\{f_i\}$ una sucesión de funciones en L_μ^1 tales que cumplen las siguientes dos hipótesis en todo punto excepto tal vez en un conjunto de medida cero:

$$i) \lim_{i \rightarrow \infty} f_i(x) \mapsto f(x) \quad (2.14)$$

$$ii) \text{Existe } g \in L_\mu^1 \text{ tal que } \forall n |f_n(x)| \leq g(x). \quad (2.15)$$

Entonces se cumple

$$f \in L_\mu^1, \lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n - f\|_{L_\mu^1} = 0 \quad (2.16)$$

La función g recibe el nombre de *mayorante integrable* de la sucesión $\{f_i\}$.

Demostración. La demostración del teorema 2.3 se hará en dos pasos. Primero se demuestra que L_μ^2 es un espacio vectorial completo, y como segundo paso se le define un producto interno y se ve que efectivamente éste induce la norma respecto a la cual se demostró su completéz. El primer paso es válido para un tipo de espacios llamados de Lebesgue o L_μ^p definidos análogamente a L_μ^2 , pero con $1 < p < \infty$ y en los que se define una norma:

$$\|f\|_{L^p} := \left(\int_{\Omega} |f|^p d\mu \right)^{\frac{1}{p}} \quad (2.17)$$

Cuando $p \neq 2$ no se define un producto interior. Sean $f, g \in L_\mu^p$, se tiene que

$$|f(x) + g(x)|^p \leq (|f(x)| + |g(x)|)^p \leq 2^p (|f(x)|^p + |g(x)|^p) \quad (2.18)$$

de donde $f + g \in L_\mu^p$. Además el hecho de que $\alpha f \in L_\mu^p$ es inmediato, las propiedades de espacio vectorial resultan serlo también. Por otro lado se debe mostrar que la norma propuesta en la ecuación 2.8 cumple realmente con los axiomas de norma (ver definición 2.3). Ver esto para los axiomas *i*), *iii*) es inmediato, en cuanto a si se cumple el axioma *ii*) de la definición de norma, se tiene:

$$\|f + g\|_{L^p}^p = \int |f + g|^{p-1} |f + g| \leq \int |f + g|^{p-1} |f| + \int |f + g|^{p-1} |g| \quad (2.19)$$

pero $|f + g|^{p-1} \in L_\mu^q$ puesto que $\int |f + g|^{q(p-1)}$ está definida. Usando la desigualdad de Hölder:

$$\leq \| |f + g|^{p-1} \|_{L^q} \|f\|_{L^p} + \| |f + g|^{p-1} \|_{L^q} \|g\|_{L^p} \quad (2.20)$$

$$= \left(\int |f + g|^{p-1 \frac{p}{p-1}} \right)^{\frac{p-1}{p}} \|f\|_{L^p} + \left(\int |f + g|^{p-1 \frac{p}{p-1}} \right)^{\frac{p-1}{p}} \|g\|_{L^p} \quad (2.21)$$

$$= \|f + g\|_{L^p}^{p-1} \|f\|_{L^p} + \|f + g\|_{L^p}^{p-1} \|g\|_{L^p}. \quad (2.22)$$

Por lo tanto $\|f + g\|_{L^p} \leq \|f\|_{L^p} + \|g\|_{L^p}$, con lo que se tiene que L^p_μ es un espacio vectorial normado, de modo que falta ver que es completo.

Sea $\{f_m\}$ una sucesión de Cauchy en L^p_μ , basta demostrar que una sub-sucesión $\{f_{m_i}\}$ -que denotamos por $\{f_n\}$ -, converge en L^p_μ , ésta se puede escoger de tal forma que cumpla

$$\|f_{k-1} - f_k\|_{L^p} \leq \frac{1}{2^k} \quad \forall k \geq 1. \quad (2.23)$$

Formamos ahora la función auxiliar $g_n(x) := \sum_{k=2}^n |f_{k-1}(x) - f_k(x)|$, se tiene que

$$\|g_n\|_{L^p} = \left\| \sum_{k=2}^n |f_{k-1}(x) - f_k(x)| \right\|_{L^p} \leq \sum_{k=2}^n \|f_{k-1}(x) - f_k(x)\|_{L^p} \leq 1. \quad (2.24)$$

De donde se sabe que $\{g_n^p\}$ es una sucesión creciente de funciones reales que cumple $\sup_i \int g_i^p < \infty$. Con el lema 2.2 se sabe que $g_n^p(x)$ está en L^1_μ y converge a un límite $g^p(x)$, el cual pertenece a L^1_μ . De donde se obtiene que $g_n(x)_\mu^p$ converge a $g(x) \in L^p_\mu$. Por otro lado

$$|f_m(x) - f_n(x)| = |f_m(x) - f_{m-1}(x) + f_{m-1}(x) + \dots - f_n(x)| \leq g(x) - g_n(x) \quad (2.25)$$

de donde se sabe que casi en todo punto $\{f_n(x)\}$ es una sucesión de Cauchy y como tal converge a un límite $f(x)$ y además se tiene

$$|f(x) - f_n(x)| \leq g(x). \quad (2.26)$$

En este punto se puede usar el lema 2.3. $\{f_i(x)\}$ es una sucesión de funciones en L^p_μ que converge casi en todo punto a $f(x)$, por lo que $|f_n(x)|^p \rightarrow |f(x)|^p$. Además g^p es una mayorante integrable de $|f_n(x)|^p$ como puede verse en la ecuación 2.26. Con esto se cumplen las dos hipótesis del tercer lema y por lo tanto se obtiene que $|f(x)|^p \in L^1_\mu$, es decir $f \in L^p_\mu$. Finalmente, puede verse que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n - f\|_{L^p_\mu} = 0 \quad (2.27)$$

tomando por separado la parte real y la parte imaginaria de la función f y utilizando el lema 2.3. Se ha demostrado que efectivamente L_μ^p es un espacio de Banach. Se debe demostrar ahora que L_μ^2 es completo respecto a la norma que induce el producto interno definido como sigue:

$$(f|g) := \int_{\Omega} f^* g d\mu \quad (2.28)$$

en donde $f, g \in L_\mu^2$. Los tres axiomas del producto interno se cumplen de manera inmediata así como la existencia de la integral que se sigue de la desigualdad de Hölder. Ahora basta darse cuenta que la norma que induce es la misma con la que se demostró que este espacio es completo. ■

§2.3 Teoría de los Espacios de Hilbert

Una vez que se tiene la definición del espacio de Hilbert, se puede comenzar a estudiar cómo son los objetos análogos a los del álgebra lineal. En esta sección se analiza en especial lo referente a la continuidad de las funciones lineales, a las bases y al espacio dual. En lo siguiente se denota al espacio de Hilbert como H .

Contrariamente a lo que sucede en el caso de dimensión finita, no todas las funciones lineales son continuas, es necesario agregarles una condición para garantizar su continuidad, ésta es que las funciones deben ser acotadas es decir debe existir una constante $k > 0$ tal que $\forall \psi \in H$

$$\|f(\psi)\| \leq k\|\psi\|. \quad (2.29)$$

Teorema 2.4 Sea $A : H \mapsto \mathbb{C}$ una función lineal, el que A sea acotada es condición necesaria y suficiente para que sea continua.

Demostración. Supongamos primero que A es acotada. Sean $\epsilon > 0$ y $\psi, \psi_0 \in H$ tales que cumplen: $\|\psi - \psi_0\| < \frac{\epsilon}{k}$, entonces

$$\|A(\psi - \psi_0)\| \leq k\|\psi - \psi_0\| < \epsilon \quad (2.30)$$

por lo tanto si $\|\psi - \psi_0\| < \delta = \frac{\epsilon}{k}$ entonces $\|A\psi - A\psi_0\| < \epsilon$.

Inversamente, supongamos que A no es acotada, entonces $\forall i \in \mathbb{N} \exists \psi_i \in H$ tal que $\|\psi_i\| = 1$ y que $\|A\psi_i\| > i$ con los que se puede formar una sucesión $\{\psi_i\}$. Sea $\{\phi_i\}$ una sucesión definida como $\phi_i := \frac{1}{i}\psi_i$, se tiene que $\|\phi_i\| = \frac{1}{i}$. Por lo tanto $\phi_i \rightarrow 0$ si $i \rightarrow \infty$, pero por otro lado sucede que

$$\|A\phi_i\| = \frac{1}{i} \|A\psi_i\| > 1, \quad (2.31)$$

por lo que $\{A\phi_i\}$ no converge a 0 y por lo tanto A no es continua. ■

Teorema 2.5 (de la proyección ortogonal) *Sea H un espacio de Hilbert y $K \subset H$ un subconjunto convexo, cerrado y no vacío. Entonces*
i) para todo $\psi \in H$ existe un único $\phi \in K$ tal que:

$$\|\psi - \phi\| = d(\psi, K) := \min_{\nu \in K} d(\psi, \nu). \quad (2.32)$$

Al vector ϕ se le llama la proyección ortogonal de ψ en K ($P_K\psi$).

ii) Si K es un subespacio de H entonces ϕ es el único vector en K tal que $\langle \psi - \phi | \nu \rangle = 0 \forall \nu \in K$.

iii) Si K es generado por un vector (e_i) se tiene que $P_K\psi = \langle e_i | \psi \rangle e_i$.

Demostración. i) Sea $\{\nu_n\}$ una sucesión minimizante para la ecuación 2.32 es decir que cumpla que $\nu_n \in K$ y que

$$d_n := \|\psi - \nu_n\| \rightarrow d = \inf_{\nu \in K} \|\psi - \nu\| \quad (2.33)$$

la cual existe ya que la imagen de la función $\nu \mapsto \|\psi - \nu\|$ está acotada inferiormente y por lo tanto tiene un ínfimo. Ahora veamos que esta sucesión es de Cauchy. Con la identidad del paralelogramo y tomando $x = \psi - \nu_n$ y $y = \psi - \nu_m$, se tiene:

$$\begin{aligned} \|\psi - \frac{\nu_n + \nu_m}{2}\|^2 + \|\frac{\nu_n - \nu_m}{2}\|^2 &= \frac{1}{2}(\|\psi - \nu_n\|^2 + \|\psi - \nu_m\|^2) \\ &= \frac{1}{2}(d_n^2 + d_m^2) \end{aligned} \quad (2.34)$$

y puesto que $\frac{\nu_n + \nu_m}{2} \in K$ sucede entonces que $\|\psi - \frac{\nu_n + \nu_m}{2}\| \geq d$ por lo tanto:

$$\|\frac{\nu_n - \nu_m}{2}\|^2 \leq \frac{1}{2}(d_n^2 + d_m^2) - d^2 \quad (2.35)$$

con lo que es evidente que la sucesión es de Cauchy y puesto que K es cerrado existe $\phi \in K$ tal que $\|\psi - \phi\| = d$. La unicidad de ϕ se puede demostrar usando la identidad del paralelogramo.

ii) ¿Qué sucede si K es un subespacio cerrado de H ? Sea $z \neq 0$, $z \in K$, entonces, por el análogo del Teorema de Pitágoras:

$$\|\psi - (\phi + \lambda z)\|^2 = \|\psi - \phi\|^2 + \lambda^2 \|z\|^2 + 2\lambda \operatorname{Re} \langle \psi - \phi | z \rangle \geq 0 \quad (2.36)$$

que es posible para todo λ sólo si $Re\langle\psi - \phi|z\rangle = 0$. Para la parte compleja se hace algo análogo y se obtiene el resultado.

iii) Finalmente, puede verse que $P_{E_n}\psi = \langle e_n|\psi\rangle e_n$, encontrando el mínimo de la función $\|\psi - \lambda e_n\|^2$ respecto a λ . ■

Definición 2.7 Un conjunto infinito de vectores es linealmente independiente si cualquier subconjunto finito de él es linealmente independiente. Tómese un conjunto de espacios ortogonales entre sí, es decir, que si se toman dos vectores de dos espacios distintos, estos son ortogonales. H es la suma hilbertiana de estos espacios si el conjunto de las combinaciones lineales finitas de sus miembros es denso en H en cuyo caso se escribe $H = \bigoplus_n E_n$.

Teorema 2.6 Sea H suma hilbertiana de $\{E_n\}$ (con $E_n := \{x \in H | x = \alpha e_n, \alpha \in \mathbb{C}\}$), y sea $\psi \in H$, entonces se tiene:

$$i) \psi = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i|\psi\rangle e_i \quad (2.37)$$

$$ii) \|\psi\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle e_i|\psi\rangle|^2 \quad (2.38)$$

Demostración. i) Sean $S_n = \sum_{i=1}^n P_{E_i}$ y $\psi \in H$. Por el teorema 2.5 (ii) $\langle\psi|S_n\psi\rangle = \|S_n\psi\|^2$, por lo que usando la desigualdad de Cauchy $\|S_n\psi\| \leq \|\psi\|$. Sea $\epsilon > 0$ y $\phi \in E$ (en donde se define a E como el conjunto de todas las combinaciones lineales finitas de los E_i) tal que $\|\psi - \phi\| < \epsilon$. Se tiene para cierta $k \in \mathbb{N}$ que $S_k\phi = \phi$ de modo que

$$\|S_k\psi - \phi\| \leq \|S_k\psi - S_k\phi\| \leq \|\psi - \phi\| \quad (2.39)$$

recordando que S_n es lineal. Por lo tanto $\|S_k\psi - \psi\| \leq \|S_k\psi - \phi\| + \|\psi - \phi\| < 2\epsilon$, de donde se tiene 2.38.

ii) Para demostrar éste punto basta ver que

$$\|S_n\psi\|^2 = \sum_{i=1}^n |\langle e_i|\psi\rangle|^2 \quad (2.40)$$

con lo que se concluye la demostración. ■

Definición 2.8 Una base Hilbertiana es una sucesión $\{e_i\}$ de vectores, tales que: $\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$ y el espacio generado por los $\{e_i\}$ es denso en H .

En el caso de los espacios de dimensión n finita se tiene que todo conjunto linealmente independiente de n vectores genera a todo el espacio, sin embargo, cuando la dimensión es infinita el quitar un número finito de vectores no afecta la cardinalidad de una base y si su condición de ser completa, de modo que deben encontrarse nuevos criterios para saber si un conjunto es o no una base. Uno de esos criterios es el siguiente:

Teorema 2.7 (Identidad de Parseval) *Sea $\{e_n\}$ un conjunto ortonormal, este es completo si y sólo si se cumple que $\forall \psi \in H$*

$$\|\psi\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle e_i | \psi \rangle|^2. \quad (2.41)$$

Demostración. Del inciso ii) del teorema 2.6 se tiene que la completéz implica la identidad de Parseval. Inversamente, supóngase que se cumple la identidad de Parseval, entonces se tiene que $\forall \epsilon > 0 \exists n \in \mathbb{N}$ tal que

$$\|\psi\|^2 - \sum_{i=1}^n |\langle e_i | \psi \rangle|^2 < \epsilon. \quad (2.42)$$

Por otro lado, con simple operaciones, debido a la ortogonalidad de los e_i , puede verse que

$$\|\psi - \sum_{i=1}^n \langle e_i | \psi \rangle e_i\|^2 = \|\psi\|^2 - \|\sum_{i=1}^n \langle e_i | \psi \rangle e_i\|^2 < \epsilon. \quad (2.43)$$

Con lo que se concluye la demostración. ■

Teorema 2.8 (De representación de Riesz-Fréchet) *Dada $A \in H'$ existe un único $\phi \in H$ tal que $A\psi = \langle \phi | \psi \rangle \forall \psi \in H$ y además $\|\phi\| = \|A\|_{H'}$. Es decir la identificación respeta la norma y por lo tanto es una isometría.*

En otras palabras dado $\phi \in H$, éste determina una función lineal y continua $f : H \mapsto \mathbb{C}$ dada por $\cdot \mapsto \langle \phi | \cdot \rangle$. Inversamente, toda función lineal a los complejos es representable de esta forma. Además la identificación de H con H' resulta ser una isometría: $\|\langle \phi | \cdot \rangle\| = \|\phi\|$.

Demostración. El camino de la demostración resulta natural una vez que se tiene en cuenta que el contradominio de las funciones del dual es de una sola dimensión y que por lo tanto cabe esperar que exista un subespacio de

una dimensión contenido en H que sea el complemento ortogonal del núcleo. En espacios de dimensión finita se tiene que $\dim(\text{núcleo}) + \dim(\text{rango}) = \dim(\text{dominio})$. Sea $E := A^{-1}(0)$, E es un subespacio cerrado de H . Si $E = H$, basta tomar $\phi = 0$, si no es el caso, se necesita demostrar que $\exists \varphi \in H - E$ tal que $\|\varphi\| = 1$, y $\langle \varphi | \psi \rangle = 0 \ \forall \psi \in E$. Sean $\varphi_0 \in H - E$ y $\varphi_1 = P_E \varphi_0$ tomamos $\varphi = \frac{\varphi_0 - \varphi_1}{\|\varphi_0 - \varphi_1\|}$, con lo que queda que φ es ortogonal al núcleo. Todo $\chi \in H$ se puede descomponer como $\chi = \lambda\varphi + \psi$, esto se puede construir haciendo $\lambda = \frac{A\chi}{A\varphi}$ y $\psi = \chi - \lambda\varphi$, lo cual cumple $A\psi = 0$. Con lo que $0 = \langle \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \chi - \lambda\varphi \rangle$, de donde

$$\lambda = \frac{\langle \varphi | \chi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} = \langle \varphi | \chi \rangle = \frac{A\chi}{A\varphi}. \quad (2.44)$$

Por esto $A\chi = \langle \phi | \chi \rangle \ \forall \chi \in H$, en donde $\phi := A\varphi^*$. El hecho de que la identificación sea una isometría es inmediato de la desigualdad de Cauchy. ■

§2.4 Operadores Lineales y Continuos

Una vez hecha la generalización de las bases y establecidas las condiciones para que las funciones lineales sean continuas, lo siguiente es analizar cómo afecta el hecho de tener una dimensión infinita a las transformaciones lineales que ahora se llaman operadores lineales. En adelante se toman en cuenta sólo espacios de Hilbert separables, es decir aquéllos para los que existe una base hilbertiana.

Dos operadores A y B son iguales si están definidos en la misma región $\Omega \subseteq H$ y si $A\psi = B\psi \ \forall \psi \in \Omega$. El conjunto de los operadores lineales definidos en la misma región forma de manera natural un espacio vectorial, en donde las operaciones se definen análogamente a como se hizo en la ecuación 2.1. Además, si el rango de B está contenido en el dominio de A se define un producto -no conmutativo-, mediante la composición

$$(A \otimes B)\psi := AB\psi. \quad (2.45)$$

Como se demostró en la sección anterior existen operadores lineales continuos y no continuos, para los primeros muchas cosas resultan ser muy parecidas a como son en los espacios de dimensión finita. En esta sección se supone que todos los operadores lineales son continuos.

Teorema 2.9 *Todo operador lineal acotado definido en un subespacio del espacio de Hilbert es extendible acotada y linealmente a todo el espacio.*

Demostración. Primero se extiende el operador A a la cerradura de su dominio D_A . Se sabe que para todo $\psi \in \overline{D_A}$ se puede construir una sucesión $\{\psi_i\} \subset D_A$ que converja a ψ . Puesto que A es acotado, se tiene que

$$\|A\psi_i - A\psi_j\| = \|A(\psi_i - \psi_j)\| \leq \|A\| \|\psi_i - \psi_j\|. \quad (2.46)$$

Con lo que es evidente que $\{A\psi_i\}$ es una sucesión de Cauchy. Se define la extensión \overline{A} como sigue:

$$\overline{A}\psi := \lim_{i \rightarrow \infty} A\psi_i. \quad (2.47)$$

Esta extensión no depende de la elección de la sucesión por la continuidad de A , así mismo la extensión hereda la linealidad de manera natural. Ya que $\overline{D_A}$ es un subespacio cerrado, se puede encontrar un subconjunto de una base de todo el espacio de Hilbert que lo genere y que su complemento genere al complemento ortogonal de D_A al que se le designa como D_A^\perp . Se tiene así que todo $\psi \in H$ puede ser expresado de la forma $\psi = \psi_1 + \psi_2$. En donde $\psi_1 \in D_A$ y $\psi_2 \in D_A^\perp$. La extensión A' a todo el espacio de Hilbert se define como sigue:

$$A'\psi = \begin{cases} \overline{A}\psi & \text{si } \psi \in \overline{D_A} \\ 0 & \text{si } \psi \in D_A^\perp \end{cases}$$

Con lo que el teorema queda demostrado. ■

Dada una base los operadores lineales acotados se pueden representar mediante matrices infinitas definidas como sigue: Sean $\psi = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i | \psi \rangle e_i$ y $A\psi = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i e_i$,

$$\alpha_i = \langle e_i | A\psi \rangle = \langle e_i | A(\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n \langle e_j | \psi \rangle e_j) \rangle \quad (2.48)$$

que por la continuidad de la función $\cdot \mapsto \langle e_i | A(\cdot) \rangle$ cumple

$$\alpha_i = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n \langle e_j | \psi \rangle \langle e_i | A e_j \rangle. \quad (2.49)$$

Si se define la matriz infinita $A_{ij} := \langle e_i | A e_j \rangle$ se puede escribir:

$$A(\psi) = \sum_{i,j=1}^{\infty} A_{ij} \langle e_j | \psi \rangle e_i \quad (2.50)$$

Un operador acotado A tiene un inverso si existe un operador A^{-1} tal que $AA^{-1} = A^{-1}A = Id$, este inverso es único. Para demostrarlo supongamos que existe otro operador B que cumple con lo mismo. Se tiene que

$$A^{-1} - B = A^{-1}A(A^{-1} - B) = A^{-1}(AA^{-1} - AB) = 0. \quad (2.51)$$

Por otro lado, al tener el mismo dominio $A = B$.

Existen dos tipos de operadores que son de gran interés en la mecánica cuántica, éstos son los unitarios y los hermiteanos. Los primeros son acotados por definición y están asociados con los análogos a las rotaciones en el espacio euclidiano. Los hermiteanos no son necesariamente acotados y son la base de la relación entre la teoría y la medición.

Definición 2.9 *Un operador lineal U es unitario si existe su inverso y además cumple con que $\|U\psi\| = \|\psi\| \forall \psi \in H$.*

Teorema 2.10 *Los operadores unitarios son los únicos que llevan bases ortonormales a nuevas bases también ortonormales y además dejan invariante el producto interno de dos vectores.*

Demostración. Sea U un operador unitario. La invariancia del producto interno bajo la transformación U : $\langle \psi | \phi \rangle = \langle U\psi | U\phi \rangle$ se demuestra de manera inmediata aplicando por separado el análogo del teorema de Pitágoras al vector $\psi + \phi$ y a su imagen. El que un conjunto ortonormal lo siga siendo bajo U se sigue de la definición de U , para demostrar que la completez se conserva, se toma cualquier vector ψ y se le aplica $U^{-1}(\psi) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i e_i$ de donde $\psi = UU^{-1}\psi = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i Ue_i$ con lo que se tiene el desarrollo de cualquier vector en la imagen de la base. Por lo tanto esta imagen es también una base.

Para demostrar que sólo los operadores lineales unitarios llevan bases ortonormales a nuevas bases ortonormales, se toma una base $\{e_i\}$, un operador cualquiera A que cumpla la condición y un vector $\psi = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k e_k$. De entrada A debe ser acotado, de otra forma podría tomarse una base con vectores cuya imagen bajo A tendiera a tener una norma infinita, con lo que A no cumpliría la condición. Además sucede que

$$\|A\psi\|^2 = \sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_k|^2 = \|\psi\|^2 \quad (2.52)$$

Por otro lado se tiene que el operador A tiene inverso: supongamos que no lo fuera de modo que existen dos vectores distintos ψ_1 y ψ_2 que tienen la

misma imagen, por lo que su diferencia es distinta de cero y tiene imagen nula. Nuevamente se podría escoger una base que incluyera a este vector diferencia con lo que el operador no cumpliría la condición. Se ha demostrado así que A es unitario. ■

Sea A un operador lineal acotado en H , existe un único operador A^\dagger tal que $\forall \phi, \psi \in H$ se cumple $\langle \phi | A\psi \rangle = \langle A^\dagger \phi | \psi \rangle$. La existencia de este operador llamado el adjunto de A se sigue del hecho de que el funcional $\psi \mapsto \langle \phi | A\psi \rangle$ es lineal y acotado (por la desigualdad de Cauchy), y por lo tanto esta en el dual. Según el teorema 2.8 existe un único vector χ tal que $\psi \mapsto \langle \chi | \psi \rangle = \langle \phi | A\psi \rangle$ el operador A^\dagger se define entonces como $A^\dagger \phi := \chi$. La linealidad de A^\dagger es inmediata, el hecho de que es acotado se sigue de que:

$$|\langle A^\dagger \phi | \psi \rangle| = |\langle \phi | A\psi \rangle| \leq \|\phi\| \|\psi\| \|A\| \quad (2.53)$$

Teorema 2.11 Sean A y B dos operadores lineales continuos, entonces se cumplen:

- i) $(A^\dagger)^\dagger = A$
- ii) $(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$
- iii) $(A^{-1})^\dagger = (A^\dagger)^{-1}$
- iv) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

Los cuatro puntos se demuestran fácilmente a partir de sustituciones.[10]

Teorema 2.12 Un operador lineal U es unitario si y sólo si $UU^\dagger = U^\dagger U = I$

Demostración. Si $UU^\dagger = U^\dagger U = I$ entonces $U^{-1} = U^\dagger$ y además

$$\|U\psi\|^2 = \langle \psi | UU^\dagger \psi \rangle = \|\psi\|^2 \quad (2.54)$$

y por lo tanto U es unitario. Por otro lado si U es unitario, se tiene para todo $\psi, \phi \in H$, que

$$\langle \phi | U^\dagger U \psi \rangle = \langle U \phi | U \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \quad (2.55)$$

por lo que $U^\dagger U = I$. Por último

$$U^\dagger - U^{-1} = (U^\dagger - U^{-1})UU^{-1} = (U^\dagger U - U^{-1}U)U^{-1} = 0 \quad (2.56)$$

con lo que se concluye que $U^\dagger = U^{-1}$. ■

§2.5 Operadores Lineales No Acotados y Teoría Espectral

En la terminología usualmente empleada en análisis funcional se denomina a todos los operadores lineales como operadores no acotados. Como se vió en el punto anterior estos operadores no acotados pueden ser acotados o no acotados. Aunque estos términos son en principio contradictorios, son ampliamente usados en análisis funcional. (Al respecto de esto puede verse [3][15]). En lo que resta de éste capítulo usaremos ésta terminología.

El hecho de que existan operadores lineales que sean no continuos es una novedad que aparece en la generalización a los espacios vectoriales de dimensión infinita. Como ya se demostró en el teorema 2.4 ésto depende del hecho de que el operador no acotado sea o no acotado. Muchos de los operadores usados en mecánica cuántica resultan ser de este tipo.

Sea H un espacio de Hilbert y A un operador no acotado en este espacio. Se define la gráfica de A como el subespacio

$$G(A) = \{(x, Ax) : x \in D\} \quad (2.57)$$

(en donde D es del dominio de A), del espacio $H \times H$. Nótese que $H \times H$ es también un espacio de Hilbert si se definen las operaciones de suma y producto por un escalar componente a componente y el producto escalar como

$$\langle (\psi_1, \psi_2) | (\phi_1, \phi_2) \rangle_{H \times H} = \langle \psi_1 | \phi_1 \rangle + \langle \psi_2 | \phi_2 \rangle. \quad (2.58)$$

El operador A es cerrado si $G(A)$ es un subespacio cerrado de $H \times H$. Esto es, si A cumple que para toda sucesión convergente en su dominio y tal que la sucesión de su imagen también converja, se cumple

$$A(\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} A(\psi_n). \quad (2.59)$$

Supongase que $A : D \mapsto H$ es un operador no acotado y que D es denso en H . Se define al adjunto de A como sigue. Sea D^\dagger el subespacio de los miembros de H para los que el mapeo $\psi \mapsto \langle A\psi | \phi \rangle$ es continuo. Este mapeo tiene una única extensión a todo H dada por continuidad uniforme y por lo tanto hay un único vector $A^\dagger \psi \in H$ tal que

$$\langle A\psi | \phi \rangle = \langle \psi | A^\dagger \phi \rangle, \quad \psi \in D, \phi \in D^\dagger. \quad (2.60)$$

Se tiene que A^\dagger es un operador no acotado en H . Se le llama a este el operador adjunto de A . Ya que se definió A en forma maximal, se sigue directamente de esto que A^\dagger es cerrado. Nótese que solo se puede definir a A^\dagger si D es denso en H , de lo contrario, se puede encontrar un vector ψ_0 ortogonal a este dominio de modo que

$$\langle A^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle A^\dagger \phi + \psi_0 | \psi \rangle, \quad (2.61)$$

lo que querría decir que A^\dagger no es univaluado. A partir de este punto se consideran sólo operadores densamente definidos en H .

Definición 2.10 *El operador lineal A (tal vez no densamente definido en H), se llama simétrico si $\forall \phi, \psi \in D_A$ se cumple $\langle \phi | A\psi \rangle = \langle A\phi | \psi \rangle$. A se llama autoadjunto si está densamente definido en H y si $A^\dagger = A$*

Dado un operador A se puede construir un operador $R_\lambda A = A - \lambda I$ donde I es el operador identidad y $\lambda \in \mathbb{C}$. La teoría espectral se encarga de estudiar lo referente a este operador $R_\lambda A$ en función del parámetro λ .

Definición 2.11 *El conjunto resolvente de A ($\rho(A)$) es el subconjunto de los números complejos tales que $R_\lambda A$ está definido, es continuo y con dominio denso en H . El complemento de $\rho(A)$ es llamado el espectro de A ($\sigma(A)$) y se divide en tres subconjuntos:*

- i) *El espectro puntual ($P\sigma(A)$) formado por los complejos para los que el resolvente no está definido y por lo tanto $N(A - \lambda I) \neq 0$. A sus miembros se les llama valores propios y a los vectores en el núcleo de $A - \lambda I$ vectores propios. Si la dimensión del núcleo para un λ determinado es mayor que uno, éste se dice un valor propio degenerado.*
- ii) *El espectro continuo ($C\sigma(A)$) formado por los complejos para los que el resolvente está definido densamente en H pero no de forma continua.*
- iii) *El espectro residual ($R\sigma(A)$) formado por los números complejos para los que el resolvente está definido pero de manera no densa.*

$$R_\lambda A \begin{cases} \text{No definido} \\ \text{Definido} \begin{cases} \text{continuo} \\ \text{no continuo} \begin{cases} \text{denso} & \lambda \in C\sigma(A) \\ \text{no denso} & \lambda \in R\sigma(A) \end{cases} \end{cases} \end{cases} \quad \begin{matrix} \lambda \in \rho(A) \\ \lambda \in P\sigma(A) \end{matrix}$$

Teorema 2.13 Si A es un operador autoadjunto se cumple que:

- i) Sus valores propios son reales.
- ii) Los vectores propios correspondientes a valores propios distintos son ortogonales.
- iii) El espectro continuo es real.
- iv) El espectro residual es vacío.

Demostración. i) Sea A un operador autoadjunto y ψ un vector propio asociado al valor propio λ se cumple que:

$$\lambda \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | A\psi \rangle = \langle A\psi | \psi \rangle = \lambda^* \langle \psi | \psi \rangle \quad (2.62)$$

y por lo tanto λ es real.

ii) Por otro lado

$$0 = \langle \psi_i | A\psi_j \rangle - \langle A\psi_i | \psi_j \rangle = (\lambda_i - \lambda_j) \langle \psi_i | \psi_j \rangle \quad (2.63)$$

por lo que $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = 0$ si $\lambda_i \neq \lambda_j$.

iii) Sea $\lambda \in C\sigma(A)$, la solución a la ecuación $A\psi - \lambda\psi = \phi$ es $\psi = R_\lambda(A)\phi$. De la ecuación se desprende que $\langle \psi | A\psi \rangle - \lambda \|\psi\|^2 = \langle \psi | \phi \rangle$, y puesto que $\langle \psi | A\psi \rangle \in \mathbb{R}$, se tiene que

$$|\operatorname{Im} \|\psi\|^2| = |\operatorname{Im} \langle \psi | \phi \rangle| \leq |\langle \psi | \phi \rangle| \leq \|\psi\| \|\phi\|, \quad (2.64)$$

y por lo tanto

$$\|\psi\| = \|R_\lambda(A)\phi\| \leq \frac{\|\phi\|}{|\operatorname{Im} \lambda|} \quad (2.65)$$

por lo que el resolvente $R_\lambda(A)$ es acotado (y continuo), si λ tiene parte imaginaria distinta de cero. Por lo tanto $\lambda \in C\sigma(A)$ debe ser real.

iv) Por último para demostrar que el espectro residual es vacío, se utiliza el siguiente lema

Lema 2.4 Para todo operador lineal B , se cumple que $\overline{R_B} = (NB^\dagger)^\perp$.

Supongamos que el lema 2.4 es cierto. Obtenemos que

$$\overline{D_{R_\lambda(A)}} = \overline{(R_{A-\lambda I})} = \{N(A - \lambda I)\}^\perp \quad (2.66)$$

Pero $N(A - \lambda I) = 0$ si λ no es valor propio, por lo tanto el dominio de $R_\lambda A$ siempre es denso en H con lo que se concluye la demostración. ■

Demostración. (Del lema 2.4) Sean $\phi \in D_B$, $\psi \in NB^\dagger$, se tiene que $0 = \langle B^\dagger \psi | \phi \rangle = \langle \psi | B\phi \rangle$, de donde $NB^\dagger \perp \overline{R_B}$. Ahora tómesese $\chi \perp \overline{R_B}$, sucede que $0 = \langle \chi | B\phi \rangle = \langle 0 | \phi \rangle$ por lo que $B^\dagger \chi = 0$, es decir $\chi \in NB^\dagger$. Con esto el lema está demostrado, pues se tiene $(\overline{R_B})^\perp = NB^\dagger$. ■

Definición 2.12 *El operador A es compacto si la cerradura de la imagen de subconjuntos acotados es compacta.*

Es inmediato que estos operadores son acotados, pues de no serlo la condición de compacidad sería violada por una sucesión de vectores unitarios cuya imagen tendiera a infinito en norma. Si A es compacto y B acotado AB es compacto y como la identidad $AA^{-1} = I$ no es un operador compacto se sigue que de existir A^{-1} no es ni siquiera acotado puesto que esto implicaría que I es compacto.

Teorema 2.14 (*Teorema Espectral para operadores compactos*) *Sea A un operador lineal compacto autoadjunto en un espacio de Hilbert H y sea $\{\lambda_i\}$ la sucesión de sus valores propios. Entonces, se tiene que*

$$A = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i P_{E_{\lambda_i}} \quad (2.67)$$

donde $P_{E_{\lambda_i}}$ es la proyección en el espacio $E_{\lambda_i} = N(A - \lambda_i I)$ y también se cumple que

$$H = \oplus_i E_{\lambda_i} \quad (2.68)$$

Se dice que (2.67) es la representación espectral de A y (2.68) la descomposición espectral de E . [2]

En la demostración utilizamos el siguiente lema.

Lema 2.5 *Si la función $\psi \mapsto |\langle A\psi | \psi \rangle|$ alcanza su máximo -restringida a los vectores de norma menor o igual a uno- en el vector ψ_0 , entonces éste es un vector propio de A y su valor propio asociado es el de mayor valor absoluto.*

Demostración. Veamos que todo vector ortogonal a ψ_0 lo es también a su imagen y por lo tanto, éste es un vector propio. Sea ψ ortogonal a ψ_0 y de norma uno. Sea $\phi := \psi_0 + \lambda\psi$. Se tiene que

$$\langle A\phi | \phi \rangle = \langle A\psi_0 | \psi_0 \rangle + 2\text{Re}\lambda \langle A\psi | \psi_0 \rangle + |\lambda|^2 \langle A\psi | \psi \rangle \quad (2.69)$$

si es que $\langle A\psi_0|\psi_0 \rangle \neq 0$ el número λ se puede escoger con una fase de manera que $\lambda\langle A\psi|\psi_0 \rangle$ sea real y positivo y que además cumpla $|\lambda|^2 \ll |\lambda|$. Así, $\langle A\psi_0|\psi_0 \rangle < \langle A\phi|\phi \rangle$ es una contradicción y por lo tanto $\langle A\psi|\psi_0 \rangle = 0$. La otra afirmación es inmediata, pues de no cumplirse entonces la condición del máximo tampoco se cumpliría.

Demostración. (Del teorema 2.15) Sea $\{\lambda_i\}$ la sucesión de valores propios (incluido el cero), se demuestra primero que H es suma hilbertiana de los espacios propios asociados a cada λ_i denotados por E_i . Ya se demostró que estos espacios son ortogonales, por lo que falta ver que las combinaciones lineales finitas de los elementos de su unión son densas en H .

Sea $E := \bigoplus_i E_i$. Se tiene que $A(E) \subset E$ por lo que si $\psi \in E^\perp$, $\phi \in E$ entonces $0 = \langle \psi|A\phi \rangle = \langle A\psi|\phi \rangle$ de donde $A(E^\perp) \subset E^\perp$. El operador $A' := A|_{E^\perp}$ es autoadjunto y compacto también -puesto que hereda estas propiedades de A . Por otro lado $P\sigma(A') = \{0\}$ pues de tener A' un vector propio éste también sería vector propio de A pero por construcción $D_{A'} \perp \bigoplus_i E_i$ y por lo tanto este vector propio de A' solo puede ser el cero. De esto se desprende que $\forall \psi \in E^\perp$ $\langle A'\psi|\psi \rangle = 0$ por el lema y por lo tanto si $\chi \in E^\perp$ y $\{\phi_i\}$ es una base ortogonal de E^\perp :

$$2\text{Re}\langle A'\chi|\phi_i \rangle = \langle A'(\chi + \phi_i)|\chi + \phi_i \rangle - \langle A'\chi|\chi \rangle - \langle A\phi_i|\phi - i \rangle = 0 \quad (2.70)$$

y análogamente para la parte compleja, lo que implica que $A' = 0$. Se tiene entonces que $E^\perp \subset N(A) \subset E$ de donde $E^\perp = 0$ y por lo tanto E es denso en H . Por último se toma una base hilbertiana para cada E_i y su unión es una base hilbertiana de vectores propios. ■

Definición 2.13 *Un conjunto de operadores se llama una familia de operadores de proyección E_x dependiente del parámetro x , si para todo $x \in \mathbb{R}$, E_x es un operador de proyección, es decir, E_x es la proyección ortogonal a un espacio cerrado, y cumple las siguientes condiciones:*

- i) $x \leq y \Rightarrow E_x \leq E_y$ es decir $E_x E_y = E_y E_x = E_x$
- ii) $\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} E_{x+\epsilon} \psi = E_x \psi \quad \forall \psi \in H$
- iii) $\lim_{x \rightarrow -\infty} E_x \psi = 0$ y $\lim_{x \rightarrow \infty} E_x \psi = \psi \quad \forall \psi \in H$

Teorema 2.15 (Espectral) *Para todo operador autoadjunto A existe una única familia de operadores de proyección tal que:*

$$\langle \phi|A\psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x d\langle \phi|E_x \psi \rangle \quad (2.71)$$

en donde

$$d\langle\phi|E_x\psi\rangle := \langle\phi|E_{x_k}\psi - E_{x_{k-1}}\psi\rangle := \langle\phi|E_x(\Delta)\psi\rangle \quad (2.72)$$

donde $\Delta = [x_{k-1}, x_k]$ es un elemento de una partición cuya norma tiende a cero en el proceso de integración.[10]

Se tiene que 2.71 es una integral de Riemann-Stieltjes. Lo anterior es llamado la descomposición espectral de A , puesto que determina completamente al operador, lo cual es evidente si se piensa que en lugar del vector ϕ se pone uno a uno los elementos de una base hilbertiana. De este forma se conoce la imagen de cualquier vector en el dominio de A , en términos de sus componentes respecto a la base Hilbertiana propuesta.

Como primer ejemplo de la aplicación de este teorema, tómesese un operador autoadjunto cuyo espectro este formado solo por conjunto discreto de valores propios $\{x_i\}$. Como familia de operadores de proyección tómesese al operador E_x dado por la proyección sobre el subespacio de los vectores propios correspondientes a los valores propios menores o iguales que x . Las condiciones *i*) y *iii*) son inmediatas. En cuanto a la condición *ii*), ésta se cumple tomando en cuenta que los valores propios son un conjunto discreto. Así se define una familia de operadores de proyección que cumple:

$$\langle\phi|A\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x d\langle\phi|E_x\psi\rangle = \sum_{-\infty}^{\infty} x_i \langle\phi|E_{x_i}\psi\rangle. \quad (2.73)$$

Por el teorema espectral 2.15 esta familia de operadores de proyección es la única que lo cumple.

Como segundo ejemplo, para el caso de un espectro continuo, tómesese el operador A en $L^2(0, 1)$ definido como $\psi(x) \mapsto x\psi(x)$ y fórmese la familia de operadores de proyección: $E_{x_0}\psi(x) = \psi(x)$ si $x \leq x_0$ y $E_{x_0}\psi(x) = 0$ si $x > x_0$. Se tiene así:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x d\langle\phi|E_x\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x d \int_0^1 \phi(y)^* E_x\psi(y) dy = \quad (2.74)$$

$$\int_0^1 x d \int_0^x \phi(y)^* \psi(y) dy = \int_0^1 \phi(x)^* x\psi(x) dx = \langle\phi|A\psi\rangle. \quad (2.75)$$

La construcción anterior también permite definir funciones de operadores autoadjuntos de la siguiente forma:

$$\langle\phi|f(A)|\psi\rangle := \int_{-\infty}^{\infty} f(x) d\langle\phi|E_x\psi\rangle. \quad (2.76)$$

Teorema 2.16 *Se tienen las siguientes propiedades*

$$i) (f + g)(A) = f(A) + g(A)$$

$$ii) (\alpha f)(A) = \alpha f(A)$$

$$iii) (fg)(A) = f(A)g(A)$$

$$iv) f(A)^\dagger = f^*(A)$$

Demostración. Las demostraciones de i) y ii) son inmediatas. iii) Por definición

$$\langle \phi | f(A)g(A) \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) d\langle \phi | E_x g(A) \psi \rangle, \quad (2.77)$$

puesto que los operadores de proyección son acotados y autoadjuntos se tiene que $d\langle \phi | E_x g(A) \psi \rangle = d\langle E_x \phi | g(A) \psi \rangle$ y por lo tanto

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f(x) d_x \int_{-\infty}^{\infty} g(y) d_y \langle E_x \phi | E_x \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) d_x \int_{-\infty}^x g(y) d\langle \phi | E_y \psi \rangle \quad (2.78)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)g(x) d\langle \phi | E_x \psi \rangle = \langle \phi | (fg)(A) \psi \rangle. \quad (2.79)$$

iv) Por último se muestra que:

$$\langle \phi | f(A)^\dagger \psi \rangle = \langle \psi | f(A) \phi \rangle^* \quad (2.80)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(A) d\langle \psi | E_x \phi \rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(A) d\langle \phi | E_x \psi \rangle \quad (2.81)$$

$$= \langle \phi | f^*(A) \psi \rangle \quad (2.82)$$

Con lo que se concluye la demostración. \blacksquare

Se define ahora el operador $U_t = e^{itH}$ -para un operador autoadjunto H - de la siguiente forma:

$$\langle \phi | U_t \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{itz} d\langle \phi | E_x \psi \rangle \quad (2.83)$$

en donde $t \in \mathbb{R}$. De manera inmediata se tiene que U_t es unitario, pues

$$U_t U_t^\dagger = \int_{-\infty}^{\infty} e^{itz} e^{-itz} d\langle \phi | E_x \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\langle \phi | E_x \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle. \quad (2.84)$$

Hasta este punto se han expuesto las bases matemáticas para continuar con el estudio formal de la mecánica cuántica. Muchos de los resultados expuestos justifican planteamientos del siguiente capítulo.

capítulo 3

LA FORMULACIÓN DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

El mundo existe independientemente de nosotros y de nuestras mentes. Nuestra percepción del mundo es limitada y los aparatos de medición son una extensión de nuestras capacidades de percepción. La mente selecciona determinados estímulos de entre todo lo que percibe y en este proceso de abstracción intenta encontrar un orden en el mundo que percibe. En este proceso surgen modelos mentales acerca de cómo es el mundo o más bien acerca de cómo se comporta el mundo. Uno de los modelos de mayor influencia en la historia es aquél en el que se representa al mundo como compuesto de partículas materiales con una posición y una velocidad definida respecto a un sistema de referencia.

Los fenómenos descritos en el capítulo 1, junto con otros, demostraron que el modelo corpuscular era sólo una visión del mundo con un rango de validez limitado. Estos hechos reclamaban en la década de los veinte de una nueva visión del mundo, de una nueva teoría física que explicara sobre bases nuevas tanto los fenómenos clásicos como los entonces nuevos fenómenos cuánticos, y que no fuera sólo una teoría creada a base de restricciones "ad hoc" sobre la mecánica clásica como era el caso de la vieja mecánica cuántica. En este capítulo se presentan brevemente las ideas que finalmente llevaron a la formulación de la mecánica cuántica, así como los postulados de esta formulación. También se presentan algunas de las consecuencias de estos postulados, una breve introducción a las integrales de camino de Feynman y a la llamada aproximación semiclásica.

§3.1 La Ecuación de Schrödinger y la Mecánica Matricial

En la década de los veinte se crearon dos teorías para explicar los entonces nuevos fenómenos físicos -descritos en el capítulo 1- conforme a una serie de principios nuevos. La primera de ellas fue la continuación de la línea de investigación propuesta por de Broglie y seguida por Schrödinger, quien encontró la ecuación que describe el comportamiento ondulatorio de las "partículas" confirmado con los experimentos de Davisson y Germer. La segunda fue propuesta por Heisenberg bajo la convicción de que la nueva teoría debería ser creada sobre la base de algún tipo de relaciones entre magnitudes observables y no necesariamente sobre modelos o imágenes clásicas como era el caso de la llamada vieja mecánica cuántica.

Heisenberg tenía claro que la nueva mecánica debería de alguna forma coincidir con la mecánica clásica a escalas macroscópicas de modo que constituyera una generalización de esta lograda con la ayuda de nuevos conceptos y nuevas variables físicas y que sin embargo se sirviera de la guía del aparato matemático clásico, cuya exactitud a escala macroscópica estaba fuera de duda. La guía de Heisenberg fue el llamado principio de correspondencia ideado por Bohr -quien tuvo una gran influencia sobre él- en el cual se postula una detallada analogía entre la teoría cuántica y la clásica apropiada, según la imagen mental que se use. Lo anterior tiene sentido en vista de otro principio de Bohr llamado el principio de complementariedad. Este postula que las imágenes clásicas de onda y partícula se complementan para dar una cierta intuición acerca de los fenómenos cuánticos.

El camino seguido por Heisenberg para encontrar la mecánica matricial comienza teniendo en mente la imagen corpuscular de un sistema periódico con energía constante -en especial el caso de un electrón en el átomo de hidrógeno-. Clásicamente un sistema periódico dependiente de n parámetros que varían con el tiempo se describe por coordenadas $q_k(t)$ dadas por

$$q_k(t) = \sum_{\sigma_1=-\infty}^{\infty} \dots \sum_{\sigma_n=-\infty}^{\infty} q_{\sigma_1 \dots \sigma_n}^{(k)} e^{2\pi i(\sigma_1 \nu_1 + \dots + \sigma_n \nu_n)t} \quad (3.1)$$

que es una serie de Fourier real que representa una función $q(t) : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ y en donde $\nu_i \in \mathbb{R}$.

Según la teoría clásica, las frecuencias y las amplitudes de emisión del átomo son las frecuencias de la serie de Fourier, sin embargo en el caso del

átomo las frecuencias observadas están cuantizadas y dadas por

$$\nu_{n,m} = \frac{E_n - E_m}{h} \quad n, m \in \mathbb{N}, \quad (3.2)$$

tal como se vió en el capítulo primero.

El gran paso en el desarrollo hecho por Heisenberg fue el haber convertido la serie de Fourier en una sucesión de varios índices quitando las sumas que aparecen en la ecuación (3.1). Además sustituyó las frecuencias clásicas por las cuánticas y los coeficientes por las amplitudes de emisión observadas. Con esto las variables dejan de ser coordenadas reales y se convierten en arreglos de números cuyas entradas dependen del tiempo. La cuestión acerca de las trayectorias del electrón alrededor del núcleo se deja de lado. De esta forma las nuevas variables propuestas por Heisenberg se construyen, en principio, como relaciones de magnitudes observadas y tienen en general la forma

$$Q_k(n, m) = q_{n,m}^{(k)} e^{2\pi i(\nu(n,m))t}, \quad (3.3)$$

$$P_k(n, m) = p_{n,m}^{(k)} e^{2\pi i(\nu(n,m))t} \quad (3.4)$$

en donde P, Q corresponden a los análogos de las variables canónicas conjugadas clásicas. En adelante el camino seguido por Heisenberg y completado por Dirac y algunos otros fue el de construir una álgebra para estas nuevas variables y después un formalismo análogo al canónico, teniendo en mente el principio de correspondencia.

Las variables propuestas por Heisenberg resultan ser matrices hermitianas infinitas dependientes del tiempo. Una de las características más importantes de estas es que son no-conmutativas, propiedad que a la larga se sitúa en el centro de la teoría cuántica. Se puede hablar de funciones de estas variables, que en principio pueden ser vistas de la siguiente forma. Si tomamos una función con variables reales $f(p_i, q_j)$, esta puede desarrollarse en serie de Taylor y después en esa serie se pueden sustituir las variables reales de los términos por las nuevas variables con lo que se tiene $f(P_i, Q_j)$

Otro paso importante en el desarrollo de la mecánica matricial fue dado por Dirac, quien encontró el objeto análogo en este formalismo al corchete de Poisson, con lo que se logró conectar el formalismo hamiltoniano con la nueva teoría. Este nuevo objeto es el conmutador de dos funciones de las variables $X(P_i, Q_j), Y(P_i, Q_j)$, definido como

$$\frac{1}{i\hbar}[X, Y] := \frac{1}{i\hbar}(XY - YX) \sim \sum_k \frac{\partial X}{\partial Q_k} \frac{\partial Y}{\partial P_k} - \frac{\partial Y}{\partial Q_k} \frac{\partial X}{\partial P_k}. \quad (3.5)$$

Con este nuevo objeto también encontrado con ayuda del principio de correspondencia se postularon las ecuaciones de evolución de las variables de forma análoga a como se hace en la mecánica clásica. Los principios de la mecánica matricial fueron:

i) Las condiciones de conmutación de las variables cuánticas son

$$[P_i, Q_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \quad [Q_i, Q_j] = [P_i, P_j] = 0. \quad (3.6)$$

ii) Las ecuaciones cuánticas de evolución son

$$\dot{Q}_i = \frac{i}{\hbar}[H, Q_i], \quad \dot{P}_i = \frac{i}{\hbar}[H, P_i] \quad (3.7)$$

en donde el hamiltoniano del sistema $H(P, Q)$ se forma sustituyendo las variables clásicas por las cuánticas.

Dado explícitamente el hamiltoniano, el problema de evolución de las variables P, Q se resuelve diagonalizando el operador hamiltoniano, pues

$$\dot{Q}(i, j) = \frac{i}{\hbar}[H_D, Q](i, j) = \frac{i}{\hbar}(H_D(i, i) - H_D(j, j))Q(i, j) \quad (3.8)$$

(en donde H_D es el hamiltoniano ya diagonalizado) y por lo tanto

$$Q(i, j) = Q_0(i, j)e^{\frac{i}{\hbar}(H_D(i, i) - H_D(j, j))t}. \quad (3.9)$$

Esta ecuación da la evolución del elemento de matriz. Lo expuesto anteriormente fue el germen de la mecánica matricial, sin embargo, hacían falta más elementos para que fuera la nueva teoría buscada. (Un desarrollo más detallado de la mecánica matricial puede encontrarse en [9]).

Por otro lado Schrödinger continuó investigando la posibilidad de desarrollar las hipótesis de de Broglie que se basaron en la analogía entre el principio de Fermat y el de Maupertuis. Para esto Schrödinger tomó la ecuación fundamental de una de las formulaciones de la mecánica clásica, la ecuación de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial S(r, t)}{\partial t} + \frac{1}{2M} \nabla S(r, t)^2 + V(r) = 0, \quad (3.10)$$

de cuya solución puede extraerse la trayectoria que parte de un punto r_0 al tiempo t_0 y llega al punto r al tiempo t . Schrödinger consideró el caso en que la energía del sistema no depende del tiempo y por lo tanto $S(r, t)$ -la función principal de Hamilton- cumple $S(r, t) = S_0 - Et$ en donde E es la energía constante del sistema y S_0 la llamada acción reducida. De esta forma se tiene que

$$|\nabla S| = \sqrt{2M(E - V(r))} \quad (3.11)$$

que es el valor absoluto del momento de las trayectorias. Puede verse que la configuración de las superficies de nivel de S es estacionaria pues las superficies de nivel al tiempo t evolucionan al tiempo t' a superficies de nivel ya existentes al tiempo t . Por otro lado la evolución de las superficies de nivel siempre cumple

$$\nabla S \cdot dn + \frac{\partial S}{\partial t} dt = 0 \quad (3.12)$$

donde dn es el vector normal a la superficie. Por lo tanto,

$$\left| \frac{\partial S}{\partial t} \right| = \left| \frac{dn}{dt} \right| = v(r, t) \quad (3.13)$$

que en el caso $E = cte$ se convierte en

$$v(r, t) = \frac{E}{\sqrt{2M(E - V)}} \quad (3.14)$$

Schrödinger supuso que las ondas de de Broglie -representadas como funciones complejas $\psi(r, t)$ - cumplen la ecuación de onda. Además supuso que la forma matemática de estas ondas era

$$\psi(r, t) = A(r)e^{\frac{iS(r, t)}{\hbar}}, \quad (3.15)$$

en donde $S(r, t)$ es la acción clásica y $A(r)$ es una función a encontrar relacionada con la amplitud de la onda. En el caso con energía constante esta función es

$$A(r)e^{\frac{i(S_0 - Et)}{\hbar}} \quad (3.16)$$

tiene frecuencia $\nu = \frac{E}{\hbar}$, los frentes de onda tienen velocidad $v = \frac{E}{\sqrt{2M(E - V(r))}}$ de modo que la longitud de onda es

$$\lambda(r, t) = \frac{v(r, t)}{\nu} = \frac{h}{\sqrt{2M(E - V(r))}} = \frac{h}{p(r, t)} \quad (3.17)$$

en concordancia con la propuesta de de Broglie y además la onda es estacionaria. Suponiendo un tipo de solución:

$$\Psi(r, t) = A(r)e^{\frac{i}{\hbar}(S_0(r) - Et)} = \psi(r)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (3.18)$$

la ecuación de onda toma la forma

$$\nabla^2 \Psi(r, t) - \frac{1}{v^2(r, t)} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(r, t) = 0 \quad (3.19)$$

$$\nabla^2 \psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} - \frac{1}{\frac{E^2}{2M(E-V(r))}} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = 0 \quad (3.20)$$

$$\nabla^2 \psi(r) + \frac{2M}{\hbar^2} (E - V) \psi(r) = 0 \quad (3.21)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r) \quad (3.22)$$

Esta última ecuación es la que se conoce como la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. El propio Schrödinger generalizó esta ecuación para el caso en que la energía no es una constante de movimiento [8]. La forma final de la ecuación es:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = \frac{-\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi(r, t) + V(r, t) \psi(r, t). \quad (3.23)$$

Los dos formalismos brevemente expuestos, resultan ser matemáticamente equivalentes (como se verá en el siguiente punto) y la conexión entre las nuevas variables físicas con el experimento fue encontrada por Born quien propuso que las variables cuánticas proporcionan la posibilidad de medir el valor de una determinada magnitud observable, tales como la posición y el momento.

La interpretación estadística de Born establece que la norma al cuadrado de la función de onda proporciona una distribución de la probabilidad de medir un determinado valor de la posición en el espacio. Esta interpretación puede entenderse mejor si se toma en cuenta el hecho de que experimentalmente se puede grabar la incidencia de fotones a través de una rejilla de difracción en una placa fotográfica. Esto puede hacerse de modo que la intensidad de la luz incidente sea baja, en este caso lo que se va grabando en la placa son manchas que cuando aumenta la intensidad total de luz recibida por la placa en un cierto tiempo, dan lugar a patrones de interferencia. De

esta forma puede verse que las ondas de de Broglie son muy distintas a las ondas clásicas. En las ondas cuánticas no es importante en sí la intensidad de la onda, puesto que aumentarla o disminuirla no afecta la forma en que se distribuye la probabilidad.

En este punto es importante recordar que la mecánica cuántica es una teoría que fue creada para explicar los fenómenos a escala microscópica, y que a esta escala la perturbación que hacen los aparatos de medición sobre los fenómenos estudiados ya no es despreciable como sucede en la mecánica clásica. De hecho se puede utilizar esta característica de la relación aparato de medición-objeto como un parámetro para determinar si un objeto es pequeño o no lo es. Si la relación es débil, el objeto es esencialmente clásico. Si la relación es fuerte, el objeto es esencialmente cuántico.

La causalidad clásica implica poder fijar las causas de un fenómeno independientemente del observador, lo que implica poder contar con mediciones que no perturben considerablemente al sistema. A escalas cuánticas esto es imposible.

Esta situación tiene su origen en el principio de incertidumbre descubierto por Heisenberg, quien en 1927 estudiaba cómo relacionar el aparato matemático de la mecánica cuántica -cuya validez estaba firme después de que Schrödinger demostrara la equivalencia matemática entre las dos mecánicas- con los experimentos.

En especial estudiaba cómo representar el camino de un electrón en una cámara de vapor dentro del esquema matemático, siendo que los paquetes de onda tienden a extenderse y que los electrones permanecen. Heisenberg afirma haber tenido en mente esos días una idea de Einstein en el sentido de que es la teoría la que decide que puede ser observado. De modo que Heisenberg se preguntó si tal vez era cierto que en la naturaleza sólo ocurren cosas representables en el formalismo matemático de la mecánica cuántica. Si lo anterior es cierto en realidad no hay trayectoria del electrón en la cámara de vapor sino una secuencia de gotas de las que no es posible extraer de manera exacta la posición y el momento del electrón, entonces calculó el límite de precisión en la medición para este caso según la mecánica cuántica y encontró la relación:

$$\Delta p_x \Delta x \sim h, \quad (3.24)$$

en donde Δp_x y Δx representan la incertidumbre en la medida del momento y la posición respectivamente, al tiempo t .

Un experimento útil en la comprensión de la mecánica cuántica es el de mandar luz polarizada hacia un cristal de polarización. Sea α el ángulo entre la dirección de polarización de la luz y la dirección en que el cristal polariza. Clásicamente se tiene que la fracción de la intensidad de la luz que atraviesa el cristal es $\sin^2\alpha$. Cuánticamente se sabe que los fotones de alguna forma se polarizan, puesto que la dirección de polarización de un haz de luz afecta la dirección en la que los electrones son emitidos por un metal en el efecto fotoeléctrico. Sucede que si se envía un fotón polarizado hacia el cristal de polarización sólo se miden dos cosas: o bien el fotón atraviesa el cristal conservando su longitud de onda y su polarización, o bien el fotón es absorbido por el cristal. Si el experimento se repite muchas veces se llega a la conclusión de que sólo una fracción de los fotones emitidos igual a $\sin^2\alpha$ atraviesa el cristal, con lo que se recupera la predicción clásica.

Lo anterior sugiere que el estado físico en que $0 < \alpha < 2\pi$, es en realidad una superposición de los dos estados medibles en que estos dos planos son paralelos o perpendiculares puesto que no se miden estos estados intermedios de manera directa. Además, el experimento sugiere que el "peso" de los estados en la superposición está relacionado con la probabilidad que tienen estos estados superpuestos de ser medidos. Lo anterior puede ser representado de la siguiente forma:

$$|\nearrow\rangle = C_1|\uparrow\rangle + C_2|\rightarrow\rangle, \quad (3.25)$$

en donde $|\nearrow\rangle$ representa el estado en que los planos difieren por un ángulo α que cumple $0 < \alpha < \frac{\pi}{2}$, $|\uparrow\rangle$ cuando $\alpha = 0$ y $|\rightarrow\rangle$ cuando $\alpha = \frac{\pi}{2}$. Las constantes C_1 y C_2 tienen el valor $\sin\alpha$ y $\cos\alpha$ respectivamente. (Los detalles de estos razonamientos pueden verse en [7]).

Hasta este punto no se ha especificado que clase de objeto matemático es $|\cdot\rangle$, así como tampoco de qué clase de suma se está hablando. Sin embargo si se postula que las ondas de de Broglie ψ representan un estado cuántico, entonces puede tomarse el ejemplo del estado $|\psi\rangle$. Para ser congruente con la interpretación estadística de Born, la función de onda ψ debe cumplir

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \psi d\mu < \infty. \quad (3.26)$$

Esto implica que el conjunto de todos los estados cuánticos de la forma $|\psi\rangle$ debe ser parte de el espacio $L^2_\mu(\mathbb{R}^3)$ que, como se demostró en el capítulo dos, es un espacio de Hilbert. Todo lo expuesto en este punto apunta hacia ciertos principios básicos que son expuestos en la siguiente sección.

§3.2 La Formulación de la Mecánica Cuántica

En el punto anterior se describieron brevemente las ideas principales que dieron origen a la mecánica cuántica tales como los postulados de la mecánica matricial, la función de onda, su ecuación de evolución, la interpretación probabilística y el hecho de que los estados cuánticos se asocian con vectores de un espacio de Hilbert. Todas estas ideas desembocan en postulados de la mecánica cuántica en cuyos enunciados se hace explícita su definición y propiedades. Estos postulados son:

Postulado .1 *A un sistema físico se le asocia un espacio de Hilbert. El estado del sistema está representado en la mecánica cuántica por un vector unitario -llamado vector de estado $|\cdot\rangle$ -, que es un elemento del espacio de Hilbert asociado al sistema y contiene toda la información física que caracteriza el estado. Si dos vectores difieren por una fase se considera que representan el mismo estado físico:*

$$|\cdot\rangle \sim e^{i\alpha}|\cdot\rangle \quad (3.27)$$

Postulado .2 *A cada magnitud física observable se la asocia un operador autoadjunto en el espacio de Hilbert asociado al sistema del que se trate. Además, las magnitudes observables sólo toman valores medibles pertenecientes al espectro del operador.*

Postulado .3 *Sea Δ un intervalo $[x_0, x_1] \subset \mathbb{R}$. Dado un vector de estado $|\cdot\rangle$, un operador autoadjunto \mathcal{O} asociado al observable B , y su espectro $\sigma(\mathcal{O})$, se tiene que la probabilidad de que una medición de B sobre el estado físico $|\cdot\rangle$ resulte un valor $x \in \Delta \cap \sigma(\mathcal{O})$ está dada por:*

$$\|E_{x_1}|\cdot\rangle - E_{x_0}|\cdot\rangle\|^2 := \|E_x(\Delta)|\cdot\rangle\|^2 \quad (3.28)$$

donde los E_x son operadores de proyección pertenecientes a la familia de operadores asociada a la descomposición espectral del operador \mathcal{O} . (La medida de Δ está relacionada con la dispersión de la medición en cuestión).

Postulado .4 *La evolución en el tiempo del vector de estado de un sistema aislado es causal y lineal. Esta evolución está dada por la ecuación:*

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad (3.29)$$

en donde H es el operador hamiltoniano del sistema y es autoadjunto.

Postulado .5 Si se tiene un sistema físico clásico en que las coordenadas de posición son q_i y los momentos conjugados son p_i , los operadores cuánticos autoadjuntos asociados a estos observables X_i, P_i deben cumplir:

$$[X_i, X_j] = [P_i, P_j] = 0, \quad [X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (3.30)$$

Las magnitudes observables que clásicamente se representan por la función $B(x, p) = B_1(x) + B_2(p)$ tienen como operador asociado al operador $\mathcal{O}(X, P) = B_1(X) + B_2(P)$.

Postulado .6 El vector de estado $|\cdot\rangle$ después de una medición del observable B , con resultado x_0 y con una dispersión correspondiente a Δ , se convierte instantáneamente en el vector $E_x(\Delta)|\cdot\rangle$ normalizado, en donde E_x es la familia espectral del operador \mathcal{O} asociado al observable B y $x_0 \in \Delta$.

(Esta forma de los postulados puede verse en [8]).

La mecánica cuántica es una teoría construida sobre la idea de que debe ser posible explicar a la naturaleza con base en relaciones de magnitudes observables. El vector de estado se refiere a una realidad física que de algún modo se etiqueta en base a mediciones. Más allá de decir que propiedades cumplen estas etiquetas, la mecánica cuántica no hace afirmaciones acerca de que hay detrás del vector de estado. El primer postulado establece una conexión entre los estados físicos con elementos de un espacio de Hilbert cuya teoría está ampliamente desarrollada. Los puntos básicos de la teoría de estos espacios se desarrollaron en el capítulo 2.

Una consecuencia de estos postulados es que si un sistema físico se puede encontrar en cualquiera de los estados $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$ entonces este estado es una combinación lineal de estos estados:

$$|\psi\rangle = \alpha_1|\psi_1\rangle + \dots + \alpha_n|\psi_n\rangle. \quad (3.31)$$

Por otro lado se tiene que la probabilidad de que un estado $|\psi\rangle$ se convierta en un estado $|\phi\rangle$, después de una medición es $\|\langle\phi|\psi\rangle\|^2$. A la cantidad $\langle\phi|\psi\rangle$ se le llama la amplitud de probabilidad. Si el estado es una superposición de otros estados la amplitud de probabilidad se escribe como:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \alpha_1\langle\phi|\psi_1\rangle + \dots + \alpha_n\langle\phi|\psi_n\rangle \quad (3.32)$$

lo que al encontrar su norma al cuadrado da lugar a interferencia.

Otra observación es que la dimensión de este espacio de vectores de estado puede ser infinita. Sin embargo en cierta forma, es posible guiarse con nuestra intuición euclidiana. Por ejemplo existe una norma y por lo tanto una distancia entre dos estados. Por otro lado, a cada estado físico $|\cdot\rangle$ le corresponde -salvo cambio de fase- un único funcional lineal complejo del espacio de Hilbert, denotado por $\langle\cdot|$ y que cumple $\langle\cdot| : |\psi\rangle \mapsto \langle\cdot|\psi\rangle$. Los postulados tres y cuatro definen explícitamente la relación del aparato matemático con las observaciones y el teorema espectral se sitúa en el centro de esta relación.

Por definición los operadores unitarios dejan invariante a la cantidad $\|E_x(\Delta)|\cdot\rangle\|^2$, por lo que la información física de la teoría no se altera si al espacio de Hilbert se le aplican este tipo de transformaciones. En ese sentido los operadores unitarios son análogos a las transformaciones canónicas de la mecánica clásica.

A continuación se definen tres conceptos estadísticos de importancia para la mecánica cuántica.[12]

Definición 3.1 Dado un espacio X medible y una función medible $\mathcal{P} : X \mapsto [0, 1] \subset \mathbb{R}$ tal que $\int_X \mathcal{P} d\mu = 1$. La función \mathcal{P} es llamada una distribución de probabilidad.

Definición 3.2 Dada una función $\mathcal{O} : X \mapsto \mathbb{R}$, se define el valor promedio de \mathcal{O} -también llamado el valor esperado- respecto a la distribución de probabilidades \mathcal{P} como:

$$\bar{\mathcal{O}} := \int_X \mathcal{O} \mathcal{P} d\mu \quad (3.33)$$

cuando X es un espacio discreto se tiene:

$$\bar{\mathcal{O}} := \sum_i \mathcal{O}_i \mathcal{P}_i \quad (3.34)$$

Definición 3.3 La dispersión cuadrática media -también conocida como la incertidumbre de la cantidad \mathcal{O} - dada una distribución de probabilidad \mathcal{P} , se define como:

$$\Delta \mathcal{O} := \sqrt{(\mathcal{O} - \bar{\mathcal{O}})^2} \quad (3.35)$$

Dado que los vectores de estado son unitarios, por definición se tiene que dada una base hilbertiana $|e_i\rangle$ en el espacio y un vector $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i |e_i\rangle$, los valores $|\alpha_i|^2$ son una distribución de probabilidades. La función de onda

normalizada a la unidad también lo es, en concordancia con su interpretación propuesta por Born.

Para darle sentido físico a la definición 3.2 en términos de la mecánica cuántica, tómese un observable cuyo operador asociado \mathcal{O} tenga un espectro discreto de sólo valores propios λ_i . La base de vectores propios la denotamos por $\{|\lambda_i\rangle\}$. En este caso el promedio o valor esperado del observable \mathcal{O} para un estado $\psi = \sum \alpha_i |\lambda_i\rangle$, al que denotamos como $\overline{\mathcal{O}}_\psi$, es igual a

$$\overline{\mathcal{O}}_\psi = \sum_i \lambda_i |\alpha_i|^2 = \langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle \quad (3.36)$$

lo anterior se generaliza para los casos en que \mathcal{O} tenga un espectro no discreto.

De esta forma la incertidumbre del observable \mathcal{O} para un estado $|\psi\rangle$ queda como:

$$(\Delta_\psi \mathcal{O})^2 = \overline{(\mathcal{O} - \overline{\mathcal{O}})^2} = \langle \psi | \mathcal{O}^2 - 2\mathcal{O}\overline{\mathcal{O}} + \overline{\mathcal{O}}^2 | \psi \rangle = \overline{\mathcal{O}^2} - \overline{\mathcal{O}}^2 \quad (3.37)$$

El principio de incertidumbre -de cuyo origen se habló en el punto anterior- puede ser deducido a partir de los postulados. Este "principio" -llamado así por razones más bien históricas- afirma que si los operadores asociados a dos observables no conmutan, entonces es imposible contar con mediciones simultáneamente válidas de estos dos observables tales que el producto de sus incertidumbres sea menor que un cierto límite. En lo particular esto implica que es imposible conocer al mismo tiempo los valores de los observables canónicos conjugados de la mecánica clásica. La deducción de este principio a partir de los postulados se puede hacer como sigue:

Para todos los números reales a, b y todos los operadores asociados a observables A, B se tiene

$$[A, B] = (A - a)(B - b) - (B - b)(A - a), \quad (3.38)$$

tomando $a = \overline{A}_\psi$ y $b = \overline{B}_\psi$ para algún estado $|\psi\rangle$, se tiene

$$\frac{1}{4} |\overline{[A, B]}_\psi|^2 = \frac{1}{4} |\langle \psi | (A - \overline{A}_\psi)(B - \overline{B}_\psi) | \psi \rangle - \langle \psi | (B - \overline{B}_\psi)(A - \overline{A}_\psi) | \psi \rangle|^2 \quad (3.39)$$

$$= \frac{1}{4} |\langle (A - \overline{A}_\psi)\psi | (B - \overline{B}_\psi)\psi \rangle - \langle (B - \overline{B}_\psi)\psi | (A - \overline{A}_\psi)\psi \rangle|^2 \quad (3.40)$$

$$= |Im(\langle (A - \overline{A}_\psi)\psi | (B - \overline{B}_\psi)\psi \rangle)|^2 \quad (3.41)$$

$$\leq \|(A - \bar{A}_\psi)\psi\|^2 \|(B - \bar{B}_\psi)\psi\|^2 = (\Delta_\psi A)^2 (\Delta_\psi B)^2. \quad (3.42)$$

Con lo que se deduce el principio de incertidumbre a partir de los postulados de la mecánica cuántica. (Esta deducción puede verse en [12]).

En el punto anterior se habló de las dos distintas imágenes de la mecánica cuántica. La de Heisenberg, en la que las variables son operadores expresados respecto a una base, es decir, matrices. Éstas evolucionan con el tiempo y contienen toda la información del sistema. La ecuación de evolución se resuelve cuando se tiene al operador hamiltoniano diagonalizado. En esta imagen los estados particulares del sistema en un tiempo determinado corresponden a vectores y no evolucionan. Las condiciones de conmutación de los análogos a las variables canónicas conjugadas, corresponden al quinto postulado. En la imagen de Schrödinger son los vectores de estado los que evolucionan en el tiempo. El problema de evolución para un sistema con hamiltoniano independiente del tiempo se resuelve cuando se conoce el espectro del operador hamiltoniano (definido para un caso particular como $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$) lo que corresponde también a diagonalizarlo.

Es posible hacer una transición matemática entre las dos imágenes sin perder ninguna información física. Se tiene del postulado 4 que la evolución temporal de los vectores en la imagen de Schrödinger es:

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad (3.43)$$

cuya solución formal es

$$|\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi_0\rangle. \quad (3.44)$$

Por lo visto al final del segundo capítulo y puesto que H es siempre un operador autoadjunto, el operador $U := e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ -llamado de evolución-es unitario. En el siguiente diagrama conmutativo se explica la transformación entre las dos imágenes

$$\begin{array}{ccc} & \mathcal{O}_H := U\mathcal{O}_S U^\dagger & \\ & \longrightarrow & \\ U \quad \begin{array}{c} H_H \\ \uparrow \\ H_S \end{array} & & \begin{array}{c} H_H \\ \downarrow \\ H_S \end{array} \quad U^\dagger \\ & \longrightarrow & \\ & \mathcal{O}_S & \end{array}$$

En este diagrama H_H representa el espacio de Hilbert de la imagen de Heisenberg, H_S el espacio de Hilbert de la imagen de Schrödinger y \mathcal{O}_S el

operador asociado a un observable en la imagen de Schrödinger. También se define el operador \mathcal{O}_H que es el operador en la imagen de Heisenberg y puede ser dependiente del tiempo. Nótese que si un operador depende del tiempo, su espectro y sus vectores propios pueden variar con el tiempo. Por esta razón las ecuaciones de los valores propios se escriben como :

$$\mathcal{O}(t)|\psi(t)\rangle = \lambda|\psi(t)\rangle \quad (3.45)$$

Por el contrario en la imagen de Schrödinger los vectores propios no dependen del tiempo por que los operadores no evolucionan. Otra observación importante es que el hamiltoniano conmuta con el operador de evolución, por lo que se tiene:

$$H_H = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} H e^{\frac{i}{\hbar}Ht} = H_S. \quad (3.46)$$

La evolución de los elementos de las matrices puede ser deducida a partir del cuarto postulado. Se sabe que

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle, \quad (3.47)$$

de donde

$$-i\hbar \frac{d}{dt}\langle\psi| = H\langle\psi|. \quad (3.48)$$

Por otro lado si $\{e_i\}$ es una base del espacio de Hilbert y se tiene expresado al operador \mathcal{O}_S en forma matricial en esta base, se tiene que

$$\frac{d}{dt}\langle e_i|\mathcal{O}_S|e_j\rangle = \frac{d}{dt}(\langle e_i|\mathcal{O}_S|e_j\rangle) + \langle e_i|\mathcal{O}_S \frac{d}{dt}|e_j\rangle \quad (3.49)$$

$$= \frac{i}{\hbar}\langle e_i|H\mathcal{O}_S|e_j\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle e_i|\mathcal{O}_S H|e_j\rangle \quad (3.50)$$

$$= \frac{i}{\hbar}\langle e_i|[H, \mathcal{O}_S]|e_j\rangle \quad (3.51)$$

De lo anterior también puede deducirse que

$$\frac{d}{dt}\overline{\mathcal{O}}_\psi = \frac{d}{dt}\langle\psi|\mathcal{O}_S\psi\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi|[H, \mathcal{O}_S]\psi\rangle = \frac{i}{\hbar}\overline{[H, \mathcal{O}]_\psi}, \quad (3.52)$$

lo que es conocido como el teorema de Ehrenfest.

Un punto importante es que el operador de evolución es unitario, de modo que los vectores de estado -unitarios por construcción- siempre tienen norma uno a lo largo de su evolución.

Hasta este punto sólo se ha especificado la forma de un caso particular del operador hamiltoniano. Sin embargo, no se ha dicho nada respecto a los operadores autoadjuntos asociados a observables tan importantes como son la posición, el momento, y el momento angular. A continuación se sugiere la forma de estos operadores.

Tomando en cuenta que la norma al cuadrado de una onda de de Broglie es una distribución de probabilidad de la posición de una partícula, el valor promedio de la posición está dado por

$$\int_{\Omega} x|\psi(x)|^2 dx = \langle \psi | x \psi \rangle. \quad (3.53)$$

Esto sugiere tomar $X : \psi(x) \mapsto x\psi(x)$ como el operador de posición en el espacio de Hilbert $L^2(\Omega)$, en donde $\Omega \subseteq \mathbb{R}$ y los vectores de estado son las ondas de de Broglie.

Para sugerir cuál debe ser la expresión del operador momento, se tiene que contar con algo similar a lo usada con el de posición. Teniendo en mente que las ondas planas tienen número de onda k definido, la relación $p = \hbar k$ -en donde p es el momento-, establece que también tienen momento definido. Se sabe que es posible expresar a las funciones en términos de ondas planas mediante la transformada de Fourier, por lo que se puede descomponer a las funciones de onda en términos de ondas con momento definido. Antes de continuar con esta idea es necesario definir un objeto matemático auxiliar:

Definición 3.4 Sea $\{\phi_i\}$ un conjunto completo de funciones, es decir, una base hilbertiana del espacio $L^2(\Omega)$. Se define la delta de Dirac como:

$$\delta(x - x') := \sum_i \phi_i(x)\phi_i(x') \quad (3.54)$$

(Esta definición puede verse en [5]). Este objeto satisface una propiedad que algunas veces se usa como su definición. Sea $f(x) \in L^2(\Omega)$. Entonces,

$$\int_{\Omega} f(x)\delta(x - x')dx = \int_{\Omega} f(x) \sum_i \phi_i^*(x)\phi_i(x')dx \quad (3.55)$$

$$= \sum_i \phi_i^*(x') \int_{\Omega} f(x)\phi_i(x)dx = f(x'). \quad (3.56)$$

A continuación se construye una expresión explícita de la delta de Dirac. Se sabe de la teoría de series de Fourier que el conjunto de funciones $\phi_n =$

$\frac{1}{l}e^{\frac{i2\pi n}{l}x}$ es completo en $L^2([0, l])$. En consecuencia la delta de Dirac en este espacio se expresa como

$$\delta(x - x') = \frac{1}{l} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\frac{i2\pi n}{l}(x-x')}. \quad (3.57)$$

Ahora se toma el límite cuando l tiende a infinito. Se obtiene

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \frac{1}{l} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\frac{i2\pi n}{l}(x-x')} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip(x-x')}{\hbar}} dp \quad (3.58)$$

que es la expresión de la delta de Dirac en $L^2(\mathbb{R})$.

Continuando con el operador momento, ahora tómesese una función de onda $\psi(x)$ tal que su transformada de Fourier esté definida. Se tiene así que:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp, \quad (3.59)$$

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx. \quad (3.60)$$

La función $\psi(x)$ ha sido descompuesta en ondas de momento definido mediante la función de peso $\tilde{\psi}(p)$. Esta función de peso cumple con la siguiente propiedad:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx \quad (3.61)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p') e^{-\frac{ip'x}{\hbar}} dp' \right\} dx \quad (3.62)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p) \tilde{\psi}(p) dp. \quad (3.63)$$

En vista de lo anterior tiene sentido interpretar a la norma al cuadrado de la función $\tilde{\psi}(p)$ como una distribución de probabilidad de momentos del estado $|\psi\rangle$. Dado que esta función de peso es única para cada función de onda, se le puede considerar como la representación del estado en el espacio de momentos.

El valor promedio del momento del estado $|\psi\rangle$ en la representación de momentos es:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p |\tilde{\psi}(p)|^2 dp = \langle \psi | p \psi \rangle \quad (3.64)$$

lo que sugiere definir $P : \tilde{\psi}(p) \mapsto p\tilde{\psi}(p)$ como el operador momento en la representación de momentos.

La forma del operador momento en la representación de posiciones es $P = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ como se muestra a continuación:

$$\langle \psi | P | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi(x) \quad (3.65)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \tilde{\psi}(p') e^{-\frac{ip'x}{\hbar}} dx dp dp' = \int_{-\infty}^{\infty} p |\tilde{\psi}(p)|^2 dp. \quad (3.66)$$

El conmutador de los operadores de posición y momento es:

$$[X, P]\psi(x) = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x \psi(x) = i\hbar \psi(x) \quad (3.67)$$

lo que muestra que los operadores sugeridos asociados a los observables de posición y momento, son congruentes con el quinto postulado.

El hecho de que sea posible representar a la función de onda como función compleja de las coordenadas o de los momentos hace necesario hacer algunas aclaraciones entre el cambio de representación.

Los símbolos $|x\rangle$ y $|p\rangle$ denotan estados puros de posiciones y momentos respectivamente, los cuales aunque no son estados físicamente reales ni tampoco están en el espacio de Hilbert, son elementos útiles en la descripción. En la representación de posiciones x se tiene $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$ y $\langle x|p'\rangle = \frac{1}{2\pi} e^{\frac{ip'x}{\hbar}}$. Análogamente en la representación de momentos p se tiene $\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$ y $\langle p|x'\rangle = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{ipx'}{\hbar}}$.

Con esto se da por terminado esta breve introducción a la mecánica cuántica, en la que se ha hecho un repaso de las ideas más relevantes -tanto físicas como matemáticas- en su desarrollo. Plantear el formalismo de la mecánica cuántica de manera exhaustiva es algo que excede los límites de este trabajo.

§3.3 La Aproximación Semiclásica y las Integrales de Camino de Feynman

Es bien sabido en física que el contar con las ecuaciones que describen un fenómeno no significa necesariamente que se tenga el problema resuelto, debido a que en la mayoría de las ocasiones no es posible encontrar una solución

exacta a estas ecuaciones. Por esto es necesario contar con métodos de aproximación adecuados, en el sentido de que no deben perder el contenido físico. Uno de estos métodos es el conocido como la aproximación WKB, basado en la idea de desarrollar a la función en términos de potencias de $\frac{\hbar}{i}$. [6]

Se sabe que toda función compleja $\psi(x)$ -que no se haga cero-, se puede expresar como $\psi(r, t) = e^{\frac{iS(r,t)}{\hbar}}$ en donde $S(r, t)$ es otra función compleja. Si se substituye a la función ψ por esta expresión en la ecuación de Schrödinger, se obtiene

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{\frac{iS(r,t)}{\hbar}} = \frac{-\hbar^2}{2M} \nabla^2 e^{\frac{iS(r,t)}{\hbar}} + V(r) e^{\frac{iS(r,t)}{\hbar}} \quad (3.68)$$

de lo que resulta la ecuación

$$-\frac{\partial S(r, t)}{\partial t} = \frac{1}{2M} \nabla S(r, t)^2 + V(r) - \frac{i\hbar}{2M} \nabla^2 S \quad (3.69)$$

que es igual a la ecuación de Hamilton-Jacobi salvo por el término proporcional a \hbar . Si el problema tratado es de escala macroscópica, es de esperarse que este término sea despreciable y con esto se regrese a la ecuación clásica.

Si nos restringimos al caso en que el hamiltoniano no depende del tiempo, entonces es posible proponer una substitución distinta en la ecuación de Schrödinger:

$$\psi(r, t) = e^{\frac{i\sigma(r)}{\hbar}} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (3.70)$$

lo que nos lleva a la ecuación:

$$E = \frac{1}{2M} |\nabla \sigma(r)|^2 + V(r) - \frac{i\hbar}{2M} \nabla^2 \sigma. \quad (3.71)$$

Ahora se propone un desarrollo de la función σ en términos de $\frac{\hbar}{i}$:

$$\sigma(r) = \sigma_0(r) + \frac{\hbar}{i} \sigma_1(r) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2(r) + \dots + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n \sigma_n(r) + \dots \quad (3.72)$$

ésta se substituye en la ecuación (4.71) y así se obtienen ecuaciones para cada una de las potencias de $\frac{\hbar}{i}$. A orden cero la ecuación es:

$$|\nabla \sigma_0(r)|^2 = 2M\{E - V(r)\} \quad (3.73)$$

y a primer orden:

$$\nabla \sigma_1(r) \cdot \nabla \sigma_0(r) = -\frac{1}{2} \nabla^2 \sigma_0.$$

La primera de éstas se resuelve fácilmente (nos restringimos a partir de aquí a una dimensión).

$$\sigma_0(x) = \pm \int_{x_0}^x \sqrt{2M(E - V(x))} dx + c = \pm \int_{x_0}^x p(x) dx + c \quad (3.75)$$

donde $p(x) := \sqrt{2M(E - V(x))}$. La solución de la segunda es:

$$\sigma_1(x) = - \int_{x_0}^x \frac{dp(x)}{p(x)} = -\frac{1}{2} \ln(\sqrt{|p(x)|}) + cte \quad (3.76)$$

Con lo que la forma de la función de onda aproximada por WKB es

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} \{ \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 \}} = \frac{k_1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{i \int_{x_0}^x p(x) dx} + \frac{k_2}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-i \int_{x_0}^x p(x) dx} \quad (3.77)$$

en donde k_1, k_2 son constantes complejas.

Con esto se tiene efectivamente un método para encontrar soluciones aproximadas a la ecuación de Schrödinger. Este tipo de aproximación también recibe el nombre de semiclásica, puesto que el tomar a la solución como una serie de potencias de \hbar de alguna forma gradúa la transición entre la ecuación cuántica y la clásica.

A continuación se plantea la cuestión de que probabilidad existe de que una partícula medida en el punto x al tiempo t sea medida en el punto x' al tiempo t' . El interés de tratar este tema tan específico viene de que será utilizado en un argumento del siguiente capítulo. Esto tiene que ser tomado más como un planteamiento teórico, que en alguna medida representa algo real, pero que simplifica las cosas. Sucede que, estrictamente hablando, un punto tiene medida cero de modo que la probabilidad de que se mide un punto es cero. Sin embargo, es posible calcular la amplitud dada por

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} H(t'-t)} | x \rangle \quad (3.78)$$

y es realmente integrando -sobre regiones de medida mayor que cero- la norma al cuadrado de esta función de x', t' que tiene sentido hablar de la probabilidad de propagación de una región a otra de la partícula.

El principio de superposición nos dice que debemos sumar todas las amplitudes de probabilidad de cada uno de los caminos posibles para encontrar la amplitud de probabilidad total de que la partícula vaya de un punto a

otro. Por el principio de incertidumbre sabemos que no es posible saber la trayectoria de la partícula, de modo que aunque la medición inicial y final sean la misma, cada camino tiene su propia amplitud de probabilidad de suceder y de esta forma los caminos entre sí se interfieren.

Por todo lo anterior lo que procede es integrar las amplitudes de probabilidad sobre todas las trayectorias posibles entre los dos puntos. Para esto se divide el intervalo de tiempo $t' - t$ en $n + 1$ partes iguales de largo ϵ . Se tiene

$$t' = (n + 1)\epsilon + t, \quad t_j = j\epsilon + t \quad (3.79)$$

con $j = 0, \dots, n$. Se sabe que se cumple la relación de completitud a cada tiempo t_j :

$$\int dx_j |x_j, t_j\rangle \langle x_j, t_j| = 1 \quad (3.80)$$

Por otro lado, se tiene que

$$\langle x_j, t_j | x_{j-1}, t_{j-1} \rangle = \langle x_j | e^{-\frac{i}{\hbar} H \epsilon} | x_{j-1} \rangle = \langle x_j | x_{j-1} \rangle - \frac{i\epsilon}{\hbar} \langle x_j | H | x_{j-1} \rangle + O(\epsilon^2) \quad (3.81)$$

Antes de continuar se necesita ver que se cumple la relación $\langle p | X | x \rangle = x \langle p | x \rangle$. Si se toma la representación de posiciones

$$\langle p | X | x \rangle = \int_{\Omega} e^{ikx'} x \delta(x - x') dx' = x \int_{\Omega} e^{ikx'} \delta(x - x') dx' = x \langle p | x \rangle \quad (3.82)$$

y análogamente se tiene $\langle p | P | x \rangle = p \langle p | x \rangle$.

Ahora se toma un hamiltoniano de la forma $H(X, P) = f(P) + g(X)$. Entonces se tiene

$$\langle x_j | H | x_{j-1} \rangle = \int dp_j \langle x_j | p_j \rangle \langle p_j | H | x_{j-1} \rangle = \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_j (x_j - x_{j-1})} H(p_j, x_{j-1}) \quad (3.83)$$

de donde se desprende que

$$\langle x_j, t_j | x_{j-1}, t_{j-1} \rangle = \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_j (x_j - x_{j-1})} \left\{ 1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon H(p_j, x_{j-1}) \right\} + O(\epsilon^2) \quad (3.84)$$

$$= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\left\{ \frac{i}{\hbar} p_j (x_j - x_{j-1}) - \frac{i}{\hbar} \epsilon H(p_j, x_{j-1}) \right\}} + O(\epsilon^2). \quad (3.85)$$

Despreciando todos los términos de orden $O(\epsilon^2)$ y tomando los límites para hacer la integración se obtiene finalmente la expresión

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^n dx_j \int \prod_{j=1}^{n+1} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{n+1} (p_j (x_j - x_{j-1}) - H(p_j, x_{j-1}) (t_j - t_{j-1}))} \quad (3.86)$$

que con una notación especial se escribe como

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \int \frac{\mathcal{D}x \mathcal{D}p}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} p \dot{x} - H(p, x) dt}, \quad (3.87)$$

Si el hamiltoniano es de la forma $H = \frac{1}{2m} P^2 + V(X)$, se puede simplificar esta expresión efectuando las integraciones sobre los momentos usando el cambio de variable $p_j \mapsto p_j - m \frac{\Delta x_j}{\epsilon}$.

$$\int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} (p \Delta x_j - \frac{p_j^2}{2m} \epsilon)} = \frac{1}{N_j} \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{im}{2\hbar} \epsilon \left(\frac{\Delta x_j}{\epsilon} \right)^2} \quad (3.88)$$

en donde se usó $\Delta x := x_j - x_{j-1}$ y además:

$$\frac{1}{N_j} := \int dp_j e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_j^2}{2m} \epsilon}. \quad (3.89)$$

Para este caso la ecuación 3.88 se convierte en

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \frac{1}{N} \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^n dx_j \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{n+1} \frac{m}{2} \left(\frac{\Delta x_j}{\epsilon} \right)^2 \epsilon + V(x) \epsilon} \quad (3.90)$$

$$= \frac{1}{N} \int \frac{\mathcal{D}x}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \quad (3.91)$$

en donde $S[x]$ es la acción clásica y el factor de normalización es :

$$\frac{1}{N} := \int \mathcal{D}p e^{-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} \frac{p^2}{2m} dt}. \quad (3.92)$$

(Este desarrollo puede encontrarse en [13]).

capítulo 4

EL EFECTO TÚNEL

Uno de los efectos mas novedosos predichos por la mecánica cuántica es el llamado efecto túnel, que consiste en la posibilidad de que las partículas atraviesen paredes de potencial mayores a su energía. Matemáticamente esto quiere decir que una función de onda, concentrada en una región del espacio alrededor de un mínimo local de potencial, puede extenderse y trasladarse en cierta medida a otros mínimos locales del potencial atravesando regiones en que la energía potencial es mayor que la energía de la partícula.

En el presente capítulo se presentan varios resultados relacionados a este efecto. Igualmente algunos métodos para encontrar soluciones de la ecuación de Schroedinger para nuevos hamiltonianos, a partir de soluciones conocidas. Por último se trata brevemente algunos aspectos del efecto túnel en varias dimensiones.

§4.1 Algunos Puntos Básicos Sobre el Efecto Túnel

Clásicamente las partículas se representan como puntos moviéndose en el tiempo con posición x y momento p definidos para todo tiempo. Si el potencial considerado es independiente del tiempo, la partícula tiene una energía constante dada por $E = K + V(x)$, en donde la energía cinética es $K = \frac{p^2}{2m}$. Dado que K es no negativa, siempre se cumple que $V(x) \leq E$. Esto implica que las partículas con energía E nunca pueden atravesar por regiones en las que se tenga $E < V(x)$.

Como se verá en esta sección, esta situación es completamente distinta

en la mecánica cuántica. Para empezar, tomemos el caso de una partícula en un potencial constante $V(x) = v$. La ecuación de Schrödinger será

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + v\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t). \quad (4.1)$$

Sus soluciones -que se encuentran usando el método de separación de variables- son:

$$\psi(x, t) = A_1 e^{i(kx - \omega t)} + A_2 e^{i(-kx - \omega t)} \quad (4.2)$$

en donde la variable de separación es la energía, A_1, A_2 son constantes, y se han hecho las sustituciones:

$$k = \sqrt{-\frac{2m(E - v)}{\hbar^2}}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}. \quad (4.3)$$

Los dos términos de esta solución son ondas planas moviéndose. La primera lo hace hacia la dirección positiva y la segunda hacia la negativa. Hablando estrictamente, estas soluciones no corresponden a estados físicos, puesto que su norma al cuadrado no es integrable. Se dice que no son normalizables. Las superposiciones normalizables de estas ondas -llamadas paquetes de ondas-, son las que corresponden a los estados físicos. Estos paquetes se pueden construir con ayuda de la transformada de Fourier:

$$\psi(x, 0) = \int \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk \quad (4.4)$$

en donde $\tilde{\psi}(k)$ es la función que determina el peso de cada onda plana en la superposición. Si esta función se concentra en la región $k > 0$, entonces el paquete estará formado por ondas que se trasladan hacia la dirección positiva y por lo tanto se moverá en esta dirección.

Si el potencial es

$$V(x) = \begin{cases} v & \text{si } x < a \\ v_0 & \text{si } a < x < b \\ v & \text{si } b < x \end{cases}$$

la solución de la ecuación de Schrödinger será

$$\psi(x, t) = \begin{cases} A_{11} e^{i(kx - \omega t)} + A_{12} e^{i(-kx - \omega t)} & \text{si } x < a \\ A_{21} e^{Kx - i\omega t} + A_{22} e^{-Kx - i\omega t} & \text{si } a < x < b \\ A_{31} e^{i(kx - \omega t)} + A_{32} e^{i(-kx - \omega t)} & \text{si } b < x \end{cases}$$

en donde $K = \sqrt{-\frac{2m(E-v_0)}{\hbar^2}}$. Si se tiene que $v_0 > E$ la solución en la región $a < x < b$ al tiempo $t = 0$, será una combinación lineal de exponenciales reales.

Los coeficientes A_{11}, \dots, A_{32} se fijan de acuerdo a la condición de que si $\psi(x, t)$ es una solución de la ecuación de Schrödinger en todo el espacio, entonces debe ser continua y con derivada continua. Esta condición nos da dos ecuaciones en el punto a y otras dos en el punto b en términos de estos coeficientes. Quedan así dos coeficientes libres. Si la situación física estudiada corresponde a tener un paquete localizado en la región izquierda y moviéndose hacia la barrera de potencial, entonces es válido tomar $A_{31} = 0$ puesto que, en principio, no se tiene nada en la región derecha moviéndose hacia la barrera. Con esto sólo un coeficiente queda libre y podemos fijar $A_{11} = 1$. A las cantidades $|A_{12}|^2$ y $|A_{31}|^2$ se les llama respectivamente, coeficiente de reflexión y coeficiente de transmisión ya que la primera es la amplitud de la onda que se refleja y la segunda es la amplitud de la onda que atraviesa el potencial.

En la situación descrita, puede verse que si se tiene un paquete de ondas moviéndose hacia la barrera de potencial, al "chocar" con ésta, alguna parte podrá atravesarla y al llegar al otro lado comenzará a alejarse de la barrera, pues en la región derecha todas las componentes lo hacen. Asimismo, una parte del paquete tenderá a reflejarse después del choque. Esto es una situación radicalmente distinta a la situación clásica puesto que existe una probabilidad de que la partícula pueda atravesar la barrera. Esto es conocido como el efecto túnel.

Tomamos ahora un sistema físico de una partícula cuyo hamiltoniano H no depende del tiempo y tal que su espectro es sólo puntual. Escribimos el problema de valores propios como

$$H\psi_i = E_i\psi_i. \quad (4.5)$$

Sea ψ un estado del sistema, su descomposición en términos de vectores propios del hamiltoniano es

$$\psi(t=0) = \sum_i c_i \psi_i \quad (4.6)$$

en donde los coeficientes de la descomposición del estado en términos de la base de vectores propios son

$$c_i = \int \psi(t=0) \psi_i^*(x) dx. \quad (4.7)$$

Si el estado está completamente localizado en la región R al tiempo $t = 0$ esto quiere decir que se cumple

$$\int_R |\psi(t=0)|^2 dx := p_R = 1 \quad (4.8)$$

en donde p_R es la probabilidad de que la partícula se encuentre en la región R o más exactamente, la probabilidad de que una medición de la posición de la partícula dé un valor en esta región. La evolución de la solución está dada por

$$\psi(x, t) = \sum_i c_i \psi_i e^{-\frac{iE_i t}{\hbar}}. \quad (4.9)$$

Con esto se puede encontrar p_R a cada tiempo t :

$$p_R(t) = \int_R |\psi(x, t)|^2 dx = \sum_{i,j} c_i^* c_j e^{\frac{i}{\hbar}(E_i - E_j)t} \int_R \psi_i^*(x) \psi_j(x) dx. \quad (4.10)$$

Esta función jugará un papel importante en el siguiente capítulo.

Si el potencial de H además cuenta con dos mínimos locales o pozos y si la onda que representa a la partícula está localizada en uno de estos en el momento inicial, después de cierto tiempo habrá evolucionado y se esparcirá. Si después de cierto tiempo la onda se encuentra localizada en su mayoría en el otro pozo, se dice que la partícula ha hecho túnel a través de la barrera de potencial que divide a los dos pozos. Si la forma y el tamaño del paquete se preserva en el proceso, a esto se le llama coherencia. En ocasiones sucede que distintas componentes de la onda hacen el túnel a distintos tiempos, de forma que la onda completa nunca llega a estar en el otro pozo. Para que se hable en términos de efecto túnel tomamos la convención de que al menos la mitad debe llegar a estar fuera del pozo. Es decir, se debe cumplir $p_R(t_0) = \frac{1}{2}$ para algún tiempo t_0 en donde R es el segundo pozo del potencial.

Antes de terminar este punto centramos nuestra atención en los estados físicos llamados estados ligados y en algunas de sus propiedades que son de interés cuando se trata con potenciales con pozos dobles.

Cuando se tiene una solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, que además es normalizable, lo que se tiene es un estado físico que prácticamente no evoluciona, pues lo único que cambia con el tiempo es su fase. A estos estados se les llama estados ligados.

Las condiciones para tener un estado ligado de energía E son:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} U(x) > E, \quad (4.11)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} U(x) > E. \quad (4.12)$$

Ya que esto implica que las soluciones de la ecuación de Schrödinger cumplan

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0, \quad (4.13)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x) = 0 \quad (4.14)$$

y por lo tanto que su norma al cuadrado sea integrable. En efecto, esto puede verse de la siguiente manera. La ecuación de Schrödinger -independiente del tiempo- puede ser escrita como:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = \alpha \{U(x) - E\} \psi(x) \quad (4.15)$$

en donde $\alpha := \frac{2m}{\hbar^2}$. Se sabe que el signo de la segunda derivada de una función esta relacionado con su concavidad o convexidad: si es positivo, la función debe ser convexa, y si es negativo, la función debe ser cóncava. En la ecuación 4.15 puede verse que en las regiones en las que el potencial es mayor que E , el signo de la segunda derivada de la solución es igual al signo de la función, de modo que donde la función es positiva es también convexa y en donde es negativa es cóncava. De esto se desprende que la única forma de que la función sea integrable es que tienda a cero junto con su derivada en las direcciones de más y menos infinito. Las soluciones correspondientes a esta clase de potenciales son llamadas estados ligados.

Los estados ligados de la energía no presentan degeneración, es decir, los espacios propios del hamiltoniano son unidimensionales. Supongase que existen dos funciones de onda ψ_1, ψ_2 que cumplen

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_1(x) + U(x)\psi_1(x) = E\psi_1(x), \quad (4.16)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_2(x) + U(x)\psi_2(x) = E\psi_2(x). \quad (4.17)$$

Entonces, se tiene

$$0 = \psi_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_1 - \psi_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_2 = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \psi_2 \frac{\partial}{\partial x} \psi_1 - \psi_1 \frac{\partial}{\partial x} \psi_2 \right\} \quad (4.18)$$

de donde se deduce que $\psi_2 \frac{\partial}{\partial x} \psi_1 - \psi_1 \frac{\partial}{\partial x} \psi_2 = cte$. Se deduce que esta constante es cero, ya que las dos funciones de onda junto con sus derivadas deben tender

a cero en el infinito. Se tiene que el wronskiano de estas dos funciones es cero y esto implica que las funciones ψ_1, ψ_2 son proporcionales y por lo tanto corresponden al mismo estado.

De lo anterior se desprende que para estados ligados, la función de onda es real, pues sucede que si ψ es solución de la ecuación de Schrödinger entonces también lo es ψ^* para la misma energía, lo que implicaría degeneración si no fuera real.

§4.2 Nuevas Soluciones para la Ecuación de Schrödinger

El número de potenciales para los que se tiene un conjunto completo de soluciones de la ecuación de Schrödinger es relativamente bajo. Existen, sin embargo, métodos para generar conjuntos completos de soluciones para nuevos hamiltonianos sin necesidad de resolverlos. Antes de exponer estos métodos redefinimos el potencial $V := \frac{2m}{\hbar^2}U$ y la energía como $e := \frac{2m}{\hbar^2}E$ para simplificar los desarrollos. La ecuación de valores propios se escribe como

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_i + \{e_i - V\} \varphi_i = 0. \quad (4.19)$$

Si bien es cierto que estos métodos no tienen que ver necesariamente con el efecto túnel, si son de utilidad para contar con más problemas resueltos en que aplicar los resultados del punto anterior y en general, contar con nuevas soluciones a la ecuación de Schrödinger puede tener otras aplicaciones.

El primer método se basa en aplicar una transformación a las soluciones del problema de valores propios de un hamiltoniano H (Al respecto puede verse [1]). Como se demuestra más adelante, las soluciones de H una vez transformadas son soluciones de un nuevo hamiltoniano del cual proporcionamos su forma explícita en términos de H . Sea $\{\varphi_i\}$ el conjunto completo de soluciones de este hamiltoniano y $\{e_i\}$ el espectro puntual, en los que se tiene que

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} c_i \quad (4.20)$$

con $c \in \mathbb{R}^+$, es decir, la base de vectores propios es ortogonal pero no ortonormal. Además, se fija la siguiente notación:

$$H_0^x := -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (4.21)$$

para representar al hamiltoniano original en la representación de la posición x .

Para obtener el nuevo hamiltoniano, se forma una lista auxiliar de funciones $\{\phi_i\}$, la cual sólo debe diferir en un número finito de entradas de la lista de funciones propias. Esta nueva lista se puede obtener de tres formas distintas a partir de variar la lista de funciones propias. La primera es multiplicando las entradas por constantes

$$\alpha_i = \sqrt{\frac{C_i}{c_i}} \quad (4.22)$$

en donde $C_i \in \mathbb{R}^+$. La segunda es eliminando una función (en cuyo caso por motivos prácticos se le sustituye por la constante cero). En tercer lugar, aumentando nuevas funciones $f(x)$ que no estén en L_μ^2 , pero que sean soluciones de la ecuación 4.19 para un valor e no incluido en el espectro del hamiltoniano original y asintóticamente cero en la dirección negativa

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) = 0. \quad (4.23)$$

En este caso -por motivos prácticos- lo que se hace es reacomodar los índices de la sucesión original de funciones propias poniendo tantos términos iguales a cero como funciones se vayan a agregar y colocando en su contraparte en los índices correspondientes a las nuevas funciones.

Se tienen de este forma dos sucesiones de funciones que coinciden de manera exacta en todas las entradas, salvo en un número finito, en un cierto número varían por una constante, y en las demás entradas hay funciones de un lado y ceros del otro. Por comodidad se escoge un orden en que las entradas distintas correspondan a los primeros n índices.

Cada entrada de la nueva lista tiene asociado un coeficiente. Para las funciones que no se variaron de la lista original este coeficiente es simplemente c_i . A las que se variaron se les pueden asociar parámetros libremente. Esto nos da una lista de coeficientes $\{C_i\}$. Se tiene también una lista de números $\{e_i\}$ en la que aparecen los valores propios de la ecuación correspondiente a cada índice. Se define así la función

$$\Omega(x, y) := \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\phi_i(x)\phi_i(y)}{C_i} - \frac{\varphi_i(x)\varphi_i(y)}{c_i} \quad (4.24)$$

y ahora se resuelve una ecuación integral para encontrar el núcleo de la

transformación

$$K(x, y) = -\Omega(x, y) - \int_{-\infty}^x K(x, z)\Omega(z, y)dz, \quad (4.25)$$

con el que se forma el operador de la transformación de Gelfan-Levitan

$$U(\phi_n) \mapsto \psi_n := \phi_n(x) + \int_{-\infty}^x K(x, y)\phi_n(y)dy. \quad (4.26)$$

Con esto se puede enunciar el siguiente resultado:

Teorema 4.1 *La función ψ_n cumple*

$$\{H_0^x + V'(x)\}\psi_n(x) = e_n\psi_n(x) \quad (4.27)$$

en donde $V'(x) := 2\frac{d}{dx}K(x, x)$. Además, el conjunto de todas las funciones ψ_n es completo.

Demostración. La primera parte se basa en mostrar que en efecto se cumple $\{H_0^x - e_n\}\psi_n(x) = -V'(x)\psi_n(x)$. Substituyendo se obtiene

$$\{H_0^x - e_n\}\psi_n(x) = H_0^x\phi_n(x) + H_0^x \int_{-\infty}^x K(x, y)\phi_n(y)dy - e_n\phi_n - e_n \int_{-\infty}^x K(x, y)\phi_n(y)dy \quad (4.28)$$

en donde el primer término se elimina con el tercero, ya que ψ_n es solución de la ecuación 4.19. De esta forma sólo se tienen que calcular el segundo y el cuarto término. El segundo es igual a

$$H_0^x \int_{-\infty}^x K(x, y)\phi_n(y)dy = -2\phi_n(x)\frac{\partial}{\partial x}K(x, x) \quad (4.29)$$

$$-K(x, x)\frac{\partial}{\partial x}\phi_n(x) + \phi_n(x)\frac{\partial}{\partial y}K(x, y)|_{y=x} + \int_{-\infty}^x H_0^y K(x, y)\phi_n(y)dy. \quad (4.30)$$

El cuarto término es

$$-e_n \int_{-\infty}^x K(x, y)\phi_n(y)dy = - \int_{-\infty}^x K(x, y)H_0^y\phi_n(y)dy \quad (4.31)$$

$$= K(x, x)\frac{\partial}{\partial x}\phi_n(x) - \phi_n(x)\frac{\partial}{\partial y}K(x, y)|_{y=x} - \int_{-\infty}^x \phi_n(y)H_0^y K(x, y)dy. \quad (4.32)$$

La suma de estos dos términos es

$$\{H_0^x - e_n\}\psi_n(x) = -2\phi_n(x)\frac{\partial}{\partial x}K(x, x) + \int_{-\infty}^x \phi_n(y)\{H_0^x - H_0^y\}K(x, y)dy. \quad (4.33)$$

Por otro lado, utilizando la ecuación de Gelfand-Levitan (4.25), se tiene que

$$\{H_0^x - H_0^y\}K(x, y) = 2\Omega(x, y)\frac{\partial}{\partial x}K(x, x) - \int_{-\infty}^x \Omega(z, y)\{H_0^x - H_0^z\}K(x, z)dz. \quad (4.34)$$

Definimos

$$-V'(x)F(x, y) := \{H_0^x - H_0^y\}K(x, y). \quad (4.35)$$

Sustituyendo 4.35 en 4.34 y eliminando términos obtenemos

$$F(x, y) = -\Omega(x, y) - \int_{-\infty}^x F(x, z)\Omega(z, y)dz. \quad (4.36)$$

Nótese que 4.36 es precisamente la ecuación de Gelfand-Levitan, de la que se sabe que sus soluciones son únicas. Por esto se tiene que $F(x, y) = K(x, y)$. Sustituyendo lo anterior en 4.35, obtenemos

$$\{H_0^x - H_0^y\}K(x, y) = -V'(x)K(x, y). \quad (4.37)$$

Finalmente se tiene

$$\{H_0^x - e_n\}\psi_n(x) = -V'(x)\phi_n(x) + \int_{-\infty}^x V'(x)K(x, y)\phi_n(y)dy \quad (4.38)$$

$$= -V'(x)\{\phi_n(x) - \int_{-\infty}^x K(x, y)\phi_n(y)dy\} \quad (4.39)$$

$$= -V'(x)\psi_n(x). \quad (4.40)$$

Con esto se tiene demostrada la primera parte del teorema, hace falta demostrar que el conjunto de todas las funciones transformadas es completo. Lo que equivale a demostrar que se cumple

$$\sum_n \frac{\psi_n(x)\psi_n(y)}{C_n} = \delta(x - y) \quad (4.41)$$

Además se tiene

$$\sum_n \frac{\psi_n(x)\psi_n(y)}{C_n} = \sum_n \frac{1}{C_n} \{\phi_n(x) + \int_{-\infty}^x K(x, z)\phi_n(z)dz\} \{\phi_n(y) \quad (4.42)$$

$$+ \int_{-\infty}^y K(y, w)\phi_n(w)dw\} \quad (4.43)$$

Por otro lado, puesto que las funciones $\{\varphi_i\}$ son un conjunto completo, se tiene

$$\sum_n \frac{\varphi_n(x)\varphi_n^*(y)}{c_n} = \delta(x-y). \quad (4.44)$$

Dado que ψ debe ser un estado ligado, debe ser real. Sustituyendo a la ecuación 4.24 en la ecuación 4.43 obtenemos

$$= \delta(x-y) + \Omega(x,y) + \int_{-\infty}^x K(x,z) \left\{ \sum_n \frac{\phi_n(z)\phi_n(y)}{C_n} \right\} dz + \quad (4.45)$$

$$\int_{-\infty}^y K(y,w) \left\{ \sum_n \frac{\phi_n(w)\phi_n(x)}{C_n} \right\} dw + \int_{-\infty}^x \int_{-\infty}^y K(x,z)K(y,w) \left\{ \sum_n \frac{\phi_n(w)\phi_n(z)}{C_n} \right\} dw dz. \quad (4.46)$$

Puede mostrarse que todos los términos de esta ecuación se anulan excepto el de la delta de Dirac [1]. Este desarrollo es un poco largo y no implica ninguna dificultad más allá de su extensión, por lo que con esto se concluye la demostración del teorema. ■

Un ejemplo en que se puede aplicar este teorema, es cuando la lista original de funciones propias de un problema se modifica en una entrada correspondiente a una función de norma uno, multiplicada por una constante. En este caso la función Ω está dada por

$$\Omega(x,y) = \frac{\phi_0(x)\phi_0(y)}{\frac{1}{\alpha}} - \frac{\phi_0(x)\phi_0(y)}{1} = (\alpha-1)\phi_0(x)\phi_0(y) \quad (4.47)$$

y la ecuación integral que determina al núcleo es

$$K(x,y) = -(\alpha-1)\phi_0(x)\phi_0(y) - \int_{-\infty}^x K(x,z)(\alpha-1)\phi_0(z)\phi_0(y) dz. \quad (4.48)$$

Para despejar el núcleo es necesario observar que

$$\int_{-\infty}^x K(x,z)\phi_0(y)\phi_0(z) dz = K(x,y) \int_{-\infty}^x \phi_0^2(z) dz, \quad (4.49)$$

puesto que $K(x,w)\phi_0(y) = K(x,y)\phi_0(w)$ como puede verse multiplicando a la ecuación 4.48 por $\phi_0(w)$. La forma final del núcleo es:

$$K(x,y) = \frac{-(\alpha-1)\phi_0(x)\phi_0(y)}{1 + (\alpha-1) \int_{-\infty}^x \phi_0^2(z) dz} \quad (4.50)$$

Con esto se tiene definida la transformación y puede ser aplicada a casos particulares.

Un ejemplo concreto de este método es el siguiente. Tomamos un potencial definido como

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x < -\frac{\pi}{2} \\ 0 & \text{si } -\frac{\pi}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2} \\ \infty & \text{si } \frac{\pi}{2} < x \end{cases}$$

Las soluciones en la región interna son:

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \operatorname{sen}(nx) & \text{para } n \text{ par} \\ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \operatorname{cos}(nx) & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

Nótese que satisfacen las condiciones de frontera: $\varphi_n(\pm\frac{\pi}{2}) = 0$ y que los valores propios son $e_n = n^2$ con $n \in \mathbb{N}$.

Para formar la función Ω , escogemos eliminar el estado $n = 1$ de la lista original de funciones propias para así formar la lista auxiliar. Tenemos así que

$$\Omega(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\phi_i(x)\phi_i(y)}{C_i} - \frac{\varphi_i(x)\varphi_i(y)}{c_i} = -\frac{2}{\pi} \operatorname{cos}(x)\operatorname{cos}(y) \quad (4.51)$$

y el núcleo de la transformación queda como

$$K(x, y) = \frac{-4\operatorname{cos}(x)\operatorname{cos}(y)}{2x - \pi - \operatorname{sin}(2x)}. \quad (4.52)$$

El nuevo potencial es

$$V'(x) = \frac{16x - 8\pi}{(2x - \pi - \operatorname{sin}(2x))^2}. \quad (4.53)$$

Finalmente las nuevas funciones propias son

$$\psi_n = \varphi_n + (-1)^n \frac{2\operatorname{cos}(x)}{2x - \pi - \operatorname{sin}(2x)} \left\{ \frac{\varphi_{n+1}(x)}{n+1} + \frac{\varphi_{n-1}(x)}{n-1} \right\}, \quad n = 2, 3, \dots \quad (4.54)$$

El segundo método para encontrar nuevas soluciones es mediante la transformación de Darboux, que se define como

$$\phi \mapsto \psi := \left\{ \frac{d}{dx} - \sigma(x) \right\} \phi, \quad (4.55)$$

en donde $\sigma(x) := \frac{d}{dx} \ln \phi_0(x)$ y $\phi_0(x)$ es una función propia sin nodos del hamiltoniano original. El nuevo potencial está dado por

$$V(x) := U(x) - 2\sigma'(x). \quad (4.56)$$

Teorema 4.2 (Darboux) Si la función ϕ satisface la ecuación

$$-\phi''(x) + U\phi(x) = \lambda\phi(x), \quad (4.57)$$

entonces la función ψ satisface

$$-\psi'' + V\psi = \lambda\psi. \quad (4.58)$$

La demostración de este teorema se basa simplemente en sustituir la definición de la función ψ en la ecuación 4.58 y ver que el resultado se sigue de que la función ϕ sea efectivamente solución de la ecuación 4.57.[11]

§4.3 Efecto Túnel Multidimensional

El aumentar las dimensiones en el estudio de la mecánica cuántica introduce en principio mayor dificultad para encontrar soluciones de la ecuación de Schrödinger, que se convierte en una ecuación en derivadas parciales. Además introduce nuevos elementos de interés para el estudio del efecto túnel tales como el de los “caminos” seguidos por la partícula en el proceso de túnel. Por otro lado los resultados y métodos sobre el efecto túnel en una dimensión propuestos en las dos secciones anteriores, no son directamente generalizables a los casos de mayores dimensiones. Sólo cuando el potencial permite que la ecuación sea separable se puede reducir el problema a varios grados de libertad unidimensionales independientes. La condición de separabilidad del potencial para dos dimensiones es que cumpla $U(x, y) = U_1(x) + U_2(y)$. Si la ecuación no es separable, entonces se puede recurrir a métodos aproximados como la aproximación semiclásica del método WKB, o bien al formalismo de las integrales de camino de Feynman.

El hecho de que las funciones integrables sean necesariamente acotadas y por lo tanto su norma al cuadrado tenga un máximo, implica que las funciones de onda tengan puntos especiales asociados con estos máximos. El movimiento en el tiempo de estos puntos describe una trayectoria y esto es lo que se conoce como los caminos de las ondas. Existen varias formas de estudiar estos “caminos”, el primero nace del siguiente argumento.

Sea $\psi(x)$ un paquete de ondas dado por

$$\psi(q, 0) = \int \varphi(\alpha) \psi(q, 0, \alpha) d^n \alpha \quad (4.59)$$

donde $q := q_1, \dots, q_n$ son coordenadas generalizadas, $\alpha := \alpha_1, \dots, \alpha_n$ es un conjunto de números cuánticos como pueden ser los momentos en cada dimensión. y en donde φ es una función de peso de la superposición propuesta. Reescribiendo tenemos

$$\psi(q, t) = \int R(\alpha) e^{i\Theta(q, t, \alpha)} d^n \alpha \quad (4.60)$$

con $R(\alpha)$ una función real y positiva con un máximo en $\alpha = \alpha_0$. La condición que da la evolución del punto máximo de la norma de $\psi(q, t)$ es

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \Theta(q, t, \alpha) |_{\alpha=\alpha_0} = 0. \quad (4.61)$$

Si se esta tratando un sistema separable, la energía puede escribirse como la suma de las energías de los distintos grados de libertad independientes del sistema: $E = E_1 + \dots + E_n$. Si en este sistema se tiene un estado construido como superposición de estados con energía definida tenemos que

$$\psi(q_i, t) = \int \varphi(\alpha) e^{i(\theta_1(q_1, \alpha_1) - \frac{iE_1(\alpha_1)t}{\hbar} + \dots + \theta_n(q_n, \alpha_n) - \frac{iE_n(\alpha_n)t}{\hbar})} d^n \alpha \quad (4.62)$$

en donde la función de peso $\varphi(\alpha)$ tiene un máximo único en el punto $\alpha_0 = (\alpha_{01}, \dots, \alpha_{0n})$. La ecuaciones de movimiento del máximo, es decir, las ecuaciones del "camino" de la onda serán

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i} \theta_i(q_i, \alpha_i) - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \alpha_i} E(\alpha_i) t |_{\alpha=\alpha_{0i}} = 0. \quad (4.63)$$

Despejando el tiempo en todas y definiendo $\frac{\partial}{\partial \alpha_i} E(\alpha_i) := \hbar \omega_i$ podemos escribir a las ecuaciones anteriores como

$$\frac{1}{\omega_1} \frac{\partial}{\partial \alpha_1} \theta(q_i, \alpha_1) |_{\alpha=\alpha_{01}} = \dots = \frac{1}{\omega_n} \frac{\partial}{\partial \alpha_n} \theta(q_i, \alpha_n) |_{\alpha=\alpha_{0n}}. \quad (4.64)$$

En las regiones clásicamente no permitidas para la partícula sucede que las funciones $\theta_i(\alpha_i)$ son imaginarias, en cuyo caso es necesario introducir un tiempo también imaginario $i\tau = t$ y reescribir $\theta_i(\alpha_i) = i\varphi_i(\alpha_i)$ para

poder encontrar las ecuaciones análogas a las de las regiones clásicamente permitidas

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i} \varphi(q_i, \alpha_i) - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \alpha_i} E(\alpha_i) \tau |_{\alpha = \alpha_0} = 0. \quad (4.65)$$

Otra forma de tratar el problema de estos caminos cuánticos, es aplicar la aproximación WKB a orden cero, en cuyo caso la función $\psi(q, t) := e^{iS(q, t)}$ debe satisfacer la ecuación de Hamilton-Jacobi

$$\frac{1}{2m} \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{\partial S(q, t)}{\partial q_i} \right\}^2 + V(q) + \frac{\partial S(q, t)}{\partial t} = 0. \quad (4.66)$$

Para sistemas separables con energía definida se cumple

$$e^{iS(q, t)} = e^{i(W_1(q_1) + \dots + W_n(q_n) - Et)} \quad (4.67)$$

y la ecuación de Hamilton-Jacobi se escribe como

$$\frac{1}{2m} \sum_{i=1}^n \left\{ \left(\frac{\partial W_i(q_i, t)}{\partial q_i} \right)^2 + V(q) \right\} = \alpha + \gamma_2 + \dots + \gamma_n = E := \gamma_1 \quad (4.68)$$

en donde $\alpha + \gamma_2 + \dots + \gamma_n$ son constantes de separación y $\alpha = \alpha(\gamma)$. Estas aparecen en vista de que cada entrada de la suma del término izquierdo depende de una variable distinta y por lo tanto debe ser constante para que toda la suma sea igual a la energía. De esta forma se encuentran las funciones $W_1(q_1), \dots, W_n(q_n)$.

Ahora se forma un paquete de ondas

$$\Psi(q, t) = \int R(\gamma) e^{iA(\gamma)} e^{i(W - Et)} d\gamma_1 \dots d\gamma_n \quad (4.69)$$

en donde

$$W = W_1(q_1, \gamma_1, \dots, \gamma_n) + W_2(q_2, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \dots + W_n(q_n, \gamma_n). \quad (4.70)$$

Si la función $A(\gamma)$ tiene un máximo en $\gamma = \gamma_0$, análogamente a como se hizo en la ecuación 4.63, las ecuaciones que dan el camino del paquete son

$$\frac{\partial}{\partial \gamma_1} \{W(q_1) - Et\} |_{\gamma = \gamma_0} = - \frac{\partial A(\gamma)}{\partial \gamma_1} |_{\gamma = \gamma_0} := p_1, \quad (4.71)$$

$$\frac{\partial}{\partial \gamma_i} \{W(q_i)\} |_{\gamma = \gamma_0} = - \frac{\partial A(\gamma)}{\partial \gamma_i} |_{\gamma = \gamma_0} := p_i. \quad (4.72)$$

Cuando el problema tratado no es separable es posible todavía, como se muestra a continuación, encontrar el camino de la onda a partir de ciertas condiciones iniciales. En el capítulo anterior se expuso brevemente el formalismo de las integrales de camino de Feynman, en donde en la ecuación 3.91 se encontró el resultado:

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \frac{1}{N} \int \frac{\mathcal{D}x}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}S[x]} \quad (4.73)$$

que es en cierto sentido una suma generalizada de las amplitudes de probabilidad asociadas a cada trayectoria posible entre dos puntos. Como se usó mas arriba, la parte que más contribuye a la norma de una integral de números complejos es la que corresponde a cuando varía menos la fase. Por otro lado se sabe que las trayectorias clásicas cumplen la condición

$$\delta S = \delta \int_{x_0}^{x_0'} L(x, \dot{x}) dt = 0 \quad (4.74)$$

Esto sugiere que el "camino" de la onda es precisamente la trayectoria clásica.

Sabemos que existen varias formulaciones de la mecánica clásica todas ellas equivalentes, en el sentido de que predicen la misma trayectoria para una partícula, de este modo es perfectamente válido cambiar a una formulación en donde el problema tratado sea mas simple. En especial puede escogerse resolver las ecuaciones de movimiento

$$m \frac{d^2 q}{dt^2} = F(q) := -\frac{\partial V(q)}{\partial q_j} \quad (4.75)$$

para ciertas condiciones iniciales.

Cuando se trata de una región clásicamente prohibida no existe una trayectoria clásica como tal, puesto que la energía resulta ser imaginaria, sin embargo, puede recurrirse nuevamente a redefinir matemáticamente el parámetro temporal como $\tau := it$ para que pueda tener sentido la definición de energía

$$E = K(\dot{q}) + V(q) = -m \frac{d^2 q}{d\tau^2} + V(q). \quad (4.76)$$

Con esto la ecuación de movimiento en la región clasicamente prohibida es

$$-m \frac{dq^2}{d\tau^2} = F(q), \quad (4.77)$$

lo que nuevamente puede ser utilizado para encontrar las trayectorias que corresponden a los "camino" de las ondas.

Como ejemplo tomamos una partícula libre cuya función de onda está dada por

$$\psi(\bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int_{-\infty}^{\infty} N e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\bar{p}-\bar{p}_0}{\sigma}\right)^2} e^{\frac{i(\bar{p}\bar{x}-E(\bar{p})t)}{\hbar}} dp^3 \quad (4.78)$$

en donde $E(\bar{p}) = p^2/2m$. La función de peso del paquete de ondas tiene un máximo único en $\bar{p} = \bar{p}_0$. Las ecuaciones 4.63 que dan las trayectorias se escriben como

$$\frac{\partial}{\partial p_i} \bar{p} \cdot \bar{x} - \frac{\partial}{\partial p_i} E(\bar{p})t \Big|_{\bar{p}=\bar{p}_0} = 0, \quad (4.79)$$

es decir,

$$\bar{x} = \frac{\bar{p}_0}{m} t. \quad (4.80)$$

Que son precisamente las ecuaciones de una partícula libre en la mecánica clásica situada en el origen al tiempo $t = 0$.

capítulo 5

EL EFECTO TÚNEL EN ESPACIOS NO SIMPLEMENTE CONEXOS

Durante mucho tiempo la topología y la física teórica fueron dos disciplinas separadas, debido en parte a que salvo en raras excepciones se suponía que los espacios tratados eran euclidianos. En las últimas tres décadas esta situación ha cambiado debido a que los espacios de interés para la física teórica se han diversificado al punto que las ideas topológicas han cobrado importancia. Es en este contexto en donde cabe preguntarse sobre cuál es la influencia de la topología del espacio en la mecánica cuántica y específicamente en el efecto túnel. Esto es sin duda un tema muy amplio, el objetivo de este quinto capítulo es explorar mediante ejemplos esta relación. En especial se pretende aprender si una propiedad global del espacio como la de no ser simplemente conexo, puede influir en fenómenos locales como por ejemplo el tiempo que un paquete de ondas situado en un pozo de potencial tarda en hacer túnel, es decir, en escapar de la región del pozo.

En el primer punto de este capítulo se dan algunas definiciones necesarias de topología y geometría, se construyen los espacios de interés en este trabajo y se da la forma de la ecuación de Schrödinger en estos mismos espacios. En el segundo se compara el efecto túnel en el círculo, que es el ejemplo más sencillo de espacio no simplemente conexo. En éste se sitúan dos barreras de potencial rectangulares y se comparan distintas situaciones de túnel variando los anchos y las distancias mínimas entre las barreras, así como los paquetes de ondas. En el tercer punto se estudia el efecto túnel en las topologías del

toro, la botella de Klein y el espacio proyectivo.

El método usado en este capítulo es distinto al de los capítulos anteriores, en los que se han expuesto principios y resultados generales que han sido demostrados o bien cuya validez ha sido sugerida. El trabajo aquí presentado se asemeja más a un estudio experimental, puesto que se toman topologías determinadas en las que se encuentran ejemplos de los que se extraen resultados particulares. Esto nos permite en principio inferir un cierto comportamiento en general. Para obtener estos ejemplos explícitos se ha hecho uso de programas realizados en MAPLE, los cuales se presentan al final de la tesis.

§5.1 Preliminares Geométricos y Topológicos

Antes de construir los espacios usados en este capítulo es conveniente recordar algunos conceptos importantes de topología y de geometría riemanniana. La exposición hecha en este punto no pretende abarcar estos temas, sino sólo hacer un breve repaso de sus puntos básicos que son de importancia en este trabajo. (Esta exposición está basada principalmente en [4][16]).

Definición 5.1 Sea X un conjunto y $P(X)$ el conjunto de todos los subconjuntos posibles de X . Una clase de subconjuntos $T \subseteq P(X)$ es una topología de X si cumple que el vacío y el total están en él, y que si dada una sucesión cualquiera de subconjuntos pertenecientes a T dada por $\{A_i\}$, se cumplen

$$\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in T \text{ y } \bigcap_{i=1}^n A_i \in T. \quad (5.1)$$

La pareja (X, T) es un espacio topológico. Los elementos de T se llaman abiertos y sus complementos se llaman cerrados.

Sean (X, T) , (Y, U) dos espacios topológicos. La función $f : X \mapsto Y$ se dice continua si la imagen inversa de cualquier abierto en Y es un abierto en X . Si una función continua también tiene inversa continua se le llama un homeomorfismo entre su dominio y su imagen. Dos espacios topológicos son homeomorfos si existe un homeomorfismo entre los dos.

Un espacio topológico X es conexo si los únicos subconjuntos de su topología que son abiertos y cerrados al mismo tiempo son el vacío y el total. Se dice que X es conexo por trayectorias si para toda pareja de puntos p_0, p_1 existe una función continua $\gamma : [0, 1] \mapsto X$ cuya imagen los une, es

decir $\gamma(0) = p_0$, $\gamma(1) = p_1$. Cuando las trayectorias γ inician y terminan en el mismo punto se les llama lazos.

Definición 5.2 Una variedad diferenciable de dimensión n es un conjunto M y una familia de mapeos inyectivos $x_\alpha : U_\alpha \subset \mathbb{R}^n \mapsto M$ con U_α abierto de \mathbb{R}^n , tales que:

- i) $\cup_\alpha x_\alpha(U_\alpha) = M$
- ii) $\forall \alpha, \beta$ con $x_\alpha(U_\alpha) \cap x_\beta(U_\beta) = W \neq \emptyset$, los conjuntos $x_\alpha^{-1}(W)$ y $x_\beta^{-1}(W)$ son abiertos en \mathbb{R}^n y los mapeos $x_\beta^{-1} \circ x_\alpha$ son diferenciables (C^∞).
- iii) La familia $\{(U_\alpha, x_\alpha)\}$ es maximal respecto de las propiedades i) y ii).

A una familia $\{(U_\alpha, x_\alpha)\}$ que satisfaga i) y ii) se le llama una estructura diferenciable de M y se dice que forma un atlas de la variedad. A los mapeos del atlas se les llama cartas. El atlas induce una topología en M si se define a los abiertos como los subconjuntos A de M que cumplen que $x_\alpha^{-1}(A \cap x_\alpha(U_\alpha))$ es abierto en \mathbb{R}^n para todo α .

Sea R una región de la variedad M y γ_1, γ_2 dos lazos cuya imagen esté contenida en R . Se dice que estos dos lazos son homotópicos en R si existe una función continua $H : [0, 1] \times [0, 1] \mapsto R$ tal que

$$H(0, t) = \gamma_1(t), \quad H(1, t) = \gamma_2(t) \quad 0 \leq t \leq 1, \quad (5.2)$$

$$H(s, 0) = H(s, 1) \quad 0 \leq s \leq 1. \quad (5.3)$$

Definición 5.3 Una variedad M conexa se dice simplemente conexa si se cumple que cualquier lazo es homotópico a un punto del espacio.

Sean M, M' dos variedades, una función $f : M \mapsto M'$ es de clase C^k en $p \in M$ si $\exists x_\alpha, x_\beta$ tales que $x_\beta^{-1} \circ f \circ x_\alpha : U_\alpha \subset \mathbb{R}^n \mapsto U_\beta \subset \mathbb{R}^m$ es de clase C^k , en donde U_α es una vecindad de p y U_β es una vecindad de $f(p)$. Dado que todos los cambios de cartas son C^∞ , el que f sea C^k no depende de la elección de dichas cartas.

Sea \mathcal{F} el conjunto de todas las funciones $f : M \mapsto \mathbb{R}$ que son de clase C^∞ . Un vector tangente v en $p \in M$ es un mapeo $v : \mathcal{F} \mapsto \mathbb{R}$ que cumple:

- i) $v(af + bg) = av(f) + bv(g), \forall f, g \in \mathcal{F}, a, b \in \mathbb{R}$,
- ii) $v(fg) = f(p)v(g) + g(p)v(f)$.

El conjunto de todos los vectores tangentes en el punto p forman un espacio vectorial V_p de dimensión igual a la dimensión de la variedad M .

Un campo vectorial es una función que asigna a cada punto de la variedad un vector de su espacio tangente. Se dice que un campo vectorial v es suave (C^∞) si para toda $f \in \mathcal{F}$ se tiene que $v(f)$ es de clase C^∞ . También es posible formar campos de vectores duales w . Estos se dicen C^∞ si la función $w(v)$ es C^∞ para todo campo vectorial suave.

Sea V un espacio vectorial de dimensión n . Un tensor de tipo (k, l) sobre V es un mapeo multilineal

$$T : V' \times \dots \times V' \times V \times \dots \times V \mapsto \mathbb{R}, \quad (5.4)$$

con k entradas del dual de V y l entradas de V .

Un campo tensorial de tipo (k, l) sobre la variedad M es una función que asigna a cada punto de M un tensor de tipo (k, l) que actúa sobre el espacio tangente en el punto y sobre su dual. Un campo tensorial T de tipo (k, l) es suave (C^∞) si la función $T(w^1, \dots, w^k, v_1, \dots, v_l)$ es suave para todo campo vectorial v_i suave y para todo campo suave de vectores duales w^i . A las funciones $f \in \mathcal{F}$ se les toma como tensores de tipo $(0, 0)$ y se les llama campos escalares. Sea T un tensor de tipo (k, l) , se denota esto como $T_{b_1 \dots b_l}^{a_1 \dots a_k}$. El conjunto de todos los campos tensoriales suaves en la variedad M de tipo (k, l) forma un espacio vectorial denotado por $\mathcal{T}(k, l)$.

Una métrica g es un campo tensorial sobre M de tipo $(0, 2)$ que es simétrico y no degenerado. Esto último quiere decir que si $g(v, v_1) = 0 \forall v_1 \in V_p$ entonces $v = 0$. Si además g es positiva definida, entonces la pareja (M, g) es una variedad riemanniana.

Un operador derivada ∇ en M , es un mapeo que lleva a campos tensoriales suaves de tipo (k, l) en campos tensoriales suaves de tipo $(k, l + 1)$. Si $T_{b_1 \dots b_l}^{a_1 \dots a_k}$ es un tensor, se denota su imagen bajo ∇ como $\nabla_e T_{b_1 \dots b_l}^{a_1 \dots a_k}$. Además los operadores derivada deben cumplir con:

i) Ser lineales, es decir que $\forall A, B \in \mathcal{T}(k, l)$ y $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ se tiene:

$$\nabla_e (\alpha A_{b_1 \dots b_l}^{a_1 \dots a_k} + \beta B_{b_1 \dots b_l}^{a_1 \dots a_k}) = \alpha \nabla_e A_{b_1 \dots b_l}^{a_1 \dots a_k} + \beta \nabla_e B_{b_1 \dots b_l}^{a_1 \dots a_k}. \quad (5.5)$$

ii) La regla de Leibnitz, es decir que $\forall A \in \mathcal{T}(k, l)$ y $\forall B \in \mathcal{T}(k', l')$ se tiene:

$$\nabla_e (A_{b_1 \dots b_l}^{a_1 \dots a_k} B_{d_1 \dots d_{l'}}^{c_1 \dots c_{l'}}) = \nabla_e (A_{b_1 \dots b_l}^{a_1 \dots a_k}) B_{d_1 \dots d_{l'}}^{c_1 \dots c_{l'}} + \nabla_e (B_{d_1 \dots d_{l'}}^{c_1 \dots c_{l'}}) A_{b_1 \dots b_l}^{a_1 \dots a_k}. \quad (5.6)$$

iii) Conmutar con la contracción, es decir, que $\forall A \in \mathcal{T}(k, l)$

$$\nabla_e (A_{b_1 \dots c \dots b_l}^{a_1 \dots c \dots a_k}) = \nabla_e A_{b_1 \dots c \dots b_l}^{a_1 \dots c \dots a_k}. \quad (5.7)$$

iv) Ser consistente con el hecho de que los vectores tangentes actúan como derivadas direccionales sobre los campos escalares, es decir que $\forall f \in \mathcal{F}$ y $\forall t^a \in V_p$ se tenga:

$$t(f) = t^a \nabla_a f. \quad (5.8)$$

v) Ser libre de torsión, es decir que $\forall f \in \mathcal{F}$ se tenga

$$\nabla_a \nabla_b f = \nabla_b \nabla_a f. \quad (5.9)$$

Teorema 5.1 *Dada una métrica g^{ab} en una variedad M , existe una única derivación que es compatible con la métrica, esto es:*

$$\nabla_a g^{bc} = 0 \quad (5.10)$$

(La demostración de este teorema puede verse en [16]).

Nótese que se ha definido tanto a la métrica g^{ab} como a la derivación ∇_c de manera intrínseca en la variedad, esto es, no se ha hecho referencia a las cartas para definir las.

Una vez que se ha hecho este breve repaso de geometría y topología construimos las cuatro variedades diferenciables de interés en este trabajo: el círculo, el toro, la botella de Klein y el espacio proyectivo.

I) Para el círculo (C) tomamos el intervalo $[0, 1] \subset \mathbb{R}$ e identificamos a los extremos $0 \sim 1$. Para dotar a este conjunto de una estructura diferenciable, damos los mapeos inyectivos $\Phi : \mathbb{R} \mapsto C$.

$$\Phi_1(x_1) = \begin{cases} x_1 & \text{si } 0 < x_1 < 1, \end{cases}$$

$$\Phi_2(x_2) = \begin{cases} x_2 & \text{si } 0 \leq x_2 < .3 \\ x_2 + 1 & \text{si } -.3 < x_2 \leq 0. \end{cases}$$

Los cambios de cartas son de clase C^∞ de manera inmediata y la unión de las imágenes de estos dos mapeos es igual a C . Además las imágenes inversas de las intersecciones de las imágenes son abiertas en \mathbb{R} . Esto dota a C de una estructura diferenciable y con esto tenemos que C es en efecto una variedad diferenciable.

Una condición suficiente para que una función $f : C \mapsto \mathbb{R}$ sea de clase C^k en un punto $p \in C$, es que la función $f \circ \Phi_i$ sea de clase C^k en una de las cartas. De esta forma para que f sea C^k en todo C es suficiente que se

cumplan:

- i) que $f(x)$ sea C^k si $0 < x < 1$,
 ii) que f sea C^k en $x = 0$, esto es

$$\lim_{x_2 \rightarrow 0^+} f^{(i)}(x_2) = \lim_{x_2 \rightarrow 0^-} f^{(i)}(x_2 + 1), \quad (5.11)$$

es decir, que $f^{(i)}(0) = f^{(i)}(1)$ en donde el índice i denota el orden de derivación $0 \leq i \leq k$.

II) Para el toro T , tomamos el conjunto $[0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$ e identificamos a los puntos $(x, 0) \sim (x, 1)$, $\forall x \in [0, 1]$ y a los puntos $(0, y) \sim (1, y)$, $\forall y \in [0, 1]$. Los mapeos son los siguientes:

$$\Phi_1(x_1, y_1) = \begin{cases} (x_1, y_1) & \text{si } 0 < x_1 < 1, 0 < y_1 < 1, \end{cases}$$

$$\Phi_2(x_2, y_2) = \begin{cases} (x_2, y_2) & \text{si } 0 < x_2 < 1, 0 \leq y_2 < .3 \\ (x_2, y_2 + 1) & \text{si } 0 < x_2 < 1, -.3 < y_2 \leq 0, \end{cases}$$

$$\Phi_3(x_3, y_3) = \begin{cases} (x_3, y_3) & \text{si } 0 \leq x_3 < .3, 0 < y_3 < 1 \\ (x_3 + 1, y_3) & \text{si } -.3 < x_3 \leq 0, 0 < y_3 < 1, \end{cases}$$

$$\Phi_4(x_4, y_4) = \begin{cases} (x_4, y_4) & \text{si } 0 \leq x_4 < .3, 0 \leq y_4 < .3 \\ (x_4 + 1, y_4) & \text{si } -.3 < x_4 \leq 0, 0 \leq y_4 < .3 \\ (x_4, y_4 + 1) & \text{si } 0 \leq x_4 < .3, -.3 < y_4 \leq 0 \\ (x_4 + 1, y_4 + 1) & \text{si } -.3 < x_4 \leq 0, -.3 < y_4 \leq 0. \end{cases}$$

Análogamente a como se encontraron las condiciones suficientes para que una función f sea de clase C^k en el círculo, se encuentran las condiciones para una función en el toro:

- i) f debe ser C^k en la región $]0, 1[\times]0, 1[$ (en donde se denota a los intervalos abiertos como $]a, b[$ para evitar confusión con los puntos).
 ii) f debe ser C^k en los puntos $(x, 0)$, con $x \in]0, 1[$. Esto se cumple si

$$\lim_{y_2 \rightarrow 0^+} D^k f(x_2, y_2) = \lim_{y_2 \rightarrow 0^-} D^k f(x_2, y_2 + 1), \quad (5.12)$$

en donde

$$D^k f(x, y) := \frac{\partial^{l+m}}{\partial x^l \partial y^m} f(x, y), \quad l + m = k. \quad (5.13)$$

La condición 5.12 se cumple si $D^k f(x_2, 0) = D^k f(x_2, 1)$, con $0 < x_2 < 1$.
 iii) f debe ser C^k en los puntos $(0, y)$, con $y \in]0, 1[$. Esto se cumple si

$$\lim_{x_3 \rightarrow 0^+} D^k f(x_3, y_3) = \lim_{x_3 \rightarrow 0^-} D^k f(x_3 + 1, y_3), \quad (5.14)$$

lo que a su vez se cumple si $D^k f(0, y_3) = D^k f(1, y_3)$, con $0 < y_3 < 1$.
 iv) f debe ser C^k en $(0, 0)$, es decir, se debe cumplir:

$$D^k f(0, 0) = D^k f(0, 1) = D^k f(1, 0) = D^k f(1, 1). \quad (5.15)$$

III) Para la botella de Klein tomamos el conjunto $[0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$ e identificamos a los puntos $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$, $\forall x \in [0, 1]$ y a los puntos $(0, y) \sim (1, y)$, $\forall y \in [0, 1]$. Los mapeos son los siguientes:

$$\begin{aligned} \Phi_1(x_1, y_1) &= \begin{cases} (x_1, y_1) & \text{si } 0 < x_1 < 1, 0 < y_1 < 1, \end{cases} \\ \Phi_2(x_2, y_2) &= \begin{cases} (x_2, y_2) & \text{si } 0 < x_2 < 1, 0 \leq y_2 < .3 \\ (-x_2 + 1, y_2 + 1) & \text{si } 0 < x_2 < 1, -.3 < y_2 \leq 0, \end{cases} \\ \Phi_3(x_3, y_3) &= \begin{cases} (x_3, y_3) & \text{si } 0 \leq x_3 < .3, 0 < y_3 < 1 \\ (x_3 + 1, y_3) & \text{si } -.3 < x_3 \leq 0, 0 < y_3 < 1, \end{cases} \\ \Phi_4(x_4, y_4) &= \begin{cases} (x_4, y_4) & \text{si } 0 \leq x_4 < .3, 0 \leq y_4 < .3 \\ (x_4 + 1, y_4) & \text{si } -.3 < x_4 \leq 0, 0 \leq y_4 < .3 \\ (-x_4 + 1, y_4 + 1) & \text{si } 0 \leq x_4 < .3, -.3 < y_4 \leq 0 \\ (-x_4, y_4 + 1) & \text{si } -.3 < x_4 \leq 0, -.3 < y_4 \leq 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Las condiciones suficientes para que una función f sea de clase C^k en la botella de Klein son:

i) f debe ser C^k en la región $]0, 1[\times]0, 1[$.

ii) f debe ser C^k en los puntos $(x, 0)$, con $x \in]0, 1[$, esto se cumple si:

$$\lim_{y_2 \rightarrow 0^+} D^k f(x_2, y_2) = \lim_{y_2 \rightarrow 0^-} D^k f(-x_2 + 1, y_2 + 1) \quad (5.16)$$

lo que se cumple si $D^k f(x_2, 0) = D^k f(-x_2 + 1, 1)$, con $0 < x_2 < 1$.

iii) f debe ser C^k en los puntos $(0, y)$, con $y \in]0, 1[$, esto se cumple si:

$$\lim_{x_3 \rightarrow 0^+} D^k f(x_3, y_3) = \lim_{x_3 \rightarrow 0^-} D^k f(x_3 + 1, y_3) \quad (5.17)$$

lo que se cumple si $D^k f(0, y_3) = D^k f(1, y_3)$, con $0 < y_3 < 1$.

iv) f debe ser C^k en $(0, 0)$, es decir, se debe cumplir:

$$D^k f(0, 0) = D^k f(0, 1) = D^k f(1, 0) = D^k f(0, 0) \quad (5.18)$$

IV) Para el espacio proyectivo tomamos también el conjunto $[0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$ e identificamos a los puntos $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$, $\forall x \in [0, 1]$ y a los puntos $(0, y) \sim (1, -y + 1)$, $\forall y \in [0, 1]$. Los mapeos son los siguientes:

$$\Phi_1(x_1, y_1) = \begin{cases} (x_1, y_1) & \text{si } 0 < x_1 < 1, 0 < y_1 < 1 \end{cases}$$

$$\Phi_2(x_2, y_2) = \begin{cases} (x_2, y_2) & \text{si } 0 < x_2 < 1, 0 \leq y_2 < .3 \\ (-x_2 + 1, y_2 + 1) & \text{si } 0 < x_2 < 1, -.3 < y_2 \leq 0 \end{cases}$$

$$\Phi_3(x_3, y_3) = \begin{cases} (x_3, y_3) & \text{si } 0 \leq x_3 < .3, 0 < y_3 < 1 \\ (x_3 + 1, -y_3 + 1) & \text{si } -.3 < x_3 \leq 0, 0 < y_3 < 1 \end{cases}$$

Estas cartas cubren al espacio proyectivo salvo a los puntos $(0, 0) \sim (1, 1)$, $(0, 1) \sim (1, 0)$. Puede verse que no es posible dar cartas que cubran estos espacios y que sean composiciones de translaciones y reflexiones de abiertos en \mathbb{R}^2 , como es el caso de todas las cartas dadas anteriormente. Para cubrir estos puntos es necesario "deformar" abiertos de \mathbb{R}^2 . En este trabajo nos limitamos a mencionar la posibilidad de formar estas dos cartas al rededor de estos dos puntos. Existen otras definiciones del espacio proyectivo como aquella en que se le considera formado por los puntos opuestos de una esfera. Es posible dar un atlas a este conjunto y ver que es homeomorfo al espacio aquí definido. (Al respecto puede verse [4]).

Por otro lado, hacemos notar que una carta que cubra sólo a un punto puede ser hecha tan pequeña como se quiera, ésto será importante mas adelante.

Las condiciones suficientes para que una función f sea de clase C^k en el espacio proyectivo son:

i) f debe ser C^k en la región $]0, 1[\times]0, 1[$,

ii) f debe ser C^k en los puntos $(x, 0)$, con $x \in]0, 1[$, esto se cumple si

$$\lim_{y_2 \rightarrow 0^+} D^k f(x_2, y_2) = \lim_{y_2 \rightarrow 0^-} D^k f(-x_2 + 1, y_2 + 1) \quad (5.19)$$

lo que a su vez se cumple si $D^k f(x_2, 0) = D^k f(-x_2 + 1, 1)$, con $0 < x_2 < 1$.

iii) f debe ser C^k en los puntos $(0, y)$, con $y \in]0, 1[$, esto se cumple si:

$$\lim_{x_3 \rightarrow 0^+} D^k f(x_3, y_3) = \lim_{x_3 \rightarrow 0^-} D^k f(x_3 + 1, -y_3 + 1) \quad (5.20)$$

lo que se cumple si $D^k f(0, y_3) = D^k f(1, -y_3 + 1)$, con $0 < y_3 < 1$.

iv) Dado que el atlas dado explícitamente para este espacio no incluye a los puntos $(0, 0) \sim (1, 1)$, $(0, 1) \sim (1, 0)$, no podemos dar las condiciones para que f sea C^k de la misma forma que en los demás puntos. Sin embargo, es posible extender a f de clase C^k definida en $]0, 1[\times]0, 1[$ de manera que la extensión sea también de clase C^k en estos puntos. Por esta razón basta que f sea C^k en los demás puntos del espacio proyectivo.

En los tres atlas dados para los tres espacios, los cambios de cartas son de clase C^∞ de y la unión de las imágenes de los mapeos son iguales a la variedad correspondiente. Además, las imágenes inversas de las intersecciones de los contradominios de los mapeos son abiertas en \mathbb{R}^n . Esto dota a estos espacios de una estructura diferenciable y los convierte en variedades diferenciables.

Una vez contruidos los espacios, el siguiente paso es definir la ecuación de Schrödinger en ellos. Para esto es necesario definir en estos espacios una métrica, para así determinar la derivación del espacio que es compatible con la métrica y con esto poder escribir a esta ecuación como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} g^{ab} \nabla_a \nabla_b \psi(p, t) + V(p) \psi(p, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(p, t), \quad (5.21)$$

en donde los puntos de la variedad se denotan como p , ∇_a es la derivación compatible con la métrica fijada en la variedad, $\psi(p, t)$ es una función $\psi : M \mapsto \mathbb{C}$ y $V(p)$ una función $V : M \mapsto \mathbb{R}$.¹

Una observación importante es que todos los términos de esta ecuación son escalares y por lo tanto no dependen de la elección de sistema coordenado o carta. Por esto están definidos de manera intrínseca en la variedad.

Recordemos que si tomamos al espacio \mathbb{R}^n en el sistema de coordenadas de la función identidad entonces el tensor métrico se escribe como $g^{\mu\nu} = \delta^{\mu\nu}$,

¹Si se tiene un campo vectorial T^a sobre la variedad, puede verse que se cumple

$$\nabla_a T^a = \partial_a T^a + \Gamma^a_{ab} T^b = \sum_\mu \frac{1}{\sqrt{\det g^{\mu\nu}}} \frac{\partial}{\partial x_\mu} (\sqrt{\det g^{\mu\nu}} T^\mu)$$

Por otro lado, se tiene que $g^{ab} \nabla_a \nabla_b f = \nabla_a (g^{ab} \nabla_b f) = \nabla_a T^a$ en donde se toma $T^a = g^{ab} \nabla_b f$. Tomando en cuenta estas dos ecuaciones, el laplaciano generalizado se expresa en una carta como

$$\sum_\mu \frac{1}{\sqrt{\det g^{\mu\nu}}} \frac{\partial}{\partial x_\mu} (\sqrt{\det g^{\mu\nu}} g^{\mu\nu} \nabla_\nu f)$$

(Al respecto puede verse [16, pag.49]).

ESTA
SALA DE LA
BIBLIOTECA

en donde $\mu, \nu = 1, \dots, n$. La derivación compatible con la métrica resulta ser el gradiente. De esta forma la ecuación de Schrödinger en este sistema coordenado es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\delta^{\mu\nu}\nabla_\mu\nabla_\nu\psi(\bar{x}, t) + V(\bar{x})\psi(\bar{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\bar{x}, t) \quad (5.22)$$

con $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, que es precisamente la ecuación de Schrödinger en su forma habitual. Con esto se tiene que la ecuación 5.21 es efectivamente una generalización de la ecuación de Schrödinger para variedades riemannianas distintas de los espacios euclidianos \mathbb{R}^n .

Tomaremos como métrica para cada uno de los espacios construidos a la métrica plana. En el caso del espacio proyectivo es necesario hacer algunas aclaraciones. El que un atlas para este espacio incluya vecindades "deformadas" tiene que ver con el hecho de que no es posible darle la métrica plana a todo el espacio proyectivo. Sin embargo, es posible concentrar la región con métrica no plana tanto como se quiera alrededor de los puntos que no incluye el atlas dado explícitamente. La medida de la región con métrica no plana puede hacerse tender a cero y con esto se puede hacer que el espacio proyectivo tenga métrica plana en todos sus puntos salvo en estos dos mencionados.

El método que habremos de seguir para encontrar las soluciones de la ecuación de Schrödinger es el siguiente. En primer lugar tomaremos la primera carta de cada uno de los atlas dados para las variedades. En estas primeras cartas de los atlas se ha usado el mapeo identidad, de modo que es válido escribir a la derivación compatible con la métrica como el gradiente y por lo tanto resolver a la ecuación de Schrödinger en la forma usual.

En segundo lugar pediremos que las soluciones encontradas sean extendibles a la variedad (es decir a la frontera de $]0, 1[$ en el caso del círculo y a la frontera de $]0, 1[\times]0, 1[$ en el caso de los demás espacios), de forma que sean de clase C^2 en la variedad. Esto nos garantiza que la función extendida sea solución de la ecuación de Schrödinger definida intrínsecamente en la variedad en 5.21. Lo anterior corresponde a resolver la ecuación de Schrödinger como un problema con condiciones de frontera.

Plantear formalmente a la ecuación de Schrödinger en el espacio proyectivo y con la métrica plana ignorando los puntos en donde esta concentrada la región con métrica no plana, implicaría tomar a la ecuación 5.21 con la métrica plana en todo el espacio salvo en una región de medida $\epsilon > 0$ y después tomar a la ecuación con el límite cuando ϵ tiende a cero y ver que

realmente la ecuación se convierte en la ecuación 5.22. Hacer esto requiere herramientas matemáticas que van más allá de los límites de este trabajo. Los argumentos que hacen pensar en que este planteamiento es válido son más bien de carácter físico. El hecho de que la región en donde la ecuación 5.21 tendría métrica no plana tenga medida cero, hace pensar que su influencia sobre el comportamiento de la onda será despreciable, esto es, el paquete prácticamente no pasará por esos puntos. En todo caso ésto es solo una idea intuitiva y en un futuro sería deseable formalizarla.

§5.2 El Efecto Túnel en el Círculo

Como primer ejemplo de espacio no simplemente conexo tomamos por su simplicidad al círculo. Intuitivamente podemos imaginar que el hecho de que dados dos puntos en este espacio, existan dos caminos opuestos que los unan, deberá influir en la forma en que evolucionan los paquetes de onda puesto que esto influye directamente en la interferencia de las componentes del paquete.

Como se explicó en el punto anterior, las condiciones para que la función de onda $\psi(x, t)$ esté bien definida en este espacio y además sea de clase C^2 , son:

$$\psi^{(k)}(0, t) = \psi^{(k)}(1, t), \quad k = 0, 1, 2 \quad (5.23)$$

y que ψ sea de clase C^2 en el intervalo $]0, 1[$.

Dado que nuestro interés en este trabajo es el de encontrar ejemplos que sugieran comportamientos en el proceso de túnel, podemos escoger tomar potenciales rectangulares y constantes en el tiempo para hacer este estudio. El que los potenciales tengan discontinuidades en ciertos puntos, implica que la segunda derivada de las soluciones de la ecuación de Schrödinger es también discontinua en estos puntos. Por esto, las soluciones a la ecuación serán de clase C^2 en todo el espacio menos en estos puntos.

La unidad de longitud en el espacio se escoge igual a la medida de todo el espacio, que denotamos por M . Por otro lado haremos una simplificación en la ecuación de Schrödinger tomando las unidades $\hbar = 1$, $c = 1$ en donde c es la velocidad de la luz en el vacío. En estas unidades la dimensión de tiempo es igual a la dimensión de espacio y la dimensión de energía es $1/\text{longitud}$. Además, fijamos el valor de la masa de forma que podamos escribir a la ecuación de Schrödinger como

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_i + \{e_i - V\} \psi_i = 0, \quad (5.24)$$

en donde se ha tomado una solución de la forma $\Psi_i(x, t) = \psi_i(x)e^{-ieit}$, ya que los potenciales de interés en este trabajo son independientes del tiempo. De esta forma, dado un potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } p_1 = 0 \leq x \leq p_2, & \text{Región I} \\ V_1 & \text{si } p_2 \leq x \leq p_3, & \text{II} \\ 0 & \text{si } p_3 \leq x \leq p_4, & \text{III} \\ V_2 & \text{si } p_4 \leq x \leq p_5, & \text{IV} \\ 0 & \text{si } p_5 \leq x \leq 1 = p_6, & \text{V,} \end{cases}$$

tenemos 5 regiones distintas del espacio y en general la solución será

$$\psi = \begin{cases} \psi_1 = A_1 \cos(\sqrt{e}x) + A_2 \operatorname{sen}(\sqrt{e}x), & \text{I} \\ \psi_2 = \psi_1(p_2) \cosh(\sqrt{V_1 - e}(x - p_2)) + \frac{\psi_1'(p_2)}{\sqrt{V_1 - e}} \operatorname{senh}(\sqrt{V_1 - e}(x - p_2)), & \text{II} \\ \psi_3 = \psi_2(p_3) \cos(\sqrt{e}(x - p_3)) + \frac{\psi_2'(p_3)}{\sqrt{e}} \operatorname{sen}(\sqrt{e}(x - p_3)), & \text{III} \\ \psi_4 = \psi_3(p_4) \cosh(\sqrt{V_2 - e}(x - p_4)) + \frac{\psi_3'(p_4)}{\sqrt{V_2 - e}} \operatorname{senh}(\sqrt{V_2 - e}(x - p_4)), & \text{IV} \\ \psi_5 = \psi_4(p_5) \cos(\sqrt{e}(x - p_5)) + \frac{\psi_4'(p_5)}{\sqrt{e}} \operatorname{sen}(\sqrt{e}(x - p_5)), & \text{V} \end{cases}$$

en donde los coeficientes de las soluciones en las regiones II, ..., V, han sido escogidos de forma que la solución sea continua y con derivada continua en los puntos p_2, \dots, p_5 . Nótese que estos coeficientes dependen linealmente de los coeficientes A_1, A_2 que están sin especificar. Para esto tenemos las condiciones 5.23 que en este caso son

$$A_1 = \psi_4(p_5) \cos(\sqrt{e}(1 - p_5)) + \frac{\psi_4'(p_5)}{\sqrt{e}} \operatorname{sen}(\sqrt{e}(1 - p_5)), \quad (5.25)$$

$$\sqrt{e}A_2 = -\sqrt{e}\psi_4(p_5) \operatorname{sen}(\sqrt{e}(1 - p_5)) + \psi_4'(p_5) \cos(\sqrt{e}(1 - p_5)), \quad (5.26)$$

$$-eA_1 = -e\psi_4(p_5) \cos(\sqrt{e}(1 - p_5)) - \sqrt{e}\psi_4'(p_5) \operatorname{sen}(\sqrt{e}(1 - p_5)), \quad (5.27)$$

las que resultan ser homogéneas para las variables A_1, A_2 . La tercera de estas ecuaciones es equivalente a la primera. La condición para que sus soluciones sean distintas de cero es que el determinante de la matriz asociada al sistema de estas ecuaciones, se anule. Este determinante es una función de la energía, de manera que sus raíces nos dan los niveles de energía de las soluciones del problema.

Con estos valores de la energía se pueden construir las funciones propias normalizadas del espacio. Por otro lado los paquetes de ondas usados son paquetes gaussianos normalizados dados como

$$g(x) = Ae^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma}\right)^2} \quad (5.28)$$

en donde x_0 es el punto medio del paquete de ondas, A es el coeficiente de normalización y σ es el ancho de la distribución.

La proyección del paquete sobre las distintas funciones propias lo descompone en coeficientes de una combinación lineal que reconstruye en cierta medida al paquete. Para descomponerlo en su totalidad haría falta proyectar al paquete sobre el conjunto infinito de los vectores propios que forman la base. Puesto que no es posible hacer esto explícitamente, es necesario contar con criterios que hagan aceptable una descomposición finita del paquete. El primero de estos es:

$$\text{Criterio}_1 := \sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2 > .95 \quad (5.29)$$

en donde n es el número de funciones propias tomadas en la descomposición y los α_i son los coeficientes. Este criterio nos dice qué tanto se han considerado en la descomposición a las componentes de mayor peso y es además la norma del paquete reconstruido como combinación lineal de funciones propias. Debido a que esta norma no es igual a uno, es necesario normalizar esta reconstrucción del paquete.

El otro criterio de interés es el siguiente:

$$\text{Criterio}_2 := \int_{p_3}^{p_4} |G(x)|^2 dx > .99 \quad (5.30)$$

en donde $G(x)$ es el paquete reconstruido ya normalizado y p_3, p_4 son los límites de la región III, que es uno de los pozos del potencial. Este criterio nos dice qué tanto del paquete está en este pozo al tiempo inicial.

Se ha considerado como adecuada la reconstrucción de un paquete en términos de coeficientes cuando el primer criterio este por arriba de 0.95 y el segundo por arriba de 0.99. La razón para fijar estas cantidades es que en los ejemplos desarrollados se observó que mejorar estos criterios implicaba considerar un mayor número de componentes, lo que aumentaba el tiempo de computadora de manera importante pero no afectaba prácticamente los datos obtenidos.

Como se explicó en el capítulo anterior, en la ecuación 4.10, la función:

$$p_R(t) = \int_R |\psi(x, t)|^2 dx = \sum_{i,j} c_i^* c_j e^{\frac{i}{\hbar}(E_i - E_j)t} \int_R \psi_i^*(x) \psi_j(x) dx \quad (5.31)$$

nos dice qué tanto del paquete permanece en la región III al tiempo t . Con ayuda de esta función hacemos la siguiente definición.

Definición 5.4 *El tiempo de túnel es el menor tiempo en que esta función se hace igual a un medio.*

Es posible distinguir un periodo entre los máximos de la gráfica de esta función al que llamamos período de túnel. Nuestro interés será encontrar relaciones entre el tiempo de túnel, el período de paquetes gaussianos situados en pozos de potencial y los potenciales rectangulares que encierren al paquete.

Un estudio exhaustivo del círculo con potenciales cuadrados implicaría tomar 6 parámetros distintos:

- 1) Proporción entre los anchos de las barreras
- 2) Suma de los anchos de las barreras
- 3) Proporción entre las alturas de las barreras
- 4) Suma de las alturas de las barreras
- 5) Distancia entre las barreras
- 6) Ancho del paquete gaussiano

Describir las variaciones del tiempo de túnel y del período de túnel en función de todos ellos es algo que requiere un tiempo de computadora considerablemente mayor al disponible para la realización de este trabajo. Debido a esto escogemos fijar la altura de las barreras como:

$$a_{barreras} = \frac{10}{M} \quad (5.32)$$

y nos concentramos en examinar con ejemplos los parámetros restantes.

En las tablas 1 a 10 y figuras 1 a 12 que aparecen al final de este capítulo, se presentan los valores escogidos para estos parámetros, así como los resultados obtenidos.

En las figuras 10 y 11 podemos ver que en general se cumple que para los distintos potenciales, el tiempo de túnel de los paquetes es mayor si el paquete se hace más ancho. Esto coincide perfectamente con lo esperado, pues por el principio de incertidumbre sabemos que entre más angosta sea una función de onda -y con esto se tenga mayor certidumbre en su posición-, mayor es la incertidumbre en su momento y por lo tanto en su energía. El resultado de esto es que los paquetes angostos se extiendan más rápido que los anchos. En los ejemplos estudiados no fué posible distinguir diferencias entre los periodos de túnel de los paquetes con distintos anchos y por esta razón se no se toma en cuenta este parámetro en los datos reportados para periodos de túnel.

Como puede verse en las figuras 1 a 6, el tiempo de túnel disminuye cuando aumenta la suma de los anchos de las barreras, contrariamente a lo que podría esperarse, barreras más anchas no contienen al paquete dentro del pozo de potencial mejor que las barreras angostas. Esta observación resulta válida con todos los valores tomados de los demás parámetros lo que hace pensar que se pueda cumplir en casos más generales.

El aumento de los anchos de las barreras también tiene efectos importantes sobre el periodo de túnel. Como puede verse en las figuras 7 a 9 y 12, entre mayor es la suma de los anchos de las barreras, mayor es el periodo de túnel. Puede pensarse en principio que existe una contradicción entre este hecho y el que el tiempo de túnel disminuya conforme aumenta el ancho de las barreras, sin embargo, esto puede explicarse recordando que el tiempo de túnel nos dice cuánto tiempo pasa para que la mitad del paquete salga del pozo de potencial y por otro lado el periodo nos dice cada cuánto en buena medida el paquete se reconstruye en el pozo de potencial. De esta forma tenemos que lo que sucede es que si aumentamos los anchos de las barreras podemos decir que la interferencia es mayor puesto que los paquetes se esparcen más rápido y tardan mayor tiempo en reconstruirse en el pozo original.

Por otro lado la variación de la proporción entre las barreras no parece ser un factor importante en el tiempo de túnel como puede verse en las figuras 1 a 6. Sin embargo, esto sí influye en el periodo de túnel. En las figuras 7 a 9 puede verse que hay una cierta disminución del periodo conforme aumenta la proporción entre las barreras. Esto hace pensar que la evolución de las componentes es más uniforme entre más delgada hacemos a una de las barreras aunque la suma de los anchos se mantenga igual.

En las figuras 10 y 11 podemos ver que cuando se aumenta la distancia entre las barreras, también aumentan los tiempos de túnel. Esto se debe a que las barreras se encuentran más lejos del paquete y éste tarda más en alcanzarlas y salir del pozo de potencial. Los periodos de túnel tienden también a aumentar cuando se aumenta la distancia entre las barreras. Esto se puede explicar recordando lo dicho en el punto uno del capítulo cuatro en cuanto a que cuando un paquete de ondas choca con una barrera de potencial, parte del paquete atraviesa y parte se refleja. La parte del paquete que se refleja, se dirige hacia la otra barrera y así sucesivamente hasta que sale del pozo. Cuando las barreras están más alejadas es de esperarse que este proceso dure mayor tiempo y esto aumente el tiempo en que el paquete sale en su mayoría del pozo del potencial. Como consecuencia inmediata esto

aumenta el periodo túnel.

§5.3 El Efecto Túnel en Tres Espacios No Simplemente Conexos

En el primer punto de este capítulo se construyeron tres distintas variedades riemannianas, éstas fueron el toro, la botella de Klein y el espacio proyectivo. Nuestro interés ahora es estudiar posibles diferencias en el efecto túnel debidas a la topología de estos espacios. Nuevamente el enfoque tomado es el de considerar ejemplos que indiquen posibles reglas generales.

Como se explicó en el primer punto de este capítulo, la forma de resolver la ecuación de Schrödinger en cada una de las variedades, será la de resolverla en $]0, 1[\times]0, 1[$ tomando la carta identidad, y después pedir condiciones de frontera de acuerdo a la variedad de que se trate. Al igual que en el punto anterior se toman hamiltonianos que permitan hacer una separación de variables y que además sean constantes por partes. Para esto se escogen potenciales de la forma $V(x, y) = V_x(x) + V_y(y)$, en donde

$$V_x(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } p_1 = 0 \leq x \leq p_2, & I \\ V_1 & \text{si } p_2 \leq x \leq p_3, & II \\ 0 & \text{si } p_3 \leq x \leq p_4, & III \\ V_2 & \text{si } p_4 \leq x \leq p_5, & IV \\ 0 & \text{si } p_5 \leq x \leq 1 = p_6, & V, \end{cases}$$

y análogamente

$$V_y(y) = \begin{cases} 0 & \text{si } p'_1 = 0 \leq y \leq p'_2, & I' \\ V'_1 & \text{si } p'_2 \leq y \leq p'_3, & II' \\ 0 & \text{si } p'_3 \leq y \leq p'_4, & III' \\ V'_2 & \text{si } p'_4 \leq y \leq p'_5, & IV' \\ 0 & \text{si } p'_5 \leq y \leq 1 = p'_6, & V'. \end{cases}$$

(Los números romanos denotan a las regiones en el eje x y y). Lo que nos permite escribir a la ecuación de Schrödinger como:

$$-\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} + V_x(x) - \frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} + V_y(y) = e_x + e_y = e \quad (5.33)$$

en donde la solución propuesta para hacer la separación de variables es $\psi(x, y) = X(x)Y(y)$ y además se han cambiado las unidades de energía análogamente a como se hizo en la ecuación 5.24. La unidad de energía se fija como $\frac{1}{M}$ siendo M^2 el área del espacio tratado.

Con esto tenemos dos ecuaciones de Schrödinger en una dimensión, que corresponden a las variables x y y . La solución general a estas ecuaciones se dió en la página 82, en donde los coeficientes A_1, A_2 se fijan según las condiciones de frontera.

Pasamos ahora a mostrar cuáles son estas condiciones de frontera que deben cumplir las funciones X, Y en cada uno de los espacios, para que la función $\psi(x, y) = X(x)Y(y)$ sea de clase C^2 .

1) En el toro:

Condiciones para la continuidad

Parte de la frontera	Ecuación	Condición que implica
1) $(0, y) \sim (1, y)$	$X(0)Y(y) = X(1)Y(y)$	$\Leftrightarrow X(0) = X(1)$
2) $(x, 0) \sim (x, 1)$	$X(x)Y(0) = X(x)Y(1)$	$\Leftrightarrow Y(0) = Y(1)$

Condiciones para que sea de clase C^1

3) $(0, y) \sim (1, y)$	$X'(0)Y(y) = X'(1)Y(y)$	$\Leftrightarrow X'(0) = X'(1)$
4) $(0, y) \sim (1, y)$	$X(0)Y'(y) = X(1)Y'(y)$	$\Leftrightarrow X(0) = X(1)$
5) $(x, 0) \sim (x, 1)$	$X'(x)Y(0) = X'(x)Y(1)$	$\Leftrightarrow Y(0) = Y(1)$
6) $(x, 0) \sim (x, 1)$	$X(x)Y'(0) = X(x)Y'(1)$	$\Leftrightarrow Y'(0) = Y'(1)$

Condiciones para que sea de clase C^2

7) $(0, y) \sim (1, y)$	$X(0)''Y(y) = X''(1)Y(y)$	$\Leftrightarrow X(0)'' = X''(1)$
8) $(0, y) \sim (1, y)$	$X(0)Y''(y) = X(1)Y''(y)$	$\Leftrightarrow X(0) = X(1)$
9) $(0, y) \sim (1, y)$	$X'(0)Y'(y) = X'(1)Y'(y)$	$\Leftrightarrow X'(0) = X'(1)$
10) $(x, 0) \sim (x, 0)$	$X''(x)Y(0) = X''(x)Y(1)$	$\Leftrightarrow Y(0) = Y(1)$
11) $(x, 0) \sim (x, 0)$	$X(x)Y''(0) = X(x)Y''(1)$	$\Leftrightarrow Y''(0) = Y''(1)$
12) $(x, 0) \sim (x, 0)$	$X'(x)Y'(0) = X'(x)Y'(1)$	$\Leftrightarrow Y'(0) = Y'(1)$

Todas estas se resumen en pedir que se cumplan:

$$D^k X(0) = D^k X(1), \quad D^k Y(0) = D^k Y(1), \quad k = 0, 1, 2. \quad (5.34)$$

Cada una de estas dos condiciones es igual a la condición que se encontró en el punto anterior para las soluciones en el círculo. Además la forma de

la ecuación es la misma, por lo que la forma de las funciones propias en el toro es $\psi(x, y) = X(x)Y(y)$, en donde $X(x)$ y $Y(y)$ son funciones propias del círculo. Si el valor propio correspondiente a una función propia ψ es e , deben existir e_x, e_y que sean valores propios de las funciones X, Y respectivamente en las ecuaciones correspondientes a las variables x, y tales que $e = e_x + e_y$.

II) En la botella de Klein:

Condiciones para la continuidad

Parte de la frontera	Ecuación	Condición que implica
1) $(0, y) \sim (1, y)$	$X(0)Y(y) = X(1)Y(y)$	$\Leftrightarrow X(0) = X(1)$
2) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X(x)Y(0) = X(-x + 1)Y(1)$	$\Leftrightarrow Y(0) = \pm Y(1)^*$

Condiciones para que sea de clase C^1

3) $(0, y) \sim (1, y)$	$X'(0)Y(y) = X'(1)Y(y)$	$\Leftrightarrow X'(0) = X'(1)$
4) $(0, y) \sim (1, y)$	$X(0)Y'(y) = X(1)Y'(y)$	$\Leftrightarrow X(0) = X(1)$
5) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X'(x)Y(0) = X'(-x + 1)Y(1)$	$\Leftrightarrow Y(0) = \pm Y(1)^*$
6) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X(x)Y'(0) = X(-x + 1)Y'(1)$	$\Leftrightarrow Y'(0) = \pm Y'(1)^*$

Condiciones para que sea de clase C^2

7) $(0, y) \sim (1, y)$	$X''(0)Y(y) = X''(1)Y(y)$	$\Leftrightarrow X''(0) = X''(1)$
8) $(0, y) \sim (1, y)$	$X(0)Y''(y) = X(1)Y''(y)$	$\Leftrightarrow X(0) = X(1)$
9) $(0, y) \sim (1, y)$	$X'(0)Y'(y) = X'(1)Y'(y)$	$\Leftrightarrow X'(0) = X'(1)$
10) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X''(x)Y(0) = X''(-x + 1)Y(1)$	$\Leftrightarrow Y(0) = \pm Y(1)^*$
11) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X(x)Y''(0) = X(-x + 1)Y''(1)$	$\Leftrightarrow Y''(0) = \pm Y''(1)^*$
12) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X'(x)Y'(0) = X'(-x + 1)Y'(1)$	$\Leftrightarrow Y'(0) = \pm Y'(1)^*$

Las condiciones en las que aparece el símbolo * implican también que la función X debe ser par o impar respecto al punto $\frac{1}{2}$. Si $X(x)$ es par entonces las ecuaciones 2, 5, 10 se cumplen sólo si se tiene $Y(0) = Y(1)$, las ecuaciones 6, 12 se cumplen sólo si $Y'(0) = Y'(1)$ y la ecuación 11 se cumple sólo si $Y''(0) = Y''(1)$.

Si $X(x)$ es impar, las ecuaciones 2, 5, 10 se cumplen sólo si $Y(0) = -Y(1)$, las ecuaciones 6, 12 se cumplen sólo si $Y'(0) = -Y'(1)$ y la ecuación 11 se cumple sólo si $Y''(0) = -Y''(1)$.

En resumen, debe cumplirse siempre

$$D^k X(0) = D^k X(1), \quad k = 0, 1, 2. \quad (5.35)$$

Además X debe ser par o impar respecto del eje $\frac{1}{2}$. Si es par entonces se debe cumplir:

$$D^k Y(0) = D^k Y(1), \quad k = 0, 1, 2. \quad (5.36)$$

Y si es impar entonces se debe cumplir:

$$D^k Y(0) = -D^k Y(1), \quad k = 0, 1, 2. \quad (5.37)$$

Denotamos con un subíndice p o i si la función es par o impar y con un supraíndice s o a , si cumple las condiciones de frontera "simétricas" como la ecuación 5.36 o las "antisimétricas" como en la ecuación 5.37. Se tiene así que la función $\psi(x, y)$ debe ser de una de estas dos formas:

$$\psi(x, y) = X_p^s Y^s \quad \text{ó} \quad \psi(x, y) = X_i^a Y^a \quad (5.38)$$

Las condiciones para la función X son las mismas condiciones para una solución en el círculo, sin embargo, el hecho de que X deba ser par o impar impone la restricción de ser pares o impares sobre los potenciales que podemos tomar. Dado que nos interesan potenciales con pozos dobles, tomaremos potenciales con barreras rectangulares equidistantes al punto $\frac{1}{2}$ y de iguales dimensiones de ancho y alto.

III) En el espacio proyectivo:

Condiciones para la continuidad

Parte de la frontera	Ecuación	Condición que implica
1) $(0, y) \sim (1, -y + 1)$	$X(0)Y(y) = X(1)Y(-y + 1)$	$\Leftrightarrow X(0) = \pm X(1)$
2) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X(x)Y(0) = X(-x + 1)Y(1)$	$\Leftrightarrow Y(0) = \pm Y(1)$

Condiciones para que sea de clase C^1

3) $(0, y) \sim (1, -y + 1)$	$X'(0)Y(y) = X'(1)Y(-y + 1)$	$\Leftrightarrow X'(0) = \pm X'(1)$
4) $(0, y) \sim (1, -y + 1)$	$X(0)Y'(y) = X(1)Y'(-y + 1)$	$\Leftrightarrow X(0) = \pm X(1)$
5) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X'(x)Y(0) = X'(-x + 1)Y(1)$	$\Leftrightarrow Y(0) = \pm Y(1)$
6) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X(x)Y'(0) = X(-x + 1)Y'(1)$	$\Leftrightarrow Y'(0) = \pm Y'(1)$

Condiciones para que sea de clase C^2

7) $(0, y) \sim (1, -y + 1)$	$X''(0)Y(y) = X''(1)Y(-y + 1)$	$\Leftrightarrow X''(0) = \pm X''(1)$
8) $(0, y) \sim (1, -y + 1)$	$X(0)Y''(y) = X(1)Y''(-y + 1)$	$\Leftrightarrow X(0) = \pm X(1)$
9) $(0, y) \sim (1, -y + 1)$	$X'(0)Y'(y) = X'(1)Y'(-y + 1)$	$\Leftrightarrow X'(0) = \pm X'(1)$
10) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X''(x)Y(0) = X''(-x + 1)Y(1)$	$\Leftrightarrow Y(0) = \pm Y(1)$
11) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X(x)Y''(0) = X(-x + 1)Y''(1)$	$\Leftrightarrow Y''(0) = \pm Y''(1)$
12) $(x, 0) \sim (-x + 1, 1)$	$X'(x)Y'(0) = X'(-x + 1)Y'(1)$	$\Leftrightarrow Y'(0) = \pm Y'(1)$

Estas condiciones implican también que necesariamente X y Y deben ser funciones pares o impares. De estas ecuaciones se obtienen las condiciones:

$$Y_p \Rightarrow X(0) = X(1), \quad X'(0) = X'(1), \quad X''(0) = X''(1), \quad (5.39)$$

$$Y_i \Rightarrow X(0) = -X(1), \quad X'(0) = -X'(1), \quad X''(0) = -X''(1), \quad (5.40)$$

$$X_p \Rightarrow Y(0) = Y(1), \quad Y'(0) = Y'(1), \quad X''(0) = X''(1), \quad (5.41)$$

$$X_i \Rightarrow Y(0) = -Y(1), \quad Y'(0) = -Y'(1), \quad X''(0) = -X''(1). \quad (5.42)$$

Con lo que se concluye que las funciones $\psi(x, y) = X(x)Y(y)$ deben ser de alguna de las siguientes formas

$$X_p^s Y_p^s, X_p^s Y_i^s, X_i^s Y_p^s, X_i^s Y_i^s. \quad (5.43)$$

Con esto se obtienen las funciones propias para todos los espacios, así como los niveles de energía. Por otro lado, el paquete de ondas gaussiano en dos dimensiones es

$$g(x, y) = g_x(x)g_y(y) = A_x A_y e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma}\right)^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y-y_0}{\sigma}\right)^2}, \quad (5.44)$$

el cual se normaliza de forma que cumpla

$$\int_0^1 |A_x e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma}\right)^2}|^2 dx = 1, \quad (5.45)$$

$$\int_0^1 |A_y e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y-y_0}{\sigma}\right)^2}|^2 dy = 1. \quad (5.46)$$

La proyección de este paquete sobre una función propia $\psi_{k,l}(x, y) = X_k(x)Y_l(y)$ esta dada por

$$\int_0^1 \int_0^1 g(x, y) \psi_{i,j}(x, y) dx dy = \int_0^1 g_x(x) X_k(x) dx \int_0^1 g_y(y) Y_l(y) dy, \quad (5.47)$$

que son las proyecciones independientes sobre la variable x , que denotamos por α_k y sobre la variable y , que denotamos por β_l , es decir

$$\alpha_k = \int_0^1 g_x(x) X_k(x) dx, \quad (5.48)$$

$$\beta_l = \int_0^1 g_y(y) Y_l(y) dy. \quad (5.49)$$

La evolución del paquete de ondas reconstruido como una combinación lineal de funciones propias -denotado por ϕ -, estará dada por

$$\phi(x, y, t) = \sum_{k,l} \alpha_k \beta_l X_k(x) Y_l(y) e^{-i(e_{x,k} + e_{y,l})t} \quad (5.50)$$

en donde $e_{x,k}$, $e_{y,l}$ son los valores propios de las ecuaciones correspondientes a las funciones X_k , Y_l .

La función que nos dice qué proporción del paquete de ondas $g(x, y)$, se encuentra en el pozo de potencial $[p_3, p_4] \times [p'_3, p'_4]$ al tiempo t , es la siguiente:

$$p_R(t) = \int_{p_3}^{p_4} \int_{p'_3}^{p'_4} |\psi(x, y, t)|^2 dx dy. \quad (5.51)$$

Al igual que en el círculo, definimos el tiempo de túnel como el menor tiempo en el que la función $p_R(t)$ se hace igual a 0.5.

Nuestro interés es encontrar relaciones entre el tiempo de túnel de los paquetes de ondas y los parámetros que caracterizan a los potenciales rectangulares que encierran al paquete de ondas en una determinada variedad y además hacer una comparación de los resultados en las tres variedades.

Nótese que las funciones propias de estos espacios son distintas por lo que en principio no es posible decir si habrá o no diferencias el efecto túnel en los tres espacios tratados.

Los parámetros de los potenciales cuadrados en cada uno de los espacios, son los siguientes:

- 1) Anchos de las barreras de potencial en la variable x .
- 2) Anchos de las barreras de potencial en la variable y .
- 3) Alturas de las barreras de potencial en la variable x .
- 4) Alturas de las barreras de potencial en la variable y .
- 5) Distancia entre las barreras de potencial en la variable x .
- 6) Distancia entre las barreras de potencial en la variable y .
- 7) Ancho del paquete de ondas.

El hecho de que por un lado nos interese comparar situaciones análogas entre los distintos espacios y que por otro lado se tenga que las dos barreras rectangulares de los potenciales en el espacio proyectivo deban tener el mismo alto y ancho, hace que escojamos para los tres espacios, potenciales que cumplan también con esto.

En los ejemplos se han tomado potenciales iguales en las variables x y y y se ha fijado el ancho del paquete como $\sigma = 3M/100$. La razón para fijar un determinado ancho del paquete es que por el principio de incertidumbre sabemos que entre más angosto sea el paquete mayor es la incertidumbre en su energía y por lo tanto se extiende más rápidamente. Debido a que es predecible la forma en que afectan las variaciones de este parámetro al tiempo de túnel es que no se le incluye entre los parámetros a ser variados.

En los ejemplos desarrollados, se han variado los tres parámetros más significativos: el ancho de las barreras, su altura y la distancia mínima que las separa, todos estos en cada uno de los tres espacios estudiados.

Los resultados obtenidos para el tiempo de túnel se presentan en las tablas 11 a 19, en las figuras 13 a 24. Más adelante se presentan las gráficas de la función $p_R(t) - .5$ en todos los casos corridos en los tres espacios. (La función $p_R(t)$ nos dice que proporción del paquete se encuentra en el pozo de potencial R al tiempo t). En todos los casos se ha tomado $M = 10$. En las siguientes tablas aparecen los valores asignados a los tres parámetros de los potenciales y se le asigna un número a las distintas combinaciones. (El parámetro que se varía horizontalmente en las tablas es el ancho de las barreras y el que se varía verticalmente es la altura de las barreras).

Distancia entre las barreras = $4M/10$

	$M/20$	$2M/20$	$3M/20$
$10/M$	1	4	7
$20/M$	2	5	8
$30/M$	3	6	9

Distancia entre las barreras = $4.5M/10$

	$M/20$	$2M/20$	$3M/20$
$10/M$	10	13	16
$20/M$	11	14	17
$30/M$	12	15	18

Distancia entre las barreras = $5M/10$

	$M/20$	$2M/20$	$3M/20$
$10/M$	19	22	25
$20/M$	20	23	26
$30/M$	21	24	27

El resultado que más llama la atención es que en todos los casos estudiados el tiempo de túnel del paquete es prácticamente el mismo en las tres variedades cuando los parámetros que definen a los potenciales son iguales. Sucede que localmente, es decir, en la primera carta de cada uno de los atlas de las variedades -dados en el primer punto de este capítulo-, el que los parámetros de los potenciales sean iguales hace que los potenciales sean los mismos. Los resultados sugieren que el tiempo de túnel de los paquetes no distingue a las distintas topologías de la variedades, aunque se tenga que las funciones propias de cada uno de estos espacios sean distintas.

En el caso del círculo se incluyó además del tiempo de túnel otra cantidad en el análisis hecho, esta fué la de el período de túnel. La razón para no incluir esta cantidad en el análisis de estos tres espacios es que no hay un período distinguible en la función que nos dice que tanto del paquete se encuentra al tiempo t dentro del pozo de potencial en el que se colocó inicialmente al paquete de ondas. (Denotamos a esta función como $p_R(t)$).

En resumen se tiene que en los ejemplos estudiados, si los parámetros de los potenciales son los mismos, las funciones $p_R(t)$ son prácticamente la misma en los tres espacios hasta que el paquete de ondas sale del pozo de potencial. A partir de ese momento estas funciones son totalmente distintas. Esto puede verse observando las gráficas de la función $p_R(t)$ que aparecen al final de la tesis.

Como puede verse en las figuras 13 a 21, en los tres espacios el aumento en la altura de la barreras ocasiona que el tiempo de túnel de los paquetes aumente, lo que se explica recordando que dentro de las barreras de potencial el paquete decae exponencialmente y esto es más pronunciado entre mayor sea la altura de la barrera.

Por otro lado se confirma lo encontrado en el punto anterior en el sentido de que un aumento en el ancho de las barreras ocasiona una disminución en el tiempo de túnel, así mismo se confirma también que entre mayor es la distancia entre las barreras, mayor es el tiempo de túnel.

Observando las gráficas de las funciones p_R correspondientes a los distintos parámetros de los potenciales y comparando en especial las gráficas correspondientes a los mismos parámetros pero a distintos espacios podemos observar que en todos los casos estas son distintas. Con esto se tiene que la topología del espacio sí influye sobre el efecto túnel, pero lo hace una vez que el paquete se ha expandido sobre todo el espacio.

Como se explicó al principio de este capítulo, estos resultados deben ser interpretados como se interpreta a los resultados experimentales en el sentido

de que a partir de ellos se pueden inferir propiedades generales. En este caso el resultado que se infiere es que la propiedad global que significa la topología de la variedad no afecta al fenómeno local que es la salida del paquete de ondas del pozo de potencial. El paquete sólo "siente" los efectos de la topología una vez que se ha extendido por todo el espacio y no antes.

TABLA 1
ANCHOS DE LAS BARRERAS EN FUNCION DE SU SUMA Y SU PROPORCION

PROPORCIONES	SUMA DE LOS ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/10	2M/10	3M/10
1	1/2, 1/2	1, 1	3/2, 3/2
2	1/3, 2/3	2/3, 4/3	1, 2
3	1/4, 3/4	1/2, 3/2	3/4, 9/4

TABLA 2
TIEMPO DE TUNEL DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=3M/100$ EN FUNCION DE LAS
PROPORCIONES ENTRE LAS BARRERAS Y DE SU SUMA
(Db= 4M/10)

PROPORCIONES	SUMA DE LOS ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/10	2M/10	3M/10
1	0.5679	0.4824	0.4022
2	0.6221	0.5052	0.4154
3	0.6175	0.5097	0.4484

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 3
TIEMPO DE TUNEL DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=3M/100$ EN FUNCION DE LAS
PROPORCIONES ENTRE LAS BARRERAS Y DE SU SUMA
(Db= 4.5M/10)

PROPORCIONES	SUMA DE LOS ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/10	2M/10	3M/10
1	0.6704	0.5609	0.4842
2	0.6878	0.6126	0.5065
3	0.7146	0.6067	0.5212

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 4
TIEMPO DE TUNEL DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=3M/100$ EN FUNCION DE LAS
PROPORCIONES ENTRE LAS BARRERAS Y DE SU SUMA
(Db= 5M/10)

PROPORCIONES	SUMA DE LOS ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/10	2M/10	3M/10
1	0.8492	0.6626	0.5628
2	0.8108	0.6876	0.601
3	0.8085	0.6941	0.5901

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 5
TIEMPO DE TUNEL DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=4M/100$ EN FUNCION DE LAS
PROPORCIONES ENTRE LAS BARRERAS Y DE SU SUMA
($Db= 4M/10$)

PROPORCIONES	SUMA DE LOS ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/10	2M/10	3M/10
1	0.7696	0.6565	0.5476
2	0.7703	0.6747	0.5590
3	0.7685	0.6707	0.5652

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 6
TIEMPO DE TUNEL DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=4M/100$ EN FUNCION DE LAS
PROPORCIONES ENTRE LAS BARRERAS Y DE SU SUMA
($Db= 4.5M/10$)

PROPORCIONES	SUMA DE LOS ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/10	2M/10	3M/10
1	0.9394	0.7631	0.6544
2	0.9347	0.7117	0.6672
3	0.9276	0.7773	0.6884

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 7
TIEMPO DE TUNEL DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=4M/100$ EN FUNCION DE LAS
PROPORCIONES ENTRE LAS BARRERAS Y DE SU SUMA
($Db= 5M/10$)

PROPORCIONES	SUMA DE LOS ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/10	2M/10	3M/10
1	0.9803	0.9332	0.7586
2	1.0800	0.9234	0.7775
3	1.0950	0.9094	0.7891

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 8
PERIODO DE TUNEL DE LOS DOS PAQUETES EN FUNCION DE LAS
PROPORCIONES ENTRE LAS BARRERAS Y DE SU SUMA
($Db = 4M/10$)

PROPORCIONES	SUMA DE LOS ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/10	2M/10	3M/10
1	18.75	20	20
2	19	20	20
3	19	20	20

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 9
PERIODO DE TUNEL DE LOS DOS PAQUETES EN FUNCION DE LAS
PROPORCIONES ENTRE LAS BARRERAS Y DE SU SUMA
($Db = 4.5M/10$)

PROPORCIONES	SUMA DE LOS ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/10	2M/10	3M/10
1	20	24	26.66
2	20	22.8	25
3	19.5	22.5	23.4

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 10
PERIODO DE TUNEL DE LOS DOS PAQUETES EN FUNCION DE LAS
PROPORCIONES ENTRE LAS BARRERAS Y DE SU SUMA
($Db = 5M/10$)

PROPORCIONES	SUMA DE LOS ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/10	2M/10	3M/10
1	20	25	30
2	20	24	28
3	19.5	23.4	25

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 11
TIEMPO DE TUNEL EN EL TORO DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=3M/100$ EN
FUNCION DE LA ALTURA Y DEL ANCHO DE LAS BARRERAS
($Db= 4M/10$)

ALTURA	ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/20	2M/20	3M/20
10/M	0.277	0.227	0.181
20/M	0.292	0.271	0.221
30/M	0.309	0.271	0.226

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 12
TIEMPO DE TUNEL EN EL TORO DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=3M/100$ EN
FUNCION DE LA ALTURA Y DEL ANCHO DE LAS BARRERAS
($Db= 4.5M/10$)

ALTURA	ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/20	2M/20	3M/20
10/M	0.336	0.283	0.230
20/M	0.350	0.306	0.268
30/M	0.366	0.315	0.271

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 13
TIEMPO DE TUNEL EN EL TORO DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=3M/100$ EN
FUNCION DE LA ALTURA Y DEL ANCHO DE LAS BARRERAS
($Db= 5M/10$)

ALTURA	ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/20	2M/20	3M/20
10/M	0.386	0.339	0.298
20/M	0.399	0.351	0.305
30/M	0.414	0.360	0.317

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 14
TIEMPO DE TUNEL EN LA BOTELLA DE KLEIN DE UN PAQUETE DE ANCHO
 $\sigma=3M/100$ EN FUNCION DE LA ALTURA Y DEL ANCHO DE LAS BARRERAS
(Db= 4M/10)

ALTURA	ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/20	2M/20	3M/20
10/M	0.282	0.234	0.190
20/M	0.297	0.227	0.221
30/M	0.325	0.271	0.226

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 15
TIEMPO DE TUNEL EN LA BOTELLA DE KLEIN DE UN PAQUETE DE ANCHO
 $\sigma=3M/100$ EN FUNCION DE LA ALTURA Y DEL ANCHO DE LAS BARRERAS
(Db= 4.5M/10)

ALTURA	ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/20	2M/20	3M/20
10/M	0.338	0.287	0.237
20/M	0.352	0.306	0.268
30/M	0.367	0.316	0.270

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 16
TIEMPO DE TUNEL EN LA BOTELLA DE KLEIN DE UN PAQUETE DE ANCHO
 $\sigma=3M/100$ EN FUNCION DE LA ALTURA Y DEL ANCHO DE LAS BARRERAS
(Db= 5M/10)

ALTURA	ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/20	2M/20	3M/20
10/M	0.386	0.339	0.298
20/M	0.398	0.350	0.306
30/M	0.414	0.361	0.317

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 17
TIEMPO DE TUNEL EN EL PROYECTIVO DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=3M/100$
EN FUNCION DE LA ALTURA Y DEL ANCHO DE LAS BARRERAS
($Db= 4M/10$)

ALTURA	ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/20	2M/20	3M/20
10/M	0.289	0.243	0.198
20/M	0.301	0.243	0.220
30/M	0.383	0.271	0.226

Db=Distancia entre las barreras

TABLA 18
TIEMPO DE TUNEL EN EL PROYECTIVO DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=3M/100$
EN FUNCION DE LA ALTURA Y DEL ANCHO DE LAS BARRERAS
($Db= 4.5M/10$)

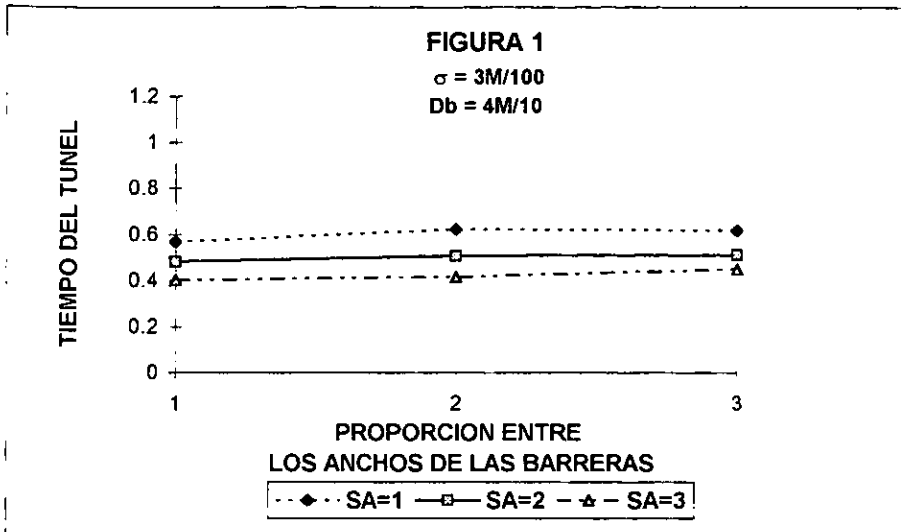
ALTURA	ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/20	2M/20	3M/20
10/M	0.340	0.291	0.244
20/M	0.353	0.306	0.266
30/M	0.369	0.316	0.269

Db=Distancia entre las barreras

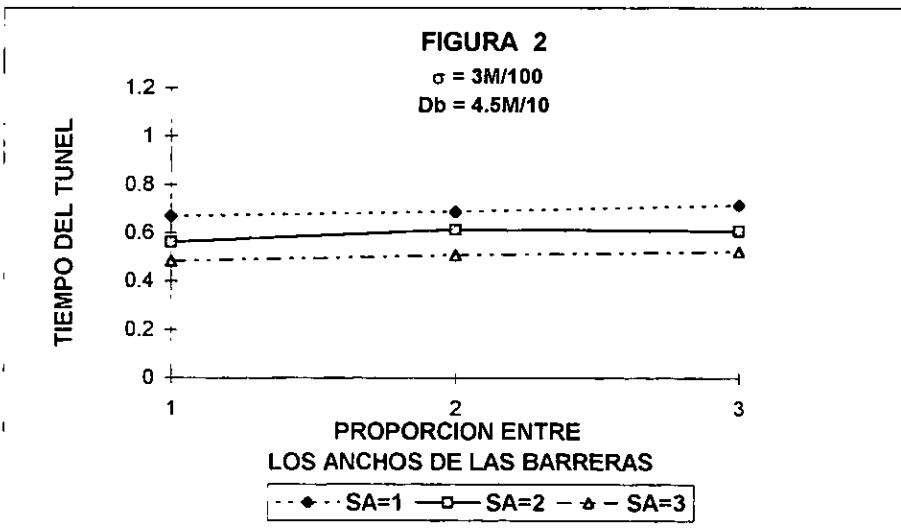
TABLA 19
TIEMPO DE TUNEL EN EL PROYECTIVO DE UN PAQUETE DE ANCHO $\sigma=3M/100$
EN FUNCION DE LA ALTURA Y DEL ANCHO DE LAS BARRERAS
($Db= 5M/10$)

ALTURA	ANCHOS DE LAS BARRERAS		
	M/20	2M/20	3M/20
10/M	0.386	0.340	0.297
20/M	0.398	0.350	0.306
30/M	0.414	0.361	0.317

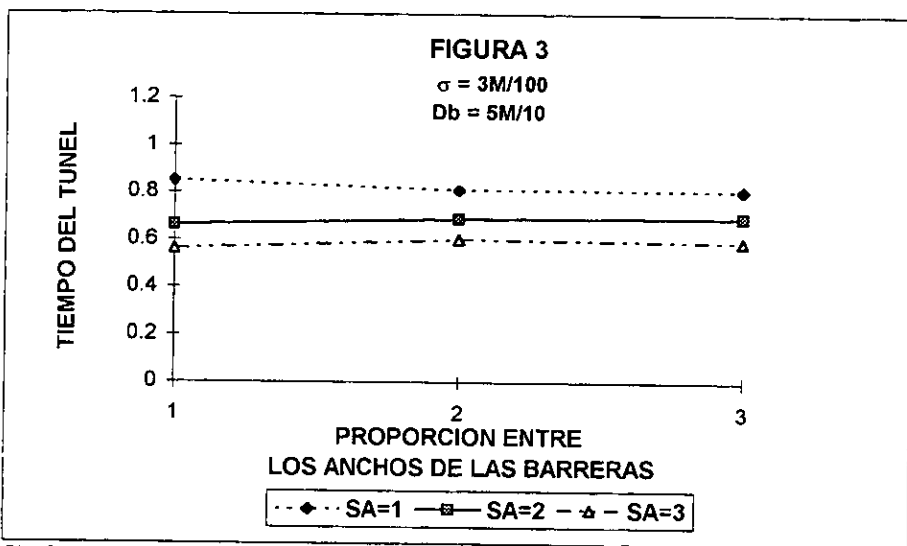
Db=Distancia entre las barreras



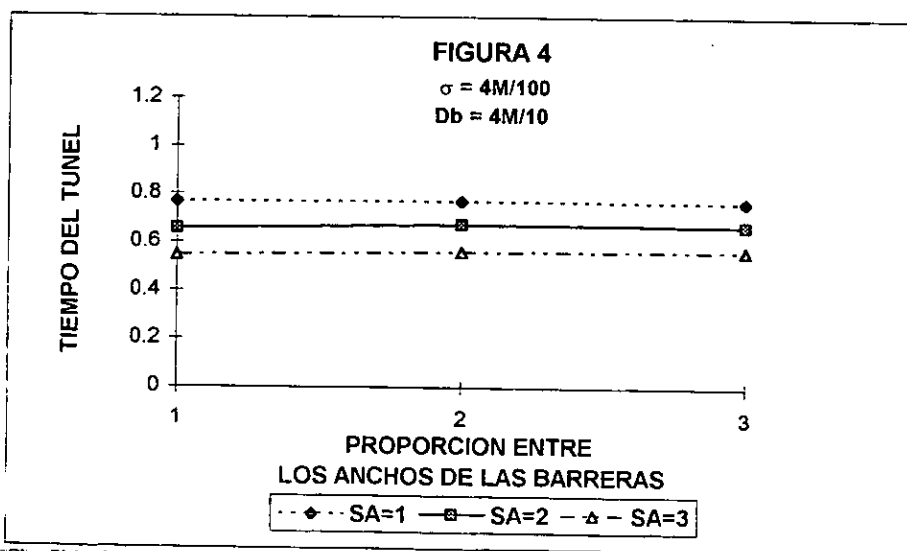
Db = Distancia entre las barreras
 SA = Suma de los anchos de las barreras



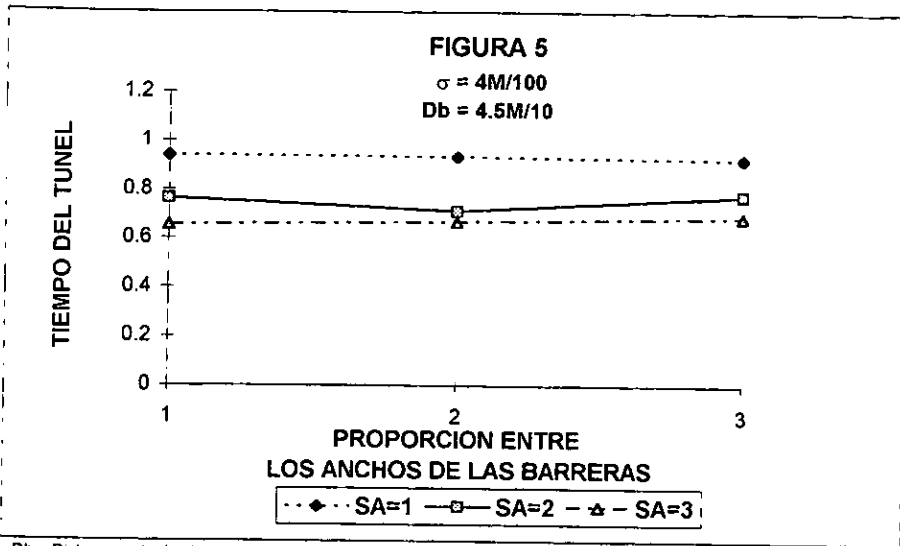
Db = Distancia entre las barreras
 SA = Suma de los anchos de las barreras



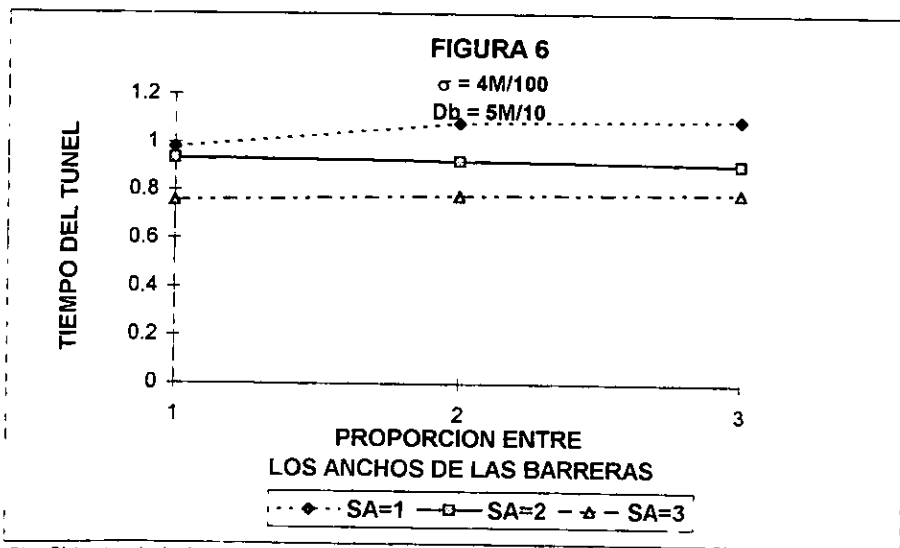
Db = Distancia entre las barreras
SA = Suma de los anchos de las barreras



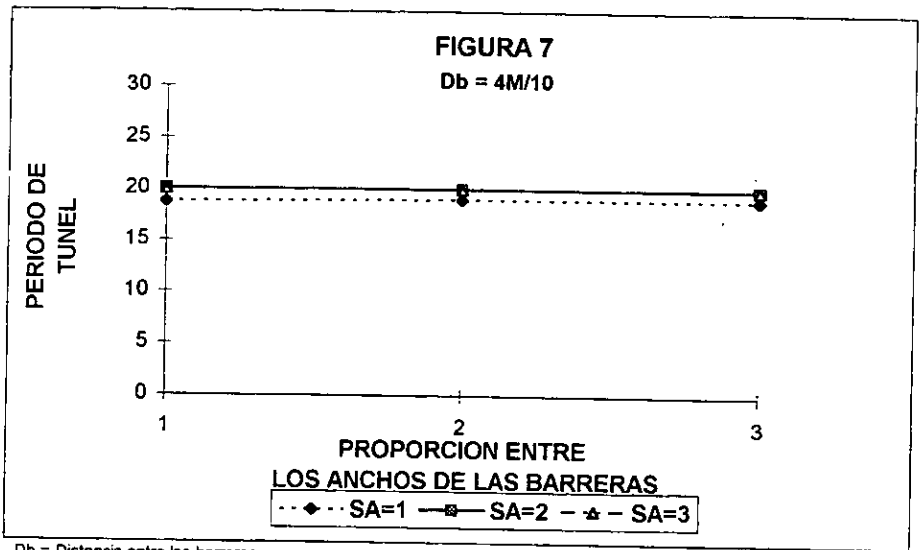
Db = Distancia entre las barreras
SA = Suma de los anchos de las barreras



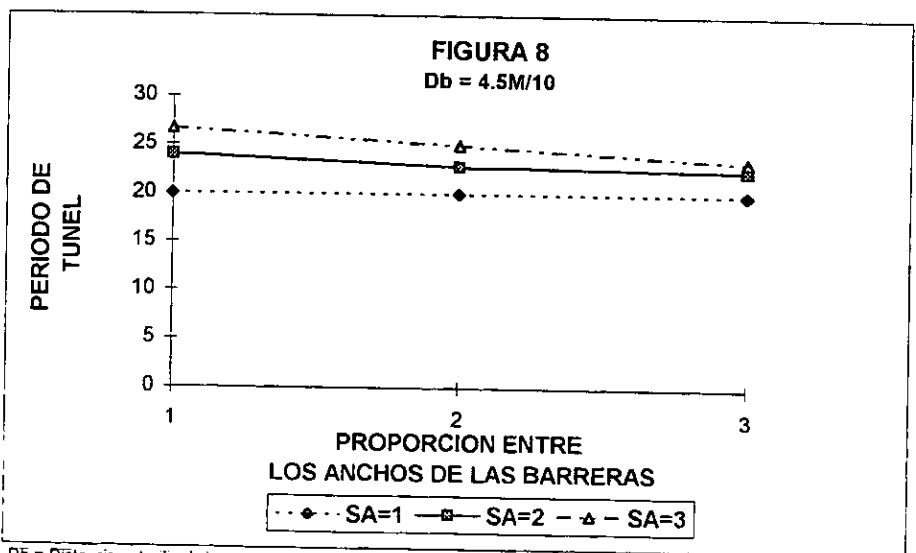
Db = Distancia entre las barreras
 SA = Suma de los anchos de las barreras



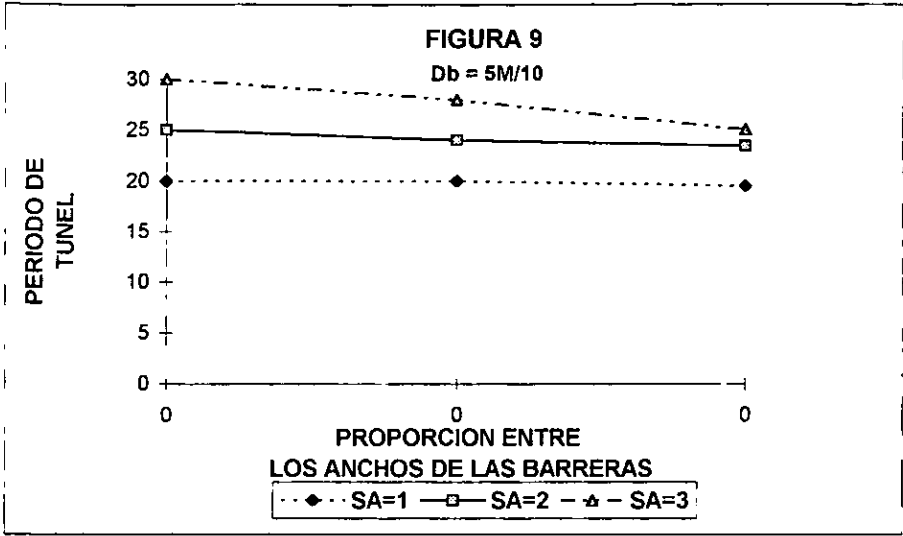
Db = Distancia entre las barreras
 SA = Suma de los anchos de las barreras



Db = Distancia entre las barreras
 SA = Suma de los anchos de las barreras



Db = Distancia entre las barreras
 SA = Suma de los anchos de las barreras



Db = Distancia entre las barreras
SA = Suma de los anchos de las barreras

FIGURA 10
 $\sigma = 3M/100$

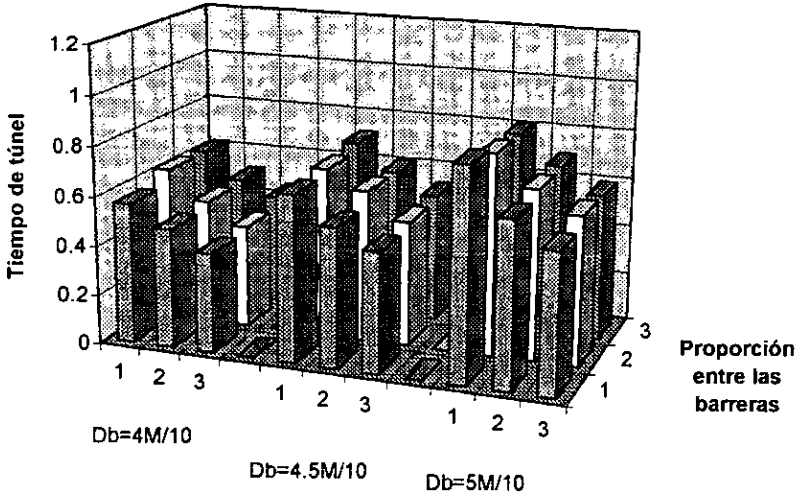


FIGURA 11
 $\sigma = 4M/100$

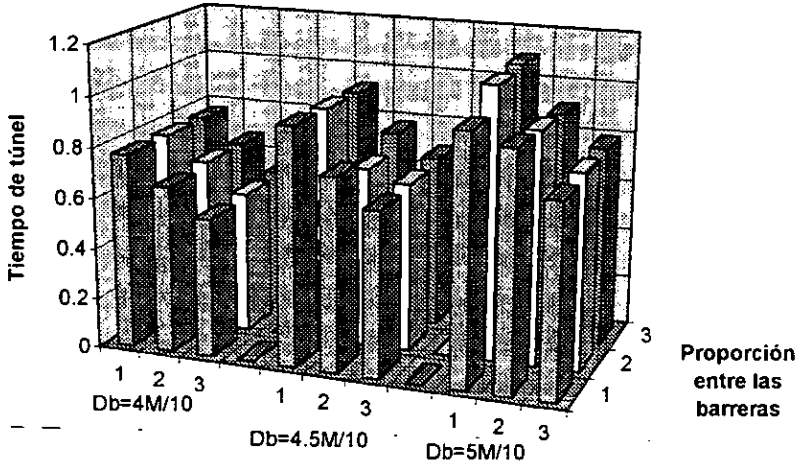
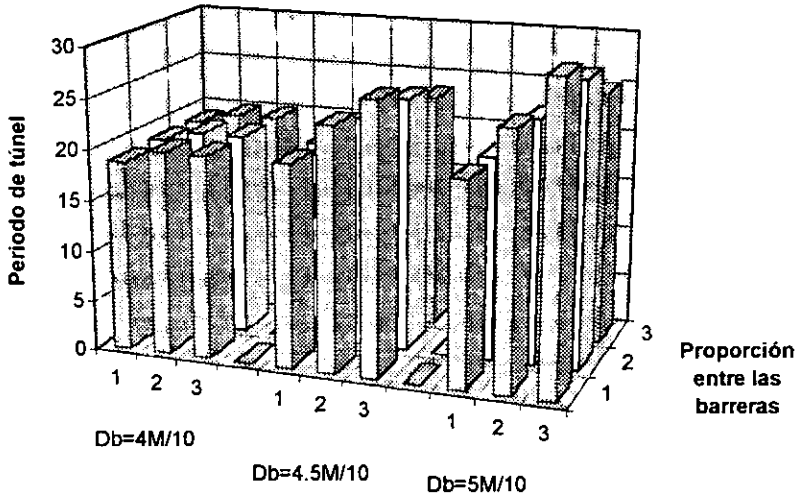
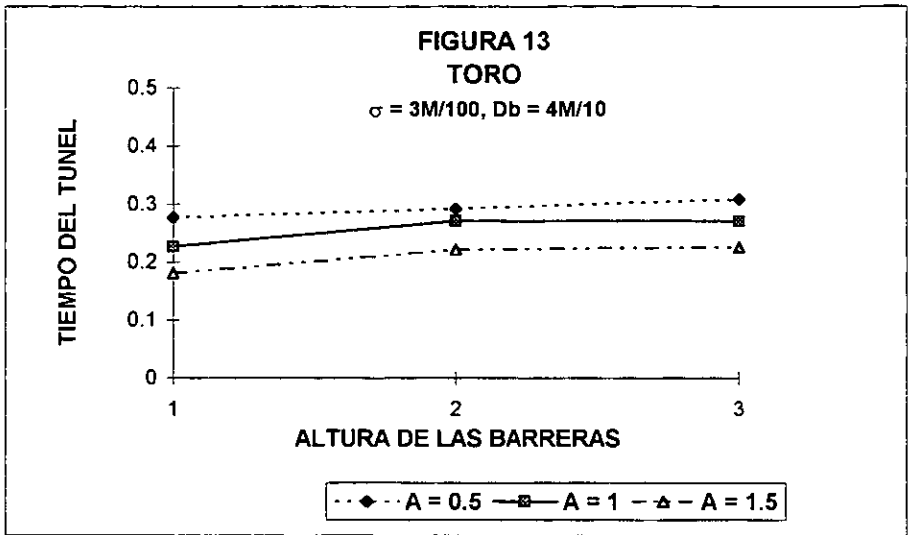
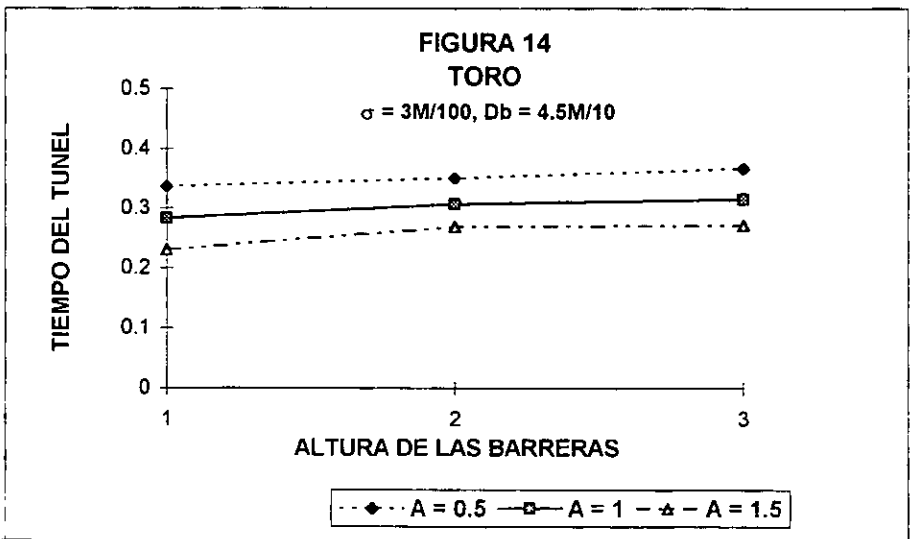


FIGURA 12

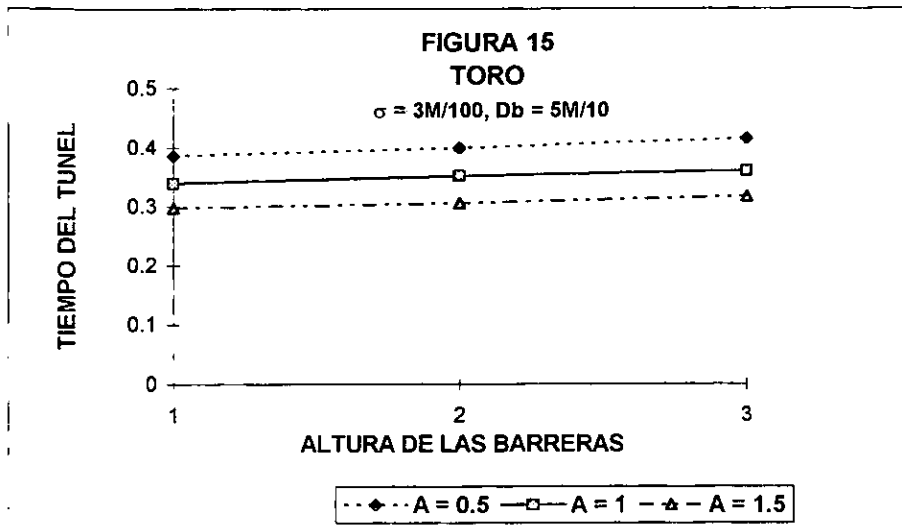




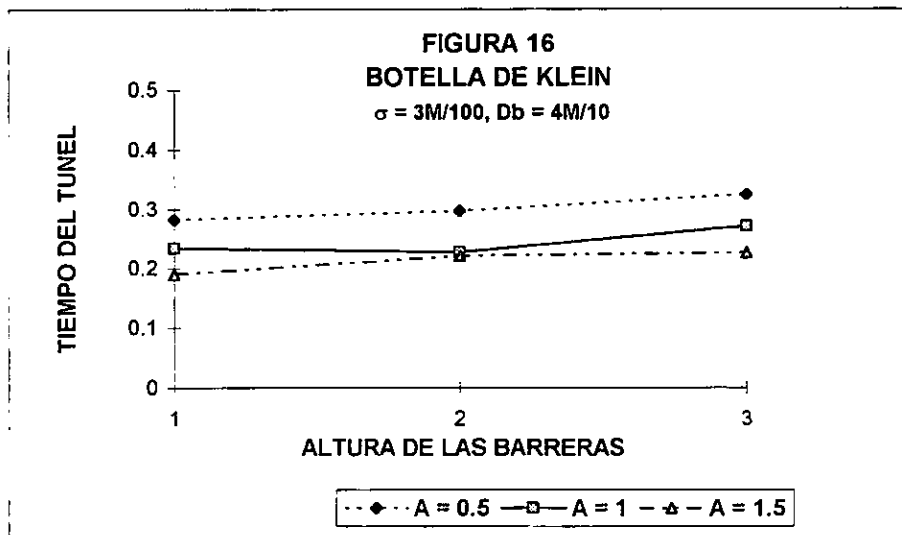
Db = Distancia entre las barreras
A = Ancho de las barreras



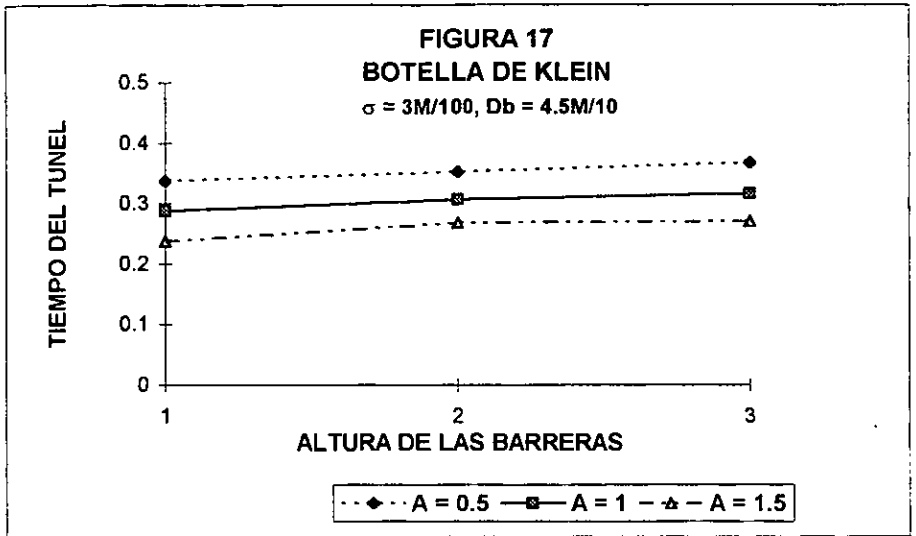
Db = Distancia entre las barreras
A = Ancho de las barreras



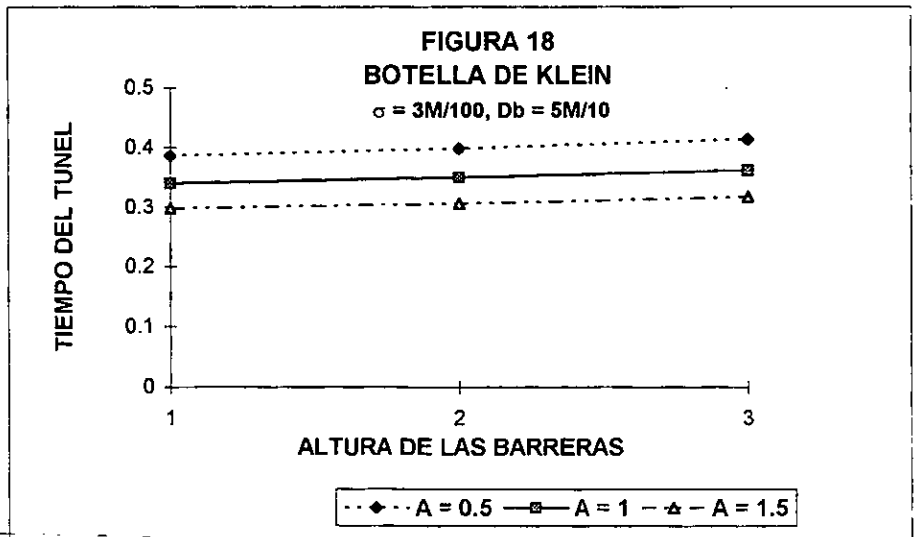
Db = Distancia entre las barreras
A = Ancho de las barreras



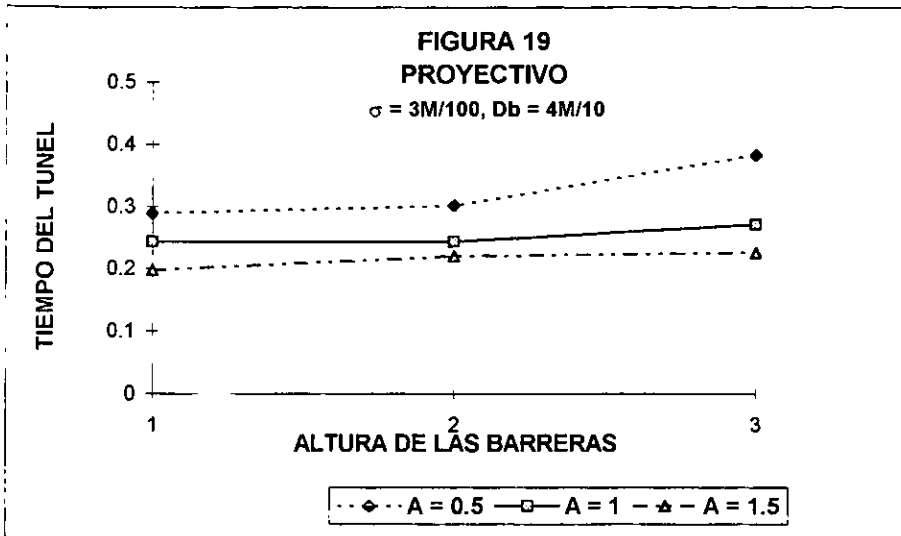
Db = Distancia entre las barreras
A = Ancho de las barreras



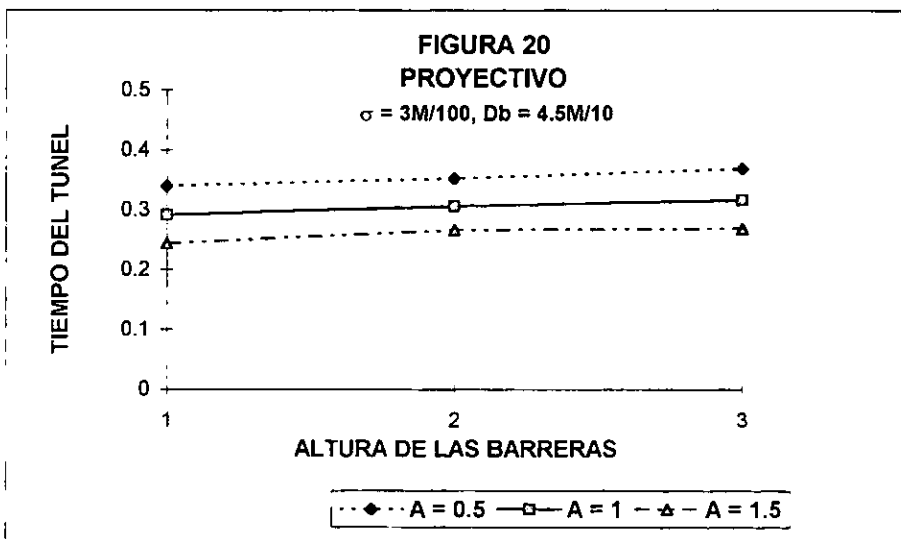
Db = Distancia entre las barreras
A = Ancho de las barreras



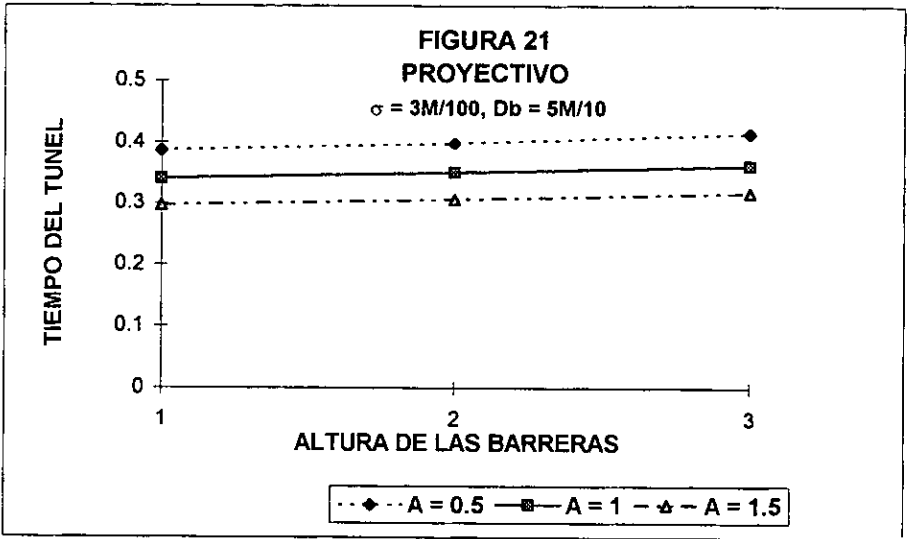
Db = Distancia entre las barreras
A = Ancho de las barreras



Db = Distancia entre las barreras
A = Ancho de las barreras



Db = Distancia entre las barreras
A = Ancho de las barreras



Db = Distancia entre las barreras

A = Ancho de las barreras

FIGURA 22
TORO
 $\sigma = 3M/100$

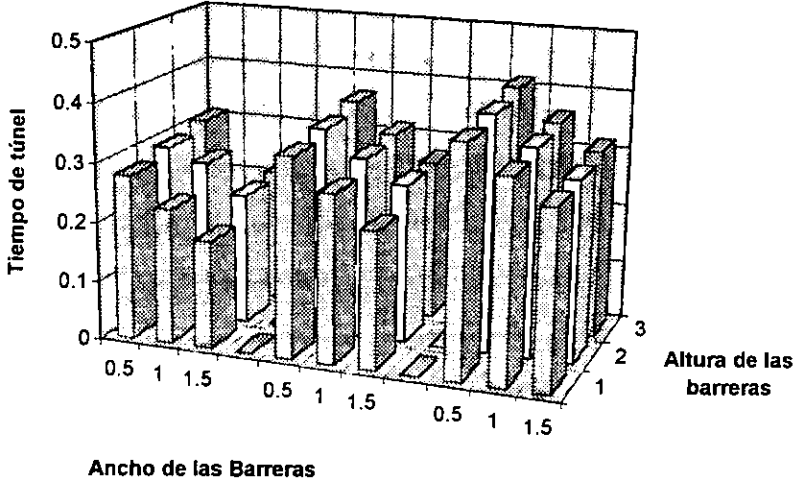


FIGURA 23
BOTELLA DE KLEIN
 $\sigma = 3M/100$

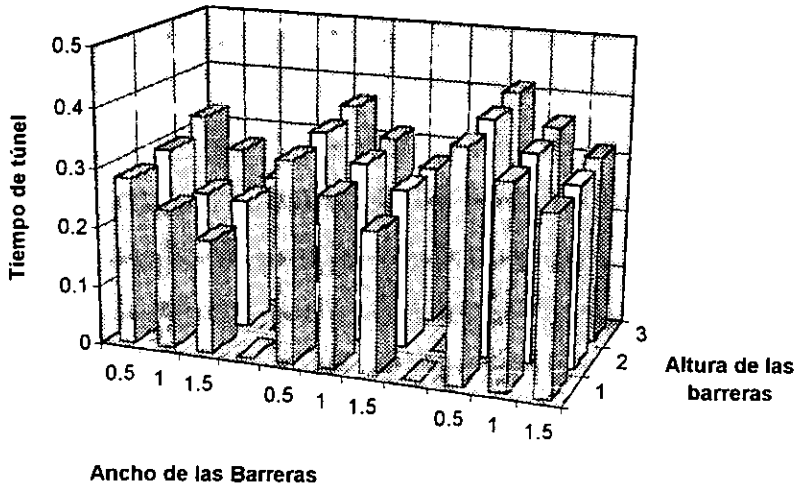
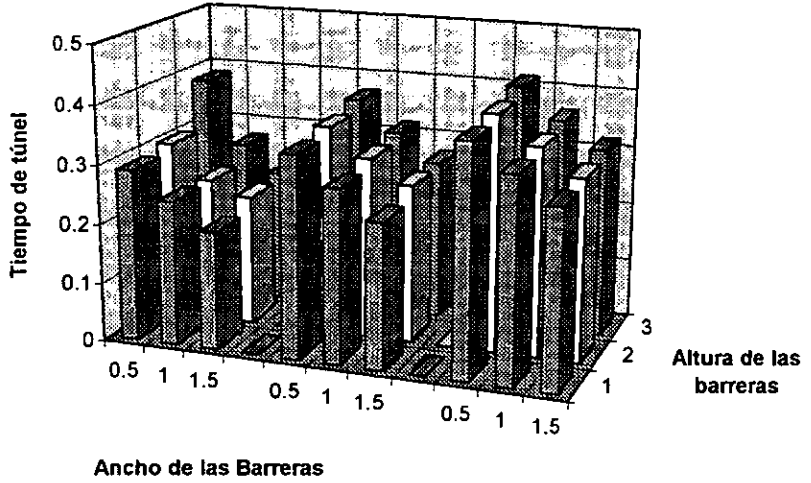
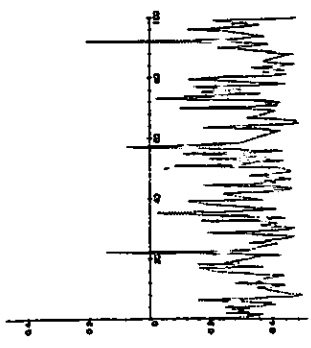


FIGURA 24
PROYECTIVO
 $\sigma = 3M/100$

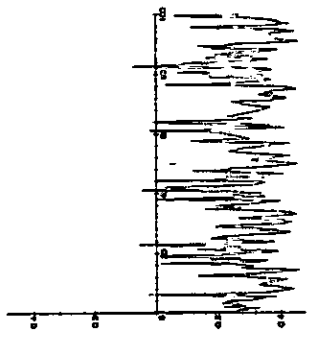


u >

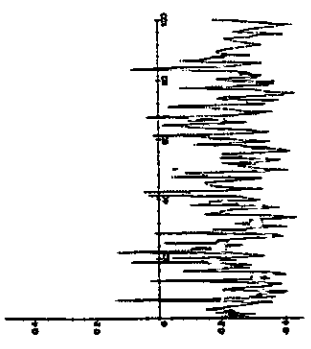
Toro_1



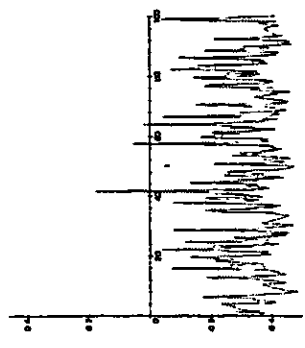
Toro_2



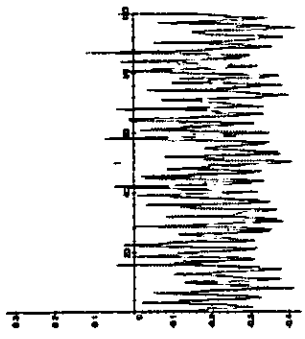
Toro_3



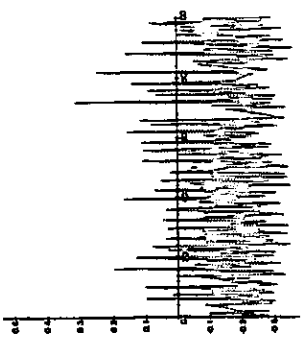
Toro_4



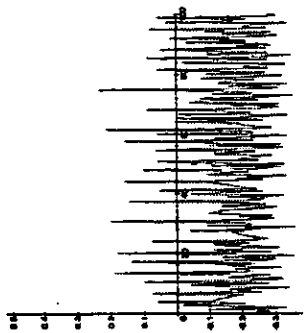
Toro_5



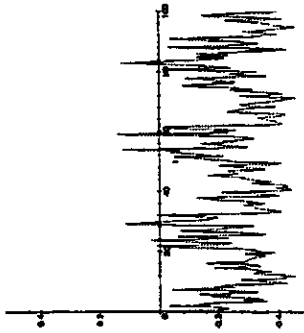
Toro_6



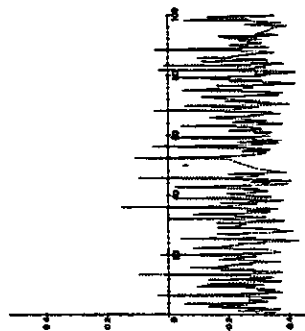
Toro_9



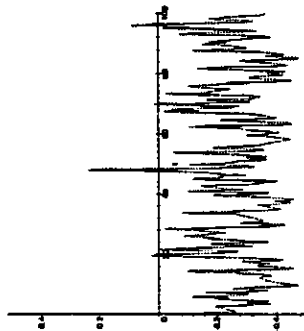
Toro_12



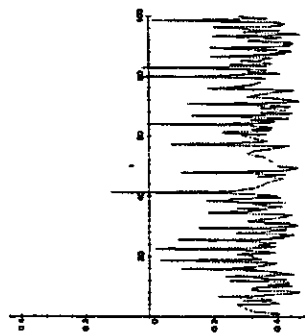
Toro_8



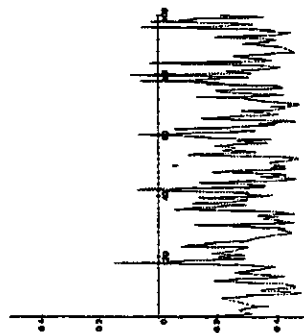
Toro_11



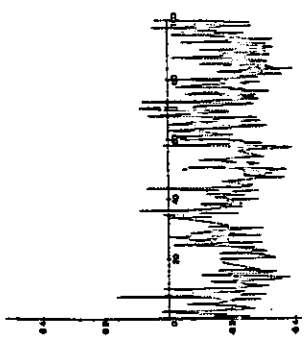
Toro_7



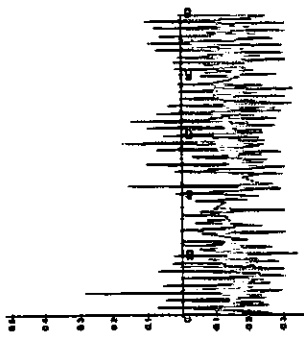
Toro_10



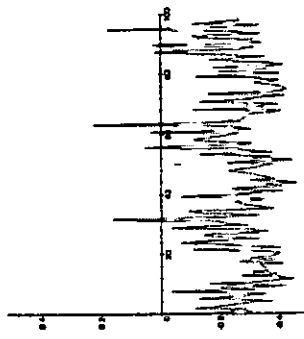
Toro_15



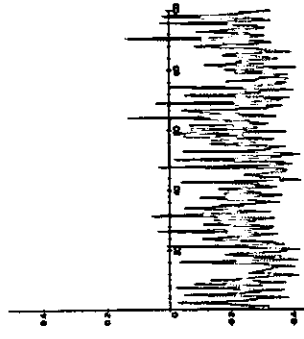
Toro_18



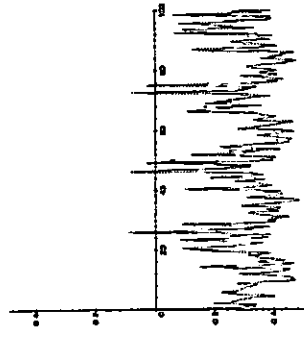
Toro_14



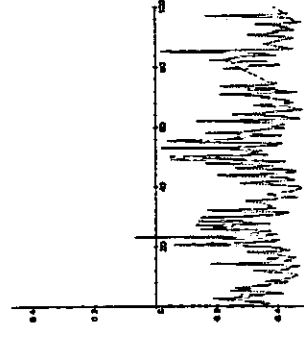
Toro_17



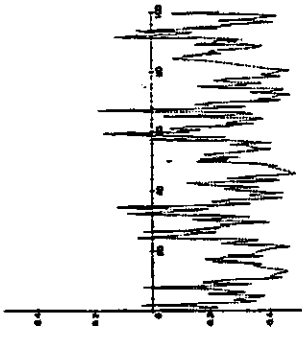
Toro_13



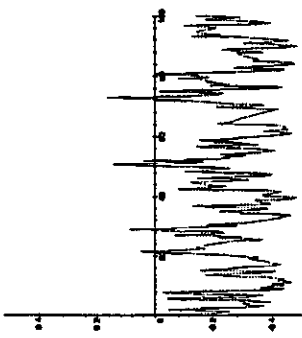
Toro_16



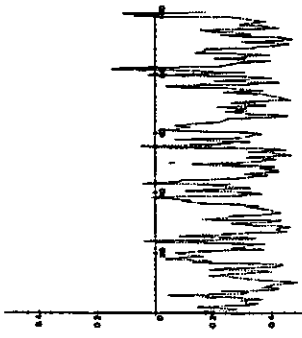
Toro_21



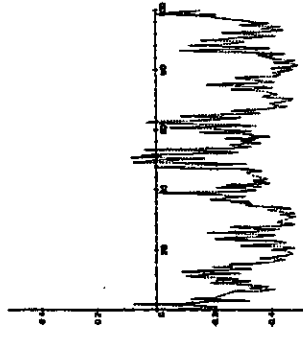
Toro_20



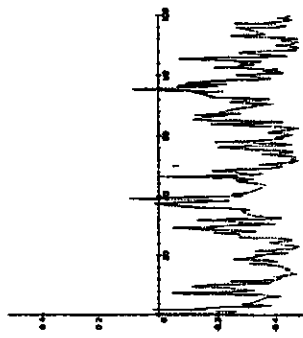
Toro_19



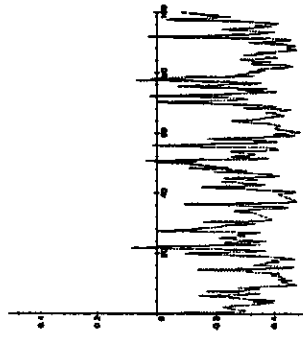
Toro_24



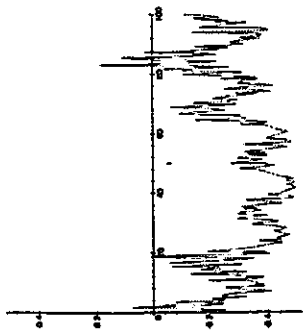
Toro_23



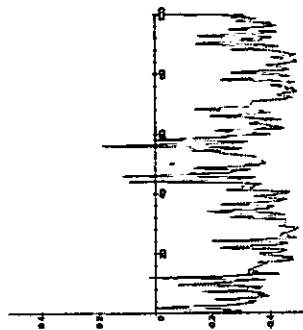
Toro_22



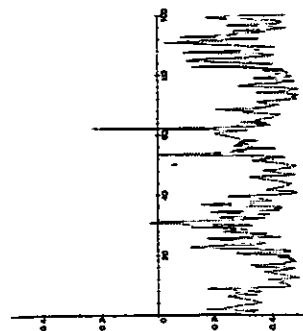
Toro_27



Toro_26

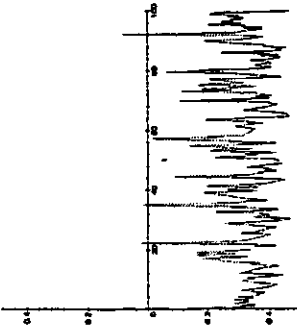


Toro_25

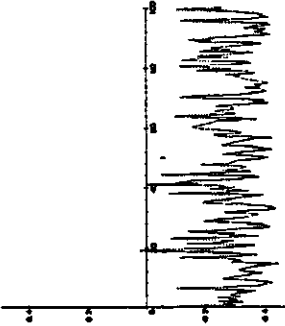


_____) U

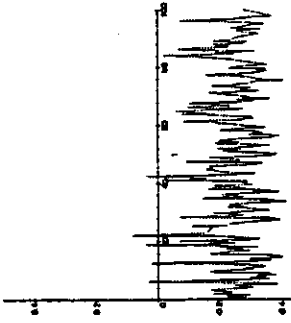
Klein_1



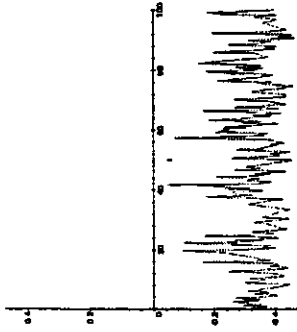
Klein_2



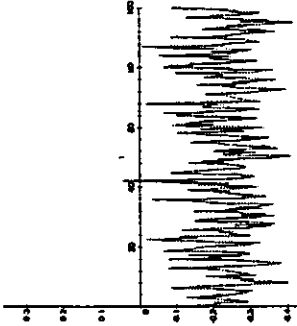
Klein_3



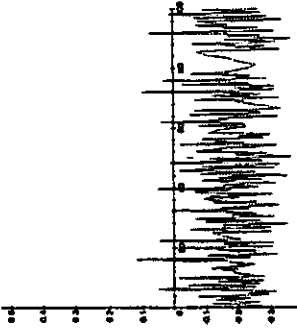
Klein_4



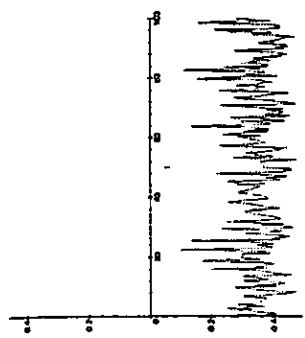
Klein_5



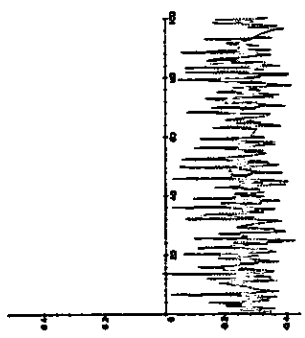
Klein_6



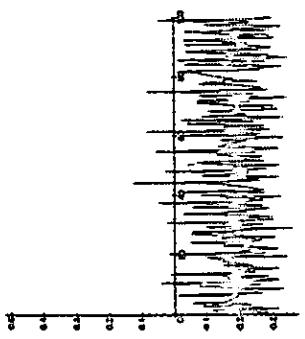
Klein_7



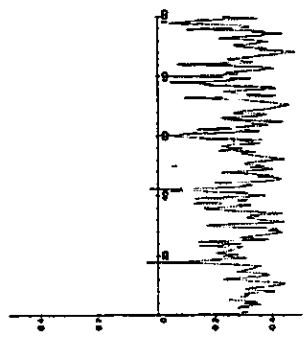
Klein_8



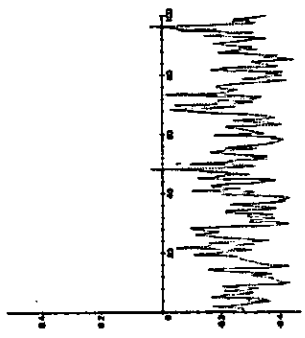
Klein_9



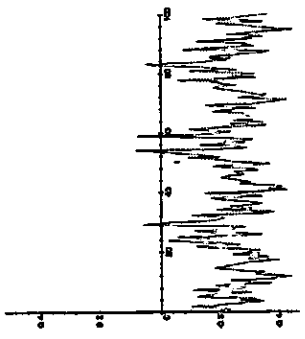
Klein_10



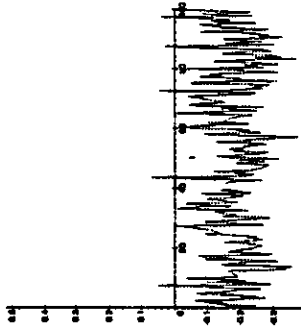
Klein_11



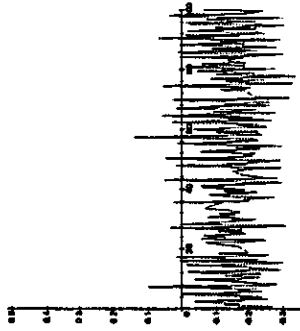
Klein_12



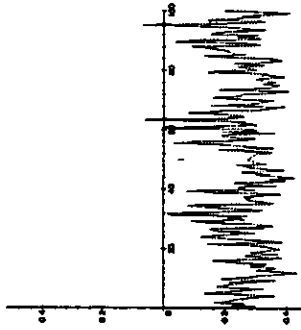
Klein_15



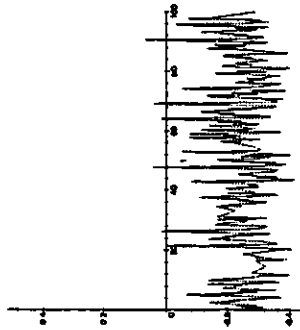
Klein_16



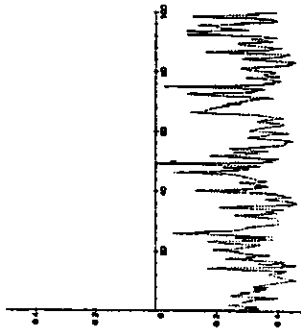
Klein_14



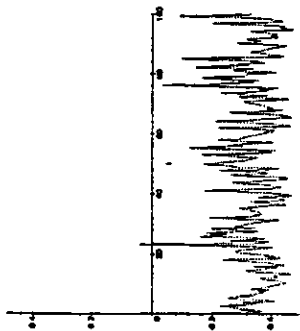
Klein_17



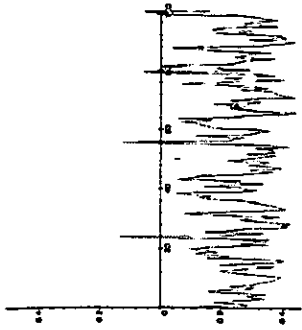
Klein_13



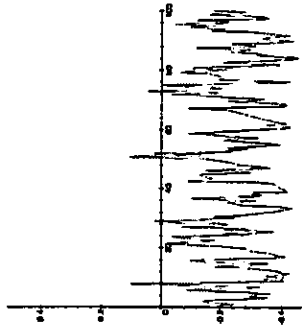
Klein_16



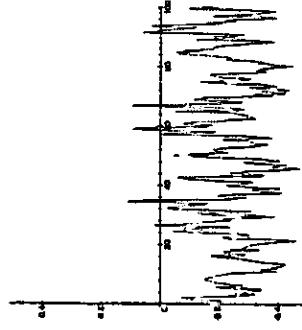
Klein_19



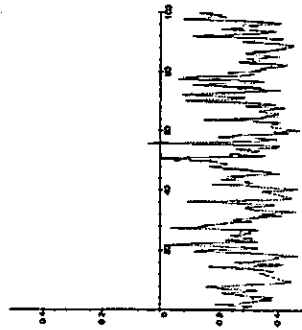
Klein_20



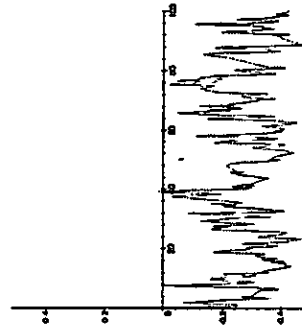
Klein_21



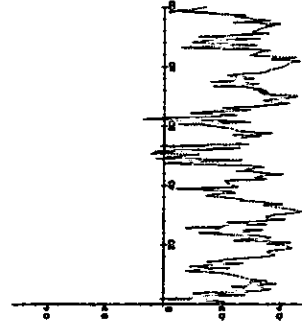
Klein_22



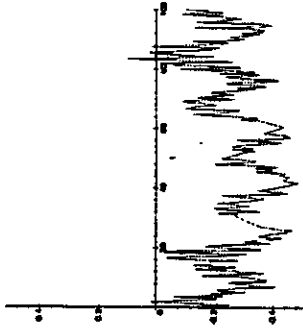
Klein_23



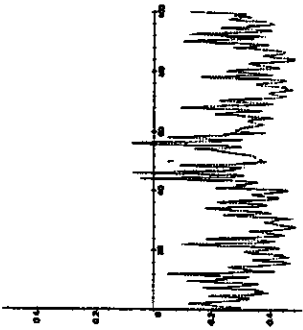
Klein_24



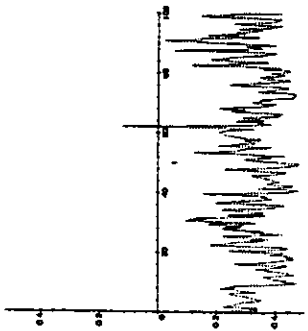
Klajn_27



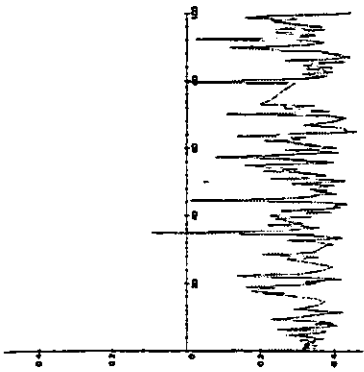
Klajn_26



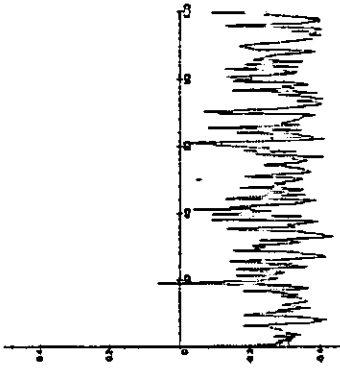
Klajn_25



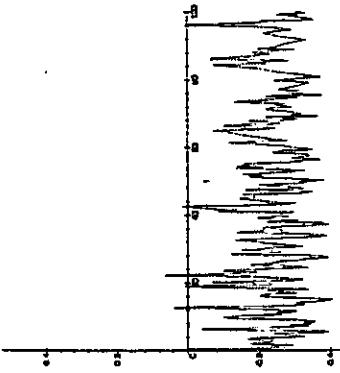
Proyectivo_1



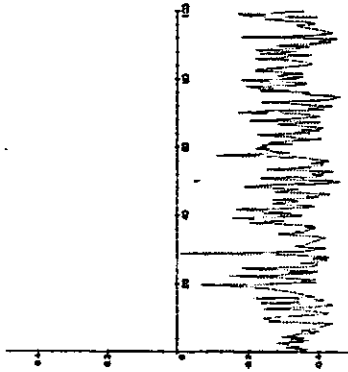
Proyectivo_2



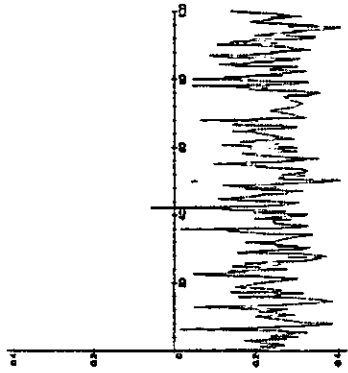
Proyectivo_3



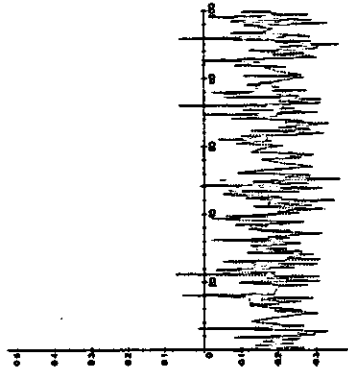
Proyectivo_4



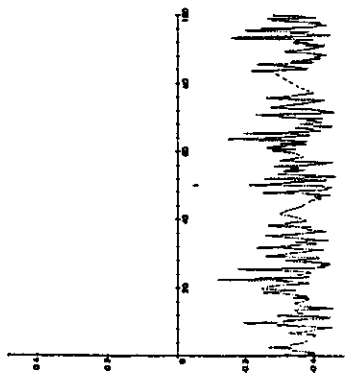
Proyectivo_5



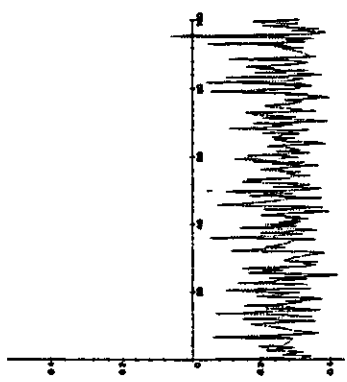
Proyectivo_6



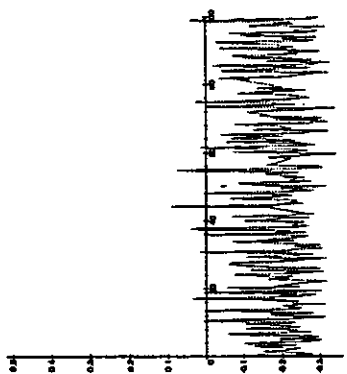
Projectivo_7



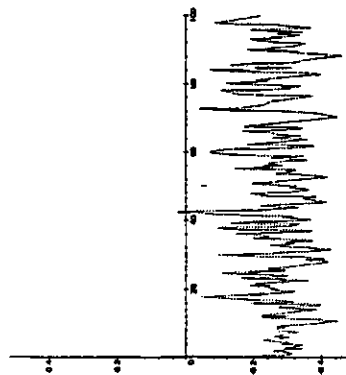
Projectivo_8



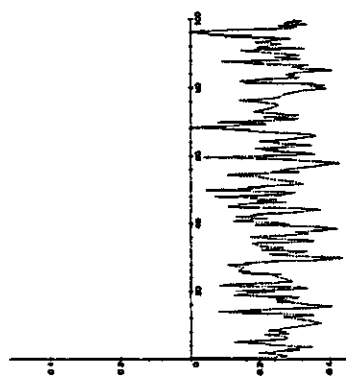
Projectivo_9



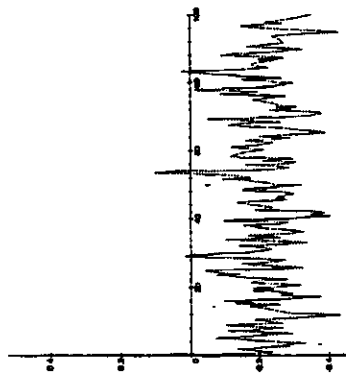
Projectivo_10



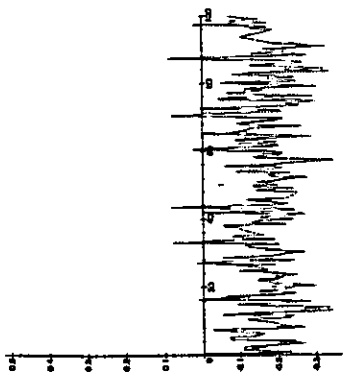
Projectivo_11



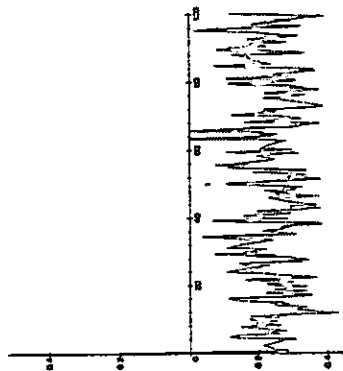
Projectivo_12



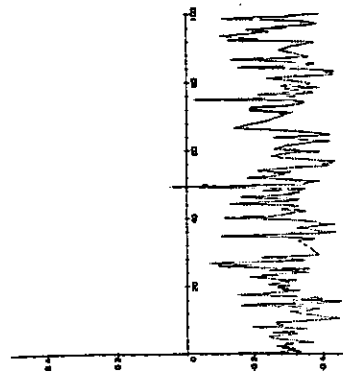
Proyectivo_15



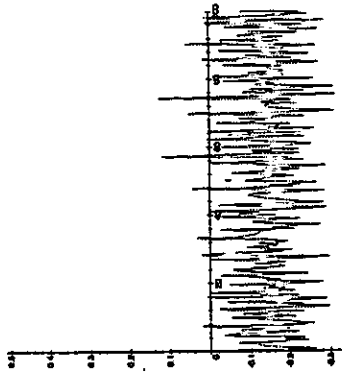
Proyectivo_14



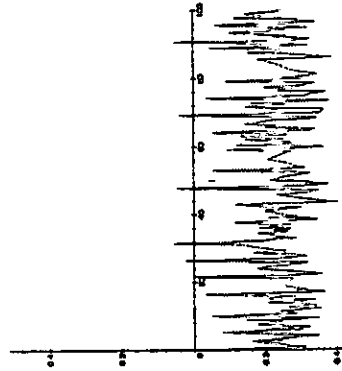
Proyectivo_13



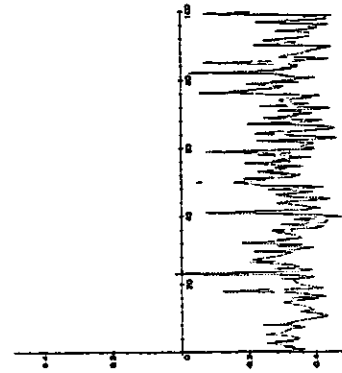
Proyectivo_18



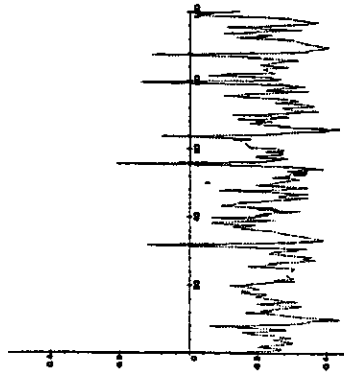
Proyectivo_17



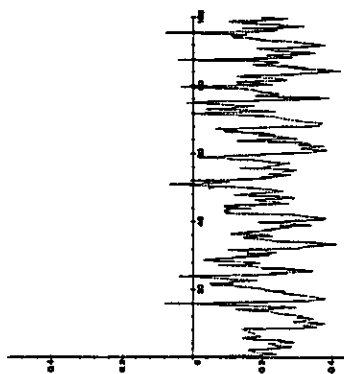
Proyectivo_16



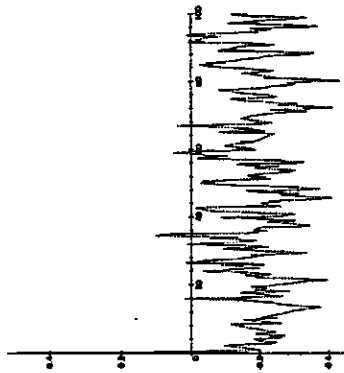
Proyectivo_19



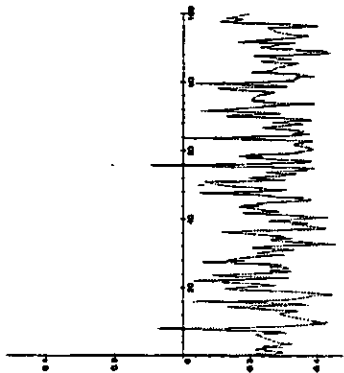
Proyectivo_20



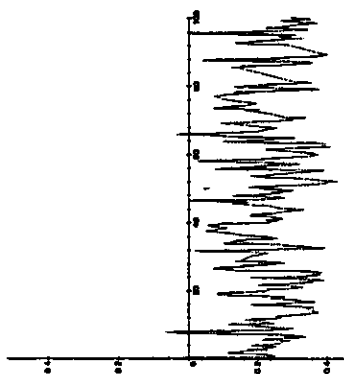
Proyectivo_21



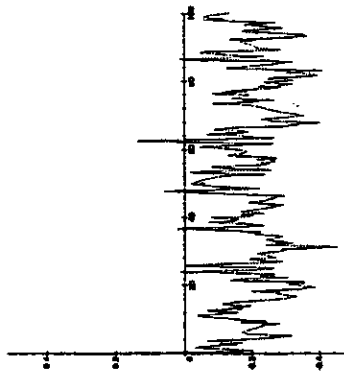
Proyectivo_22



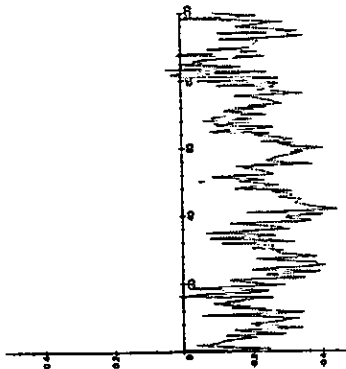
Proyectivo_23



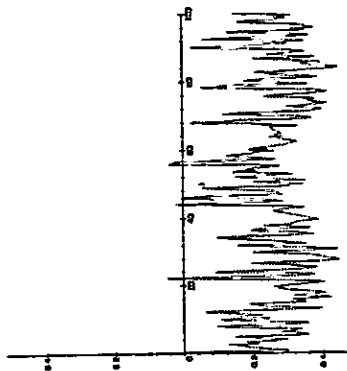
Proyectivo_24



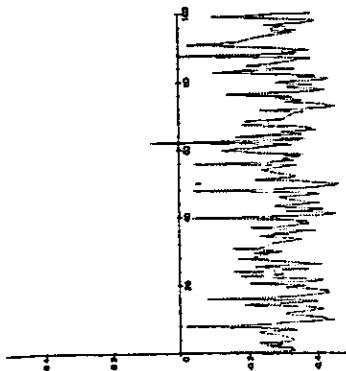
Projectivo_27



Projectivo_26



Projectivo_25

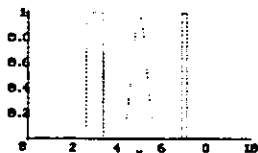


*Paquete Gaussiano evolucionando en el círculo
con un potencial constante en secciones*

eigenfunciones

Datos del espacio y potenciales

```
[ > d:=4:ancho1:=eval(3/4): ancho2:=eval(1/4):
  > p1:=0:eval((p6-d-ancho1)/2): p2:=": p2+ancho1:
  p3:=":p3+d-(ancho1+ancho2)/2: p4:=": p5:=p4+ancho2: p6:=10:V1:=0:
  V2:=1: V3:=0: V4:=1: V5:=V1:
  > k1:=sqrt(En-V1): k2:=sqrt(En-V2): k3:=sqrt(En-V3): k4:=sqrt(En-V4):
  k5:=sqrt(En-V5):readlib(piecewise):
  potenciales:=x->piecewise(x>=p6,0,x>=p5,V5,x>=p4,V4,x>=p3,
  V3,x>=p2,V2,x>=p1,V1):
  gauss:=x->exp(-1/2 * ( (x- ( (p6-p1)/2 ) ) / sigma )^2 ):
  plot({potenciales(x),eval(subs(sigma=.3,gauss(x)))},x=p1..p6);
  normalizar:=proc(f)unapply(f(x)/sqrt( eval
  ((int(f(x)^2,x=p1..p6))),x);end:
```



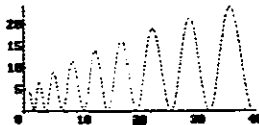
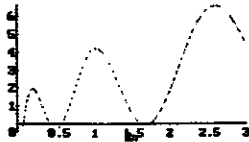
forma general de la solución

```
[ > phi1:=x->c11*cos(k1*(x-p1))+c12*sin(k1*(x-p1)): phi10:=D(phi1):
  phi2:=x->phi1(p2)*cos(k2*(x-p2))+phi10(p2)*sin(k2*(x-p2))/k2:phi20:=D(phi2):
  phi3:=x->phi2(p3)*cos(k3*(x-p3))+phi20(p3)*sin(k3*(x-p3))/k3:phi30
  :=D(phi3):phi4:=x->phi3(p4)*cos(k4*(x-p4))+phi30(p4)*sin(k4*(x-p4))/k4:
  phi40:=D(phi4):phi5:=x->phi4(p5)*cos(k5*(x-p5))+phi40(p5)*sin(k5*(x-p5)
  )/k5:phi50:=D(phi5):
  Phi:=x->piecewise(x>p6,0,x>=p5,phi5(x),x>=p4,phi4(x),x>=p3,phi3(x),x>=p
  2,phi2(x),x>=p1,phi1(x)):
```

ecuación de eigenvalores

```
[ > M11:=simplify(subs({c11=1,c12=0},Phi(p1)-Phi(p6) )):
  M12:=simplify(subs({c11=0,c12=1},Phi(p1)-Phi(p6) )):
  M21:=simplify(subs({c11=1,c12=0},phi10(p1)-phi50(p6))):
  M22:=simplify(subs({c11=0,c12=1},phi10(p1)-phi50(p6))):
  Maux:=array(1..2,1..2,[[M11,M12],[M21,M22]]): with(linalg):
  > h:=unapply(det(Maux),En):
  > plot(h(En),En=0..3):
```

```
> plot(h(En),En=0..40);
```



eigenvalores

programa que encuentra la raíces entre dos valores

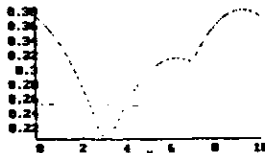
```
> raicesc:=proc(f,Min:numeric,Max:numeric,n:integer)
  for i from 1 to n do if
    is(
      f(evalf((i*(Max-Min)/n)+Min))*f(evalf(((i+1)*(Max-Min)/n)+Min))<=0)
    then
      fsolve(f(x)=0,x,evalf(i*((Max-Min)/n)+Min)..evalf((i+1)*((Max-Min)/n)
+Min)); L:=[op(L),""] fi: od : L[2..nops(L)];      end:
  warning, 'i' is implicitly declared local
  warning, 'L' is implicitly declared local
> raicesc(h,0,20,777);
[.07644693096, .4120380860, .5588861869, 1.633068441, 1.728687860, 3.616341719, 3.697809521,
  6.365254074, 6.474395119, 9.923214488, 10.02018614, 14.28696243, 14.34038173, 19.42354053,
  19.46743967 ]
> listaux2 :=": nops("): M:=";
```

M = 15

define las eigenfunciones normalizadas:

eigenfunciones no normalizadas

```
> eigenf:=[ seq(unapply( eval( subs( { En=listaux2[i] ,c11=1,
  c12=-evalf(subs(En=listaux2[i],M11)) /
  evalf(subs(En=listaux2[i],M12)}),      Phi(x)) ),x),i=1..M )]:
> [seq(sqrt(
  eval((int(eigenf[k](x)^2,x=p1..p6))))),k=1..M]:normalizador:="":
[ > [seq((1/normalizador[j])*eigenf[j](x),j=1..M)]: eigenfn:="":
[ estado base
> plot({seq(eigenfn[i](x),i=1..1)},x=p1..p6);
```



sigma = 3/10

```
[ > sigma:=evalf( (p6-p1)*3/100): gaussn:=normalizar(gauss):
```


coeficientes, test1

```
[ > [seq( evalf ( Int ( eigenfn[k](x) * gaussn(x), x=p1..p6)), k = 1..M ) ] :  
[ > coef:=":  
[ > test1:=sum('coef[i]^2', 'i'=1..M);  
                                     test1 := .9554553444  
[ > 1/sqrt(test1):NG=":  
[ > [seq( [seq( evalf( Int(eigenfn[i]*eigenfn[j], x=p3..p4)) , i=1..j)]  
      ,j=1..M)]: Ip3p4=":
```

Funcion que nos dice que tanto del paquete esta "dentro" al tiempo t y que nos da el periodo efectivo de reconstruccion del paquete

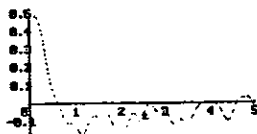
```
[ > NG*coef: coef:=":  
[ > [seq( [seq( coef[i]*coef[j]*Ip3p4[j][i] , i=1..j)], j=1..M)]: Kij:=":  
[ > K:= [seq([seq(Kij[i][j], j=1..i), seq(Kij[j][i], j=eval(i+1)..M)]  
      ,i=1..M)]:  
[ > simplify(sum(sum( 'K['i']['j']*exp(I*(listaux2['i]-listaux2['j'])*  
      *t) , 'i'=1..M), 'j'=1..M))-.5: TT:=unapply(",t):  
[ > TT(0)+.5:test2=":
```

test2 := .9922852126

```
[ > plot(simplify(TT(t)), t=0..90);
```



```
[ > plot(simplify(TT(t)), t=0..5);
```



```
[ > raicesc(TT, 0, 1, 7);
```

[.6175047119]

RESULTADOS FINALES

PERIODO : 19

TIEMPO DE TUNEL : .6175047156

sigma = 4/10

bibliografía

- [1] P. Abrahams and H. Moses. *Physical Review A*, 22(1333), 1980.
- [2] N. Boccara. *Functional Analysis*. Academic Press, 1990.
- [3] H. Brézis. *Análisis Funcional*. Alianza Universidad, 1983.
- [4] M. Do Carmo. *Riemannian Geometry*. Birkhauser Boston, 1992.
- [5] L. de la Peña. *Introducción a la Mecánica Cuántica*. UNAM-FCE, 1991.
- [6] M. de Llano. *Mecánica Cuántica*. UNAM, 1996.
- [7] P. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford University Press, 1958.
- [8] A. Galindo. *Introducción a la Mecánica Cuántica*. Alhambra, 1978.
- [9] W. Heisenberg. *The Physical Principles of the Quantum Theory*. Dover Publications, 1947.
- [10] T. Jordan. *Linear Operators for Quantum Mechanics*. John Willey & Sons, 1980.
- [11] V. Matveev. *Darboux Transformations and Solitons*. Springer, 1991.
- [12] E. Packel. *Functional Analysis*. Intext, Inc., 1974. .
- [13] S. Pokorski. *Gauge Field Theories*. Cambridge Univertity Pres.
- [14] M. Razavy and A. Pimpale. Quantum tunneling: a general study in multi-dimensional potential barriers with and without dissipative coupling. *Physics Reports, Review Section on Physics Letters* 168, 6(305-370), 1988.

- [15] R. Showalter. Monotone operators in banach space and nonlinear partial differential equations. *Mathematical Surveys and Monographs A.M.S.*, 49, 1997.
- [16] R. Wald. *General Relativity*. The University of Chicago Press, 1984.