



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

"UNA NUEVA SOLUCION PARA LA ECUACION DE
SCHRÖDINGER UNIDIMENSIONAL Y SU RELACION
CON LA APROXIMACION SEMICLASICA"

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

F I S I C O

P R E S E N T A :

JULIO ERNESTO HERNANDEZ PALACIOS



DIRECTOR DE TESIS: DR. FERNANDO MATIAS MORENO YNTRIAGO



2004

FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR



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.

ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:
"Una nueva solución para la ecuación de Schrödinger unidimensional y su relación
con la aproximación semiclásica"

realizado por Hernández Palacios Julio Ernesto

con número de cuenta 09852598-6 , quien cubrió los créditos de la carrera de: Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario

Propietario Dr. Fernando Matías Moreno Yntriago

M. en C. Mirna Villavicencio Torres

Propietario

Dr. José Alejandro Ayala Mercado

Suplente

Dr. Manuel Torres Labansat

Suplente

Dr. Roberto Escudero Derat

Consejo Departamental de Física

M. EN C. ALICIA ZARZOSA PEREZ
Facultad de Ciencias
Coordinadora de Licenciatura
Departamento de Física

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.
NOMBRE: Julio Ernesto Hernández Palacios
FECHA: 28 de agosto, 2007
FIRMA: [Firma]

Agradecimientos

Este trabajo definitivamente no lo he hecho solo; ha habido mucha gente involucrada con su realización de muy distintas maneras a lo largo de todas sus etapas. Quiero agradecerles a todos ellos por haber estado cerca durante este tiempo:

A mi madre, que me dio vida y apoyo incondicional.

A mi padre, a quien más admiro y de quien más he aprendido.

A Mony y Camilo, que aguantan cariñosamente a los anteriores.

A mis hermanos Andrés, Felipe, Alexia y Gustavo, cuya existencia me ha motivado para seguir adelante.

A mi familia, mi muy basta y amorosa familia que desde Monterrey siempre me dio su cariño y apoyo.

A Edith y Juan por haber sido parte fundamental de ella todos estos años.

A Eli, por el minutote interminable.

A Ana, por toda la magia.

A Miztli y Roberto, amigos y sobrevivientes de aquel grupo con el que empecé el camino que hasta aquí me trajo.

A la banda por todo el coto: El Arañas, El Cabezón, El Coach, La Chalupa, El Lecus, El Medallas, El Milhaus, La Morena, Piet y El Ponv. a quienes

mejor me refiero por sus apodos porque de otra manera no se darían por aludidos.

A mis viejos amigos y compañeros de vida: Laura, Abraham, Chito, Nacho y Rogelio.

A la raza del gallinero: Chamín, Felix, Emerson, Lalo y Luis Carlos por haberme dado su amistad y por haberme recordado mis raíces norteañas.

A Gaby Murguía, por su amistad y quien sin deberla ni temerla me hizo el grandísimo favor de revisar mi trabajo y me ayudo a detectar un montón de errores.

Al buen René Garduño, por todas las comidas, los libros, el montón de firmas y sobre todo por su gran amistad.

A Gisela y Juan, por toda su generosidad.

Muy particularmente al Dr. Fernando Matías Moreno Yntriago, por su confianza y paciencia al dirigir esta tesis, por haberme apoyado y motivado durante estos meses de trabajo y por haberme permitido aprender de él.

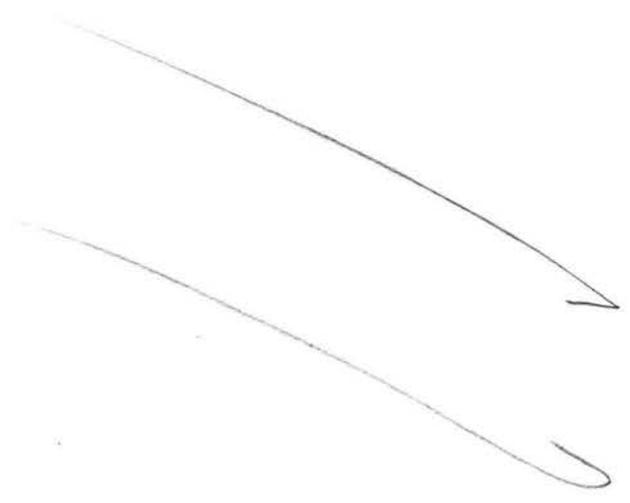
A los sinodales de este trabajo, M. en C. Mirna Villavicencio Torres, Dr. Alejandro Ayala Mercado, Dr. Roberto Escudero Durat y Dr. Manuel Torres Labansat, quienes amablemente dedicaron parte de su valioso tiempo para revisarlo y cuyas observaciones me permitieron lograr un mejor entendimiento.

A la UNAM, particularmente a la Facultad de Ciencias y al Instituto de Física, por haberme dado la oportunidad de estudiar y aprender.

Finalmente, a la Fundación TELMEX, a PROBETEL y al SNI por haberme apoyado con las becas y estímulos que me permitieron dedicarme a este trabajo.

Resumen

En este trabajo se calcula una solución para la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo. Se encuentra que ésta es de la forma $\psi_\epsilon(x) = CS'(x)^{1/2} \exp[iS(x)/\hbar]$ y es válida de manera exacta toda vez que el flujo j sea nulo y la función $S(x)$ cumpla con $S(x) = \pm \int \sqrt{2m(E - V(x) + V_Q(x))} dx$, donde el término $V_Q(x)$ tiene la forma $V_Q(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3S''^2(x)}{4S'^2(x)} - \frac{S^{(3)}(x)}{2S'(x)} \right)$. Por la forma de la solución calculada se encuentra una conexión entre ésta y la solución obtenida en la aproximación semiclásica, que es igual a $\psi_\epsilon(x)$ a orden cero. Esto nos permite hacer un análisis más detallado mediante el cual se explican los orígenes de la solución semiclásica en las regiones clásicamente prohibidas. Finalmente, se explora la posibilidad de mejorar las soluciones para la aproximación semiclásica y determinar la función $S(x)$ de nuestra solución mediante un proceso iterativo.



Resumen

En este trabajo se calcula una solución para la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo. Se encuentra que ésta es de la forma $\psi_\epsilon(x) = C S'(x)^{1/2} \exp[iS(x)/\hbar]$ y es válida de manera exacta toda vez que el flujo j sea nulo y la función $S(x)$ cumpla con $S(x) = \pm \int \sqrt{2m(E - V(x) + V_Q(x))} dx$, donde el término $V_Q(x)$ tiene la forma $V_Q(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3S''^2(x)}{4S'^2(x)} - \frac{S^{(3)}(x)}{2S'(x)} \right)$. Por la forma de la solución calculada se encuentra una conexión entre ésta y la solución obtenida en la aproximación semiclásica, que es igual a $\psi_\epsilon(x)$ a orden cero. Esto nos permite hacer un análisis más detallado mediante el cual se explican los orígenes de la solución semiclásica en las regiones clásicamente prohibidas. Finalmente, se explora la posibilidad de mejorar las soluciones para la aproximación semiclásica y determinar la función $S(x)$ de nuestra solución mediante un proceso iterativo.

Índice General

Agradecimientos	i
Resumen	iii
Índice General	v
Introducción	1
1 La Ecuación de Schrödinger Unidimensional	5
1.1 La Función de Onda Ψ	5
1.2 La Ecuación de Schrödinger Unidimensional Independiente del Tiempo	7
1.3 La Ecuación de Eigenvalores	8
1.4 El Postulado de Desarrollo	8
1.5 El Operador Hamiltoniano	9
1.6 Valores Esperados	10
2 Una Solución Para la Ecuación de Schrödinger Unidimen- sional Independiente del Tiempo	13
2.1 Planteamiento de una Solución para la Ecuación de Schrödinger	13
2.2 El Potencial Cuántico	20
2.3 Un Acercamiento a la Validez de la Solución ψ_ϵ	21
3 Determinación de la Función de Onda ψ_ϵ Mediante un Pro- ceso Iterativo	25
3.1 Hipótesis de Iteración	25
3.2 El Proceso Iterativo	26
3.3 Soluciones Iteradas	27

4	Revisión de la Aproximación Semiclásica	33
4.1	Analizando el Caso $E < V$	34
4.2	Soluciones Iteradas	39
5	Evaluación del Método Iterativo	41
5.1	El Pozo Unidimensional	42
5.2	El Potencial Lineal	43
5.3	El Oscilador Armónico	59
	Conclusiones	75
A	La Aproximación Semiclásica: el Método WKB	79
	Bibliografía	84

Introducción

Por tratarse de una teoría que en muchos sentidos contradice la intuición y el sentido común, herencia del mundo macroscópico en el que estamos inmersos como observadores, la Mecánica Cuántica tiene distintas y variadas formas de ser interpretada. Cada una de ellas presenta características particulares que la hacen atractiva para abordar ciertos problemas físicos y que a la vez son poco útiles para el planteamiento de otros. Lo importante es, sin embargo, que con cada una de éstas se puedan hacer predicciones sobre fenómenos físicos en la naturaleza comprobables por medio de la observación. Aún así, ya sea por su simpleza o aplicabilidad, existen interpretaciones que son preferidas sobre las demás.

En el presente trabajo nos basamos en el formalismo de la función de onda o mecánica ondulatoria. Este es uno de los más estudiados y aceptados y lo empleamos para exponer una descripción detallada de un sistema cuántico que no evoluciona en el tiempo. Nos enfocamos en el estudio de un sistema formado por una partícula no relativista y sin espín que interactúa con un potencial arbitrario dependiente de la posición. En este sentido, la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo es nuestro punto de partida. Para obtener información del sistema y ser capaces de hacer predicciones sobre su comportamiento requerimos resolver la ecuación anteriormente mencionada. Las soluciones a ésta son las llamadas funciones de onda del sistema, al cual describen completamente en términos de amplitudes de probabilidad.

Aunque en la actualidad existen muchos métodos aproximados para encontrar soluciones para la ecuación de Schrödinger, fueron pocos los intentos encontrados en la literatura por establecer un lineamiento de carácter más general que permita una formulación sistemática de las soluciones exactas.

Los tratamientos y cálculos de soluciones exactas -más allá de las pocas por todos conocidas- que se encontraron están orientados a resolver la ecuación con algún potencial muy particular y cuya solución es de gran interés para ciertas líneas de investigación. Si bien esto genera conocimiento y un mejor entendimiento de la realidad física, los procesos y herramientas empleados rara vez son generalizables de modo que su aplicabilidad resulta un tanto limitada. Luego, nos parece deseable contar con una especie de “receta” que nos indique las soluciones exactas para la ecuación y emplearlas aún cuando su cálculo resulte un poco más complicado que el de un método aproximado.

Existe un método de aproximación para las soluciones de la ecuación de Schrödinger que nos resulta particularmente interesante pues éste retoma algunas características clásicas o macroscópicas del sistema. También permite, en principio, hacer una conexión entre el sistema cuántico y el sistema clásico, de modo que se pone de manifiesto la idea que señala que la descripción clásica de un sistema físico es un límite de la descripción cuántica. Aunque existe más de una forma de entender tal límite, en este trabajo no abundaremos mucho sobre ellas puesto que va más allá de nuestros objetivos. De cualquier modo en algún momento echaremos mano de una para dar continuidad a nuestro trabajo.

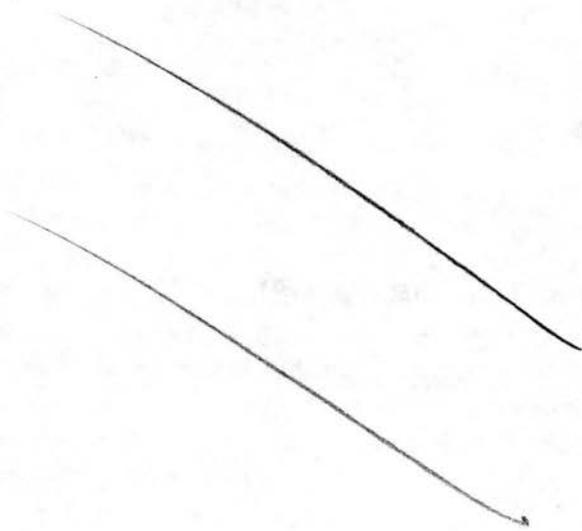
Haciendo caso a lo anterior, definimos los tres objetivos principales de este trabajo:

- *Establecer una metodología autocontenida para calcular una solución exacta para la ecuación estacionaria de Schrödinger unidimensional.* En el capítulo dos nos damos a la ambiciosa tarea de buscar -con la finalidad de encontrar, claro está- un algoritmo que nos permita conocer las soluciones deseadas en términos de los parámetros *intrínsecos* del sistema, así como encontrar las reglas para su uso. Los resultados que se obtienen son sumamente motivantes, pues se encuentra una solución exacta mediante un sistema autocontenido de ecuaciones.
- *Explorar la hipótesis que plantea que un proceso iterativo aplicado a las soluciones semiclásicas conlleva a una mejor descripción del sistema empleando solución encontrada.* Puesto que la solución encontrada depende de un parámetro que las mismas ecuaciones definen pero no precisan y que, entre otras cosas, depende de sus derivadas, resulta llamativo intentar un proceso iterativo para calcularlas. Más aún, existiendo

referencias en la literatura que señalan que un proceso de esa naturaleza llevado a cabo sobre las soluciones de la aproximación semiclásica habría de mejorar la precisión de la aproximación y tomando en cuenta el vínculo encontrado entre la solución exacta y tal aproximación, llevar a cabo el proceso nos permitiría tanto explorar la hipótesis como, en caso de ser válida, encontrar las funciones necesarias. En el capítulo tres abordamos esta tarea y en el cinco aplicamos los resultados a una serie de ejemplos.

- *Hacer una revisión de la aproximación semiclásica usada normalmente para resolver la ecuación estacionaria de Schrödinger unidimensional.* La solución obtenida en este trabajo tiene una estructura muy similar a la de las soluciones calculadas y postuladas por la aproximación semiclásica. Esta similitud nos invita a llevar a cabo un estudio del método semiclásico a la luz de un procedimiento análogo al que da lugar a nuestra solución. Con esta revisión se logra esclarecer el origen de las soluciones en las regiones clásicamente prohibidas para sistemas ligados que la aproximación semiclásica solamente postula además de construir nuestras propias expresiones para la descripción del sistema en esta misma región. Estas ideas se desarrollan en el capítulo cuatro.

Antes de atender estos objetivos es conveniente mencionar que al principio de este trabajo hacemos una breve revisión del marco teórico que define al formalismo que le da sustento a éste y a los resultados que de aquí puedan ser obtenidos. Con esto se intenta dar un recordatorio (cuando no los elementos suficientes) para seguir con detalle el desarrollo de cada objetivo así como para entender la importancia que vemos en cada uno de ellos. También debemos decir que los sistemas que estudiamos al aplicar los primeros resultados aportan mucha información cuantitativa sobre la física involucrada en cada uno, pero procuramos hacer una descripción cualitativa y gráfica de ésta con la finalidad de lograr un mejor entendimiento. Por otra parte, al final de este trabajo se encuentra también un apéndice complementario sobre la aproximación semiclásica, a la cual nos referimos con bastante frecuencia pero cuyo estudio detallado no se requiere para el entendimiento de los temas que deseamos desarrollar.



referencias en la literatura que señalan que un proceso de esa naturaleza llevado a cabo sobre las soluciones de la aproximación semiclásica habría de mejorar la precisión de la aproximación y tomando en cuenta el vínculo encontrado entre la solución exacta y tal aproximación, llevar a cabo el proceso nos permitiría tanto explorar la hipótesis como, en caso de ser válida, encontrar las funciones necesarias. En el capítulo tres abordamos esta tarea y en el cinco aplicamos los resultados a una serie de ejemplos.

- *Hacer una revisión de la aproximación semiclásica usada normalmente para resolver la ecuación estacionaria de Schrödinger unidimensional.* La solución obtenida en este trabajo tiene una estructura muy similar a la de las soluciones calculadas y postuladas por la aproximación semiclásica. Esta similitud nos invita a llevar a cabo un estudio del método semiclásico a la luz de un procedimiento análogo al que da lugar a nuestra solución. Con esta revisión se logra esclarecer el origen de las soluciones en las regiones clásicamente prohibidas para sistemas ligados que la aproximación semiclásica solamente postula además de construir nuestras propias expresiones para la descripción del sistema en esta misma región. Estas ideas se desarrollan en el capítulo cuatro.

Antes de atender estos objetivos es conveniente mencionar que al principio de este trabajo hacemos una breve revisión del marco teórico que define al formalismo que le da sustento a éste y a los resultados que de aquí puedan ser obtenidos. Con esto se intenta dar un recordatorio (cuando no los elementos suficientes) para seguir con detalle el desarrollo de cada objetivo así como para entender la importancia que vemos en cada uno de ellos. También debemos decir que los sistemas que estudiamos al aplicar los primeros resultados aportan mucha información cuantitativa sobre la física involucrada en cada uno, pero procuramos hacer una descripción cualitativa y gráfica de ésta con la finalidad de lograr un mejor entendimiento. Por otra parte, al final de este trabajo se encuentra también un apéndice complementario sobre la aproximación semiclásica, a la cual nos referimos con bastante frecuencia pero cuyo estudio detallado no se requiere para el entendimiento de los temas que deseamos desarrollar.

Capítulo 1

La Ecuación de Schrödinger Unidimensional

Desde el punto de vista de la mecánica ondulatoria, la ecuación fundamental de la mecánica cuántica que describe la evolución de una partícula no-relativista de masa m y sin espín al interactuar con un potencial V que depende de las coordenadas espaciotemporales, es la llamada ecuación de Schrödinger [4]-[7]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t) \quad (1.1)$$

Con ayuda de esta ley dinámica se pueden calcular las funciones y parámetros que determinan al sistema. Por tanto, resolver esta ecuación constituye una tarea fundamental cuando se desea entender un proceso cuántico en la naturaleza. El primer paso en nuestro trabajo consiste en entender a las soluciones de esta ecuación para posteriormente poder formular un procedimiento que nos permita encontrarlas.

1.1 La Función de Onda Ψ

Las soluciones Ψ a la ecuación (1.1), que son necesariamente funciones complejas por la presencia de i en el término de la izquierda de la ecuación, son conocidas como funciones de onda. Éstas determinan el estado del sistema y de ellas podemos extraer toda la información física necesaria para hacer una descripción completa de éste. Dicha información nos es dada en términos de

las amplitudes de probabilidad de obtener cierto resultado cuando se le mide algún parámetro al sistema. Por ejemplo, con la única ayuda de la función de onda podemos hacer una predicción sobre la ubicación de la partícula que queremos describir: la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula entre las posiciones x y $x + dx$ al tiempo t es

$$P(x, t)dx = |\Psi(x, t)|^2 dx = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx \quad (1.2)$$

Además, como la partícula debe estar en algún lugar en el espacio, se satisface la condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (1.3)$$

Para obtener información sobre los parámetros físicos de nuestro sistema debemos recurrir a la noción de *observable* y de lo cual se hará una discusión más adelante. Continuando con la descripción de las soluciones, matemáticamente la función de onda es en general una función compleja que pertenece a un espacio de Hilbert y por la forma de la ecuación (1.1) éstas están definidas hasta una fase constante de la forma $e^{i\alpha}$. Para ser soluciones admisibles, las funciones de onda deben cumplir con algunas consideraciones físicas y matemáticas de las cuales señalamos las siguientes [7, 9]:

1. Ψ debe ser finita excepto, a lo más, en un conjunto finito de puntos en el espacio y debe cumplir la ecuación (1.3). Es decir, debe ser de cuadrado integrable.
2. Ψ debe ser continua y continuamente diferenciable.
3. Ψ debe ser univaluada en todo punto.
4. Ψ debe satisfacer las condiciones de frontera adecuadas para el sistema físico.
5. Ψ debe satisfacer la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (1.4)$$

donde $\rho(x, t)$ es la densidad de probabilidad $|\Psi(x, t)|^2$ y j es la densidad de corriente o flujo con $j = \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right)$

1.2 La Ecuación de Schrödinger Unidimensional Independiente del Tiempo

Si suponemos que la función de onda $\Psi(x, t)$ puede descomponerse en un producto de funciones de variables independientes de la forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x)T(t) \quad (1.5)$$

y que el potencial es constante en el tiempo, entonces la ecuación (1.1) adquiere la forma

$$i\hbar\psi(x)\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2 T(t)}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)T(t) \quad (1.6)$$

de donde al dividir entre $\psi(x)T(t)$ obtenemos

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \quad (1.7)$$

siempre que $\psi(x)T(t) \neq 0$ (excepto, tal vez, en un número finito de puntos). Entonces, como las ecuaciones dependen de parámetros independientes entre sí, ambas ecuaciones deben ser iguales a una constante, que convenientemente etiquetamos como E . Tenemos ahora el sistema de ecuaciones

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = E \quad (1.8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = E \quad (1.9)$$

Resolviendo (1.8) tenemos que

$$T(t) = Ce^{-iEt/\hbar} \quad (1.10)$$

y de (1.9) tenemos que

$$\boxed{E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)} \quad (1.11)$$

La ecuación anterior constituye la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo y es con ésta con la que habremos de estar trabajando a lo largo de esta tesis.

1.3 La Ecuación de Eigenvalores

Llamamos *observable* a todo aquel parámetro físico que podemos medirle al sistema, tal como la energía, la cantidad de movimiento, la masa, etcétera. De acuerdo con uno de los postulados de la mecánica cuántica [6] para cada observable A del sistema existe un operador lineal asociado \hat{A} tal que al hacer una medición de la primera obtenemos un valor a si la función de onda ψ_a que describe al sistema es solución de la ecuación

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a \quad (1.12)$$

A la ecuación anterior se le conoce como *ecuación de eigenvalores*, donde a es un *eigenvalor* del operador \hat{A} y ψ_a es la *eigenfunción* de \hat{A} correspondiente a a . Al medir la observable A sólo podemos obtener un resultado contenido en el conjunto de todos los eigenvalores $\{a_i\}$, el cual puede ser discreto o continuo. Para cada elemento $\{a_i\}$ del espectro del operador existe al menos una eigenfunción ψ_i que es solución de la ecuación (1.12). Si todos los elementos del espectro son reales se dice que el operador \hat{A} es *hermitiano*¹

1.4 El Postulado de Desarrollo

Por el principio de superposición sabemos que si ψ y ϕ son soluciones de una ecuación diferencial, una combinación lineal de éstas también lo es. Del mismo modo podemos decir que si ψ_a y ψ_b son soluciones de la ecuación de Schrödinger, $\psi = a\psi_a + b\psi_b$ también es una solución. El *postulado de desarrollo* [4] de la mecánica cuántica hace uso de este hecho y nos dice que, si \hat{A} es hermitiano, el conjunto de todas sus eigenfunciones linealmente independientes ψ_i es *completo* y forma la base de un espacio de Hilbert al cual pertenecen todas las posibles soluciones de la ecuación de Schrödinger. Es decir, cualquier solución de la ecuación (1.11) puede escribirse como

$$\psi(x) = \sum_a^i C_a \psi_a(x), \text{ con eigenvalores discretos} \quad (1.13)$$

$$= \int C_a \psi_a(x) da, \text{ con eigenvalores continuos} \quad (1.14)$$

¹Esta no es la única forma de definir la hermiticidad de un operador. Más adelante, cuando se revise el concepto de *valor esperado* de un operador podremos dar una definición más formal.

y se cumple que

$$\sum_a^i |C_a|^2 = 1 \quad (1.15)$$

Este último resultado es la relación de completez para el conjunto de eigenfunciones ψ_i que forman el espacio de funciones. Al coeficiente C_a se le llama amplitud de probabilidad y representa la cantidad con la que contribuye la función ψ_a a la función de onda ψ ; $|C_a|^2$ es la probabilidad de encontrar al sistema en el estado ψ_a con eigenvalor a .

1.5 El Operador Hamiltoniano

Podemos definir el operador \hat{H} como

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (1.16)$$

con lo que es posible reescribir a la ecuación (1.11) como

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.17)$$

Claramente la ecuación (1.17) es la ecuación de eigenvalores del operador \hat{H} . Como se mencionó antes, E es una constante indefinida. Podemos pensar que existe un conjunto de eigenvalores $\{E_i\}$ para \hat{H} de donde la constante E puede tomar algún valor. Entonces también existe un conjunto $\{\psi_{E_i}\}$ de eigenfunciones que satisfacen la ecuación para cada uno de los valores posibles de E . Pero ¿a qué observable corresponde este operador? Para aclarar esta cuestión, hacemos uso de otro operador, el de cantidad de movimiento \hat{p} definido en el espacio de configuración como [4]

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (1.18)$$

Vemos que si sustituimos este operador en la ecuación (1.16) el operador \hat{H} queda como

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \quad (1.19)$$

el cual se parece mucho al Hamiltoniano clásico definido por las ecuaciones de Hamilton. La única diferencia estriba en que tenemos un operador \hat{p} y

no una cantidad p , pero como ya vimos que para toda observable existe un operador, podemos suponer que \hat{H} es el operador Hamiltoniano análogo a la función hamiltoniana de un sistema clásico. Por lo tanto se dice que la cantidad E definida por (1.11) es la energía del sistema.

1.6 Valores Esperados

Como se mencionó antes, con la función de onda podemos extraer información de las observables del sistema en términos de las amplitudes de probabilidad para los posibles resultados de éstas durante una medición. No podemos hablar entonces del valor de la observable A al hacer la medición sino del *valor esperado* o valor promedio de A . Dicho valor está definido como

$$\langle A \rangle \equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \equiv \int \psi^* \hat{A} \psi dx \quad (1.20)$$

Si ya contamos con una representación de la función de onda en términos de las eigenfunciones de un operador \hat{A} , entonces tenemos que el valor esperado de éste queda como

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \\ &= \left\langle \sum_i C_i \psi_i | \hat{A} | \sum_j C_j \psi_j \right\rangle \\ &= \sum_{i,j} C_i^* C_j a_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle \\ &= \sum_{i,j} C_i^* C_j a_j \delta_{i,j} \\ &= \sum_i |C_i|^2 a_i \end{aligned} \quad (1.21)$$

Podemos ahora complementar la definición dada anteriormente para operadores hermitianos. Es claro de la ecuación (1.20) que

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle^* &= \left(\int \phi^* \hat{A} \psi dx \right)^* \\ &= \int \phi (\hat{A} \psi)^* dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int (\hat{A}\psi)^* \phi dx \\
&= \langle \hat{A}\psi | \phi \rangle
\end{aligned}
\tag{1.22}$$

Definiendo al operador hermitiano adjunto de A como el operador A^\dagger tal que

$$\langle \phi | \hat{A}\psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \phi | \psi \rangle
\tag{1.23}$$

se dice que A es hermitiano si es autoadjunto, i.e. $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$. Por otra parte, de la ecuación (1.22) vemos que si A es autoadjunto se tiene que $\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \rangle = \langle \hat{A} \rangle^*$, de donde concluimos nuevamente que los eigenvalores son reales para un operador hermitiano.

Con las nociones sobre las soluciones de la ecuación de Schrödinger que se acaban de revisar y con las ecuaciones vistas para extraer información del sistema, estamos ahora en condiciones de ir en busca de un método que nos permita calcular de forma exacta las soluciones a la ecuación (1.11). En los capítulos siguientes habremos de dedicarnos a esta tarea.

Capítulo 2

Una Solución Para la Ecuación de Schrödinger Unidimensional Independiente del Tiempo

Como se mencionó en el capítulo anterior, la ecuación de Schrödinger describe la dinámica de un sistema cuántico y las soluciones de ésta contienen el total de la información que describe a la partícula. Es entonces claro que cuando deseamos entender un sistema físico descrito a través de la formulación ondulatoria de la mecánica cuántica, debemos identificar dichas soluciones. Salvo en contadas excepciones, esto constituye una tarea ardua, pues no existe una forma general de hacer el cálculo y muchas veces es necesario recurrir a métodos aproximados. De éstos existen muchos y en este trabajo se hablará de uno de ellos con algún detalle en los capítulos y apéndices siguientes. Queremos ahora explorar la posibilidad de construir una solución para la ecuación (1.11) a partir de un Ansatz propuesto inicialmente por David Bohm [1, 2], pues con su uso parece reducirse el trabajo necesario para el cálculo de las funciones de onda.

2.1 Planteamiento de una Solución para la Ecuación de Schrödinger

Existen muchas formas de atacar el problema de resolver la ecuación (1.11). Los métodos que se siguen dependen principalmente del tipo de potencial V con el que interactúa la partícula. Al plantear nuestra solución, sin embargo,

dejaremos el problema de la forma del potencial para más tarde, cuando el desarrollo imponga de manera natural las condiciones que éste debe satisfacer. Nos enfocamos de momento en resolver la ecuación diferencial de forma puramente matemática y sin tomar consideraciones físicas en este punto. Así, sabemos que la ecuación

$$\frac{d^2}{dx^2}f(x) + A^2f(x) = 0 \quad (2.1)$$

tiene soluciones de la forma

$$f(x) = e^{iAx} \quad (2.2)$$

Con esto en mente y recordando la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0$$

encontrada en (1.11), podemos ir más allá y proponer una solución para ésta de la forma

$$\psi(x) = R(x)e^{\frac{i}{\hbar}S(x)} \quad (2.3)$$

donde las funciones R y S son reales. Una solución idéntica se encuentra en la literatura en los trabajos relacionados con la formulación de la onda piloto (también llamada formulación de *de Broglie-Bohm*) para la mecánica cuántica [1, 12] y en algunos planteamientos de la aproximación semiclásica para resolver la ecuación de Schrödinger [8]. Por lo tanto, las conclusiones que hagamos a partir de esta expresión tal vez también puedan ser utilizadas bajo este enfoque.

Continuando con la solución, si sustituimos el Ansatz (2.3) en la ecuación (1.11), vemos que ésta se separa en dos partes, una real y otra imaginaria. Con esta separación podemos hacer una primera evaluación de la validez de nuestro Ansatz y encontramos la forma que deben tener las funciones $R(x)$ y $S(x)$. De forma explícita, vemos que

$$\psi = Re^{\frac{i}{\hbar}S} \quad (2.4)$$

$$\psi' = \left(R' + \frac{i}{\hbar}RS'\right)e^{\frac{i}{\hbar}S} \quad (2.5)$$

$$\psi'' = \left[\left(R'' - \frac{1}{\hbar^2} R S'^2 \right) + \frac{i}{\hbar} (2R'S' + R S'') \right] e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \quad (2.6)$$

donde el apóstrofe significa diferenciación respecto a x . Al sustituir las expresiones anteriores en (1.11) tenemos que ésta queda de la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(R'' - \frac{1}{\hbar^2} R S'^2 \right) + \frac{i}{\hbar} (2R'S' + R S'') \right] e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} + (V - E) R e^{\frac{i}{\hbar} S} = 0 \quad (2.7)$$

que se puede escribir también como

$$\hbar^2 R'' - R S'^2 + i\hbar(2R'S' + R S'') + 2mR(E - V) = 0 \quad (2.8)$$

que podemos separar en dos ecuaciones. La primera de éstas corresponde a la parte real:

$$-R S'^2 + 2mR(E - V) + \hbar^2 R'' = 0 \quad (2.9)$$

y otra corresponde a la parte imaginaria:

$$2R'S' + R S'' = 0 \quad (2.10)$$

Esta última expresión nos permite hacer una evaluación preliminar de la validez del Ansatz (2.3). Para esto multiplicamos la ecuación anterior por el factor R/m , con lo que obtenemos la ecuación

$$\frac{1}{m} (2RR'S' + R^2 S'') = 0 \quad (2.11)$$

que podemos reescribir como

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{R^2 S'}{m} \right) = 0 \quad (2.12)$$

Recordando que nuestro problema es independiente del tiempo, la ecuación de continuidad toma la forma

$$\frac{d}{dx} j = 0 \quad (2.13)$$

Comparando esta ecuación con (2.12) concluimos que el término $R^2 S'/m$ en ésta debe ser la corriente de probabilidad j . Esto lo verificamos sustituyendo (2.3) la definición de j , obteniendo

$$\begin{aligned}
j &= \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \\
&= \frac{\hbar}{2im} \left(R \left(R' + \frac{i}{\hbar} R S' \right) - \left(R' - \frac{i}{\hbar} R S' \right) R \right) \\
&= \frac{\hbar}{2im} \left(\frac{2i}{\hbar} R^2 S' \right) \\
&= \frac{R^2 S'}{m}
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Es decir, es correcto concluir que el término $R^2 S'/m$ que aparece al modificar la ecuación (2.10) es la corriente de probabilidad j y que esta ecuación nos es otra más que la ecuación de continuidad. Esto nos permite decir que, al menos hasta este punto, la solución (2.3) y la separación de la ecuación (1.11) en una parte real y otra imaginaria son físicamente consistentes.

Continuando con nuestro problema, sabemos que para tener una solución completa debemos determinar las funciones R y S . Como tenemos dos ecuaciones y dos incógnitas, R y S , podemos encontrar soluciones exactas para nuestro sistema. Estamos suponiendo que las derivadas de las funciones R y S las podremos calcular una vez que éstas se hayan encontrado, así que las expresiones que a continuación se encuentren estarán en términos de alguna o algunas de las derivadas. Tomamos primeramente la parte real de la ecuación de Schrödinger (2.9) y acomodamos los términos para despejar aquellos que dependen de la función S , encontrando que

$$S'^2 = 2m \left(E - V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{R''}{R} \right) \tag{2.15}$$

de donde obtenemos

$$S' = \pm \sqrt{2m \left(E - V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{R''}{R} \right)} \tag{2.16}$$

o bien, integrando ambos lados de la ecuación

$$S = \pm \int \sqrt{2m \left(E - V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{R''}{R} \right)} dx \tag{2.17}$$

Antes de seguir, observamos que una expresión para S en términos de j y R se puede calcular si a la ecuación (2.9) la multiplicamos por R/m . Con esto se encuentra que

$$S = \int \frac{R}{j} (2R(E - V) + \hbar R'') dx \quad (2.18)$$

Puesto que ésta y (2.17) son equivalentes, notamos que la función S sólo tendrá sentido si $j \neq 0$, es decir si

$$R \neq 0 \quad (2.19)$$

$$S' \neq 0 \quad (2.20)$$

Una vez hecha esta aclaración podemos seguir buscando nuestra la solución. Suponiendo que ambas desigualdades se cumplen, separamos los términos dependientes de R de los de S en la expresión para la parte imaginaria (2.10) dividiéndola entre j . Es decir, reescribimos la ecuación como

$$\frac{2R'}{R} + \frac{S''}{S'} = 0 \quad (2.21)$$

Claramente esta expresión es equivalente a

$$\begin{aligned} 2 \frac{d}{dx} \ln R + \frac{d}{dx} \ln S' &= \\ \frac{d}{dx} (\ln R^2 + \ln S') &= \\ \frac{d}{dx} \ln (R^2 S') &= \\ \frac{d}{dx} \ln (jm) &= 0 \end{aligned} \quad (2.22)$$

Integrando ahora ambos lados de la última expresión obtenemos

$$\ln jm = C_0 \quad (2.23)$$

donde C_0 es una constante de integración. Podemos despejar el término jm elevando a la función exponencial por cada uno de los términos de la igualdad (2.23), lo que nos da como resultado

$$jm = e^{C_0} = C^2 \quad (2.24)$$

Esto nos dice que el flujo j es constante y por las condiciones (2.19) y (2.20) decimos que $C \neq 0$. Podemos usar este resultado y la forma de j para obtener la expresión para la función R en términos de la derivada de S de la forma

$$R = \pm \frac{C}{\sqrt{S'}} \quad (2.25)$$

Sustituyendo en el Ansatz inicial, tenemos que siempre que el flujo j sea distinto de cero la función de onda (2.3) puede ser escrita como función únicamente de S de la forma

$$\boxed{\psi_\epsilon = \frac{C_\pm}{\sqrt{S'}} e^{\frac{i}{\hbar} S}} \quad (2.26)$$

Con las expresiones (2.17) y (2.25) tenemos dos expresiones que nos definen a R en términos de S y/o sus derivadas y viceversa. Podemos entonces encontrar la forma de S en términos de sus derivadas y complementar a la solución anterior. Para esto, primeramente derivamos dos veces la expresión (2.25), obteniendo

$$R' = -C_\pm \frac{S''}{2S'^{3/2}} \quad (2.27)$$

$$R'' = C_\pm \left(\frac{3S''^2}{4S'^{5/2}} - \frac{S'''}{2S'^{3/2}} \right) \quad (2.28)$$

Con esto podemos construir el término que depende de la función $R(x)$ y sus derivadas en la expresión (2.17) en términos de $S(x)$ y sus derivadas:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{R''}{R} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3S''^2}{4S'^2} - \frac{S'''}{2S'} \right) \quad (2.29)$$

Ahora, sustituyendo este último resultado en la ec. (2.17) tenemos una expresión para S en términos de sus derivadas de la forma

$$S = \pm \int \sqrt{2m \left(E - V + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3S''^2}{4S'^2} - \frac{S'''}{2S'} \right) \right)} dx \quad (2.30)$$

o bien

$$S' = \pm \sqrt{2m \left(E - V + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3S''^2}{4S'^2} - \frac{S'''}{2S'} \right) \right)} \quad (2.31)$$

Con cualquiera de estas dos últimas ecuaciones tenemos definida a la solución (2.26) de forma cerrada. Resulta notable el hecho de que el único término en todas las ecuaciones encontradas desde la separación de la ecuación de Schrödinger que depende explícitamente de \hbar es el de la expresión (2.29). Más adelante en este mismo capítulo se hará una discusión de las implicaciones o interpretaciones que se desprenden de tal dependencia. Por el momento nos limitaremos a renombrarlo como

$$V_Q = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3S''^2}{4S'^2} - \frac{S'''}{2S'} \right) \quad (2.32)$$

con lo cual la expresión (2.30) queda de una forma más compacta:

$$S = \pm \int \sqrt{2m(E - V + V_Q)} dx \quad (2.33)$$

Para verificar que (2.26) sea efectivamente una solución para la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo la sustituimos en (1.11). Esto nos lleva a la ecuación

$$-S'^2 + 2m(E - V) + \hbar^2 \left(\frac{3S''^2}{4S'^2} - \frac{S'''}{2S'} \right) = 0 \quad (2.34)$$

que por la expresión (2.32) podemos reescribir como

$$-S'^2 + 2m(E - V + V_Q) = 0 \quad (2.35)$$

Claramente podemos ver que si derivamos una vez y elevamos al cuadrado la expresión (2.33) y la sustituimos en (2.35), esta última ecuación se satisface de forma exacta. Esto quiere decir que la función ψ_ϵ es una solución exacta para la ecuación (1.11) si y sólo si la función S satisface la ecuación (2.33) y $j \neq 0$. Un proceso para encontrar dicha función se explora en el capítulo 4.

La expresión final encontrada ψ_ϵ junto con la ecuación (2.30) constituye un avance en los objetivos de este trabajo, pues se trata de un sistema de ecuaciones que definen la forma de una solución exacta de la ecuación de onda.

En síntesis, observamos que es posible satisfacer exactamente a la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo si

1. proponemos una función de onda de la forma

$$\psi_\epsilon = \frac{C_\pm}{\sqrt{S'}} e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

2. encontramos a la función S que satisfaga la ecuación

$$S = \pm \int \sqrt{2m \left(E - V + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3S''^2}{4S'^2} - \frac{S'''}{2S'} \right) \right)} dx$$

3. el flujo j del sistema es constante y distinto de cero.

2.2 El Potencial Cuántico

Es interesante ver que el término que depende de las derivadas de orden superior de S en (2.30), al que convenientemente llamamos V_Q en (2.32), es el único elemento en la ecuación que depende explícitamente de \hbar . Podemos tratar de entender este término llevando primero las ecuaciones obtenidas al límite clásico. En el llamado *límite de Planck*, donde

$$\hbar \rightarrow 0 \tag{2.36}$$

las leyes de la mecánica cuántica deben reducirse a las leyes de la mecánica clásica¹. En este sentido, vemos que el límite clásico de (2.34) es

$$-S'^2 + 2m(E - V) = 0 \tag{2.37}$$

o bien

$$E = \frac{S'^2}{2m} + V \tag{2.38}$$

Ahora, si suponemos que la dependencia de S en \hbar dada por (2.30) es tal que $S_{\hbar \rightarrow 0}$ es la acción clásica del sistema de modo que se cumpla

¹Cabe señalar que este límite es complementario al *principio de correspondencia de Bohr*, en el que el límite clásico se encuentra al tomar números cuánticos grandes ($n \rightarrow \infty$) [6]

$$S'_{\hbar \rightarrow 0} = p \quad (2.39)$$

donde $p(x)$ es la cantidad de movimiento clásica de la partícula en una dimensión, la expresión (2.38) corresponde a la ecuación de Hamilton-Jacobi.

El que exista un límite clásico para la ecuación de Schrödinger en términos de la ecuación de H-J al usar la solución (2.26) es un claro indicador de que dicha expresión es correcta en el sentido de que reproduce el comportamiento clásico de la partícula cuando los términos dependientes de \hbar son despreciados. En este sentido, la información cuántica del sistema se encuentra contenida únicamente en el término V_Q . Retomando las ideas de Bohm, podemos decir entonces que si la ecuación de H-J describe correctamente a la partícula clásicamente, entonces el término V_Q puede verse como una corrección a los parámetros que determinan clásicamente el sistema, es decir la cantidad de movimiento p , la energía E y potencial V , y nos lleva a una interpretación cuántica de todo el sistema [3].

Por la discusión anterior y por inspección de las ecuaciones (2.35) y (2.37) podemos concluir que mientras la partícula clásica interactúa con un potencial V y la describen parámetros clásicos, la partícula cuántica interactúa con un potencial $V - V_Q$ y la describen parámetros corregidos. En algunos textos y bajo el formalismo de la *onda piloto* para interpretar a la mecánica cuántica, al potencial V_Q se le suele dar el nombre de *potencial cuántico de Bohm* [2, 12].

2.3 Un Acercamiento a la Validez de la Solución

ψ_ϵ

Aunque aún no tenemos un método para determinar de manera precisa la forma de la función S que define a nuestra solución ψ_ϵ , podemos hacer una prueba sencilla con la finalidad de explorar su validez y aplicabilidad. Por ejemplo, podemos intentar resolver el problema de una partícula de energía E confinada por una caja de potencial $V(x)$ de ancho a con paredes infinitas, cuyas soluciones analíticas podemos calcular o encontrar en los libros de texto [6]. Primero veamos la forma del potencial con el que interactúa la partícula:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ 0, & x \in (0, a) \\ \infty, & x \geq a \end{cases}$$

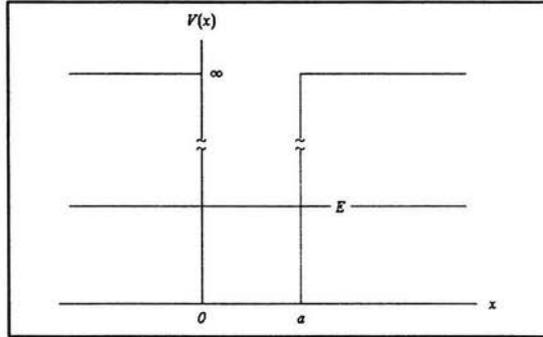


Figura 2.1: Caja de potencial con paredes infinitas

Sabemos que en las regiones fuera del intervalo $(0, a)$ la función debe ser nula. Esto hace que ahí la solución que queremos probar no sea aplicable pues ahí $j = 0$. Sin embargo, es obvio que no la necesitamos; ya sabemos que es cero. Nos enfocamos entonces en la región $(0, a)$. Como el potencial V es nulo, entonces

$$S = \pm \int \sqrt{2m(E + V_Q)} dx \quad (2.40)$$

Por otra parte, puesto que en un sistema ligado unidimensional como el que estamos tratando las funciones de onda deben ser reales [9], podemos mejor emplear una combinación lineal de las soluciones ψ_ϵ^+ y ψ_ϵ^- para plantear la solución del sistema en la región $(0, a)$. La forma más general de escribir a nuestra función de onda es

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{S'}} \sin(S/\hbar) + \frac{C_2}{\sqrt{S'}} \cos(S/\hbar) \quad (2.41)$$

Antes de continuar, nos preguntamos lo siguiente: ¿cuál podría ser la contribución neta del potencial V_Q en nuestro sistema? Recordando la discusión en la sección previa podemos decir que, puesto que la partícula es libre

en el interior de la caja, los efectos cuánticos sobre ésta deben ser pocos. Podríamos incluso suponer que el potencial cuántico en el interior de la caja es nulo. Esta suposición nos lleva a lo siguiente:

$$\begin{aligned} S &= \int \sqrt{2mEx} dx \\ &= \sqrt{2mEx} \end{aligned} \quad (2.42)$$

con lo cual

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{C_1}{\sqrt{2mE}} \sin\left(\frac{\sqrt{2mEx}}{\hbar}\right) + \frac{C_2}{\sqrt{2mE}} \cos\left(\frac{\sqrt{2mEx}}{\hbar}\right) \\ &= \frac{2C_1}{\sqrt{k\hbar}} \sin(kx) + \frac{C_2}{\sqrt{k\hbar}} \cos(kx) \end{aligned} \quad (2.43)$$

donde $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Aplicando las condiciones de frontera para la función de onda tenemos que

$$\psi_\epsilon(0) = \psi_\epsilon(a) = 0 \quad (2.44)$$

de donde se concluye que

$$C_2 = 0 \quad (2.45)$$

$$k = k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (2.46)$$

Finalmente obtenemos el valor de C_1 normalizando la probabilidad de encontrar a la partícula en el intervalo $(0, a)$:

$$\begin{aligned} \psi^* \psi &= \frac{C_1^* C_1}{k_n \hbar} \int_0^a \sin^2(k_n x) dx \\ &= |C_1|^2 \frac{a}{2k_n \hbar} = 1 \end{aligned} \quad (2.47)$$

de donde obtenemos

$$C_1 = \sqrt{\frac{2k_n \hbar}{a}} \quad (2.48)$$

Sustituyendo este resultado y (2.46) en la solución (2.43) tenemos que la función de onda queda como

$$\begin{aligned}
 \psi &= \frac{C_1}{\sqrt{k_n \hbar}} \sin(k_n x) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{k_n \hbar}} \left(\sqrt{\frac{2k_n \hbar}{a}} \right) \sin(k_n x) \\
 &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)
 \end{aligned} \tag{2.49}$$

y la energía se cuantiza como

$$E = E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi \hbar}{a} \right)^2 \tag{2.50}$$

Sabemos que estas últimas expresiones son las correctas para describir a la partícula en la caja de potencial así como la energía que la caracteriza [6].

Como acabamos de mostrar, una solución válida para el caso del pozo de potencial infinito puede ser construida con una combinación lineal de ψ_ϵ^+ y ψ_ϵ^- y con una suposición simple y razonable: el potencial cuántico V_Q es cero dentro de la caja. Si bien es cierto que un ejemplo no es suficiente para mostrar la validez general de una hipótesis, el desarrollo anterior nos señala dos puntos importantes:

1. Existe al menos un sistema cuántico que podemos describir de manera exacta mediante el uso de la solución ψ_ϵ .
2. Es posible encontrar al menos una función S que satisfaga de forma exacta la ecuación (2.30).

Una vez que la solución ha sido probada para un sistema sencillo, podemos continuar con la búsqueda de una metodología más general que nos permita encontrar la función S que describa la interacción de nuestra partícula en otros casos tal vez más complejos.

Capítulo 3

Determinación de la Función de Onda ψ_ϵ Mediante un Proceso Iterativo

En el capítulo anterior dijimos que es posible encontrar una solución exacta para la ecuación de Schrödinger unidimensional en términos de un parámetro S que aún no hemos determinado. Sin embargo, vimos que con algunas suposiciones razonadas y razonables esta función puede ser aproximada y obtuvimos así la expresión exacta de la función de onda para un problema de prueba. La tarea siguiente de este trabajo consiste en buscar un método que nos permita determinar de manera precisa la forma de la función S esperando poder encontrar con éste las funciones de onda de cualquier problema unidimensional independiente del tiempo.

3.1 Hipótesis de Iteración

Cuando se construyó la solución exacta (2.26) para la ecuación de Schrödinger unidimensional, esta quedó determinada por una función S que recoge los valores del sistema que queremos estudiar. Encontramos entonces que esta función debe cumplir con la relación (2.33) para que la solución exacta tenga sentido. Hasta ahora no hemos hablado de cómo podemos calcular esta función S de modo que la condición se cumpla, por lo cual nos proponemos ahora a explorar un método con este fin.

La forma de la ecuación (2.30) nos recuerda una relación de recurrencia, pues S se encuentra definida en términos de sus propias derivadas. Sabemos que para una relación de este tipo es necesario determinar las condiciones iniciales de la recurrencia. Esto nos sugiere que necesitamos hacer una primera aproximación de la función para poder iniciar la recurrencia. Por otra parte, la discusión sobre el potencial cuántico muestra una conexión entre la solución exacta (2.26) y el límite clásico de las ecuaciones de movimiento del sistema. Más adelante se verá más claramente este vínculo. Por ahora estos hechos nos permiten tomar una hipótesis planteada originalmente para las soluciones de la aproximación semiclásica [3] para resolver la ecuación (1.11) y aplicarla a nuestra solución.

Durante el estudio de la aproximación semiclásica para resolver la ecuación de Schrodinger unidimensional independiente del tiempo en [7] el autor nos dice que

“En realidad, un proceso iterativo es sugerido por el hecho de que $u''(x)$ es cero para la partícula libre. Sospechamos que esta segunda derivada se mantiene relativamente pequeña si el potencial no varía violentamente”

Aplicado a nuestra solución, la función $u(x)$ que se menciona en la cita se refiere a los términos relacionados con S y sus derivadas. La condición $u''(x) = 0$ se refiere a que los términos S'' y S''' son cero, lo cual es consistente con el ejemplo visto al final del capítulo 2. Si la segunda derivada de la que habla el autor se mantiene pequeña nosotros podemos decir que el potencial cuántico se mantiene pequeño en nuestra solución. Tomaremos, pues, la sugerencia del autor y buscaremos determinar a la función S mediante un proceso iterativo. Antes de proceder nos parece importante señalar que no se encontraron referencias en la literatura sobre estudios de esta hipótesis, por lo que con este trabajo se podría dar alguna luz sobre su validez o aplicabilidad.

3.2 El Proceso Iterativo

Estaremos realizando un proceso iterativo para calcular la forma de la función S de la solución ψ_ϵ de acuerdo a los siguientes criterios:

1. Como la función S depende de sus derivadas y no tenemos idea de como es ésta, lo primero que haremos es tomar una “definición adecuada” -es

decir una aproximación- de la función de modo que podamos calcularlas. A esta función, que define las condiciones iniciales de la iteración, la llamaremos S_0

2. Posteriormente construiremos el potencial cuántico V_{Q_0} correspondiente a esa función. Con esta primera aproximación de V_Q buscamos hacer una mejor aproximación de S de acuerdo a la forma (2.33). A ésta la llamaremos S_1 .
3. Con este resultado, podemos construir un nuevo potencial cuántico, que nos sirve para construir la siguiente aproximación de S y así hasta lograr autocontención del sistema.
4. Cada vez que encontremos una expresión aproximada para S construiremos también la función de onda aproximada de acuerdo con la expresión exacta (2.26) antes de calcular el siguiente potencial cuántico.
5. Diremos que el método funciona si la función aproximada de S converge rápidamente, con lo cual convergen también el potencial cuántico y la solución.

3.3 Soluciones Iteradas

Para iniciar el proceso tomamos al potencial cuántico V_Q como nulo. Con esto reescribimos la expresión (2.33) y construimos la función S a orden cero:

$$S_0 = \pm \int \sqrt{2m(E - V)} dx \quad (3.1)$$

que inmediatamente empleamos para definir la aproximación de nuestra función de onda a orden cero sustituyendo en la solución exacta obteniendo

$$\psi_0 = \frac{C_{\pm}}{\sqrt{S'_0}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} S_0} \quad (3.2)$$

Esta primera aproximación de la función de onda puede ser calculada ya de manera formal, pues sólo depende de los valores de E y V . Así, la función de onda queda a orden cero como

$$\psi_0 = \frac{C_{\pm}}{\sqrt[4]{2m(E - V)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int \sqrt{2m(E - V)} dx} \quad (3.3)$$

De aquí surgen las primeras observaciones del proceso. Primero, la ecuación anterior es igual a la solución encontrada por la aproximación semiclásica [1, 3, 5, 6, 7, 8, 10, 11]. Esto nos muestra que la solución exacta es más general y que existe un límite para el cual ésta nos devuelve los resultados de una aproximación ampliamente aceptada. Esto también nos ayuda a justificar *a posteriori* el haber escogido llevar a cabo un proceso que originalmente fuera pensado para la aproximación semiclásica.

Segundo, también de la ecuación anterior resulta evidente que en los puntos $\{x_i\}$ en los que

$$E = V(x_i) \quad (3.4)$$

la solución ψ_0 no será una aproximación válida de una solución exacta, pues ésta diverge y la amplitud de probabilidad se vuelve infinita. Esto nos recuerda los problemas que presenta la aproximación semiclásica en los llamados puntos de retorno. Nos conviene entonces seguir con la iteración para ver si este problema se resuelve de manera natural.

Volviendo al proceso, si sustituimos (3.2) en (1.11) llegamos a

$$-S_0'^2 + 2m(E - V) + \hbar^2 \left(\frac{3S_0''^2}{4S_0'^2} - \frac{S_0'''}{2S_0'} \right) = 0 \quad (3.5)$$

donde claramente vemos que, de acuerdo a (3.1), ψ_0 es una solución exacta para la ecuación de Schrödinger si $\hbar \rightarrow 0$. Es decir, a orden cero, el potencial cuántico (2.32) es de la forma

$$V_{Q_0} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3S_0''^2}{4S_0'^2} - \frac{S_0'''}{2S_0'} \right) \quad (3.6)$$

Esta corrección la podemos calcular de forma exacta empleando la definición de S_0 . Obtenemos nuevamente una función que depende únicamente de la energía inicial de la partícula y de la forma del potencial inicial con el que ésta interactúa. Esto es,

$$V_{Q_0} = \frac{\hbar^2}{32m} \left(\frac{5V'^2}{(E - V)^2} + \frac{4V''}{E - V} \right) \quad (3.7)$$

y por la forma en que estamos considerándolo podemos decir que

$$\frac{\hbar^2}{32m} \left(\frac{5V'^2}{(E-V)^3} + \frac{4V''}{(E-V)^2} \right) \ll 1 \quad (3.8)$$

De nuevo se ve que si se cumple la condición (3.4) la condición anterior no podrá ser satisfecha, lo cual implica que el potencial cuántico deja de ser despreciable. A menos, claro, de que se cumpla que $V'^2 \rightarrow 0$ y $V'' \rightarrow 0$ más rápido que $(E-V)^2$ y $E-V$, respectivamente, en toda vecindad que contenga a los puntos $\{x_i\}$ que satisfagan (3.4), lo cual no se puede garantizar para cualquier valor de E .

Sin embargo, omitiendo esos puntos $\{x_i\}$, vemos que esta primera aproximación puede emplearse en las regiones donde

1. El potencial V sea tal que sus primeras dos derivadas sean suficientemente pequeñas.
2. La energía E de la partícula sea suficientemente mayor -o suficientemente menor- que el potencial V .

Para seguir con el proceso iterativo ahora usamos al potencial cuántico a orden cero para definir de la función S a primer orden

$$S_1 = \pm \int \sqrt{2m(E-V+V_{Q_0})} dx \quad (3.9)$$

$$= \pm \int \sqrt{2m \left(E - V + \frac{\hbar^2}{32m} \left(\frac{5V'^2}{(E-V)^2} + \frac{4V''}{E-V} \right) \right)} dx \quad (3.10)$$

y la solución a primer orden

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{C_{\pm}}{\sqrt{S'_1}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} S_1} \\ &= \frac{C_{\pm}}{\sqrt{2m(E-V+V_{Q_0})}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int \sqrt{2m(E-V+V_{Q_0})} dx} \\ &= \frac{C_{\pm}}{\sqrt{2m}} \left[E - V + \frac{\hbar^2}{32m} \left(\frac{5V'^2}{(E-V)^2} + \frac{4V''}{E-V} \right) \right]^{-1/4} \times \end{aligned}$$

$$\times e^{\pm \frac{i\sqrt{2m}}{\hbar} \int \left[E - V + \frac{\hbar^2}{32m} \left(\frac{5V'^2}{(E-V)^2} + \frac{4V''}{E-V} \right) \right]^{1/2} dx} \quad (3.11)$$

Podemos ver de esta última expresión que ahora la función aproximada es nula en los puntos en que $E = V$, pues si V' es distinto de cero, el término $(E - V)^2$ manda toda la amplitud a cero. También vemos que salvo en casos muy sencillos la integral en la exponencial no podrá resolverse de forma analítica. Pero ahora continuamos con el proceso para ver si en la siguiente iteración se puede ver más claramente el comportamiento de la solución y, principalmente, ver si ésta puede estar convergiendo.

Como la forma del potencial cuántico se mantiene para cualquier paso de la iteración, calculamos directamente V_{Q_1} empleando la definición (2.32) sin recurrir de nuevo a la solución de (1.11). Tenemos así que

$$V_{Q_1} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3S_1''^2}{4S_1'^2} - \frac{S_1''''}{2S_1'} \right) \quad (3.12)$$

y la función S a segundo orden es

$$S_2 = \pm \int \sqrt{2m(E - V + V_{Q_1})} dx \quad (3.13)$$

Desgraciadamente las expresiones anteriores se complican tanto al reducir las a funciones de E , V y sus derivadas que resulta impráctico escribirlas en este texto. Sin embargo, es importante decir que el término $\sqrt{2m(E - V + V_{Q_1})}$ tiene ahora nueve raíces, seis más que en el paso anterior. También es importante mencionar que la amplitud sigue yéndose a cero en los puntos en que $E = V$. Tal vez la parte más destacable sea que ahora aparecen términos proporcionales a \hbar^4 en el potencial cuántico. No es difícil entonces predecir que en la n -ésima iteración habrán términos proporcionales a \hbar^{2n} . Además, puesto que la parte de la exponencial puede escogerse como una función puramente real, ésta sólo oscila de modo que el comportamiento de la integral no afecta mucho a la forma de la solución en estos mismos en tanto no sea divergente. Por otra parte, escribir de forma explícita las iteraciones siguientes también carece de utilidad, por lo que mejor sólo escribimos las formas generales de las n -ésimas aproximaciones de las funciones V_Q , S y ψ_ϵ :

$$V_{Q_n} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3S_n''^2}{4S_n'^2} - \frac{S_n'''}{2S_n'} \right) \quad (3.14)$$

$$S_n = \pm \int \sqrt{2m(E - V + V_{Q_{n-1}})} dx \quad (3.15)$$

$$\psi_n = \frac{C_{\pm}}{\sqrt{S_n'}} e^{\pm i S_n} \quad (3.16)$$

Para analizar la evolución de la solución a través de la iteración necesitamos aplicar el proceso a problemas específicos. Nuestra solución ya mostró su viabilidad con un ejemplo sencillo por lo que tiene sentido intentar un ejemplo más interesante. Además ahora podemos buscar calcular las funciones S con las ecuaciones y el procedimiento que acabamos de establecer. La aplicabilidad de éste muy probablemente esté en función de la forma del potencial que estudiemos, pues de las ecuaciones encontradas en (3.3) y (3.11) se ve que ésta seguramente determinará la forma en que se resuelven las integrales.

Para que nuestra solución sea completa, es decir que describa siempre de forma correcta a la partícula, debemos hacer una consideración adicional. Hasta este momento hemos supuesto que los términos que involucran raíces pares son siempre reales. Pero por ejemplo ¿qué pasa si $E < V - V_Q$? Claramente la solución exacta se vuelve imaginaria, lo cual contradice lo visto en [9]. Sucede también que si, tal como hemos estado suponiendo, el potencial cuántico se mantiene pequeño, la desigualdad anterior puede expresar su mismo sentido a través de la desigualdad $E < V$. Las regiones del espacio en las que esto se cumple son aquellas en las que clásicamente la partícula no puede ser encontrada. Sin embargo, haciendo referencia una vez más a las propiedades probabilísticas de la mecánica cuántica, existe una probabilidad distinta de cero de encontrar a la partícula cuántica en las zonas clásicamente inaccesibles. En el capítulo siguiente se desarrolla de manera similar a la hecha en el capítulo dos una solución para la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo en las regiones clásicamente prohibidas.

Capítulo 4

Revisión de la Aproximación Semiclásica

En la literatura se encuentra que las soluciones a la ecuación de Schrödinger correspondientes a la aproximación semiclassical en las regiones en las que $E < V$ son postuladas sin que un proceso las justifique [1, 6, 7, 9, 11]. Al emplearlas se observa que éstas satisfacen la ecuación (1.11), pero siguen sin ser claros los pasos que hay que seguir para *construirlas*. Además, siguiendo un línea de razonamiento análoga a la empleada para calcular las soluciones en las regiones en que $E > V$ planteada tradicionalmente en los libros, se encuentra que las partes real e imaginaria del Ansatz usualmente empleado en la descripción del método intercambian papeles sin justificación previa ni explicación física que la fundamente. Es decir, de acuerdo al método se puede seguir tratando a la función S' como la acción clásica en el límite $\hbar \rightarrow 0$, pero en la región que en este momento nos interesa esta función resulta imaginaria, aun cuando sabemos que debe ser cero. Tratando de dar una explicación coherente a este problema y respaldados por la reducción de la solución exacta a la solución de la aproximación semiclassical (3.3), en las siguientes secciones mostramos un procedimiento en el que empleamos el razonamiento usado al construir la solución ψ_ϵ para encontrar la forma de las soluciones de la ecuación (1.11) en el caso clásicamente prohibido. Mostramos también como estas nuevas soluciones pueden reducirse a las soluciones postuladas por la aproximación semiclassical. En el apéndice A de este trabajo se hace una repaso detallado de esta aproximación. Para esta sección haremos uso de los resultados que ahí se exponen sin entrar en muchos detalles.

4.1 Analizando el Caso $E < V$

Recordando la aproximación semiclásica [3, 1, 6, 9, 11, 8, 7], se tiene que empleando el el Ansatz

$$\psi = e^{r + \frac{i}{\hbar} S}$$

en la ecuación de Schrödinger, se obtienen las ecuaciones

$$E = \frac{1}{2m} S'^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m} [r'^2 + r'']$$

$$2r'S' + S'' = 0$$

Que a su vez dan origen a la ecuación de Hamilton-Jacobi

$$E = \frac{1}{2m} S'^2 + V$$

y a las relaciones

$$R = e^r = \frac{1}{\sqrt{S'}} = \frac{1}{\sqrt{p}}$$
$$p \equiv S'$$

cuando se hace un desarrollo de S en serie de potencias de \hbar y nos quedamos con los términos de orden menor que \hbar^2 ; de aquí que se le llame aproximación semiclásica a este procedimiento.

La solución encontrada por la aproximación está escrita en términos de la cantidad de movimiento clásico del sistema de la forma:

$$\psi_{sc} = \frac{C_{\pm}}{\sqrt{p}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p dx} \quad (4.1)$$

$$p = \pm \sqrt{2m(E - V)} \quad (4.2)$$

Es muy importante hacer notar que estas expresiones son válidas únicamente en aquellas regiones que le son clásicamente accesibles a la partícula, aquellas en que $E > V$. Las soluciones correspondientes a las regiones en que $E < V$ son postuladas [3, 1, 6, 9, 11, 7] suponiendo que un proceso análogo al seguido

para las soluciones en las regiones complementarias se puede llevar a cabo. Estas son de la forma

$$\psi_{sc} = \frac{C_{\pm}}{\sqrt{q}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int q dx} \quad (4.3)$$

$$q = \pm \sqrt{2m(V - E)} \quad (4.4)$$

Sin embargo, al hacer el desarrollo para estas nuevas regiones, se observa que la función S , asociada con la acción clásica del sistema debido a la reducción a la ecuación de H-J, cambia de real a imaginaria al pasar de la región $E > V$ a la región $E < V$.

Para evitar esta ambigüedad en la función S , podemos volver al proceso visto en el capítulo 2. Si planteamos ahora un Ansatz de la forma

$$\psi = e^{\frac{S}{\hbar} + ir} \quad (4.5)$$

al sustituir en la ecuación de Schrodinger unidimensional independiente del tiempo se tienen las ecuaciones

$$E = -\frac{1}{2m} S'^2 + V + \frac{\hbar^2}{2m} \left[r'^2 - \frac{1}{\hbar} S'' \right] \quad (4.6)$$

$$\frac{2}{\hbar} r' S' + r'' = 0 \quad (4.7)$$

siempre y cuando $\psi \neq 0$. Si análogamente buscamos el comportamiento de ambas cuando $\hbar \rightarrow 0$, obtenemos que

$$E = -\frac{1}{2m} S'^2 + V \quad (4.8)$$

y que se debe cumplir que

$$r' = 0 \quad (4.9)$$

pues de otro modo, si $r' \neq 0$, la ecuación (4.7) diverge.

De las ecuaciones anteriores podemos decir un par de cosas: primero, es claro del resultado (4.9) que

$$r = C_0 \quad (4.10)$$

donde C es una constante de integración. Y segundo y más importante, que la expresión (4.8) es del *tipo* de la ecuación de Hamilton-Jacobi con la salvedad de que al reordenar, si *esperamos* que para el primer término del lado izquierdo se cumpla que

$$S'^2 > 0 \quad (4.11)$$

entonces *exigimos* que

$$V > E \quad (4.12)$$

De acuerdo con la definición de $S'(x)$ vista como la acción clásica y la cual se pide que sea un función real [3], la condición (4.11) se cumple inmediatamente. Por lo tanto, nuestro problema sólo puede estar definido en la región del espacio en la que la condición (4.12) se cumple. Es decir, todo cuanto obtengamos del Ansatz (4.5) será válido sólo para el caso en que $V > E$.

Sustituyendo (4.9) en (4.6) nos deja con

$$E = -\frac{1}{2m}S'^2 + V - \frac{\hbar}{2m}S'' \quad (4.13)$$

Podemos ahora definir al potencial cuántico de este sistema de forma similar a como se hizo al encontrar (2.32)

$$V_Q = \frac{\hbar}{2m}S'' \quad (4.14)$$

Es importante notar que este potencial es proporcional a \hbar , mientras que el potencial cuántico de la región clásicamente permitida (2.32) es proporcional a \hbar^2 . Esto nos muestra de inmediato que la contribución al sistema del primero es mayor que la del segundo. Por otra parte, de la ecuación (4.13) también podemos despejar una expresión para S' de la forma

$$S'^2 = \frac{1}{2m}(V - E) - \hbar S'' \quad (4.15)$$

entonces

$$S' = \pm \sqrt{2m(V - E) - \hbar S''} \quad (4.16)$$

por lo que

$$\begin{aligned}
 S &= \pm \int \sqrt{2m(V - E) - \hbar S''} dx \\
 &= \pm \int \sqrt{q^2} \sqrt{1 - \frac{\hbar}{q^2} S''} dx \\
 &= \pm \int |q| \sqrt{1 - \frac{\hbar}{q^2} S''} dx \\
 &= \pm \int q \left(1 - \frac{\hbar}{q^2} S''\right)^{1/2} dx \tag{4.17}
 \end{aligned}$$

donde $q^2 = 2m(V - E)$. Si ahora desarrollamos la raíz en la expresión (4.17), S toma la forma

$$\begin{aligned}
 S &= \pm \int q \left(1 - \frac{\hbar}{2q^2} S'' - \dots\right) dx \\
 &= \pm \int \left(q - \frac{\hbar}{2q} S'' - \dots\right) dx \tag{4.18}
 \end{aligned}$$

Esta última expresión contiene un serie de potencias de \hbar . Si suponemos que \hbar es muy pequeña, entonces podemos despreciar los términos de la serie correspondientes a ordenes superiores de este parámetro. Esto nos deja con la ecuación

$$S = \pm \int q - \frac{\hbar}{2q} \frac{d^2 S}{dx^2} dx \tag{4.19}$$

En base a lo visto en el capítulo anterior, podemos llevar a cabo una iteración del potencial cuántico (4.14) en la expresión anterior. Definimos entonces la aproximación a orden cero de la función S como

$$S_0 = \pm \int q dx \tag{4.20}$$

que nos permite definir la aproximación de la función de onda a orden cero como

$$\begin{aligned}
\psi_0 &= e^{\frac{S_0}{\hbar} + ir} \\
&= e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int q dx + iC_0} \\
&= C e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int q dx}
\end{aligned} \tag{4.21}$$

con $C = e^{iC_0}$. Podemos definir ahora el potencial cuántico a orden cero empleando (4.20) como

$$V_{Q_0} = \frac{\hbar}{2q} \frac{d^2 S_0}{dx^2} \tag{4.22}$$

Iterando esta expresión en la siguiente aproximación de S encontramos que

$$\begin{aligned}
S_1 &= \pm \int q - \frac{\hbar}{2q} \frac{d^2 S_0}{dx^2} dx \\
&= \pm \int q - \frac{\hbar}{2q} \left(\pm \frac{dq}{dx} \right) dx \\
&= \pm \int q dx - \hbar \int \frac{1}{2q} \frac{dq}{dx} dx \\
&= \pm \int q dx - \hbar \frac{1}{2} \ln q \\
&= \pm \int q dx - \hbar \ln \sqrt{q}
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Con esto y con (4.10) podemos escribir la solución de la ecuación (1.11) para la región clásicamente inaccesible en términos del Ansatz (4.5) como

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= e^{\frac{S_1}{\hbar} + ir} \\
&= e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int q dx - \ln \sqrt{q} + iC_0} \\
&= e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int q dx} e^{-\ln \sqrt{q}} e^{iC_0} \\
&= \frac{C}{\sqrt{q}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int q dx}
\end{aligned} \tag{4.24}$$

El resultado (4.24) es el mismo que el que usualmente se propone en la literatura para los casos en que $E < V$ señalado por la aproximación semiclásica (4.3). Hemos encontrado, pues, una forma de deducir la ecuación que de

acuerdo a la aproximación semiclásica da una aproximación de la solución a la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo en la región clásicamente prohibida sin comprometer la naturaleza de la función S . Más aun, si se quiere ver a la S' como una expresión para la acción en esta región, esto puede fundamentarse con la expresión del tipo H-J (4.13).

4.2 Soluciones Iteradas

Aunque ya encontramos la solución que define la aproximación semiclásica estamos interesados en obtener una mejor descripción del sistema que la que dicho método ofrece. Por lo tanto retomamos la idea de las soluciones iteradas para esta región del espacio. Las ecuaciones que describen a la n -ésima aproximación de la solución de acuerdo a este proceso se ven de la siguiente forma

$$S_n = \pm \int q dx - \int \frac{\hbar}{2q} \frac{\partial^2 S_{n-1}}{\partial x^2} dx \quad (4.25)$$

$$\psi_n = C e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int q - \frac{\hbar}{2q} \frac{\partial^2 S_{n-1}}{\partial x^2} dx} \quad (4.26)$$

Utilizando la primera de éstas desarrollamos las primeras 3 iteraciones para obtener

$$\begin{aligned} S_0 &= \pm \int q dx \\ S_1 &= \pm \int q dx - \frac{\hbar}{2} \ln q \\ S_2 &= \pm \int q dx - \frac{\hbar}{2} \ln q \pm \frac{\hbar^2}{4} \int \frac{q''}{q^2} dx \mp \frac{\hbar^2}{4} \int \frac{q'^2}{q^3} dx \\ S_3 &= \pm \int q dx - \frac{\hbar}{2} \ln q \pm \frac{\hbar^2}{4} \int \frac{q''}{q^2} dx \mp \frac{\hbar^2}{4} \int \frac{q'^2}{q^3} dx \\ &\quad + \frac{\hbar^3}{2} \int \frac{q'q''}{q^4} dx - \frac{\hbar^3}{8} \int \frac{q^{(3)}}{q^3} dx - \frac{3\hbar^3}{8} \int \frac{q'^3}{q^5} dx \end{aligned} \quad (4.27)$$

De estas expresiones vemos que la estructura general de la función S es de la forma

$$S_n = \pm \int q dx - \frac{\hbar}{2} \ln q + O(\hbar^n), \quad n > 1 \quad (4.28)$$

por lo que la estructura de las soluciones es del tipo

$$\psi_n = \frac{C}{\sqrt{q}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int q dx} e^{O(\hbar^n)} \quad (4.29)$$

Si la serie de potencias $O(\hbar^n)$ es convergente entonces la solución ψ_n también convergerá a una solución similar a la dada por la aproximación semiclásica. Sin embargo, ésta también podría ser tal que las discontinuidades de la solución semiclásica en los puntos $E = V$ sean eliminadas y puedan conectarse suavemente las soluciones en ambos lados de los puntos de retorno. Trataremos de ver esto con algunos ejemplos en el capítulo final de este trabajo.

Capítulo 5

Evaluación del Método Iterativo

En los capítulos anteriores hemos construido soluciones para un sistema físico descrito por la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo en las regiones del espacio clásicamente accesibles e inaccesibles. Cuando tenemos a una partícula moviéndose en una región del primer tipo situada entre dos regiones del segundo tipo hablamos de estados ligados del sistema. Clásicamente, la partícula está restringida a moverse en la región intermedia pues no puede penetrar en las otras, de modo que oscila entre los puntos $\{x_i\}$ que satisfacen $E = V(x_i)$. Como ya mencionamos anteriormente, para la partícula cuántica es posible penetrar en la región prohibida, de modo que la descripción completa del sistema requiere que las soluciones en cada región converjan suavemente en dichos puntos (recordemos que la función de onda y su primera derivada deben ser continuas). Encontramos también un método con el que esperamos poder calcular de forma las soluciones en ambas regiones basado en la iteración del potencial cuántico. Vimos que con éste método pueden reducirse las soluciones a las expresiones dadas por la aproximación semiclásica lo cual ofrece una prueba modesta de la validez tanto de las soluciones como del método. Es nuestra intención en este trabajo evaluar la posibilidad de mejorar las expresiones semiclásicas con el método que proponemos así como ver si es posible empatar de esta forma las soluciones en ambas regiones a través de los puntos $\{x_i\}$. Como también mencionamos, la descripción analítica de las soluciones iteradas resulta un tanto complicada, por lo que haremos un primer acercamiento a nuestro objetivo mediante la aplicación a algunos problemas representativos de estado

ligados y cuyas soluciones exactas y aproximaciones semiclásicas conocemos. Con esto esperamos hacer un dictamen más acertado de las soluciones y del método.

5.1 El Pozo Unidimensional

Al final del capítulo 2 vimos este problema sin una metodología clara. Nos guiamos por intuición puesto que carecíamos de una mejor forma para proceder. Sin embargo probamos que una combinación lineal de las funciones ψ_ϵ^+ y ψ_ϵ^- resuelve este problema. Trataremos de resolverlo de nuevo pero ahora de una manera más formal con el procedimiento que discutimos y queremos probar. Nuevamente este problema nos será de alguna utilidad pues podrá darnos información sobre la validez del método iterativo.

Nos situamos de nuevo en el interior de la caja, donde $V = 0$. Partimos de las expresiones (3.15) y (3.16) para construir las funciones S_0 y ψ_0 , que quedan como

$$\begin{aligned} S_0 &= \pm \int \sqrt{2mE} dx \\ &= \pm \sqrt{2mE} x \end{aligned} \quad (5.1)$$

$$\psi_0 = \frac{C_\pm}{\sqrt[4]{2mE}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} x} \quad (5.2)$$

De las ecuaciones (2.40-2.50) sabemos que con la elección de $\psi = \psi_0$ obtenemos el resultado correcto. ¿Qué pasa entonces con el proceso iterativo? Para responder esto, seguiremos con el procedimiento a pesar de que sabemos que la solución a orden cero es la correcta. Al construir el potencial cuántico a orden cero obtenemos que

$$V_{Q_0} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3S_0''^2}{4S_0'^2} - \frac{S_0'''}{2S_0'} \right) \quad (5.3)$$

$$= 0 \quad (5.4)$$

pues de la ecuación (5.1) se tiene que

$$S_0'' = S_0''' = 0 \quad (5.5)$$

Por lo tanto la iteración del potencial cuántico en la aproximación de S no habrá de modificar en absoluto la expresión obtenida a orden cero sin importar el número de veces que se haga. En otras palabras, las soluciones convergen desde la primera iteración. Esto prueba de una manera muy sencilla que el procedimiento no es del todo descabellado y que al menos existe un sistema en el que el planteamiento de la solución iterada tiene sentido. Pasemos ahora a un ejemplo un poco más complicado.

5.2 El Potencial Lineal

Vamos a considerar a una partícula que interactúa con un potencial lineal de la forma

$$V = a|x|, \quad a > 0 \tag{5.6}$$

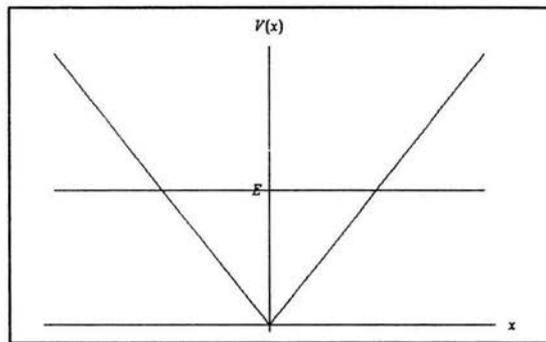


Figura 5.1: Potencial Lineal

Tenemos el espacio dividido en tres regiones, una clásicamente accesible y dos clásicamente inaccesibles. Estas están delimitadas por los puntos en que $E = V$, a los que comúnmente se les llama puntos de retorno. Sin embargo, debido a la formulación de la mecánica cuántica y a las propiedades cuánticas de la partícula, no podemos simplemente suponer que en las clásicamente prohibidas la partícula no puede ser encontrada. De hecho, existe una probabilidad distinta de cero de que la partícula penetre en la barrera debida al potencial. Sin embargo, ésta debe tender rápidamente a cero conforme se

aleja de los puntos de retorno. Para resolver el problema trataremos a los dos tipos de regiones por separado con los dos tipos de soluciones encontradas en (3.16) y (4.25).

En la región clásicamente permitida necesitamos una función cuyo flujo j sea cero, por lo que nuevamente construimos una solución que lo satisfaga mediante una combinación lineal de las soluciones ψ_{ϵ}^{\pm} . Ahora no deseamos que la función sea nula en los puntos de retorno pues esperamos que la partícula penetre en la barrera más allá de éstos. Los puntos de retorno del sistema son $x_1 = -E/a$ y $x_2 = E/a$ y la función de onda que usaremos queda como

$$\psi = (-1)^{n+1} \frac{\cos(S/\hbar)}{\sqrt{S'}} \quad (5.7)$$

Calculando la forma inicial de S como

$$\begin{aligned} S_0 &= \pm \int \sqrt{2m(E - a|x|)} dx \\ &= \mp \frac{2\sqrt{2m}}{3a} (E - a|x|)^{3/2} \\ &= \mp \frac{2}{3} \left[\left(\frac{2m}{a^2} \right)^{1/3} (E - a|x|) \right]^{3/2} \end{aligned} \quad (5.8)$$

encontramos la primera aproximación de la solución

$$\begin{aligned} \psi_0 &= \frac{C_{\pm} \cos \left(\frac{2}{3} \left[\left(\frac{2m}{a^2} \right)^{1/3} (E - a|x|) \right]^{3/2} \right)}{\sqrt[4]{2m(E - a|x|)}} \\ &= \frac{C_{\pm}}{(2ma)^{1/3}} \frac{\cos \left(\mp \frac{2}{3} \left[\left(\frac{2m}{a^2} \right)^{1/3} (E - a|x|) \right]^{3/2} \right)}{\left[\left(\frac{2m}{a^2} \right)^{1/3} (E - a|x|) \right]^{1/4}} \end{aligned} \quad (5.9)$$

Ahora, en la región clásicamente inaccesible no tenemos restricciones sobre la función de onda, de modo que podemos emplear directamente las fórmulas encontradas en (4.24) y (4.25). Por la simetría del potencial podemos plantear

el problema para sólo una región. Escogiendo la región *III* (de x_2 en adelante), queremos que la solución tienda rápidamente a cero cuando $x \rightarrow \infty$ desde x_1 . La función que satisface esto es

$$\psi = Ce^{-\frac{1}{\hbar}S} \quad (5.10)$$

$$S = \int q - \frac{\hbar S''}{2q} \quad (5.11)$$

con $q = \sqrt{2m(a|x| - E)}$. De este modo, S y la solución en la región *III* a orden cero son:

$$S_0 = \int \sqrt{2m(a|x| - E)} \quad (5.12)$$

$$\psi = Ce^{-\frac{1}{\hbar} \int \sqrt{2m(a|x| - E)}} \quad (5.13)$$

Conectamos las soluciones a través de los puntos de retorno con ayuda de las formas asintóticas de la función de Airy Ai^1 y encontramos que la energía se cuantiza como

$$E = \left(\frac{3a\hbar}{8\pi\sqrt{2m}} \right)^{2/3} (2n + 1)^{2/3} \quad (5.14)$$

Veamos ahora cómo se comporta la solución. Por ejemplo, si para el número cuántico principal tomamos $n = 6$, la forma de las funciones S y $\frac{1}{\sqrt{S}}$ así como la función de onda que definen a orden cero tienen la forma

¹Este procedimiento es equivalente al usado en la aproximación semiclásica que se detalla en el Apéndice A

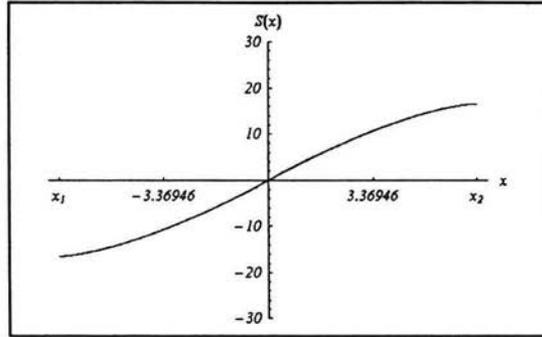


Figura 5.2: Función S en aproximación cero

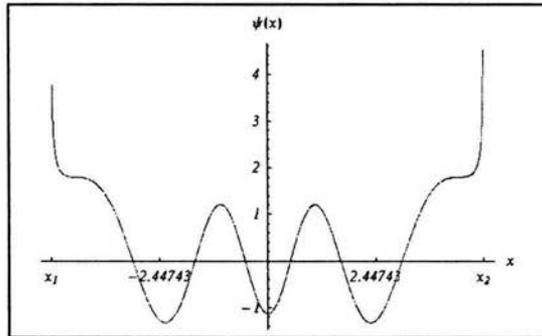


Figura 5.3: Función de onda en aproximación cero

Para hacer la primera iteración construimos al potencial cuántico de orden cero, que queda como

$$V_{Q_0} = \frac{5a^2\hbar^2}{32m(E - a|x|)^2} \quad (5.15)$$

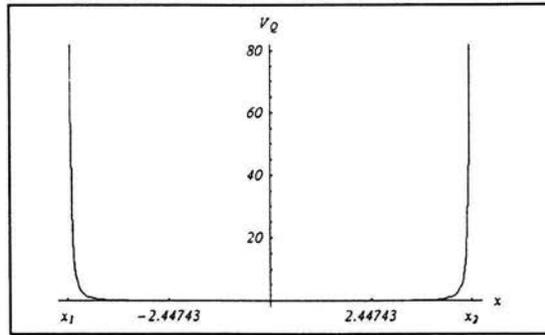


Figura 5.4: Potencial cuántico a orden cero

Hacemos ahora las primeras iteraciones del potencial cuántico en la función S para construir las funciones correspondientes. Los resultados gráficos de las primeras cuatro iteraciones se muestran en la figuras 5.5-5.20

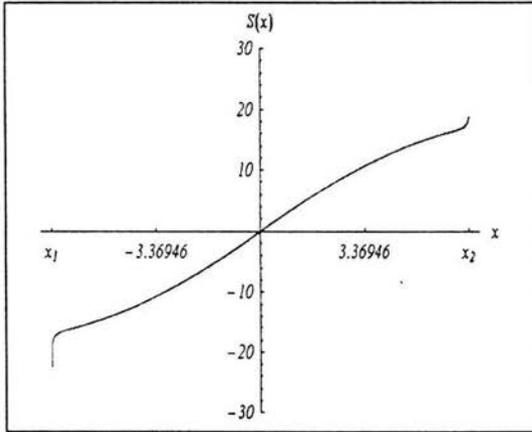


Figura 5.5: Función S a primer orden de la iteración

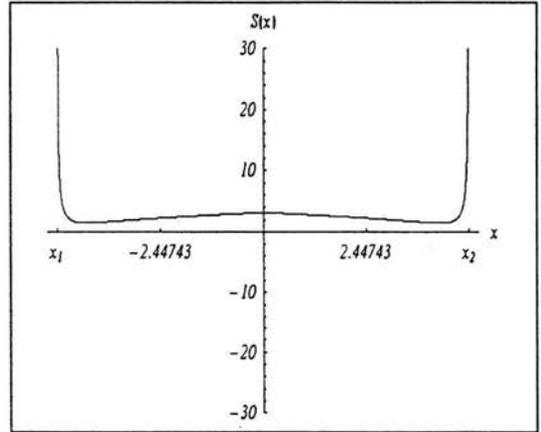


Figura 5.7: Amplitud de la función a primer orden

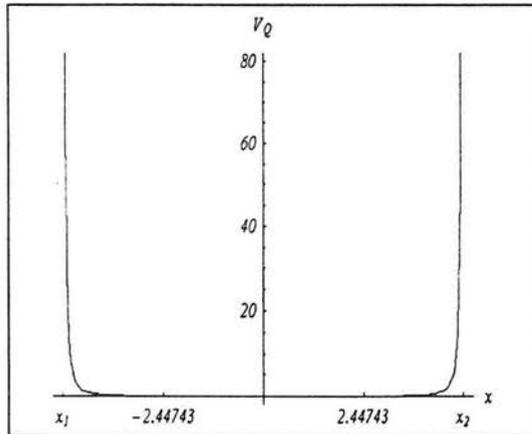


Figura 5.6: Potencial Cuántico a orden cero

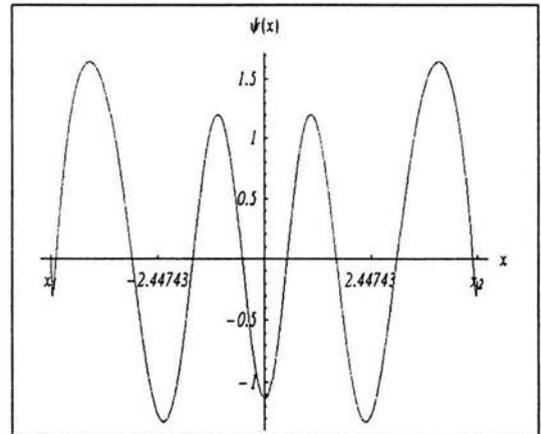


Figura 5.8: Función de onda en la primera iteración

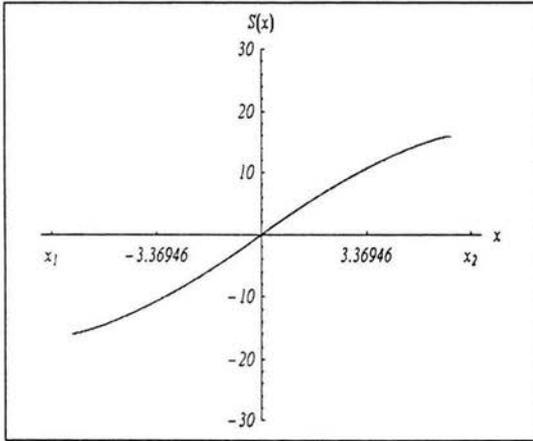


Figura 5.9: Función S a segundo orden de la iteración

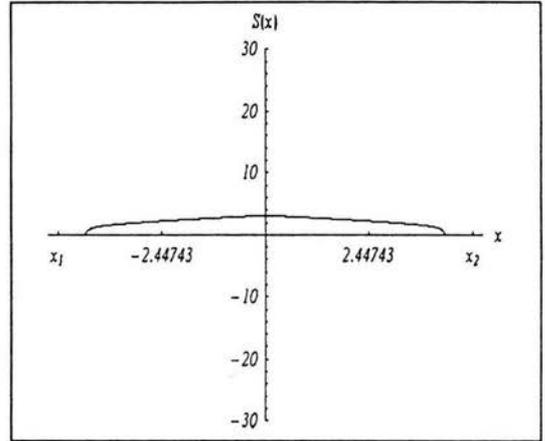


Figura 5.11: Amplitud de la función a primer orden

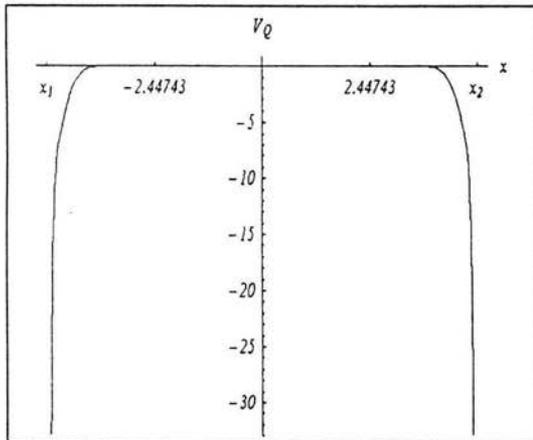


Figura 5.10: Potencial Cuántico a primer orden

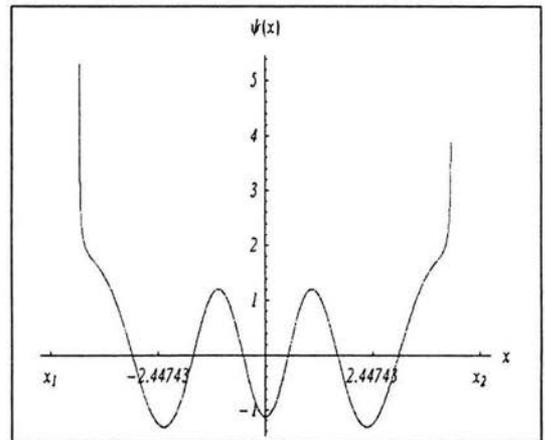


Figura 5.12: Función de onda en la segunda iteración

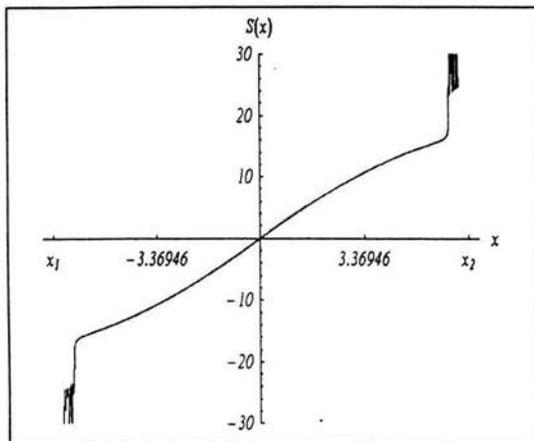


Figura 5.13: Función S a tercer orden de la iteración

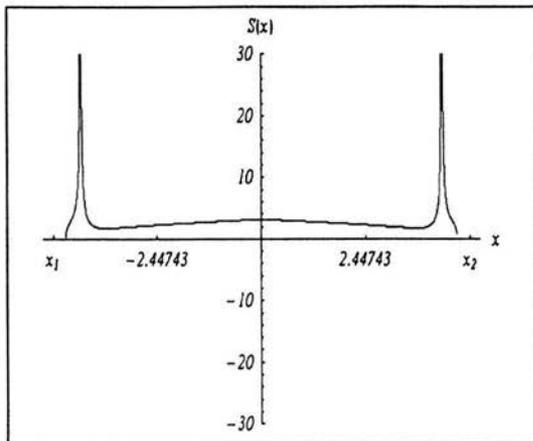


Figura 5.15: Amplitud de la función a tercer orden

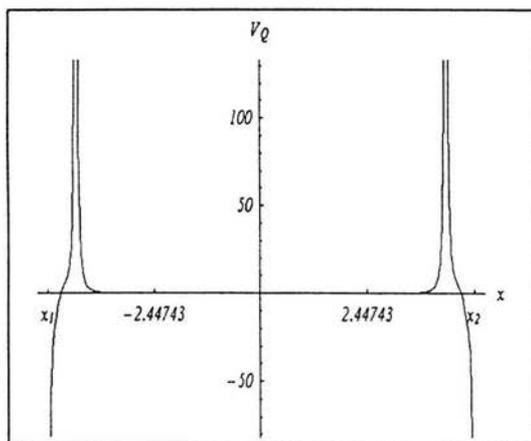


Figura 5.14: Potencial Cuántico a segundo orden

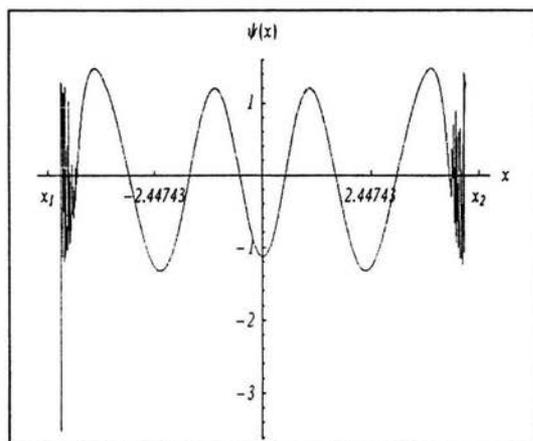


Figura 5.16: Función de onda en la tercera iteración

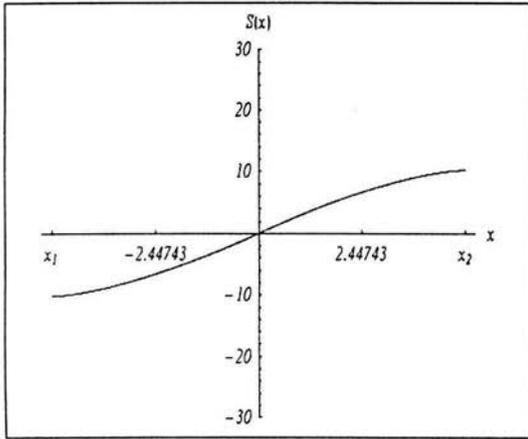


Figura 5.17: Función S a cuarto orden de la iteración

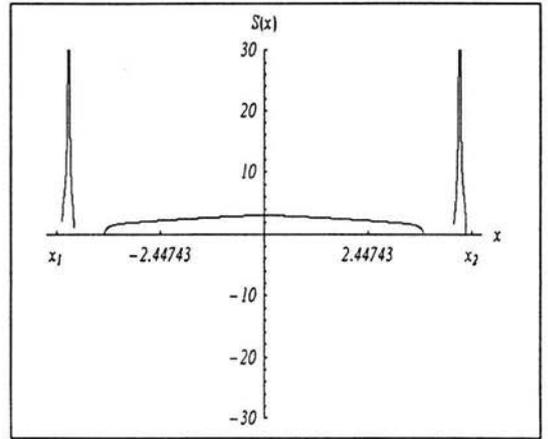


Figura 5.19: Amplitud de la función a cuarto orden

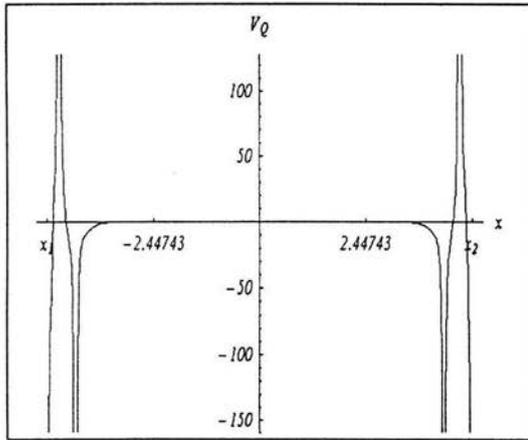


Figura 5.18: Potencial Cuántico a tercer orden

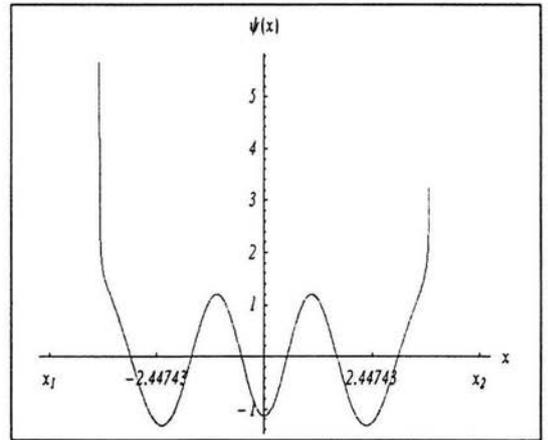


Figura 5.20: Función de onda en la cuarta iteración

De la evolución del potencial cuántico visto en las figuras anteriores concluimos que no se observa convergencia. Por el contrario, son más las singularidades con cada iteración. También vemos que las singularidades en la amplitud aumentan y cada vez es menor la región en que ésta es continua. Lo mismo pasa para la función S , que si bien conserva su forma general, la región en la que está definida es cada vez menor. Como consecuencia de esto la función de onda presenta más divergencias y es continua en una región menor. Es decir, se comporta tan bien como en la primera aproximación pero con puntos de retorno cada vez más cercanos.

Por otra parte, también con $n = 6$, en la región prohibida las gráficas de S_0 y ψ_0 tienen la forma:

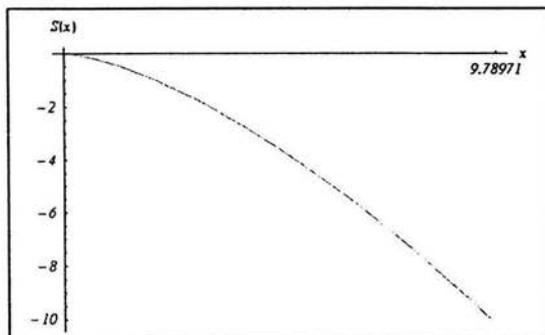


Figura 5.21: Función S a orden cero

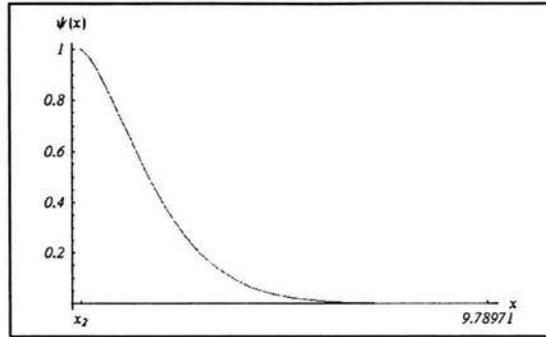


Figura 5.22: Función de onda a orden cero

Construimos el potencial cuántico a orden cero de la forma

$$V_{Q_0} = \frac{\hbar S_0''}{2q} \quad (5.16)$$

que iteramos en S para construir las aproximaciones de la solución. En las figuras siguientes presentamos los resultados para S , V_Q y ψ de las primeras cuatro iteraciones en la región clásicamente prohibida; la amplitud $S'^{-1/2}$ es la misma en todos los casos.

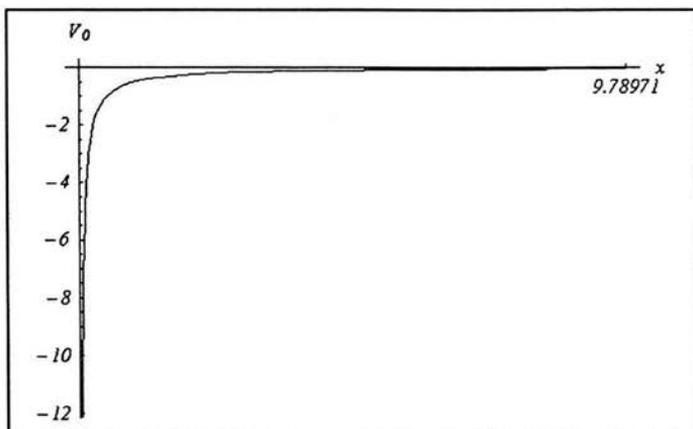


Figura 5.23: Potencial cuántico a orden cero

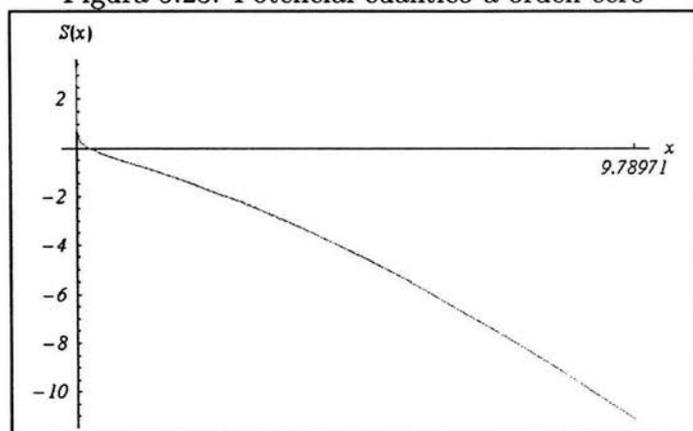


Figura 5.24: Función S a primer orden de la iteración

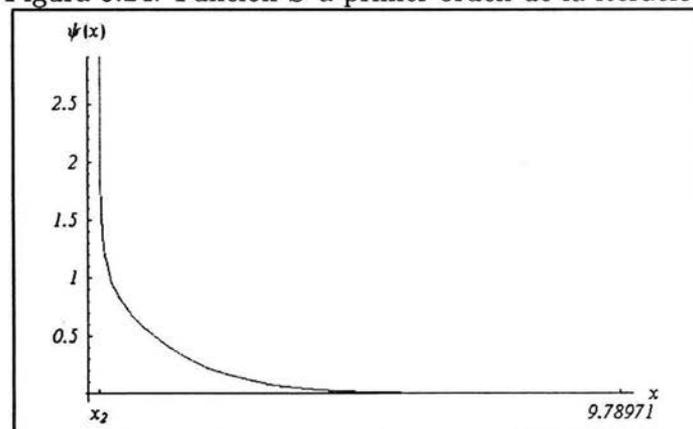


Figura 5.25: Función de onda en la primera iteración

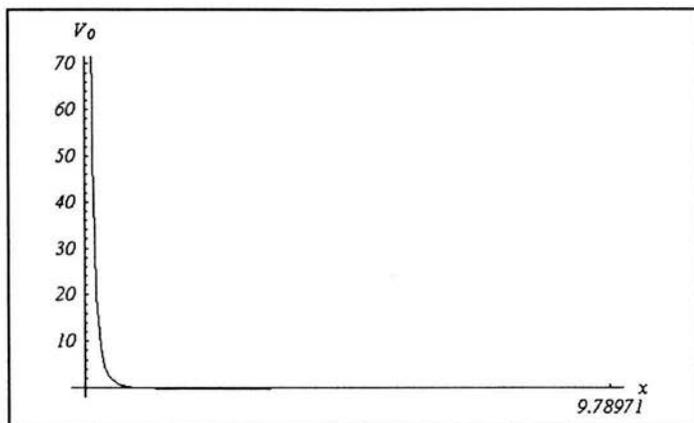


Figura 5.26: Potencial cuántico a primer orden

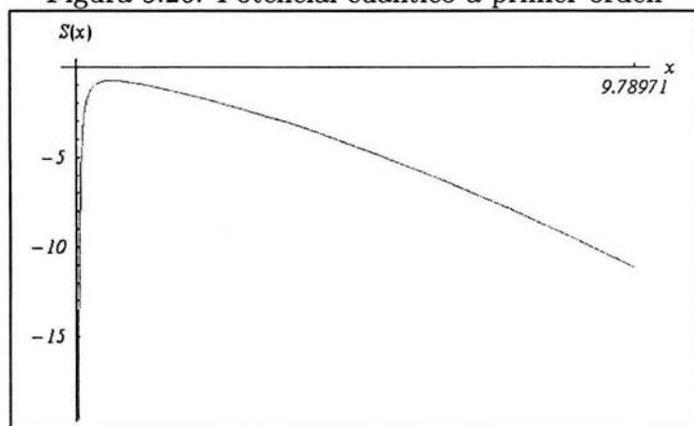


Figura 5.27: Función S a segundo orden de la iteración

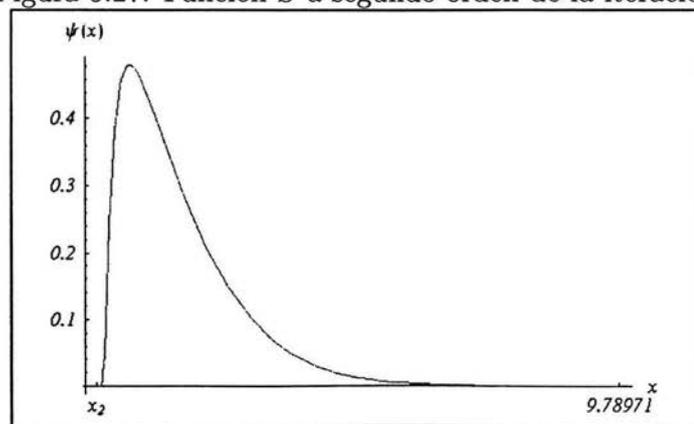


Figura 5.28: Función de onda en la segunda iteración

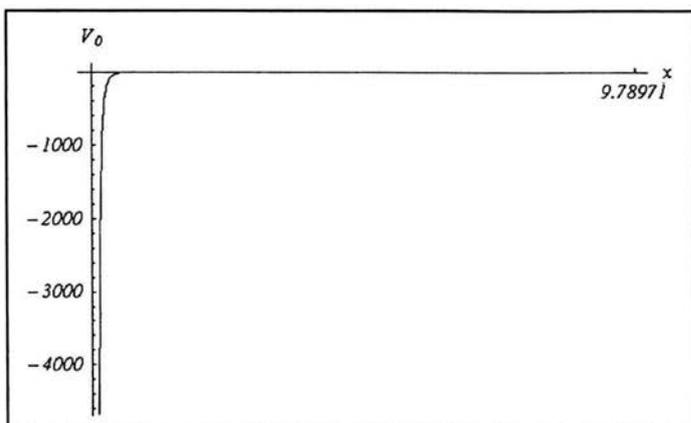


Figura 5.29: Potencial cuántico a segundo orden

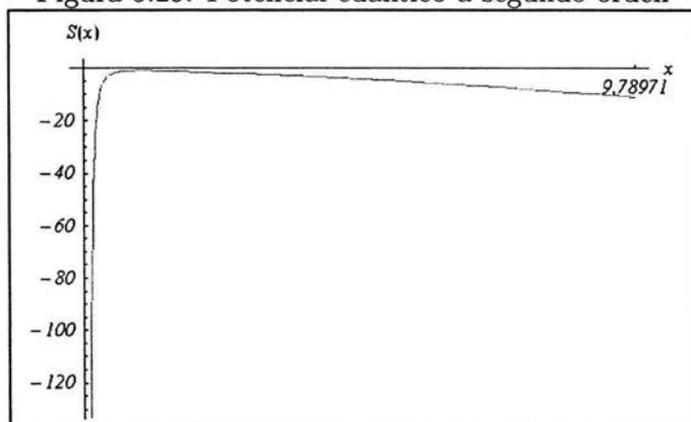


Figura 5.30: Función S a tercer orden de la iteración

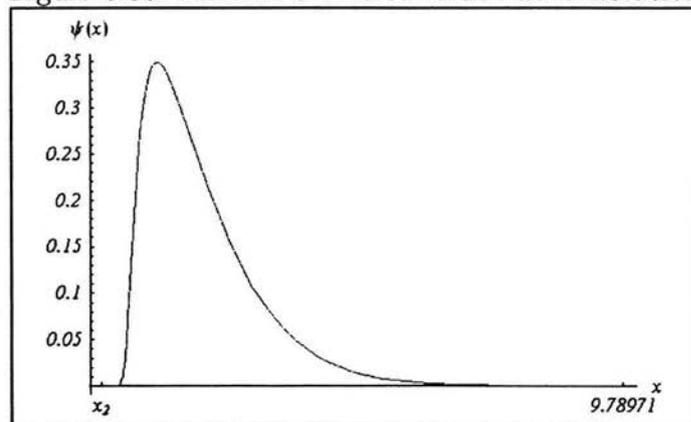


Figura 5.31: Función de onda en la tercera iteración

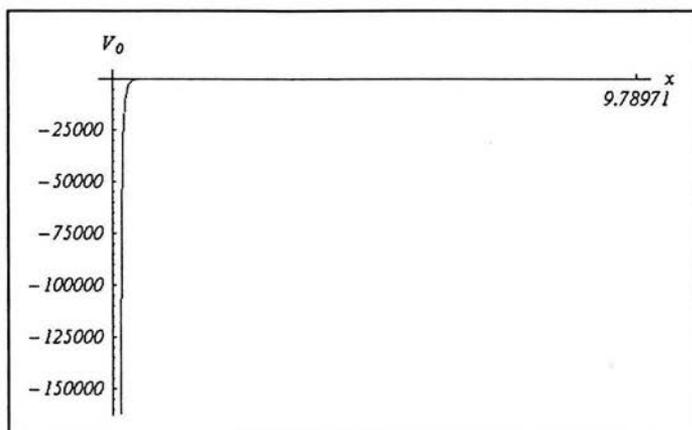


Figura 5.32: Potencial cuántico a tercer orden

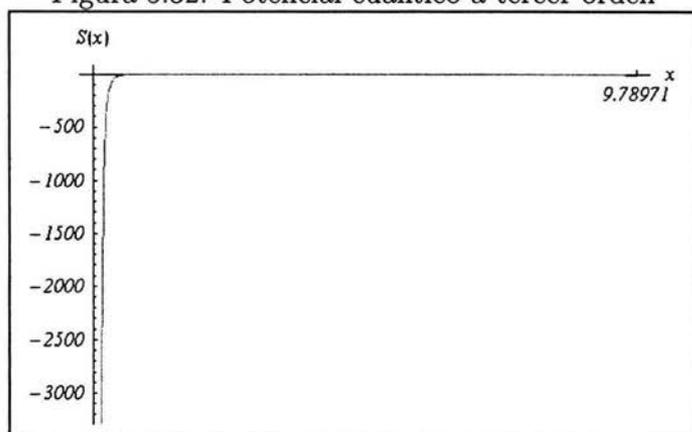


Figura 5.33: Función S a cuarto orden de la iteración

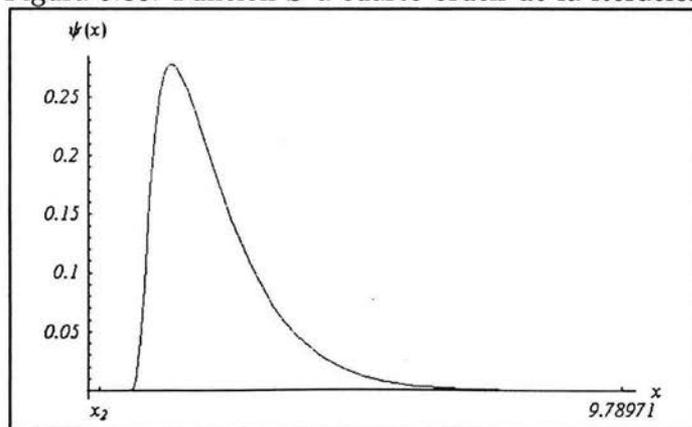


Figura 5.34: Función de onda en la cuarta iteración

Al igual que en la región permitida, vemos de las gráficas anteriores que la región en que la función S está definida decrece con las iteraciones. Notamos también que el potencial cuántico, lejos de converger, desarrolla más singularidades y que la función de onda deja de ser útil en las regiones cercanas (cada vez más amplias) a los puntos de retorno.

Finalmente, sabemos que al resolver la ecuación de Schrödinger con un potencial de la forma (5.6), las funciones de Airy $Ai(z)$, con $z = \left(\frac{2ma}{\hbar^2}\right)^{1/3} (x_1 - x)$, la satisfacen de forma exacta en todo el espacio y éstas conectan suavemente las soluciones de un lado y otro de los puntos de retorno. Una comparación de la solución exacta con la primera y la última aproximación de la solución iterada se muestra en la siguiente gráfica:

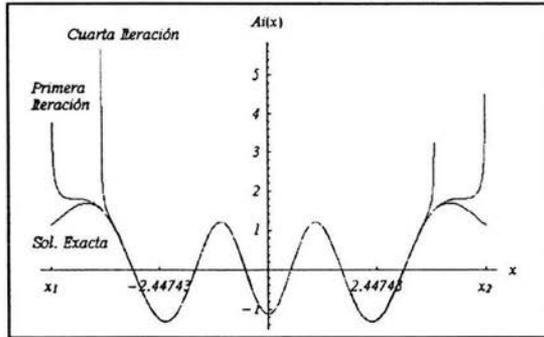


Figura 5.35: En la región permitida

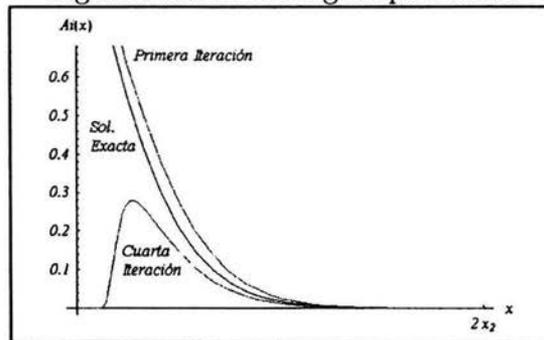


Figura 5.36: En la región clásicamente inaccesible

Claramente observamos que si bien la solución iterada reproduce de forma

exacta el comportamiento de la función de Airy lejos de los puntos de retorno, con cada nueva iteración es necesario estar más lejos de los puntos de retorno para que la función de onda nos dé información correcta.

5.3 El Oscilador Armónico

Pasamos ahora a nuestro último ejemplo, el oscilador armónico. Empezamos de la misma forma que en los ejemplos anteriores: primero vemos las soluciones en la región clásicamente permitida y luego en la prohibida. Construimos para esto una solución real a partir de las funciones ψ_ϵ^\pm y la usamos en el sistema ligado. Llevamos a cabo algunas iteraciones y vemos el comportamiento de la solución después de cada una. Nuevamente esperamos convergencia rápida en las soluciones y que los intervalos en que el método no puede ser empleado se colapsen de modo que las soluciones en ambos lados converjan suavemente. El sistema con el que estaremos trabajando es de la forma

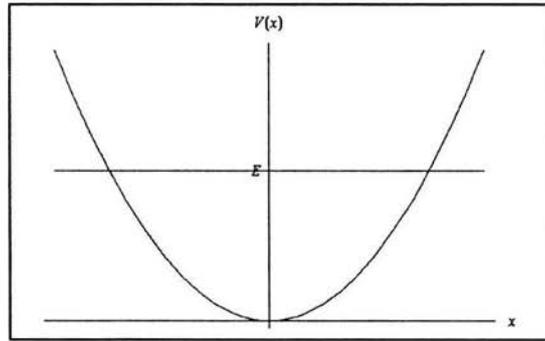


Figura 5.37: Oscilador Armónico con $m = \omega^2 = 1$

Los puntos de retorno son $x_1 = -\sqrt{2E/m\omega^2}$ y $x_2 = \sqrt{2E/m\omega^2}$. La ecuación que construimos entre éstos tiene la forma

$$\psi = (-1)^n \frac{2}{\sqrt{S'}} \sin\left(\frac{S}{\hbar}\right) \quad (5.17)$$

donde n es el número cuántico principal del sistema. Entonces, las aproximaciones de S y ψ a orden cero son

$$S_0 = \int \sqrt{2m \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right)} dx$$

$$= \frac{1}{2\omega} \left(x\omega \sqrt{m(2E - mx^2\omega^2)} + 3iE \ln 2 + 2iE \ln \left(\sqrt{2E - mx^2\omega^2} \right) \right) \quad (5.18)$$

$$\psi_0 = (-1)^n \frac{2}{\sqrt{S'_0}} \sin \left(\frac{S_0}{\hbar} \right) \quad (5.19)$$

De aquí podemos ya calcular el potencial cuántico del sistema a orden cero usando la relación (3.41) (con $n = 0$), pero antes veamos la forma que toman S y la amplitud $1/\sqrt{S'_0}$ también a orden cero para luego entender la forma que tiene la función de onda. Al evaluarlas entre los puntos de retorno, las funciones S_0 y $\frac{1}{\sqrt{S'_0}}$ se comportan de la forma señalada en las figuras 5.38 y 5.39 respectivamente.

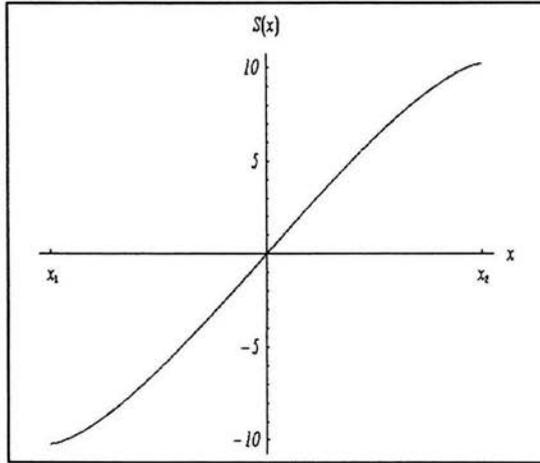


Figura 5.38: Aproximación de la la función S a orden cero

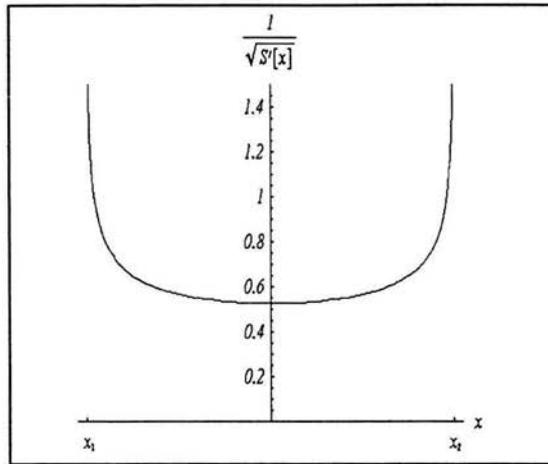


Figura 5.39: Aproximación de la la función $1/\sqrt{S'}$ a orden cero

De éstas podemos ver que la parte oscilatoria de la función de onda va a ser bastante regular en todo el intervalo, pues S está definida en todo punto entre x_1 y x_2 y su comportamiento es muy suave. Por otra parte, resulta evidente que la amplitud va a causar problemas a la solución, pues ésta diverge en los puntos de retorno. El comportamiento de la solución (5.19) se puede apreciar en la siguiente gráfica, donde tomamos a $n = 6$ como el número cuántico principal:

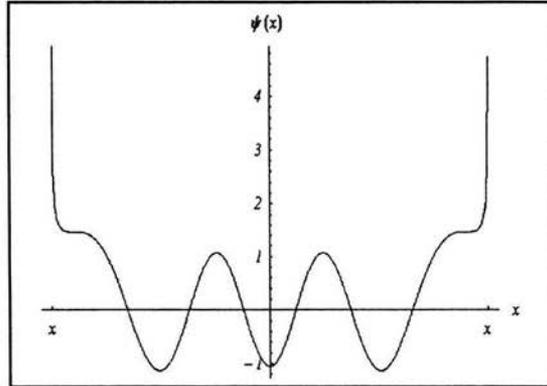


Figura 5.40: Función de onda a orden cero

Hasta este punto, la función se comporta tal como predice la teoría de la aproximación semiclásica. Veamos qué cambios trae la inclusión del potencial cuántico y su iteración en la solución. El potencial cuántico a orden cero exhibe el siguiente comportamiento:

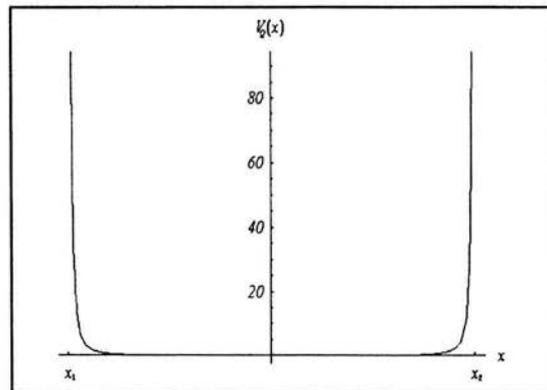


Figura 5.41: Aproximación del potencial cuántico V_Q a orden cero

Se puede observar que en esta primera aproximación, éste es muy cercano a cero en la región interior apartada de los puntos de retorno, pero diverge rápidamente al acercarnos a x_1 y x_2 . Como la siguiente aproximación de la solución depende de cómo es este potencial, es probable que las divergencias se manifiesten claramente al evaluarlas. A continuación presentamos los grupos de gráficas correspondientes al potencial cuántico, la función S , la amplitud, y la función de onda para las primeras cuatro iteraciones:

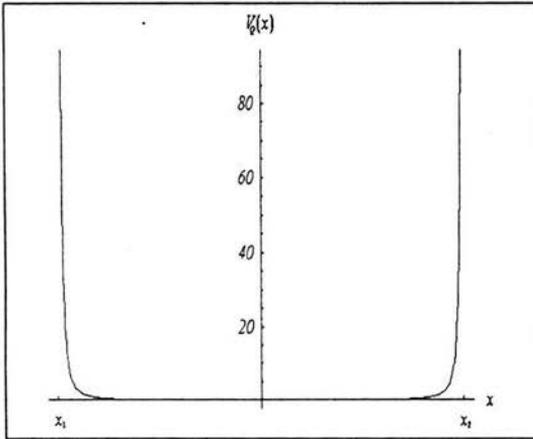


Figura 5.42: Potencial cuántico V_Q a orden cero

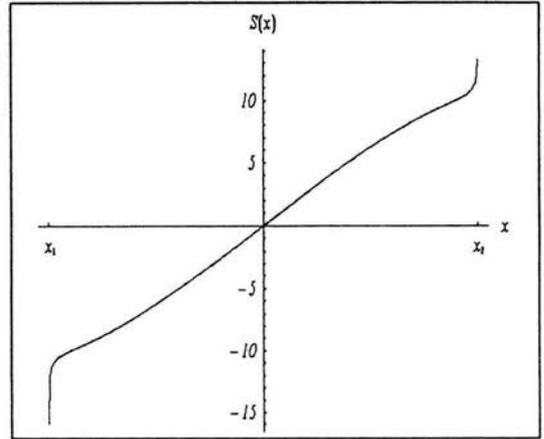


Figura 5.44: Primera iteración numérica de S

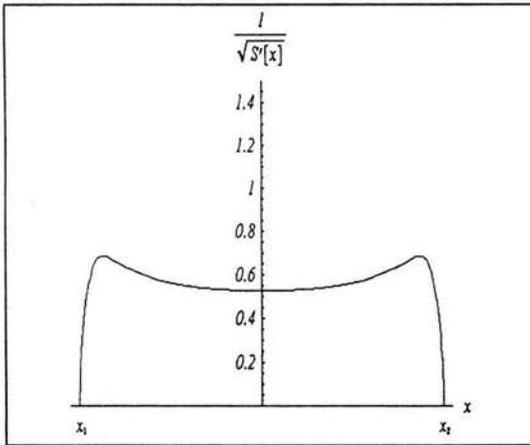


Figura 5.43: Primera iteración de $1/\sqrt{S'}$

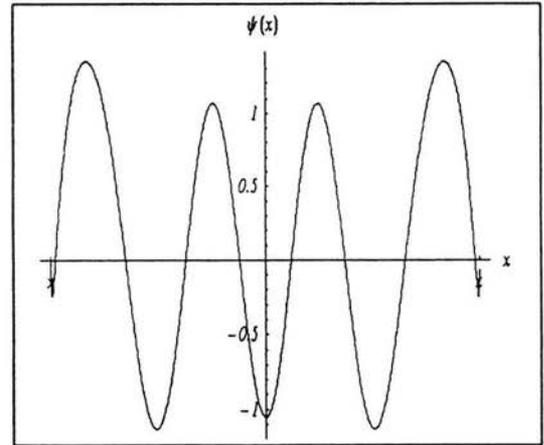


Figura 5.45: Primera iteración de ψ

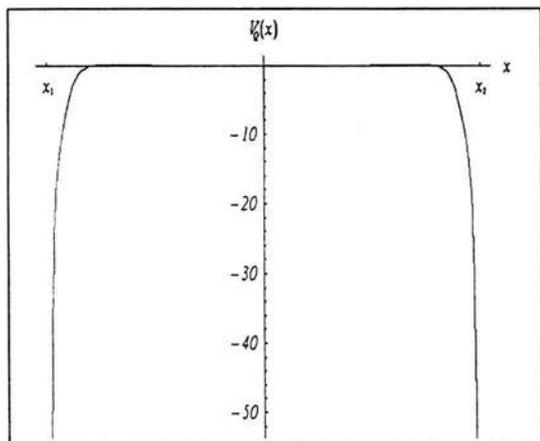


Figura 5.46: Potencial cuántico V_Q a primer orden

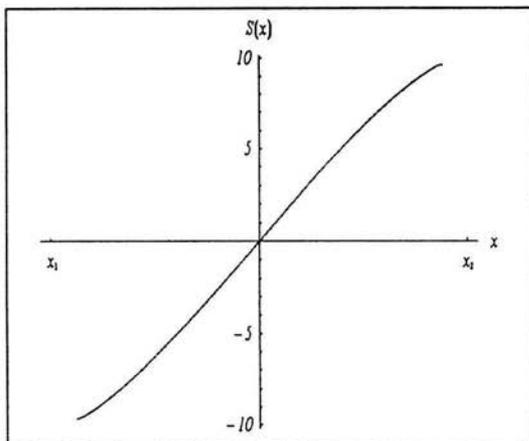


Figura 5.48: Segunda iteración numérica de S

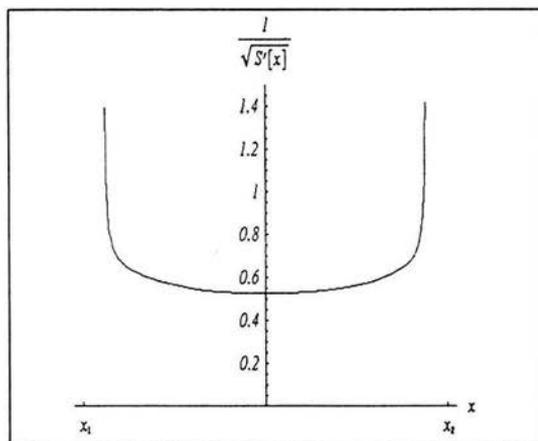


Figura 5.47: Segunda iteración de $1/\sqrt{S'}$

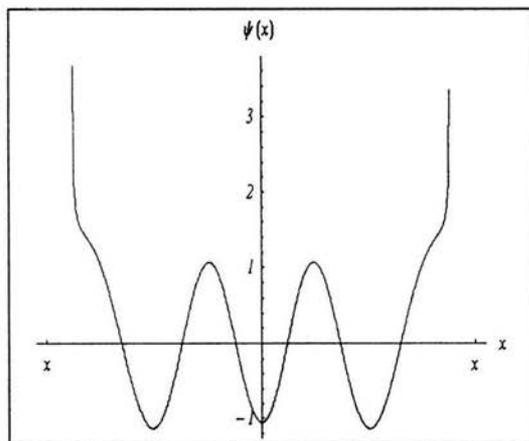


Figura 5.49: Segunda iteración de ψ

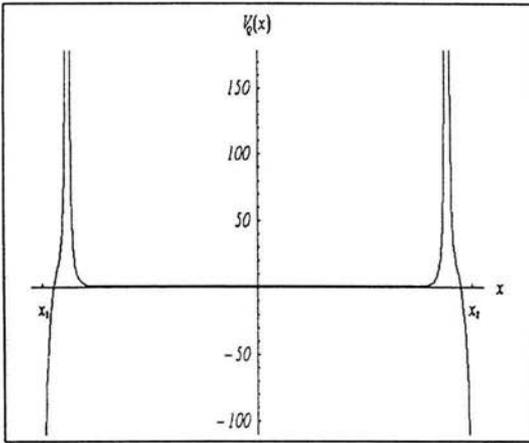


Figura 5.50: Potencial cuántico V_Q a segundo orden

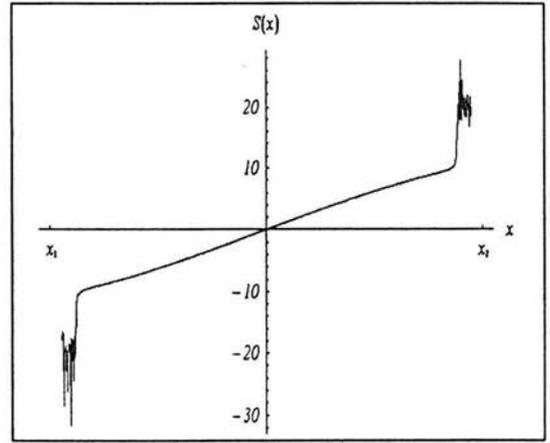


Figura 5.52: Tercera iteración numérica de S

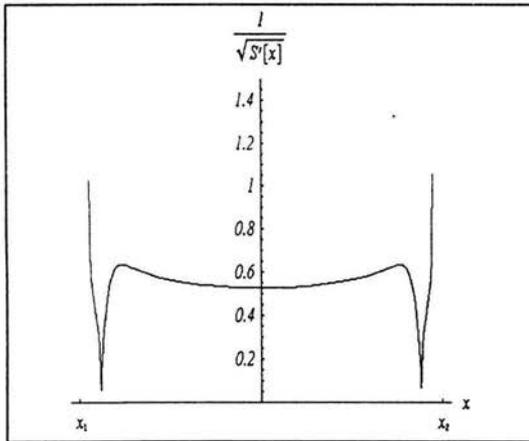


Figura 5.51: Tercera iteración de $1/\sqrt{S'}$

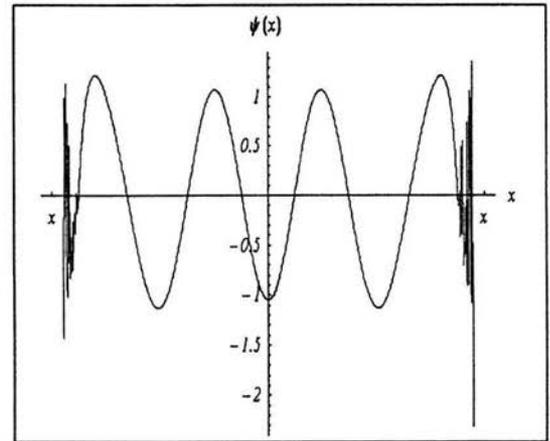


Figura 5.53: Tercera iteración de ψ

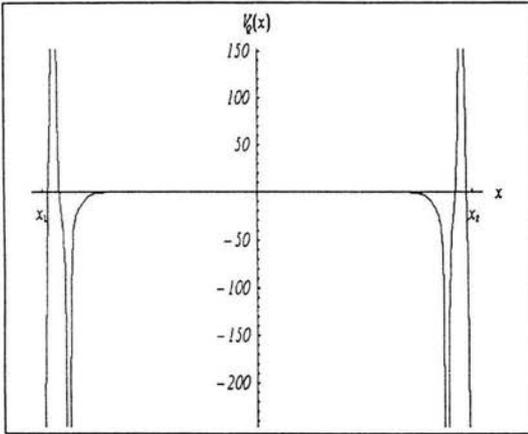


Figura 5.54: Potencial cuántico V_Q a tercer orden

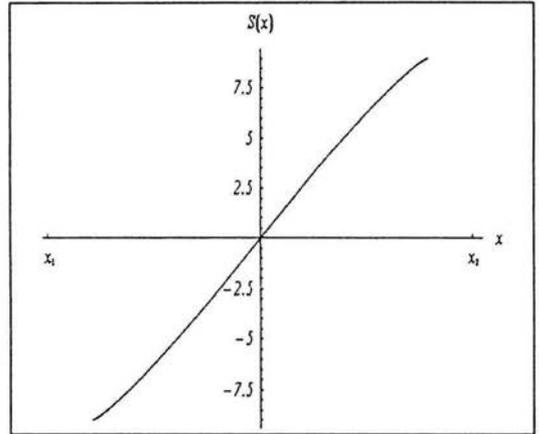


Figura 5.56: Cuarta iteración numérica de S

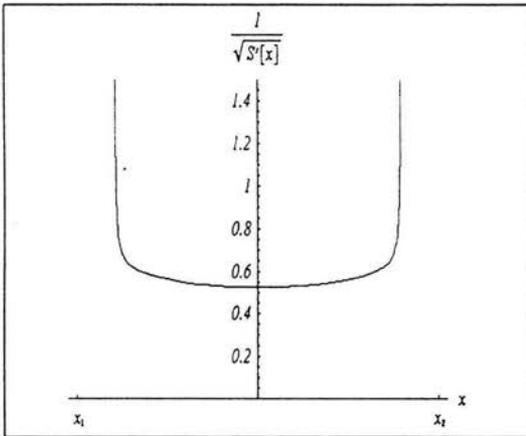


Figura 5.55: Cuarta iteración de $1/\sqrt{S'}$

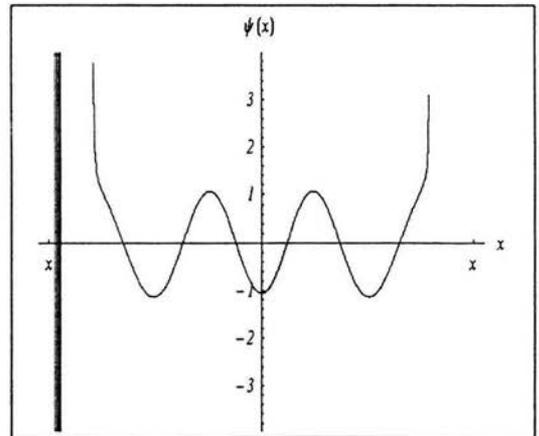


Figura 5.57: Cuarta iteración de ψ

Nuevamente tenemos que el potencial cuántico no muestra una convergencia a este orden de la iteración. Tal como en el ejemplo anterior, éste presenta cada vez más singularidades conforme se aumenta el orden. La función de onda también presenta las primeras divergencias más lejos de los puntos de retorno conforme se avanza en la iteración debido a que tanto V_Q como S son más singulares.

Vayamos ahora a la región clásicamente inaccesible. Las funciones S y ψ a orden cero que nos sirven para fijar las condiciones iniciales de la iteración tienen la forma mostrada en las siguientes gráficas. También estamos suponiendo que el número cuántico principal n es $n = 6$.

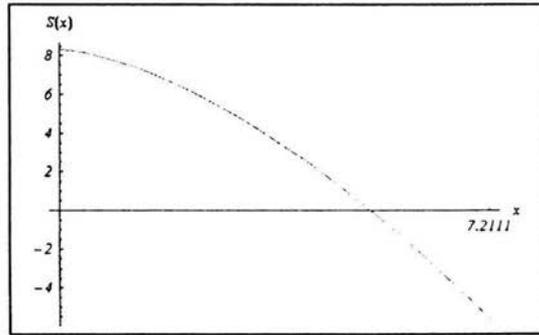


Figura 5.42: Función S a orden cero

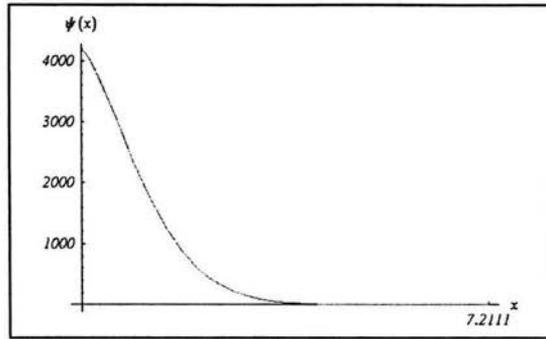


Figura 5.43: Función de onda a orden cero

Nuevamente construimos el potencial cuántico a orden cero de la forma

$$V_{Q_0} = \frac{\hbar S_0''}{2q} \quad (5.20)$$

que iteramos en S para construir las aproximaciones de la solución. En las figuras 5.44-5.55 presentamos los resultados para S , V_Q y ψ de las primeras cuatro iteraciones en la región clásicamente prohibida; la amplitud $S'^{-1/2}$ es también la misma en todos los casos.

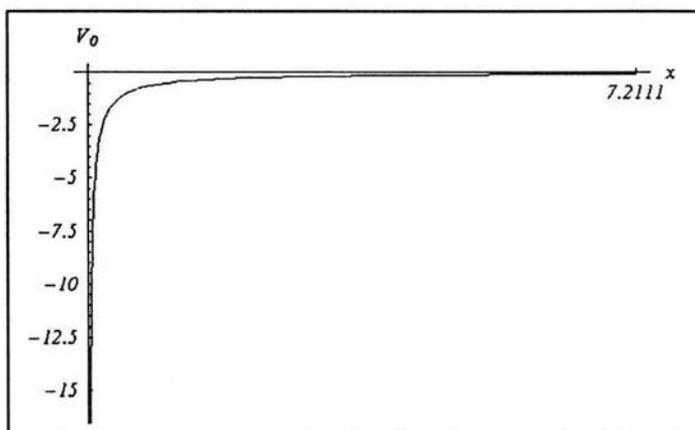


Figura 5.44: Potencial cuántico a orden cero

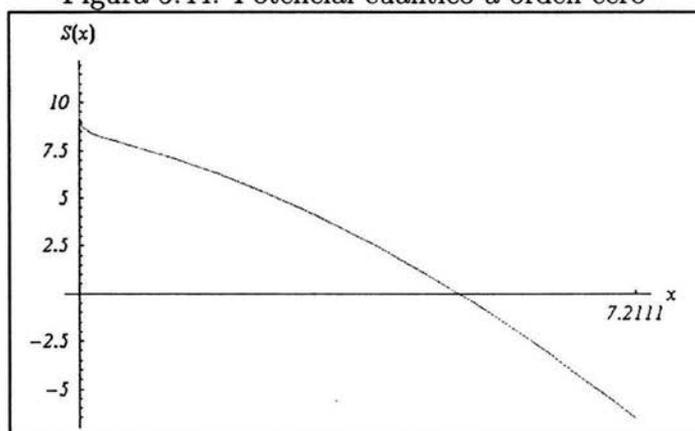


Figura 5.45: Función S a primer orden de la iteración

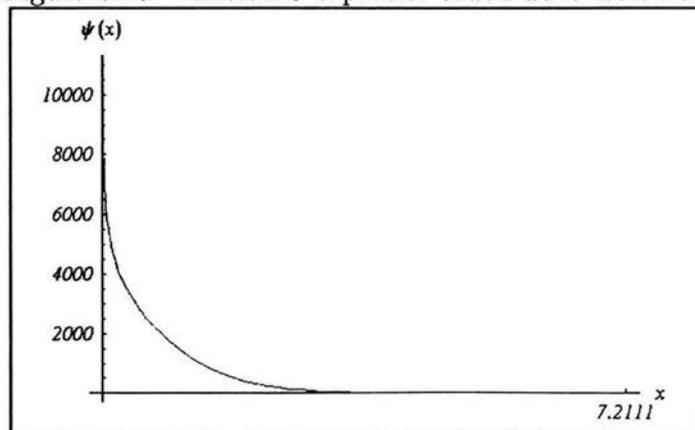


Figura 5.46: Función de onda en la primera iteración

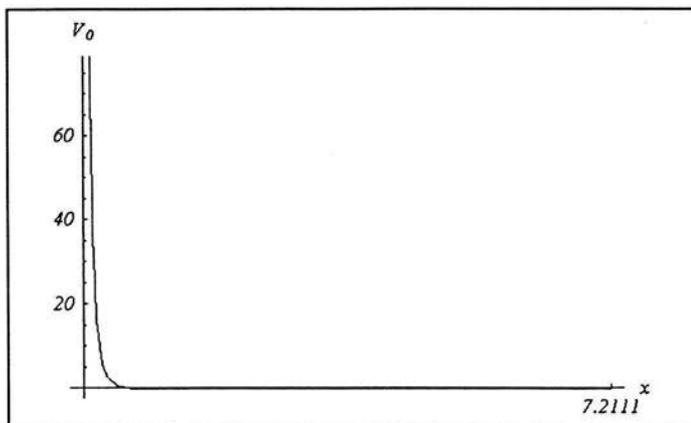


Figura 5.47: Potencial cuántico a primer orden

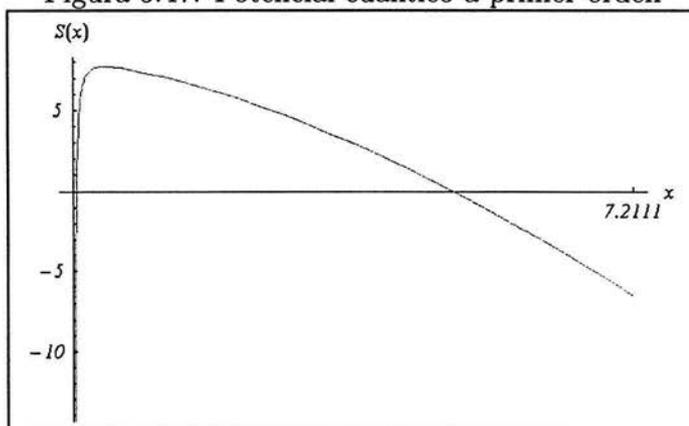


Figura 5.48: Función S a segundo orden de la iteración

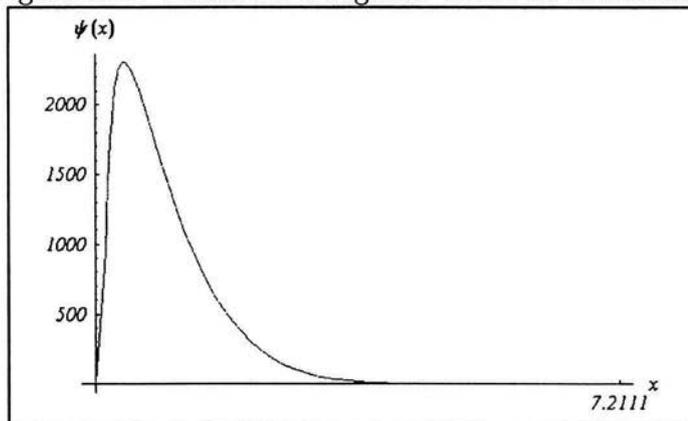


Figura 5.49: Función de onda en la segunda iteración

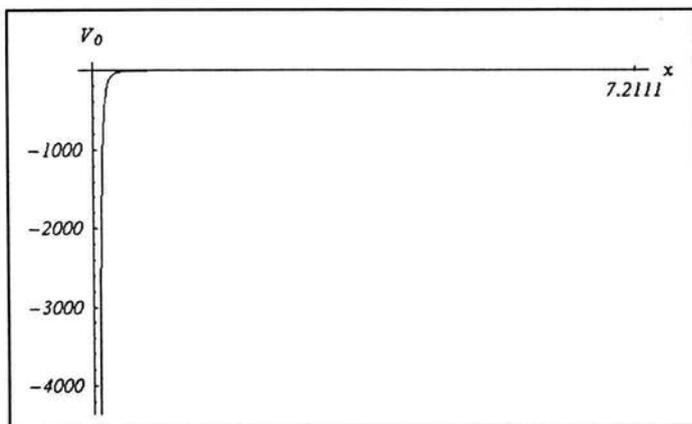


Figura 5.50: Potencial cuántico a segundo orden

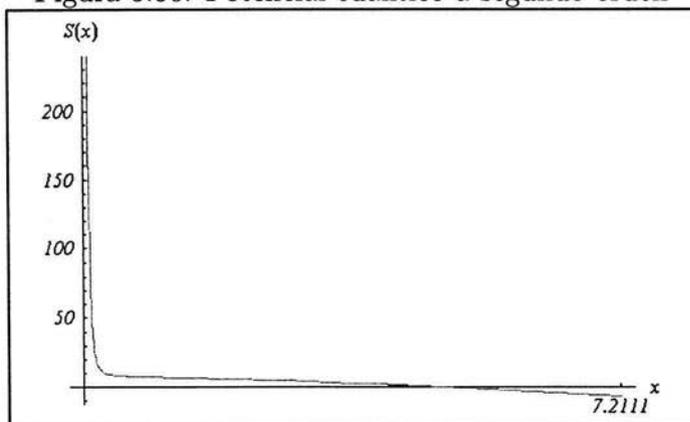


Figura 5.51: Función S a tercer orden de la iteración

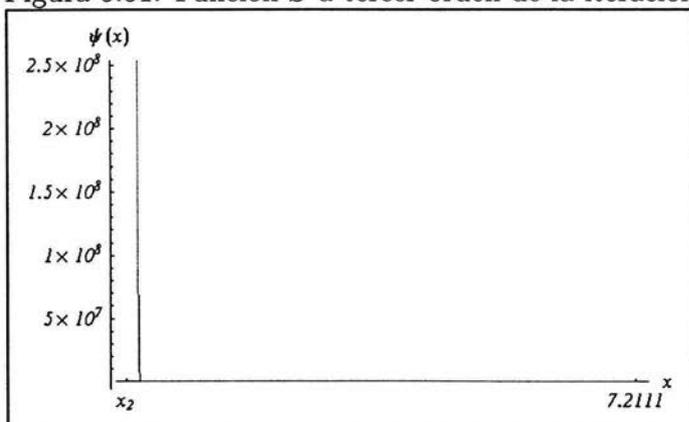


Figura 5.52: Función de onda en la tercera iteración

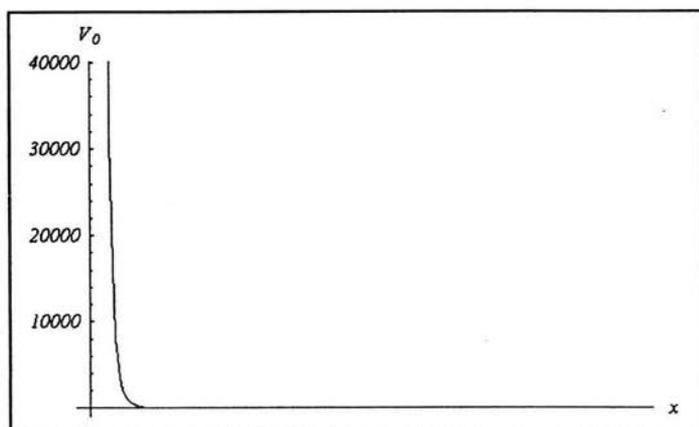


Figura 5.53: Potencial cuántico a tercer orden

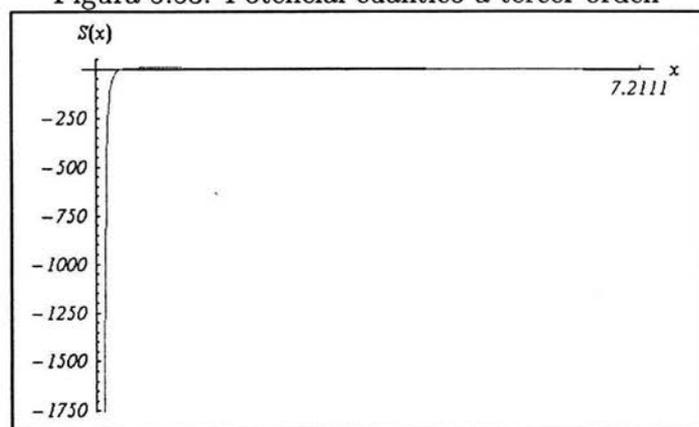


Figura 5.54: Función S a cuarto orden de la iteración

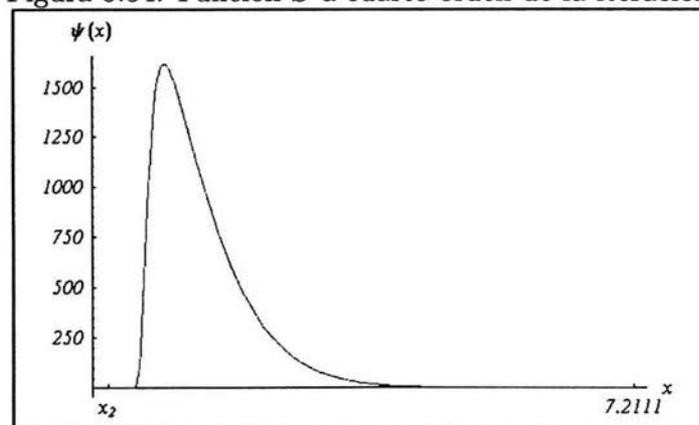


Figura 5.55: Función de onda en la cuarta iteración

En las gráficas anteriores pudimos observar que el potencial cuántico presenta más discontinuidades al avanzar con las iteraciones. Puesto que S y la solución dependen de V_Q , también vemos que estas funciones son singulares en más puntos que al principio. Si la comparamos con la solución exacta para el potencial de oscilador dadas por los polinomios de Hermite, en la figura siguiente vemos que las soluciones son buenas en un región suficientemente lejana de los puntos de retorno. Además, con cada iteración es necesario alejarse más para que la solución sea válida.

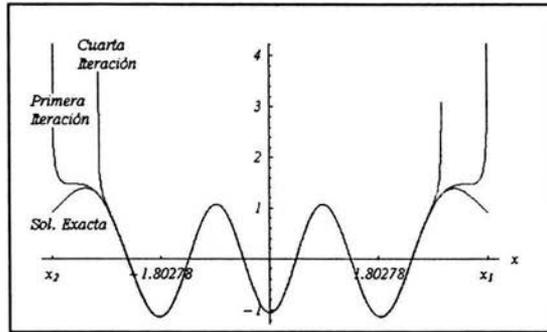


Figura 5.56: Potencial Lineal

En base a estos ejemplos, vemos que el proceso iterativo presenta serias dificultades para calcular a la función de onda. De la forma en que fue realizado no fue posible lograr una convergencia en los potenciales cuánticos, los cuales determinan las soluciones a cada sistema.

Conclusiones

A lo largo de este trabajo estuvimos empleando el formalismo de la mecánica ondulatoria para la mecánica cuántica para hacer una descripción de un sistema físico que no evoluciona en el tiempo. Este consistió de un partícula no relativista y sin espín interactuando con un potencial dependiente de la posición. De acuerdo a este formalismo, se puede conocer al sistema completamente si se conoce la función de onda que lo describe. Tales funciones son, además, las soluciones a la ecuación de Schrödinger. En este trabajo nos enfocamos en el estudio de soluciones para la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo.

Uno de los intereses y motivos principales para la realización este trabajo fue encontrar una metodología que nos permita calcular las funciones de onda para la ecuación mencionada. Queríamos hallar un procedimiento para determinar las soluciones de manera general sin recurrir a condiciones particulares del sistema que quisiéramos describir. Al principio de este trabajo logramos deducir una expresión para una solución de la ecuación en cuestión a partir de un Ansatz propuesto originalmente por David Bohm [1, 2, 12]. Establecimos también las condiciones que debe cumplir esta expresión en términos de los parámetros del sistema de modo que se satisfaga la ecuación. Respecto a la expresión encontrada es necesario hacer énfasis en un los siguientes puntos:

1. La función ψ_ϵ puede plantearse como una solución para la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo si y sólo si la densidad de corriente j del sistema es constante y distinta de cero.
2. La función ψ_ϵ es una solución exacta si además la función S satisface las condiciones impuestas por la ecuación (2.30).

3. Para los estados ligados, en donde la función de onda es real y la densidad de corriente es cero, la solución ψ_ϵ sólo es útil para construir otras soluciones que satisfagan las condiciones del problema.
4. La expresión deducida para la solución no se encuentra en la literatura, por lo que posiblemente se trate de un resultado original de este trabajo.

Posteriormente desarrollamos un método para calcular de forma precisa la solución exacta a través de un proceso en el que iteramos el potencial cuántico en la función S . Se tomó la opción del proceso iterativo por dos razones: la primera es que la función S define una relación de recurrencia entre ésta y sus derivadas, de modo que se necesitan fijar las condiciones iniciales de tal recurrencia. La segunda es que existe una hipótesis en la literatura sobre las soluciones de la aproximación semiclásica que sugiere un método de esta índole. Por similitud entre éstas y nuestra solución decidimos poner a prueba dicha hipótesis. Con este método y con una modificación al Ansatz de Bohm pudimos también encontrar una expresión para la solución de la ecuación de Schrödinger en las regiones que clásicamente son inaccesibles para una partícula. Éstas también mostraron una similitud con las soluciones que la aproximación semiclásica postula para esta interesante región del espacio. Del método iterativo y de la solución a la luz de éste podemos concluir lo siguiente:

1. La forma de la solución exacta puede reducirse a la solución de la aproximación semiclásica en la región clásicamente permitida a través del proceso iterativo si éste se deja a orden cero. Es posible entonces que nuestra solución llevada a un orden superior en la iteración mejore la precisión de la solución semiclásica.
2. Con la modificación del Ansatz se puede construir una solución a la ecuación de Schrödinger en la región clásicamente prohibida, que a través del proceso iterativo se reduce también a la solución de la aproximación semiclásica cuando el proceso iterativo se lleva al primer orden en la misma región. Esto es particularmente interesante pues en la literatura no se encuentra un proceso que lleve a estas expresiones finales.
3. Por la dependencia en \hbar del potencial cuántico en ambas regiones decimos que los efectos de éste deben ser más intensos en la región clásicamente inaccesible.

Finalmente, con el objetivo de evaluar el proceso iterativo para determinar la solución exacta, recurrimos a la aplicación de ambos a ejemplos concretos pues el análisis en términos de parámetros abstractos se tornaba complicado y no era fácil extraer información de las ecuaciones generales. A través de los ejemplos de sistemas de estados cuánticos ligados que analizamos pudimos ver algunos resultados importantes, que ahora nos permiten decir que:

1. La solución ψ_ϵ puede usarse para construir soluciones reales que satisfagan de forma exacta a la ecuación de Schrödinger aún cuando no pueda determinarse la función S de manera precisa. Existen sistemas cuánticos para los que se encontró la forma de la función S y que fueron descritos de forma exacta con estas soluciones.
2. La convergencia en las soluciones iteradas en ambas regiones para los problemas de estados ligados está determinada por la convergencia de una serie de potencias de \hbar que a la vez determina al potencial cuántico en el n -ésimo paso de la iteración. La convergencia de ésta se encuentra estrechamente relacionada con la forma del potencial del sistema que se estudia y de las condiciones iniciales para la iteración.
3. Por la forma en que se llevó a cabo, decimos que el proceso iterativo falla para los sistemas ligeramente más complicados que analizamos. La ineficacia de éste radica en que con cada iteración el potencial cuántico calculado por el método presenta más singularidades debido a que son más los puntos en que S' es cero y al menos una de S'' o $S^{(3)}$ no lo es.
4. Es probable que con este método se pueda hacer una mejor aproximación que la semiclásica a una distancia suficientemente lejana (y mayor que la requerida por la aproximación semiclásica) de los puntos de retorno. Dicho de otra forma, es posible que nuestra solución y/o las que se construyan a partir de ésta pueda ser mejor en intervalos menores que la semiclásica cuando se aproximan por iteraciones.

Por lo anterior podemos decir que en buena medida el objetivo principal de este trabajo fue satisfecho pues se encontró un sistema autocontenido de ecuaciones que determinan de forma exacta la solución de la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo. Sin embargo, su aplicación directa esta limitada a sistemas no ligados. Para el resto, sólo sirve como guía para construir una solución adecuada. También entendimos

cómo se puede construir la solución de la aproximación semiclásica en las regiones clásicamente prohibidas encontrando un límite semiclásico adecuado para nuestra solución y sin tener que hacer suposiciones innecesarias sobre el sistema.

Por otra parte, el asunto de la determinación de la función de onda por un proceso iterativo y, más concretamente, la posibilidad de traer una mejora a las soluciones semiclásicas con este proceso todavía presenta algunos problemas interesantes que pueden dar pie a futuros trabajos de investigación. Por ejemplo, queda aun por verse si cambiando la forma de la aproximación cero de la función S se obtienen otras estructuras para el potencial cuántico, quien es a fin de cuentas el que determina la serie que esperamos converja. Podemos también preguntarnos si existe una mejor forma de hacer las iteraciones. Es decir, ¿estamos iterando el parámetro que debemos? ¿Hasta dónde es válido hacer las suposiciones que nos llevan a las expresiones iteradas? Otra cuestión que conviene preguntarse es cómo afecta la forma del potencial a la iteración. ¿Existen distintos procedimientos, iterativos o no iterativos, para distintas clases de potenciales? De la no convergencia de las series de \hbar surge la duda de si al quedarnos con todos los términos de la serie en la solución semiclásica ¿ésta seguirá convergiendo? Finalmente -sólo para cortar la discusión, pues evidentemente surgen muchas preguntas de los resultados obtenidos- nos podemos preguntar de qué otra forma podríamos construir la función S . De cualquier modo el haber explorado la hipótesis de las soluciones iteradas nos permite decir que, hasta donde nos fue posible investigar y de la forma en que decidimos hacerlo, difícilmente se pueden obtener mejores soluciones para la aproximación semiclásica de esta forma.

Apéndice A

La Aproximación Semiclásica: el Método WKB

La aproximación semiclásica, también llamada *aproximación WKB* tiene sus orígenes en los estudios realizados por G. Wentzel, A. Kramers y L. Brillouin¹ en la década de 1920 para resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional con potenciales independientes del tiempo suponiendo que estos varían lentamente con la posición. Partiendo de esta suposición se puede proponer un *ansatz* a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (1.11) de la forma

$$\psi(x) = e^{i\frac{S(x)}{\hbar}} \quad (\text{A.1})$$

Sustituyéndolo en la ecuación de Schrödinger tenemos que

$$E = \frac{1}{2m}S'^2 + V - \frac{i\hbar}{2m}S'' \quad (\text{A.2})$$

Para calcular esta función S se supone que un desarrollo en serie de potencias de \hbar puede hacerse como²

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots \quad (\text{A.3})$$

Al sustituirla en (A.2) se obtiene

¹En algunos textos ingleses se le llama JWKB por la contribución de H. Jeffreys

²También puede construirse esta serie sin el factor $1/i$ y los resultados son equivalentes.

$$-S'^2 + 2m(E - V) + i\hbar(S_0'' + 2S_0'S_1') + \hbar^2(S_1'' + 2S_0'S_2' + S_1'^2) + \dots = 0 \quad (\text{A.4})$$

Esta ecuación sólo se satisface de forma general si cada término dependiente de alguna potencia de \hbar es individualmente cero. Por lo tanto (A.4) define una jerarquía de ecuaciones, cuyos primeros elementos son

$$S_0'^2 = 2m(E - V) \quad (\text{A.5})$$

$$S_1' = -\frac{S_0''}{2S_0'} \quad (\text{A.6})$$

$$S_2' = -\frac{S_1'^2 + S_1''}{2S_0'} \quad (\text{A.7})$$

⋮

Podemos escribir cada uno en términos del anterior, lo que obtenemos resolviendo primero la ecuación de S_0 . Suponiendo que los términos restantes del desarrollo $O(\hbar^n)$ son muy pequeños en comparación con los primeros tres, la serie de ecuaciones se reduce a las que ya se escribieron de forma explícita. Esto nos deja con las relaciones siguientes

$$S_0 = \pm \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E - V)} dx' \quad (\text{A.8})$$

$$S_1 = -\int \frac{1}{4} \frac{2mV'}{2m(E - V)} dx = -\frac{1}{4} \ln 2m(E - V) \quad (\text{A.9})$$

$$S_2 = \int \left(\frac{S_0'''}{2S_0'^2} - \frac{3S_0''^2}{4S_0'^3} \right) dx \quad (\text{A.10})$$

⋮

Resulta evidente que si el potencial varía lentamente y $E - V \neq 0$, tanto S'' como S''' serán pequeños y se puede decir que $S_2 \rightarrow 0$. Por lo tanto, sólo se conserva a S_0 y S_1 en el desarrollo de S . De este modo, la solución dada por (A.1) queda como

$$\psi_{WKB}^{\pm} = e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

$$\begin{aligned}
&\approx e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \frac{\hbar}{4} S_1)} \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}(\pm S_0 - \frac{\hbar}{4} \frac{1}{2} \ln S_0')} \\
&= \frac{C_{\pm}}{\sqrt{S_0'}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} S_0} \\
&= \frac{C_{\pm}}{\sqrt[4]{2m(E-V)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int \sqrt{2m(E-V)} dx'} \quad (A.11)
\end{aligned}$$

De la ecuación (A.8) para S_0 tenemos que esta solución puede reducirse a una forma puramente real sólo en el dominio en que $E > V$. Esta es la región clásicamente accesible para la partícula. La región complementaria en la que $E < V$ es clásicamente inaccesible para la partícula, pues la cantidad de movimiento de ésta se vuelve puramente imaginaria. En esta región la solución (A.12) no es válida. Sin embargo, una solución también complementaria está dada de la forma

$$\psi = \frac{C_{\pm}}{\sqrt[4]{|2m(E-V)|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} (\int |\sqrt{2m(E-V)}| dx')} \quad (A.12)$$

Es claro que ambas soluciones dejan de ser buenas aproximaciones en aquellos puntos en que $E = V$, pues la densidad de probabilidad de hallar a la partícula se vuelve infinita con la divergencia de las funciones de onda. Estos puntos son los puntos de retorno clásicos del sistema. Para estados ligados las soluciones (A.12) y (A.12) pueden ser empleadas siempre que éstas se apliquen en regiones suficientemente lejanas de dichos puntos. Un estado ligado se representa en la figura siguiente.

Se espera entonces que la función de onda que describe al sistema sea tal que la partícula oscile en la región *II* y que decaiga exponencialmente en *I* y *III* al alejarse de los puntos de retorno. Entonces, de acuerdo a la aproximación semiclásica, la función de onda del sistema es de la forma

$$\psi = \begin{cases} \frac{C_1}{|\sqrt[4]{2m(E-V)}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |\sqrt{2m(E-V)}| dx'}, & x < x_1 \\ \frac{C_2 e^{\frac{i}{\hbar} \int^x \sqrt{2m(E-V)} dx'}}{\sqrt[4]{2m(E-V)}} + \frac{C_3 e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x \sqrt{2m(E-V)} dx'}}{\sqrt[4]{2m(E-V)}}, & x_1 < x < x_2 \\ \frac{C_4}{|\sqrt[4]{2m(E-V)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |\sqrt{2m(E-V)}| dx'}, & x_2 < x \end{cases}$$

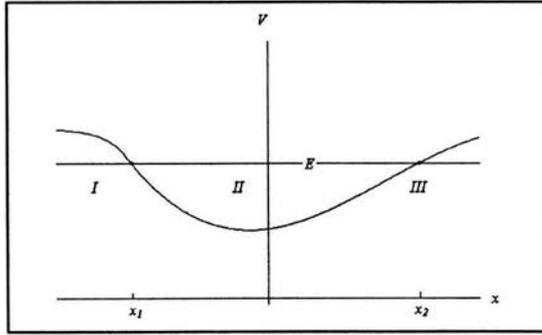


Figura A.1: Sistema ligado. Clásicamente la partícula oscila en la región *II* entre x_1 y x_2 , aunque cuánticamente la partícula puede penetrar en las regiones *I* y *III*

Para que esta representación sea correcta, es necesario conectar las soluciones a ambos lados de los puntos de retorno, en los que todas éstas divergen. La forma de hacer esto es suponiendo que el potencial puede ser aproximado por un potencial lineal $V_{\pm} = E \pm A_{\pm}(x - x_{2,1})$ en una vecindad alrededor de estos puntos. Con esta suposición la ecuación de Schrödinger se puede reescribir como

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - z\psi = 0 \quad (\text{A.13})$$

con $z_{\pm} = \pm (2mA_{\pm})^{1/3}(x - x_{2,1})$. Las soluciones de (A.13) son las funciones de Airy Ai y Bi . Al revisar las aproximaciones asintóticas de éstas se observa que las más adecuadas son las Ai , pues éstas oscilan a la región clásicamente accesible y decrecen exponencialmente lejos de los puntos de retorno en la región clásicamente inaccesible³. Satisfaciendo las condiciones a la frontera del problema, la función de onda del sistema se puede escribir como [6, 10]:

³Para el caso de una barrera de potencial, las soluciones adecuadas son las Bi , que decrecen entre los puntos de retorno y oscilan fuera de ellos.

$$\psi = \begin{cases} \frac{(-1)^n}{\sqrt[4]{|2m(E-V)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |\sqrt{2m(E-V)}| dx'}, & x < x_1 \\ \frac{2(-1)^n \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m(E-V)} dx' + \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt[4]{2m(E-V)}}, & x_1 < x < x_2 \\ \frac{1}{\sqrt[4]{|2m(E-V)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |\sqrt{2m(E-V)}| dx'}, & x_2 < x \end{cases}$$

De el análisis que lleva a esta expresión de la función de onda también se desprende la condición de cuantización (nuevamente al satisfacerse las condiciones a la frontera):

$$\oint \sqrt{2m(E-V)} dx = (n+1)\pi\hbar \quad (\text{A.14})$$

que es muy similar a la condición de de Wilson-Somerfeld salvo un factor de dos.

Bibliografía

- [1] D. Bohm. *Quantum Theory*. Dover Publications, New York, 1989.
- [2] D. Bohm and B.J. Hiley. *The Undivided Universe: An Ontological Interpretation of Quantum Theory*. Routledge, 1993.
- [3] H. Friedrich and J. Trost. Working with wkb waves far from the semi-classical limit. *Phys. Rep*, 397:359–449, 2004.
- [4] S. Gasiorowicz. *Quantum Physics*. John Wiley & Sons, New York, second edition, 1996.
- [5] L. Landau and M. Lifshitz. *Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory)*, volume 3 of *Course of Theoretical Physics*. Pergamon Press, third edition, 1995.
- [6] R. Liboff. *Introductory Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, third edition, 1998.
- [7] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, New York, third edition, 1998.
- [8] A. Messiah. *Quantum Mechanics*. Dover Publications, New York, 1999.
- [9] L. de la Peña. *Introducción a la mecánica cuántica*. Fondo de Cultura Economica, segunda edición, Mexico, 1991.
- [10] J. Powell and B. Crasemann. *Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, 1961.
- [11] J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, revised edition, 1995.

- [12] D. Styer *et al.* Nine formulations of quantum mechanics. *Am. J. Phys.*, 70(3):288–297, 2002.