



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

“ESTADOS COHERENTES MOLECULARES”

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

JESÚS ALONSO CASTAÑEDA MONTES

DIRECTORA DE TESIS: DRA. ROCÍO JÁUREGUI RENAUD

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. LUIS DE LA PEÑA AUERBACH

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. SAHEN HACYAN SALERYAN



**posgrado en ciencias físicas
u n a m**

MÉXICO, D.F. , JULIO DE 2007



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.

Índice general

1. Introducción	5
2. El oscilador armónico	7
2.1. Solución de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico	7
2.2. Estados coherentes del oscilador armónico	9
3. Potencial de Morse	13
3.1. Aproximación Born-Oppenheimer	13
3.2. El potencial de Morse y el espectro vibracional molecular	16
3.2.1. Estados discretos para el potencial de Morse	17
3.2.2. Estados continuos para el potencial de Morse	18
3.2.3. Estudio semiclásico de la acción para el potencial de Morse	20
3.2.4. Relación del potencial de Morse con el álgebra $su(2)$	21
3.2.5. Relación del potencial de Morse con el álgebra $su(1,1)$	24
4. Estados coherentes para sistemas anarmónicos	27
4.1. Construcción de Gazeau-Klauder	27

4.1.1.	Estados coherentes de Gazeau-Klauder con espectro discreto	29
4.1.2.	Estados coherentes de Gazeau-Klauder con espectro continuo	32
4.1.3.	Estados coherentes de Gazeau-Klauder con un espectro discreto y continuo	34
4.2.	Construcción de Manko <i>et al.</i>	35
4.2.1.	Construcción de estados coherentes para el q -oscilador	39
4.3.	Construcción a través de la teoría de grupos	39
4.3.1.	Construcción de estados coherentes para H_4	41
4.3.2.	Construcción de estados coherentes para $SU(2)$	42
4.3.3.	Construcción de estados coherentes para $SU(1, 1)$	45
4.3.4.	Estados coherentes atómicos	47
4.3.5.	Construcción de estados coherentes para FGL	48
4.4.	Construcción de Nieto y Simmons para potenciales generales	50
4.4.1.	Construcción de estados coherentes para el potencial de Morse	53
5.	Estados coherentes para el potencial de Morse	57
5.1.	Espectro discreto	58
5.1.1.	Formalismo de Gazeau-Klauder	58
5.1.2.	Formalismo de Manko <i>et al.</i>	59
5.1.3.	Formalismo de grupos	60
5.2.	Espectro completo	65
5.2.1.	Estados coherentes desplazados para el potencial de Morse	65
5.2.2.	Estados coherentes para el potencial de Morse en el formalismo de Gazeau-Klauder	73

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	3
5.2.3. Evolución en el espacio de fase y dispersiones de los estados coherentes de Morse	77
6. Conclusiones	89
A. Polinomios generalizados de Laguerre	93
B. Elementos de matriz para el potencial de Morse	95
B.1. Elementos de matriz entre estados vibracionales.	95
B.2. Elementos de matriz entre estados vibracionales y de dispersión.	97
B.3. Elementos de matriz entre estados de dispersión.	100
C. Determinación de las constantes $a_1(J)$ y $a_2(J)$	105

Capítulo 1

Introducción

Los estados coherentes fueron propuestos por Schrödinger en 1926 [1]. Su interés fue conectar los estados clásicos de un oscilador armónico con los estados que resultan de la descripción cuántica de éste; él se refirió a ellos como estados de mínima dispersión. Schrödinger tenía en mente la búsqueda de estados no dispersivos para el átomo de hidrógeno. Pasaron alrededor de 30 años hasta que en el inicio de la década de 1960 las propiedades de los estados coherentes fueron investigadas por Klauder, Glauber y Sudarshan [2, 3, 4]. Fue precisamente en el trabajo de Glauber, gracias al cual fue laureado con el Premio Nobel de Física 2005, en donde por primera vez se les nombró estados coherentes, y con ellos él estudió las funciones de correlación electromagnética que son de gran importancia en la óptica cuántica. El estudio de la relevancia de los estados coherentes fue contemporáneo al desarrollo de la luz láser.

Los estados coherentes no sólo son útiles para describir luz coherente, sino también en estudios de mecánica estadística, de fonones en cristales, de superfluidez, de superconductividad, etcétera [18].

Debido a la robustez de los estados coherentes, éstos han sido muy estudiados y existen diversas generalizaciones para sistemas anarmónicos. En el presente trabajo se estudian las cuatro que existen, a saber: estados coherentes Gazeau-Klauder [6], estados coherentes Manko-Marmo-

Sudarshan-Zaccaria [7], estados coherentes de la teoría de grupos [37, 39] y estados coherentes de Nieto-Simmons [8]. Estos formalismos los aplicamos a un potencial anarmónico propuesto, en 1929, por Morse para describir el espectro vibracional de moléculas diatómicas [5]. Y de esta manera construimos los estados que jueguen el papel análogo a los estados coherentes en moléculas. En la literatura existen reportadas construcciones de estados coherentes para el potencial de Morse [9, 44, 45, 46, 49], sin embargo, estas construcciones no incorporan, por lo general, el espectro continuo. En el trabajo de Benedict y Molnár, la incorporación del continuo sí se hace, pero discretizándolo. En el presente trabajo realizamos la construcción de estados coherentes para el potencial de Morse incorporando los estados de dispersión dentro de dos formalismos, el de Gazeau-Klauder y como estados desplazados. Estos últimos son aquellos que resultan de desplazar el estado base vibracional a través de una transición de Franck Condon donde sólo se varía la posición de equilibrio del potencial, y son equivalentes, en el caso discreto, a los estados coherentes de Nieto, aproximados en su propio formalismo, y también a los de Benedict y Molnár que resultan de un formalismo de supersimetría.

Cabe resaltar que la técnica de excitación molecular utilizando láseres ultracortos hace factible la verificación experimental de estos estudios teóricos [16].

Capítulo 2

El oscilador armónico

Un sistema físico de gran interés teórico es el oscilador armónico, el cual ha sido muy fructífero tanto en la mecánica clásica como en la mecánica cuántica. Y en esta última, por ejemplo, describe muy bien las oscilaciones de átomos y moléculas cuando los potenciales involucrados se pueden aproximar en torno a un mínimo de potencial como curvas parabólicas. Los estados coherentes para el oscilador armónico fueron construidos por Glauber [3], y por eso también se denominan estados de Glauber.

2.1. Solución de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico

El potencial de un oscilador armónico cuántico unidimensional es

$$\hat{V}(x) = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \quad (2.1)$$

aquí ω representa la frecuencia de oscilación, y m la masa del oscilador. La ecuación de Schrödinger para este potencial en la representación de coordenadas es

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi, \quad (2.2)$$

cuya solución estacionaria es ampliamente conocida en la literatura cuántica [18]:

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_n(\xi), \quad (2.3)$$

donde $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \xi$, y $H_n(\xi)$ es un polinomio de Hermite de grado n ; los eigenvalores de la energía son $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$.

El hamiltoniano del oscilador armónico cuántico también se puede expresar en términos de operadores de creación y aniquilación de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.4)$$

con las siguientes expresiones para los operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger :

$$\hat{a} = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}} \hat{p} \right); \quad \hat{a}^\dagger = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}} \hat{p} \right). \quad (2.5)$$

Los operadores de creación y aniquilación, \hat{a}^\dagger y \hat{a} , respectivamente, cumplen las siguientes reglas de conmutación:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \mathbb{I}; \quad [\hat{a}, \hat{H}] = \hbar\omega \hat{a}; \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{H}] = -\hbar\omega \hat{a}^\dagger; \quad [\hat{n}, \hat{H}] = 0, \quad \hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}. \quad (2.6)$$

Los operadores \hat{a} , \hat{a}^\dagger , \hat{n} y \mathbb{I} forman el grupo de Heisenberg-Weyl (H_4), y actúan en la base de Fock de la siguiente manera:

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle. \quad (2.7)$$

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle; \quad (2.8)$$

$$\hat{a} |0\rangle = 0, \quad \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle; \quad (2.9)$$

y así la ecuación de eigenvalores para el oscilador armónico en la misma base es

$$\hat{H} |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle. \quad (2.10)$$

El hamiltoniano de la Ec. 2.4 y los conmutadores expresados en 2.6 definen un oscilador cuántico de frecuencia ω , con estado de vacío $|0\rangle$, y conducen a la dinámica del mismo. En la teoría clásica electromagnética se muestra mediante un análisis de Fourier que el campo de radiación se puede considerar como una superposición de osciladores armónicos, cada uno de los cuales satisface una ecuación de Helmholtz. Por otra parte, al cuantizar el campo electromagnético estos osciladores deben de ser tratados cuánticamente y no clásicamente. Fue Dirac quien en 1927 utilizó el formalismo en términos de operadores de creación y aniquilación mostrando anteriormente para realizar esta cuantización, la cual se denomina *segunda cuantización* [19].

2.2. Estados coherentes del oscilador armónico

En óptica cuántica existen tres formas equivalentes de definir a un estado coherente para un oscilador armónico [18, 20]:

1. Son estados de mínima incertidumbre ($\Delta x \Delta p = \hbar/2$), y en las unidades naturales del sistema $[\Delta x]=[\Delta p]$. Los estados de mínima incertidumbre que no cumplen con esta última condición son los estados prensados o comprimidos (*squeezed states*).
2. Son eigenestados del operador de aniquilación:

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle. \quad (2.11)$$

3. Son generados por la aplicación del operador de desplazamiento sobre el estado base:

$$|\alpha\rangle = D(\alpha) |0\rangle \quad (2.12)$$

en donde $D(\alpha) = \exp(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a})$.

Construimos el estado coherente $|\alpha\rangle$ a partir de la tercera definición. Mediante el teorema de Baker-Campbell-Hausdorff, el operador de desplazamiento se expresa así

$$\begin{aligned} D(\alpha) &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp(\alpha\hat{a}^\dagger) \exp(-\alpha^*\hat{a}) \\ &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\hat{a}^\dagger)^n}{n!} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-\alpha^*\hat{a})^m}{m!}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

y aplicándolo a $|0\rangle$ obtenemos

$$D(\alpha)|0\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\hat{a}^\dagger)^n}{n!} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-\alpha^*\hat{a})^m}{m!} |0\rangle \quad (2.14)$$

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\hat{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle, \quad (2.15)$$

ya que de los términos en la suma sobre m aplicados al estado base sólo sobrevive el primero. Y con ayuda de la última expresión en 2.6, obtenemos los estados coherentes para oscilador armónico en la base de Fock:

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (2.16)$$

Es claro que estos estados siguen siendo coherentes ante la aplicación del operador de evolución temporal:

$$\exp(-i\hat{H}t/\hbar) |\alpha\rangle = |\alpha'\rangle \rightarrow \alpha' = \alpha \exp(-i\omega t). \quad (2.17)$$

A esta propiedad de los estados coherentes se le denomina estabilidad temporal.

Ahora demostraremos la equivalencia entre las definiciones 2 y 3. Partimos de la Ec. 2.16 y desarrollamos $|\alpha\rangle$ en la base de Fock

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle, \quad (2.18)$$

a partir de la Ec. 2.11 encontramos los coeficientes C_n :

$$\begin{aligned} \hat{a}|\alpha\rangle &= \hat{a} \left(\sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle \right) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \hat{a} |n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle \\ &= \alpha \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Así obtenemos la siguiente regla de recurrencia:

$$C_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} C_n, \quad (2.20)$$

y como por normalización $C_0 = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right)$,

$$C_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right). \quad (2.21)$$

Estos estados coherentes están normalizados mas no son ortogonales, ya que

$$|\langle \beta | \alpha \rangle|^2 = \exp(-|\alpha - \beta|^2). \quad (2.22)$$

Así vemos que la definición 2 es equivalente a la definición 3. Ahora demostraremos que ambas definiciones implican la definición 1. Partimos de nuevo de la Ec. 2.11, y calculamos $\Delta x \Delta p$ a partir de

$$\langle \hat{x} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha + \alpha^*), \quad (2.23)$$

$$\langle \hat{p} \rangle = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle \alpha | \hat{a} - \hat{a}^\dagger | \alpha \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\alpha^* - \alpha), \quad (2.24)$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} | \alpha \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (\alpha^{*2} + \alpha^2 + 2\alpha^*\alpha + 1) = \langle \hat{x} \rangle^2 + \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad (2.25)$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle \alpha | \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} | \alpha \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (-\alpha^{*2} - \alpha^2 + 2\alpha^*\alpha + 1) = \langle \hat{p} \rangle^2 + \frac{m\hbar\omega}{2}. \quad (2.26)$$

Estos resultados implican que

$$\sigma_x^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}; \quad \sigma_p^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \frac{m\hbar\omega}{2}. \quad (2.27)$$

Por lo tanto, para el estado coherente $|\alpha\rangle$

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \quad (2.28)$$

ya que $\Delta x = \sqrt{\sigma_x^2}$ y $\Delta p = \sqrt{\sigma_p^2}$. De esta manera vemos que los estados coherentes del oscilador armónico unidimensional minimizan la relación de incertidumbre de Heisenberg.

En la electrodinámica cuántica un campo escalar cuantizado \hat{F} se expresa en términos de operadores de creación y aniquilación de la siguiente manera:

$$\hat{F} = \sum_{\gamma} f_{\gamma} \hat{a}_{\gamma} + f_{\gamma}^* \hat{a}_{\gamma}^{\dagger}, \quad (2.29)$$

en donde las funciones f_{γ} son soluciones de la ecuación dinámica del campo y dependen en general de \vec{x}, t y ω . Considerando al campo \hat{F} como una componente del campo eléctrico \vec{E} o magnético \vec{B} , si calculamos el valor esperado del mismo, para una α dada, sobre un estado de n fotones obtenemos

$$\langle n | f \hat{a} + f^* \hat{a}^{\dagger} | n \rangle = f \langle n | \hat{a} | n \rangle + f^* \langle n | \hat{a}^{\dagger} | n \rangle \quad (2.30)$$

$$= \sqrt{n} f \langle n | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} f^* \langle n | n+1 \rangle = 0. \quad (2.31)$$

El campo promedia a cero independientemente del número de fotones. Si queremos un campo que promedie a un valor distinto de cero, es decir, que tenga un comportamiento análogo a un campo clásico, recurrimos a un estado coherente $|\alpha\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{F} | \alpha \rangle &= \sum_{n,m} C_n^* C_m \langle n | f \hat{a} + f^* \hat{a}^{\dagger} | m \rangle \\ &= \sum_{n,m} C_n^* C_m \left[\sqrt{m} f \langle n | m-1 \rangle + \sqrt{m+1} f^* \langle n | m+1 \rangle \right] \\ &= \sum_{n,m} C_n^* C_m \left[\sqrt{m} f \delta_{n,m-1} + \sqrt{m+1} f^* \delta_{n,m+1} \right] \\ &= \sum_n \left[C_n^* C_{n+1} \sqrt{n+1} f + C_n C_{n+1}^* \sqrt{n+1} f^* \right] = \alpha f + \alpha^* f^* \equiv \xi(x, t) \end{aligned}$$

Lo que significa que los estados coherentes $|\alpha\rangle$ promedian a una función dada $\xi(x, t)$ como en el caso de los campos clásicos.

Capítulo 3

Potencial de Morse

Aunque el modelo de oscilador armónico puede ser muy útil para estudiar una gran cantidad de sistemas físicos, existen muchos otros modelos teóricos que se aplican a una amplia gama de problemas prácticos. Es, pues, importante estudiar diversos potenciales anarmónicos en el contexto de los estados coherentes que, como ya hemos mencionado, fueron construidos a partir de un modelo armónico. Un potencial anarmónico muy útil es el potencial de Morse, el cual utilizaremos en el presente trabajo y que describe muy bien las vibraciones nucleares de moléculas diatómicas [5].

3.1. Aproximación Born-Oppenheimer

Un sistema molecular es aquel formado por núcleos y electrones. Las moléculas, por lo tanto, tienen movimientos electrónicos y nucleares. Por lo general, estos movimientos son tratados de manera independiente. La justificación teórica para realizar este tratamiento se conoce como aproximación de Born-Oppenheimer, que es la base de la física molecular. Esta aproximación se fundamenta en el hecho de que la masa de los núcleos es mucho mayor -tres órdenes de magnitud- a la de los electrones.

El hamiltoniano no relativista para una molécula de S núcleos y N electrones es [21]

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^S \frac{\nabla_k^2}{m_k} - \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^N \nabla_{\mu}^2 - \sum_{\mu} \sum_k \frac{Z_k}{r_{\mu k}} + \sum_{k<l} \frac{Z_k Z_l}{r_{kl}} + \sum_{\mu<\nu} \frac{1}{r_{\mu\nu}}, \quad (3.1)$$

en donde hemos utilizado unidades atómicas ($m_{electrón}, \hbar$ y $e = 1$). El término m_k es la masa del núcleo k . El primer término del hamiltoniano describe la energía cinética del movimiento de los núcleos; el segundo es el término cinético de los electrones; el tercero, la interacción entre electrones y núcleos; el cuarto, la repulsión entre núcleos, y el último término representa la repulsión entre electrones.

La aproximación de Born-Oppenheimer consta de dos etapas.

- Primera etapa. Se congela el movimiento de los núcleos y se establece la mejor forma de hacer esto dada la ecuación de Schrödinger, resolviendo la siguiente ecuación:

$$\hat{H}\psi(r, R) = E\psi(r, R). \quad (3.2)$$

Aquí r se refiere a las coordenadas de los electrones, y R a las de los núcleos:

$$r = (r_1, r_2, \dots, r_N), \quad R = (R_1, R_2, \dots, R_S). \quad (3.3)$$

Como en esta etapa estamos manteniendo la posición de los núcleos fija R_f , la Ec. 3.2 se expresa de la siguiente manera

$$\hat{H}_e \varphi_n(r, R_f) = U_n(R_f) \varphi_n(r; R_f), \quad (3.4)$$

donde el hamiltoniano electrónico (incluyendo la repulsión internuclear, la cual por lo general se omite) es

$$\hat{H}_e = -\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^N \nabla_{\mu}^2 - \sum_{\mu} \sum_k \frac{Z_k}{r_{\mu k}} + \sum_{k<l} \frac{Z_k Z_l}{r_{kl}} + \sum_{\mu<\nu} \frac{1}{r_{\mu\nu}}. \quad (3.5)$$

Las funciones $U_n(R_f)$ no son triviales. La justificación física de esta primera etapa (despreciar el movimiento de los núcleos) puede interpretarse a través del principio de incertidumbre de Heisenberg

$$\Delta x \Delta p \approx \hbar, \quad (3.6)$$

que traducido a nivel molecular establece que la velocidad de los electrones es por lo menos 1000 veces mayor a la de los núcleos.

- Segunda etapa. Considerando un conjunto completo de funciones discretas, para cada R_f , se puede proponer $\psi(r, R)$ como

$$\psi(r, R) = \sum_n F_n(R) \varphi_n(r; R_f). \quad (3.7)$$

Aquí las $F_n(R)$ describen el movimiento de los núcleos con R como coordenada no fija mientras que en $\varphi_n(r; R_f)$ es un parámetro. La función $\psi(r, R)$ es solución de la ecuación 3.2 , y mediante una aproximación adiabática se demuestra que [23]

$$\psi(r, R) = F_n(R) \varphi_n(r; R_f). \quad (3.8)$$

Podemos sintetizar la aproximación de Born-Oppenheimer de la siguiente manera: Debido a la diferencia entre el valor de las masas -o las velocidades- de los núcleos y los electrones, el movimiento de aquéllos en una molécula se describe mediante un potencial efectivo generado por la cuantización del movimiento de los electrones, donde dicha cuantización se hace considerando las distancias internucleares fijas. Así la función de onda que describe un estado estacionario molecular es simplemente el producto de una función de onda nuclear por una electrónica, y ésta es en esencia la aproximación de Born-Oppenheimer.

3.2. El potencial de Morse y el espectro vibracional molecular

Ahora utilizaremos la aproximación de Born-Oppenheimer para describir el espectro vibracional de moléculas diatómicas. Partimos de la Ec. 3.8, y auxiliándonos de la Ec. 3.4, resolvemos la ecuación de eigenvalores:

$$\left[-\frac{\nabla_k^2}{2\mu} + U(\vec{R}) - E \right] F(\vec{R}) = 0. \quad (3.9)$$

En esta expresión μ representa la masa reducida de los dos núcleos, y R es la distancia internuclear. Es fácil expresar el laplaciano en coordenadas esféricas, de esta manera la Ec. 3.9 es

$$-\frac{1}{2\mu R^2} \left[\frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} - \hat{L}^2 \right] F(R, \theta, \phi) + U(R)F(R, \theta, \phi) = EF(R, \theta, \phi). \quad (3.10)$$

Esta ecuación es análoga a la de un campo central donde la solución para $F(R, \theta, \phi)$ es

$$F(R, \theta, \phi) = \frac{1}{R} f(R) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (3.11)$$

Los armónicos esféricos $Y_{lm}(\theta, \phi)$ satisfacen la ecuación de eigenvalores

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (3.12)$$

Así la ecuación para el movimiento nuclear es

$$-\frac{1}{2\mu R^2} \left[\frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} - l(l+1) \right] F(R, \theta, \phi) + U(R)F(R, \theta, \phi) = EF(R, \theta, \phi). \quad (3.13)$$

Enfocándonos en moléculas diatómicas con $l = 0$, el hamiltoniano nuclear se reduce a

$$\hat{H} = -\frac{1}{2\mu R^2} \frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} + U(R), \quad \text{con } \hbar = 1 \quad (3.14)$$

Como mencionamos en la sección anterior, las $U(R)$ en física molecular no son triviales. Sin

embargo, una forma muy común de aproximar $U(R)$ por una función analítica es el potencial de Morse [5], cuya expresión es

$$U(R) = D [\exp \{-2\beta(R - R_0)\} - 2 \exp \{-\beta(R - R_0)\}], \quad (3.15)$$

en donde D da la profundidad del pozo, β el alcance, y R_0 la posición de equilibrio.

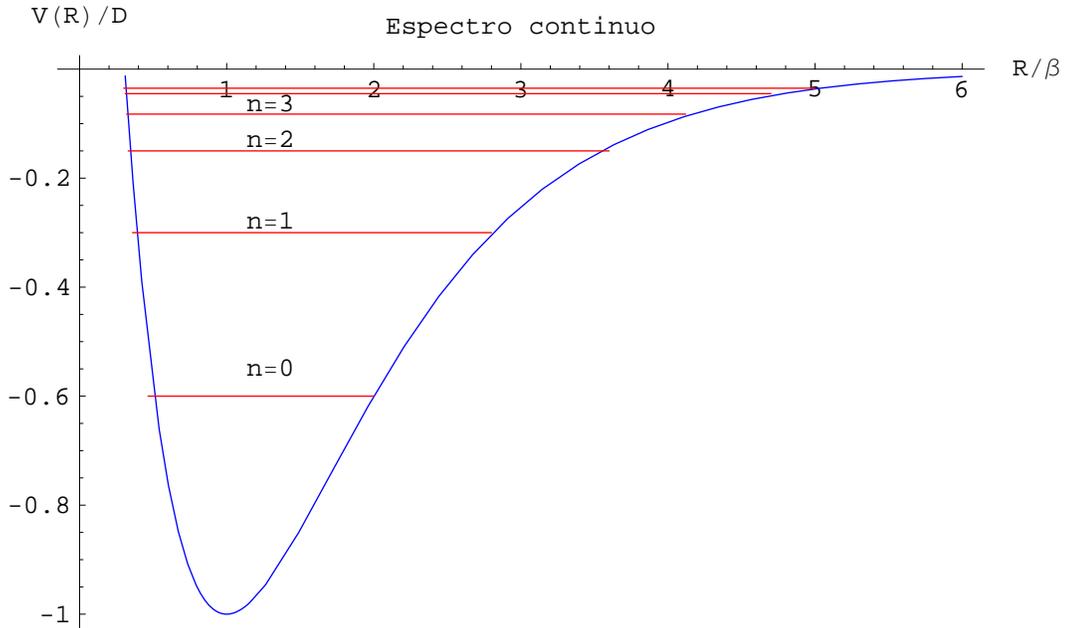


Figura 3.1: Potencial de Morse.

3.2.1. Estados discretos para el potencial de Morse

Para resolver la Ec. 3.14 para el potencial de Morse, primero se introducen nuevas variables, las cuales se definen de la siguiente manera

$$a = \sqrt{2\mu D}/\beta\hbar, \quad z = 2a \exp[-\beta(R - R_0)] \quad \text{y} \quad b = \sqrt{-2\mu E}/\beta\hbar. \quad (3.16)$$

En el caso de estados ligados, es decir, para $E < 0$, la ecuación que hay que resolver es

$$z^2\psi'' + z\psi' + \left[-b^2 + az - \frac{1}{4}z^2\right]\psi = 0. \quad (3.17)$$

La cuantización energética encontrada por Morse es

$$E_n = -D + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega\chi \left(n + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (3.18)$$

donde $\omega = \beta\sqrt{\frac{2D}{\mu}}$ y $\chi = \frac{1}{2}\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2\mu D}}$.

Las eigenfunciones $\psi_n(z)$ para los estados ligados del potencial de Morse son [5]

$$\psi_n(z) = C_n \exp(-z/2) z^{b_n} L_n^{2b_n}(z), \quad b_n = N - n > 0, \quad (3.19)$$

donde C_n es la constante de normalización

$$C_n = [\beta(2N - 2n)n!/\Gamma(2N + 1 - n)]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.20)$$

y aquí N es el número de estados ligados para el pozo, el cual está relacionado tanto con la constante a como con la constante de anarmonicidad χ , de la siguiente manera

$$N = a - \frac{1}{2}, \quad \chi^{-1} = 2N + 1. \quad (3.21)$$

Estos estados discretos son ortonormales, es decir,

$$\langle m | n \rangle = \delta_{n,m}. \quad (3.22)$$

Es muy importante mencionar que la solución de Morse abarca todo el plano, es decir, tanto para R positivas como negativas. Sin embargo, sabemos que estas soluciones sólo tienen significado físico para $R > 0$. El problema del potencial de Morse es un caso tridimensional, pero la solución se obtiene como un problema unidimensional.

3.2.2. Estados continuos para el potencial de Morse

Para el caso de los estados de dispersión o continuos del potencial de Morse, es decir, para energías positivas $E > 0$, la Ec. 3.14 es

$$z^2\psi'' + z\psi' + \left[\varepsilon^2 + az - \frac{1}{4}z^2 \right] \psi = 0, \quad (3.23)$$

donde se ha introducido una nueva variable ε definida como

$$\varepsilon = \sqrt{2\mu E}/\beta\hbar = \frac{k}{\beta}. \quad (3.24)$$

Por último se define

$$\psi(z) = \frac{1}{\sqrt{z}}W(z), \quad (3.25)$$

y así la Ec. 3.23 se transforma en la ecuación diferencial de Whittaker

$$W'' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{a}{z} - \frac{1}{z^2} \left((i\varepsilon)^2 - \frac{1}{4} \right) \right] W = 0. \quad (3.26)$$

Entonces las eigenfunciones para los estados de dispersión del potencial de Morse, $\psi_E(z)$, son [53]

$$\begin{aligned} \psi_E(z) = C_E \exp\left(-\frac{z}{2}\right) \{ & A(\varepsilon) {}_1F_1(-N + i\varepsilon, 2i\varepsilon + 1; z) z^{i\varepsilon} \\ & + A^*(\varepsilon) {}_1F_1(-N - i\varepsilon, -2i\varepsilon + 1; z) z^{-i\varepsilon}\}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

con

$$A(\varepsilon) = \frac{\Gamma(-2i\varepsilon)}{\Gamma(-N - i\varepsilon)}, \quad (3.28)$$

y $C_E(\varepsilon)$ la constante de normalización que, de acuerdo al criterio de Bethe-Salpeter [51, 58] se determina mediante el requerimiento

$$\int_0^\infty dR \langle R|\varepsilon\rangle \int_{E-\Delta E}^{E+\Delta E} \langle \varepsilon'|R\rangle dE' = 1, \quad (3.29)$$

que en este caso particular conduce a

$$C_E = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} \frac{1}{|A(\varepsilon)|} \sqrt{\frac{dk}{dE}}. \quad (3.30)$$

Las eigenfunciones del potencial de Morse para el espectro continuo son oscilatorias para $R > 0$, pero para $R < 0$ tienen un comportamiento divergente.

3.2.3. Estudio semiclásico de la acción para el potencial de Morse

Las variables de ángulo-acción para el potencial de Morse se pueden determinar explícitamente [67]. Estas variables se definen de la manera usual como se hace en mecánica clásica, es decir, la variable de acción I viene determinada por la integral

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint P dx, \quad (3.31)$$

donde $x = R - R_0$. y $P = p/\sqrt{2D\mu}$. El valor reportado de la integral es [67]

$$I = 1 - \{1 - P^2 - [1 - \exp(-x)]\}, \quad \text{para } 0 \leq I \leq 1. \quad (3.32)$$

El hamiltoniano de Morse, a su vez, puede expresarse a través de la acción I . Y para el espectro discreto tenemos que es

$$\hat{H}_{Morse}^{ligado}(I) = I - \frac{I^2}{2}, \quad (3.33)$$

mientras que para el espectro continuo es

$$\hat{H}_{Morse}^{dispersion}(I) = 1 - I + \frac{I^2}{2}. \quad (3.34)$$

El valor de la acción que separa a ambos espectros es $I = 1$. Es decir,

$$\hat{H}_{Morse} = \begin{cases} \hat{H}_{Morse}^{lig}(I) & \text{si } 0 \leq I \leq 1 \\ \hat{H}_{Morse}^{dis}(I) & \text{si } 1 \leq I \leq \infty \end{cases}$$

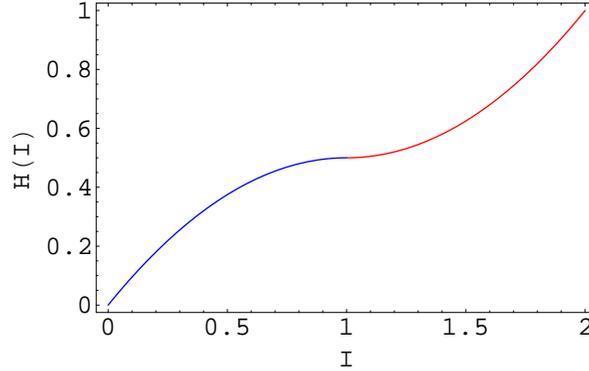


Figura 3.2: El hamiltoniano de Morse como función de la acción.

3.2.4. Relación del potencial de Morse con el álgebra $su(2)$

El hamiltoniano de un oscilador armónico bidimensional isotrópico es [27]

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{x}^2 + \hat{y}^2), \quad (3.35)$$

eligiendo \hbar, ω y m iguales a la unidad. Este hamiltoniano es soluble tanto en coordenadas cartesianas como en coordenadas polares. A partir de la transformación

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta \quad (3.36)$$

se obtienen dos ecuaciones de eigenvalores, una para la parte radial y otra para la angular,

$$\frac{1}{2} \left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d}{dr} + \frac{m^2}{r^2} + r^2 \right) \Phi(r) = E \Phi(r) \quad (3.37)$$

$$-\frac{d^2}{d\theta^2} \phi(\theta) = m^2 \phi(\theta) \quad (3.38)$$

cuyas soluciones son, respectivamente,

$$\Phi_{Nm}(r) = \sqrt{\frac{2((N-m)/2)!}{((N+m)/2)!}} r^{|m|} L_{(N-|m|)/2}^{|m|}(r^2) \exp(-r^2/2) \quad (3.39)$$

con $E = N + 1$, $N = 0, 1, \dots$ y

$$\phi_m(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\theta) \quad (3.40)$$

donde $m = \pm N, \pm(N-2), \dots, \pm 1$ ó 0 . La solución completa de la función de onda es

$$\Phi_{Nm}(r, \theta) = \sqrt{\frac{((N-m)/2)!}{\pi((N+m)/2)!}} r^{|m|} L_{(N-|m|)/2}^{|m|}(r^2) \exp(-r^2/2) \exp(im\theta), \quad (3.41)$$

$L_{(N-|m|)/2}^{|m|}$ son polinomios asociados de Laguerre. En esta representación, los estados del oscilador armónico bidimensional están especificados por los valores N y m , y son $(N+1)$ degenerados. Esta degeneración está asociada con una simetría $U(2)$ del hamiltoniano de la Ec. 3.35, la cual es fácil ver si expresamos a éste en términos de los operadores de creación y aniquilación de dos osciladores armónicos unidimensionales.

A partir de

$$\hat{s}^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2}}(\hat{x} - i\hat{p}_x), \quad \hat{t}^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2}}(\hat{y} - i\hat{p}_y), \quad (3.42)$$

$$\hat{s} = \sqrt{\frac{1}{2}}(\hat{x} + i\hat{p}_x), \quad \hat{t} = \sqrt{\frac{1}{2}}(\hat{y} + i\hat{p}_y), \quad (3.43)$$

se obtienen las siguientes reglas de conmutación

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = i, \quad (3.44)$$

$$[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0, \quad (3.45)$$

$$[\hat{s}, \hat{s}^\dagger] = [\hat{t}, \hat{t}^\dagger] = \mathbb{I}. \quad (3.46)$$

Con los operadores definidos en (3.43) podemos identificar al hamiltoniano del oscilador armónico bidimensional como

$$\hat{H} = \hat{s}^\dagger \hat{s} + \hat{t}^\dagger \hat{t} + 1. \quad (3.47)$$

Para estudiar la simetría asociada con \hat{H} , se define el conjunto de cuatro operadores

$$G_1^1 \equiv \hat{s}^\dagger \hat{s}, \quad G_1^2 = \hat{s}^\dagger \hat{t}, \quad G_2^1 = \hat{t}^\dagger \hat{s}, \quad G_2^2 = \hat{t}^\dagger \hat{t}, \quad (3.48)$$

los cuales conmutan con \hat{H} , y satisfacen entre ellos la siguiente regla de conmutación

$$[G_i^j, G_k^l] = G_i^l \delta_{j,k} - G_k^j \delta_{i,l}, \quad i, j, k, l = 1, 2. \quad (3.49)$$

Con esto se demuestra que los operadores expresados en las Eqs. 3.48 definen el álgebra de Lie de $U(2)$, y, por lo tanto, son generadores del mismo. Si definimos las siguientes combinaciones lineales de los generadores de $U(2)$

$$\hat{J}_x \equiv \frac{1}{2} (\hat{s}^\dagger \hat{s} - \hat{t}^\dagger \hat{t}), \quad \hat{J}_y \equiv \frac{1}{2} (\hat{t}^\dagger \hat{s} + \hat{s}^\dagger \hat{t}), \quad \hat{J}_z \equiv \frac{i}{2} (\hat{t}^\dagger \hat{s} - \hat{s}^\dagger \hat{t}), \quad \hat{N} \equiv \hat{s}^\dagger \hat{s} + \hat{t}^\dagger \hat{t}, \quad (3.50)$$

obtenemos

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\epsilon_{jkl} \hat{J}_l, \quad j, k, l = x, y, z, \quad (3.51)$$

donde ϵ_{jkl} es el factor de Levi Civita, y además

$$\hat{H} = \hat{N} + 1, \quad [\hat{N}, \hat{J}_j] = 0, \quad j = x, y, z. \quad (3.52)$$

De esta manera podemos ver claramente que los operadores \hat{J}_x, \hat{J}_y y \hat{J}_z satisfacen las reglas de conmutación para $su(2)$.

Al definir combinaciones lineales de los generadores de $U(2)$ donde una de ellas, \hat{N} , genera de manera trivial un álgebra $u(1)$, y las otras tres, \hat{J}_x, \hat{J}_y y \hat{J}_z , un álgebra $su(2)$, se ilustra que $U(2)$ es isomorfo al producto directo $SU(2) \otimes U(1)$, $U(2) \simeq SU(2) \otimes U(1)$. Y ya que el hamiltoniano del oscilador armónico bidimensional conmuta tanto con los generadores de $U(2)$ como los de $SU(2)$, cualquiera de los dos grupos puede ser considerado como el grupo de simetría en cuestión. De hecho, es un resultado general que [26] $SU(n)$ es el grupo de simetría para un oscilador armónico n -dimensional.

En el estudio de modelos algebraicos para física molecular [27] es conocida la conexión del potencial de Morse con el álgebra $su(2)$. Dicha conexión se encuentra a través de la siguiente transformación en la Ec. 3.37

$$r^2 = (N + 1) \exp(-\rho), \quad (3.53)$$

donde r^2 es de hecho la variable natural de las eigenfunciones del potencial de Morse z definida en 3.16, e implica

$$\frac{d}{dr} = \frac{d\rho}{dr} \frac{d}{d\rho} = -\frac{2}{\sqrt{N+1}} \exp\left(\frac{\rho}{2}\right) \frac{d}{d\rho} \quad (3.54)$$

y

$$\frac{d^2}{dr^2} = \frac{d\rho}{dr} \frac{d}{d\rho} \left[-\frac{2}{\sqrt{N+1}} \exp\left(\frac{\rho}{2}\right) \frac{d}{d\rho} \right] = \frac{4}{N+1} \left[\frac{\exp(\rho)}{2} \frac{d}{d\rho} + \exp(\rho) \frac{d^2}{d\rho^2} \right]. \quad (3.55)$$

Utilizando esta transformación, la Ec. 3.37 se expresa como

$$\left\{ -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{(N+1)^2}{4} [\exp(-2\rho) - 2\exp(-\rho)] \right\} \Phi(\rho) = -\frac{m^2}{4} \Phi(\rho). \quad (3.56)$$

Si en esta expresión definimos la transformación

$$R = \frac{\rho}{\beta}, \quad \beta = \text{constante}, \quad (3.57)$$

y multiplicamos por $\frac{\beta^2 \hbar^2}{2\mu}$, se obtiene

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{\beta^2 \hbar^2 (N+1)^2}{8\mu} [\exp(-2\beta R) - 2\exp(-\beta R)] \right\} \Phi(R) = -\frac{m^2 \beta^2 \hbar^2}{8\mu} \Phi(R). \quad (3.58)$$

Esta ecuación es equivalente a la Ec. 3.14 utilizando el potencial de Morse si

$$N+1 = \sqrt{\frac{8\mu D}{\beta^2 \hbar^2}}, \quad E = -\frac{m^2 \beta^2 \hbar^2}{8\mu}. \quad (3.59)$$

Así vemos que el grupo de simetría para el potencial de Morse es $SU(2)$. Sin embargo, es claro que el espectro de Morse es reproducido dos veces ya que los eigenvalores de la energía son proporcionales a m^2 . Por lo tanto, debemos restringirnos a valores de m positivos o negativos. Gracias a esta simetría involucrada los eigenestados de Morse pueden ser clasificados a través de los estados de $SU(2)$, y más específicamente, debido a los eigenvalores de la energía, a través de los estados de $SU(2) \supset SO(2)$. El hamiltoniano de Morse puede ser expresado como

$$\hat{H}_{Morse} = -\frac{\beta^2 \hbar^2}{2\mu} \hat{J}_z^2 \quad \text{si } j - n = m. \quad (3.60)$$

3.2.5. Relación del potencial de Morse con el álgebra $su(1,1)$

Hemos visto cómo se relacionan los estados discretos del potencial de Morse con el álgebra $su(2)$. También es posible encontrar una relación entre el álgebra $su(1,1)$ y los estados de dispersión

del potencial de Morse [28]. Esta relación se encuentra si hacemos en la Ec. 3.58 la sustitución $m \Rightarrow ik_y$. De tal forma que la energía es positiva y la variable k_y es continua.

Los operadores que generan el álgebra $su(1, 1)$ son

$$\begin{aligned}\hat{K}_+ &= \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger, \\ \hat{K}_- &= \hat{a} \hat{b}, \\ \hat{K}_z &= \frac{1}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{b}^\dagger \hat{b} + 1), \\ \hat{M} &= \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{b}^\dagger \hat{b};\end{aligned}\tag{3.61}$$

con las siguientes reglas de conmutación,

$$\begin{aligned}[\hat{K}_+, \hat{K}_-] &= -2\hat{K}_z, \\ [\hat{K}_\pm, \hat{K}_z] &= \pm\hat{K}_\pm.\end{aligned}\tag{3.62}$$

Trabajando en la base cuyos elementos son eigenfunciones de M y K_y , es decir,

$$\hat{M} |M, k_y\rangle = M |M, k_y\rangle, \quad \hat{K}_y |M, k_y\rangle = k_y |M, k_y\rangle, \quad 0 \leq k_y \leq \infty,\tag{3.63}$$

y utilizando la misma transformación expresada en la Ec. 3.36, los operadores \hat{M} y \hat{K}_y son

$$\hat{M} = \frac{1}{2} \left(r^2 - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right),\tag{3.64}$$

$$\hat{K}_y = \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial \theta}.\tag{3.65}$$

Mientras las eigenfunciones están dadas por

$$\langle r, \theta | M, k_y \rangle = R_{M, k_y}(r) \exp(2ik_y \theta).\tag{3.66}$$

La parte radial $R_{M, k_y}(r)$ satisface la siguiente ecuación

$$\frac{1}{2} \left(r^2 - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{4k_y^2}{r^2} \right) R_{M, k_y}(r) = M R_{M, k_y}(r),\tag{3.67}$$

y realizando la transformación $r^2 = M \exp(-\rho)$, esta misma ecuación se expresa como

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{M^2}{4} [\exp(-2\rho) - 2 \exp(-\rho)] \right\} R_{M, k_y}(\rho) = k_y^2 R_{M, k_y}(\rho).\tag{3.68}$$

De manera análoga al caso discreto, si ahora identificamos $M = N + 1$, entonces el hamiltoniano de dispersión de Morse es

$$\hat{H}_{Morse}^{dispersión} = -\frac{\beta^2 \hbar^2}{2\mu} \hat{K}_y^2. \quad (3.69)$$

Y las eigenfunciones de este hamiltoniano son

$$\begin{aligned} \Phi_{M,k_y}(r) = & A (r^2)^{ik_y} \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) F\left(ik_y - \frac{M}{2} + \frac{1}{2}, 2ik_y + 1; r^2\right) \\ & + B (r^2)^{-ik_y} \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) F\left(-ik_y - \frac{M}{2} + \frac{1}{2}, -2ik_y + 1; r^2\right), \end{aligned} \quad (3.70)$$

donde F es una función hipergeométrica confluyente.

Capítulo 4

Estados coherentes para sistemas anarmónicos

En el presente capítulo haremos una revisión de las diversas generalizaciones que encontramos reportadas en la literatura de estados coherentes para sistemas anarmónicos. Estas generalizaciones son las cuatro que mencionamos en la introducción: estados coherentes Gazeau-Klauder, estados coherentes Manko-Marmo-Sudarshan-Zaccaria, estados coherentes de la teoría de grupos, y estados coherentes de Nieto-Simmons [8]

4.1. Construcción de Gazeau-Klauder

Como mencionamos en la introducción, el trabajo pionero sobre la relevancia de los estados coherentes se debe a Glauber, Sudarshan y Klauder. Este último estudió en dos trabajos clásicos [29, 30] una relación generalizada entre dinámica clásica y cuántica. En ellos desarrolló un conjunto de estados que tenían las propiedades básicas de los estados que Glauber denominó estados coherentes en un trabajo [3] publicado poco después. Klauder llamó a sus estados *overcomplete family of states* (OFS). Entre las propiedades básicas de estos estados se encuentran la es-

tabilidad temporal, la continuidad y el hecho de que son un conjunto completo de estados normalizados mas no ortogonales. La forma en que Klauder hizo la conexión entre dinámica clásica y cuántica fue a través de la acción. El trabajo de Klauder en el tema de los estados coherentes es prolífico [31, 32, 33].

En un trabajo relativamente reciente, Klauder y Gazeau [2] hacen una generalización en la cual se pueden estudiar sistemas con un grado de libertad cuyo hamiltoniano tenga un espectro discreto y/o continuo. Los estados coherentes en este formalismo están caracterizados por un conjunto de dos parámetros reales

$$|J, \gamma\rangle, \quad J \geq 0; \quad -\infty < \gamma < +\infty. \quad (4.1)$$

En esto se coincide con el caso armónico donde los estados coherentes se caracterizan por un conjunto de números complejos $\{\alpha\}$, y toda α a su vez tiene dos parámetros reales: un módulo y una fase. Los estados coherentes en esta construcción satisfacen cuatro requerimientos:

1. Continuidad: $(J', \gamma') \rightarrow (J, \gamma) \implies |J', \gamma'\rangle \rightarrow |J, \gamma\rangle$.
2. Completez: $\mathbb{I} = \int |J, \gamma\rangle \langle J, \gamma| d\mu(J, \gamma)$.
3. Estabilidad temporal: $\exp(-i\hat{H}t) |J, \gamma\rangle = |J, \gamma + \omega t\rangle$, $\omega = \text{constante}$.
4. Identidad de acción: $\langle J, \gamma | \hat{H} |J, \gamma\rangle = \omega J$.

El primer requerimiento es trivial; en el segundo el operador identidad debe ser entendido en sentido estricto, o bien como un proyector en un subespacio finito o infinito; el tercero es simplemente la estabilidad temporal que caracteriza a los estados coherentes del oscilador armónico. Como ya mencionamos los requerimientos 1 y 2 también caracterizan a los estados coherentes del oscilador armónico. El cuarto requerimiento Gazeau y Klauder denominan identidad de acción. El nombre de esta última propiedad se debe a que el parámetro J es constante en el tiempo mientras γ se incrementa linealmente, de manera análoga al comportamiento clásico de

sistemas descritos en términos de variables de ángulo-acción, cuya funcional de acción es

$$S = \int_0^T (J\dot{\gamma} - \omega J) dt. \quad (4.2)$$

La acción para los estados coherentes de Gazeau-Klauder es, entonces,

$$S_{GK} = \int_0^T \left[i \langle J, \gamma | \frac{d}{dt} |J, \gamma\rangle - \langle J, \gamma | \hat{H} |J, \gamma\rangle \right] dt. \quad (4.3)$$

Sin embargo, en el caso del potencial de Morse, como vimos en la descripción semiclásica de su acción, el hamiltoniano no depende de manera lineal (como en el caso del oscilador armónico) de la acción I , sino de forma cuadrática.

4.1.1. Estados coherentes de Gazeau-Klauder con espectro discreto

Ilustraremos ahora cómo se construyen los estados coherentes de Gazeau-Klauder para un espectro discreto. Se parte de un hamiltoniano \hat{H} que se supone no degenerado y si es necesario se ajusta el espectro de tal forma que $\langle \hat{H} \rangle \geq 0$,

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad n \geq 0; \quad (4.4)$$

$$0 = E_0 < E_1 < E_2 < \dots, \quad (4.5)$$

además

$$E_n = \omega e_n, \quad \rho_n = e_1 e_2 \dots e_n, \quad \text{con } \hbar = 1. \quad (4.6)$$

Se define el estado coherente de Gazeau-Klauder como

$$|J, \gamma\rangle = N^{-1}(J) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J^{\frac{n}{2}} \exp(-ie_n \gamma)}{\sqrt{\rho_n}} |n\rangle. \quad (4.7)$$

Estos estados coherentes están normalizados

$$\langle J, \gamma | J, \gamma \rangle = N^{-2}(J) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J^n}{\rho_n} \equiv 1 \implies N^2(J) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J^n}{\rho_n}, \quad (4.8)$$

$N(J)$ es la constante de normalización. El término ρ_n , que es un factorial generalizado, cumple con la condición

$$\rho_0 = 1. \quad (4.9)$$

Es muy importante resaltar que es precisamente en ρ_n donde se encuentra el carácter anarmónico del sistema a estudiar.

Estos estados definidos en la Ec. 4.7 cumplen los cuatro requerimientos de la construcción. El de la continuidad es trivial. Para obtener la completez, partimos de la siguiente definición

$$\int \cdots d\nu(\gamma) \equiv \lim_{\Gamma \rightarrow \infty} \frac{1}{2\Gamma} \int_{-\Gamma}^{+\Gamma} \cdots d\gamma, \quad (4.10)$$

la cual implica que

$$\int |J, \gamma\rangle \langle J, \gamma| d\nu(\gamma) = N(J)^{-2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J^n}{\rho_n} |n\rangle \langle n|. \quad (4.11)$$

Se asume que ρ_n es el n -ésimo momento de una distribución de probabilidad

$$\rho_n \equiv \int_0^R u^n \rho(u) du \geq 0, \quad (4.12)$$

donde $u = u(J)$. A partir de lo anterior, si $u = J$ y $0 \leq J < R$, podemos definir

$$\frac{1}{\rho_n} \int_0^R N(J)^{-2} \rho(J) J^n dJ = 1. \quad (4.13)$$

Tomando $d\mu(J, \gamma) = \rho(J) dJ d\nu(\gamma)$, y con las definiciones anteriores, se obtiene la completez de estos estados

$$\int |J, \gamma\rangle \langle J, \gamma| d\mu(J, \gamma) = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \mathbb{I}. \quad (4.14)$$

Ahora demostraremos la estabilidad temporal de estos estados. A partir de la definición expresada en la Ec. 4.7

$$\exp(-i\hat{H}t) |J, \gamma\rangle = N^{-1}(J) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J^{\frac{n}{2}} \exp(-ie_n\gamma - iE_n t)}{\sqrt{\rho_n}} |n\rangle, \quad (4.15)$$

y como $E_n = e_n\omega$,

$$\exp(-i\hat{H}t) |J, \gamma\rangle = |J, \gamma + \omega t\rangle. \quad (4.16)$$

Por último, mostraremos cómo se obtiene la identidad de acción

$$\langle J, \gamma | \hat{H} | J, \gamma \rangle = N^{-2}(J) \sum_{m=0}^{\infty} \langle m | \frac{J^{\frac{m}{2}} \exp(i e_m \gamma)}{\sqrt{\rho_m}} \sum_{n=0}^{\infty} \hat{H} | n \rangle \frac{J^{\frac{n}{2}} \exp(-i e_n \gamma)}{\sqrt{\rho_n}}. \quad (4.17)$$

Por las Ecs. expresadas en (4.4) y la ortonormalidad de la base $\{|n\rangle\}$,

$$\langle J, \gamma | \hat{H} | J, \gamma \rangle = N^{-2}(J) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{E_n J^n}{\rho_n} = \omega \frac{\sum_{n=0}^{\infty} e_n \frac{J^n}{\rho_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{J^n}{\rho_n}}, \quad (4.18)$$

y para que se cumpla el requerimiento 4, este resultado implica que

$$\sum_{n=0}^{\infty} e_n \frac{J^n}{\rho_n} = J \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J^n}{\rho_n}. \quad (4.19)$$

Construcción de estados coherentes para el átomo de hidrógeno

Para realizar esta construcción se parte del potencial de Coulomb ($V(R) = -\frac{1}{R}$), y consideramos sólo su espectro discreto.

$$E_{n-1} = \omega \left[1 - \frac{1}{n^2} \right], n \geq 1; \quad (4.20)$$

$$e_{n-1} = \left[1 - \frac{1}{n^2} \right] = \frac{(n+1)(n-1)}{n^2}. \quad (4.21)$$

A partir de esto encontramos ρ_n ,

$$\rho_n = \frac{3}{4} \times \frac{8}{9} \cdots \frac{n(n+2)}{(n+1)^2} = \frac{(n+2)}{2(n+1)}. \quad (4.22)$$

Por lo tanto, el estado coherente es

$$|J\gamma\rangle = N^{-1}(J) \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2n+2}{n+2}} J^{\frac{n}{2}} \exp\left(-i \left[1 - \frac{1}{(n+1)^2} \right] \gamma\right) |n\rangle. \quad (4.23)$$

Estos estados coherentes para el átomo de hidrógeno cumplen los cuatro requerimientos de la construcción de Gazeau-Klauder.

4.1.2. Estados coherentes de Gazeau-Klauder con espectro continuo

Para esta construcción, al igual que en el caso discreto, se parte de un espectro no degenerado, cuyo $\langle \hat{H} \rangle > 0$, y $|E\rangle$ representa al estado de dispersión de tal forma que

$$\hat{H} |E\rangle = \omega E |E\rangle, \quad 0 < E < \bar{E}, \quad (4.24)$$

donde $\bar{E} \leq \infty$. El estado coherente para el caso discreto estaba expresado por $|J, \gamma\rangle$, para el caso continuo la acción J es sustituida por una función de la misma $s = s(J) > 0$. De tal forma que el estado coherente de Gazeau-Klauder con espectro continuo está definido por

$$|s(J), \gamma\rangle = M(s)^{-1} \int_0^{\bar{E}} \frac{s^E \exp(-i\gamma E)}{f(E)} |E\rangle dE, \quad (4.25)$$

donde $M(s)^{-1}$ es una constante de normalización, y $f(E)$ una función por determinar.

Así, el estado coherente definido en la anterior ecuación satisface los cuatro requerimientos de Gazeau-Klauder. La continuidad de los estados es, al igual que en el caso discreto, trivial. Para la completez partimos de la normalización de los estados,

$$\langle s(J), \gamma | s(J), \gamma \rangle = 1 \Rightarrow M(s)^2 = \int_0^{\bar{E}} \frac{s^{2E}}{f(E)^2} dE. \quad (4.26)$$

Partiendo de la definición dada en el Eq.4.25 ,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |s, \gamma\rangle \langle s, \gamma| \frac{d\gamma}{2\pi} = M(s)^{-2} \int_0^{\bar{E}} \frac{s^{2E}}{f(E)^2} |E\rangle \langle E| dE. \quad (4.27)$$

Para determinar la función $f(E)$ y también la completez, Gazeau y Klauder introducen una función de peso $\sigma(s) \geq 0$, que satisfaga

$$\int_0^S s^{2E} \sigma(s) ds \equiv f(E)^2. \quad (4.28)$$

Definiendo el diferencial $d\mu(s, \gamma)$ como

$$d\mu(s, \gamma) = \frac{1}{2\pi} M(s)^2 \sigma(s) ds d\gamma, \quad (4.29)$$

obtenemos la completez que buscamos en estos estados

$$\int |s\gamma\rangle \langle s\gamma| d\mu(s, \gamma) = \int_0^{\bar{E}} |E\rangle \langle E| = \mathbb{I}. \quad (4.30)$$

La estabilidad temporal es obvia, ya que

$$\exp(-i\hat{H}t) |s, \gamma\rangle = M(s)^{-1} \int_0^{\bar{E}} \frac{s^E \exp(-i\gamma E + \omega t)}{f(E)} |E\rangle dE = |s, \gamma + \omega t\rangle. \quad (4.31)$$

Por último, obtenemos la identidad de acción,

$$\begin{aligned} \langle s(J), \gamma | \hat{H} | s(J), \gamma \rangle &= M(s)^{-2} \int_0^{\bar{E}} \frac{E s^{2E}}{f(E)^2} dE = s \frac{\delta}{\delta s} \ln M(s) = H(s) \\ &= \omega \frac{\int_0^{\bar{E}} (E s(J)^{2E} / f(E)^2) dE}{\int_0^{\bar{E}} (s(J)^{2E} / f(E)^2) dE} = \omega J. \end{aligned} \quad (4.32)$$

4.1.3. Estados coherentes de Gazeau-Klauder con un espectro discreto y continuo

Para el caso en que el hamiltoniano en cuestión tiene un espectro discreto y continuo a la vez, la construcción de Gazeau-Klauder parte de las dos construcciones, para cada tipo de espectro, que ya hemos ilustrado anteriormente. El estado coherente se define como una combinación de estados discretos y continuos, actuando cada uno en su subespacio correspondiente. Manteniendo la notación de estado coherente para espectro discreto $|J, \gamma\rangle$, y redefiniendo la notación para el espectro continuo como $|K, \delta\rangle$ ($s \rightarrow K$ y $\gamma \rightarrow \delta$), el estado coherente es el siguiente

$$|J, \gamma; K, \delta; \phi\rangle = f(K, \delta) |J, \gamma\rangle + \exp(-i\phi)g(J, \gamma) |K, \delta\rangle, \quad (4.33)$$

donde $f(K, \delta)$ y $g(J, \gamma)$ son funciones escalares por determinar, y ϕ es una fase.

La construcción que se hace a partir de la definición dada en la Ec. 4.33, dentro del propio formalismo de Gazeau y Klauder, es incompleta, ya que no obtiene la identidad de acción. Sin embargo, sí es posible obtener los otros tres requerimientos: continuidad, completez y estabilidad temporal. La primera, al igual que en los casos anteriores, es trivial. Ilustraremos cómo se obtiene la completez y la estabilidad temporal. En el primer caso

$$\int |J, \gamma; K, \delta; \phi\rangle \langle J, \gamma; K, \delta; \phi| d\lambda (J, \gamma; K, \delta; \phi) = \mathbb{I}, \quad (4.34)$$

donde esta integral es la suma directa de \mathbb{I}_D (identidad en el espectro discreto) y \mathbb{I}_C (identidad en el espectro continuo). Estos dos últimos operadores actúan en espacios diferentes. Para llegar a la identidad expresada en la integral anterior, se necesitan satisfacer tres requerimientos. Estos son

$$\begin{aligned} \int |f(K, \delta)|^2 |J, \gamma\rangle \langle J, \gamma| d\lambda &= \mathbb{I}_D \\ \int |g(J, \gamma)|^2 |K, \delta\rangle \langle K, \delta| d\lambda &= \mathbb{I}_C \\ \int \exp(i\phi) \int f(K, \delta)g(J, \gamma)^* |J, \gamma\rangle \langle K, \delta| d\lambda &= 0, \end{aligned} \quad (4.35)$$

donde el diferencial $d\lambda$ se escoge de manera natural como

$$d\lambda(J, \gamma; K, \delta; \phi) = d\mu_D(J, \gamma) d\mu_C(K, \delta) d\phi/2\pi. \quad (4.36)$$

Y con esta última elección, los tres requerimientos anteriores se reducen a

$$\begin{aligned} \int |f(K, \delta)|^2 d\mu_C(K, \delta) &= 1 \\ \int |g(J, \gamma)|^2 d\mu_D(J, \gamma) &= 1. \end{aligned} \quad (4.37)$$

El intervalo de integración de la fase ϕ que se utiliza en la construcción es $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Es evidente que con la introducción de esta fase se eliminan los elementos matriciales no diagonales. Para obtener la estabilidad temporal, primero se observa que $0 \leq H_D \leq \Omega$ y $\Omega < H_C$. Pero como tenemos dos espectros, debemos utilizar un factor de fase adicional. Así, el requerimiento que buscamos es

$$\begin{aligned} \exp(-iHt) |J, \gamma; K, \delta; \phi\rangle &= f(K, \delta) |J, \gamma + \omega t\rangle + \exp[-i(\phi + \Omega t)] g(J, \gamma) |K, \delta + \omega t\rangle \\ &= |J, \gamma + \omega t; K, \delta + \omega t; \phi + \Omega t\rangle. \end{aligned} \quad (4.38)$$

4.2. Construcción de Manko *et al.*

Hemos visto que en mecánica cuántica el oscilador armónico tiene una estructura algebraica que se expresa en términos de operadores de creación y aniquilación. Para sistemas anarmónicos existe una generalización en la cual los osciladores son remplazados por osciladores deformados, los q -osciladores [17]. Este es un oscilador no lineal cuya frecuencia de vibración depende de la energía, y esa dependencia se da a través de un coseno hiperbólico que contiene un parámetro de la no linealidad.

$$\omega = \frac{\lambda}{\sinh \lambda} \cosh(\lambda |\alpha|^2), \quad (4.39)$$

donde α es una constante de movimiento, y λ un parámetro real.

Estos osciladores tienen una versión clásica y su contraparte cuántica. De hecho, Bierdenharn [34] hizo la construcción de estados coherentes para el q -oscilador a través de operadores

bosónicos \hat{a}_q y \hat{a}_q^\dagger . El álgebra $su_q(2)$ fue introducida por Sklyanin [35] e independientemente por Kulish y Reshetikhin [36].

Los f -estados coherentes son una propuesta para sistemas anarmónicos. Esta generalización de los q -osciladores no necesariamente considera la frecuencia de vibración como una función hiperbólica sino como una función algebraica del operador \hat{n} , y tiene su origen en un concepto algebraico: los estados coherentes son eigenfunciones de un operador análogo al de aniquilación. Para realizar esta generalización se construyen los operadores \hat{A} y \hat{A}^\dagger que en el espacio de Fock describan el análogo cuántico de un oscilador armónico. Se parte de la estructura algebraica expresada en las relaciones dadas en los conmutadores expresados en 2.6, así como de las Ecs. 2.7, 2.8 y 2.9.

Los operadores \hat{A} y \hat{A}^\dagger son deformaciones algebraicas de los operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger ,

$$\hat{A} = \hat{a}f(\hat{n}) = f(\hat{n} + 1)\hat{a}, \quad \hat{A}^\dagger = f^\dagger(\hat{n})\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger f^\dagger(\hat{n} + 1). \quad (4.40)$$

El operador $f(\hat{n})$ es hermítico ya que \hat{n} lo es,

$$f(\hat{n}) = f^\dagger(\hat{n}). \quad (4.41)$$

Además es fácil comprobar que

$$[\hat{A}, \hat{n}] = \hat{A}, \quad [\hat{A}^\dagger, \hat{n}] = -\hat{A}^\dagger. \quad (4.42)$$

Utilizando la base de Fock, los operadores \hat{A} y \hat{A}^\dagger son

$$\hat{A} = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n} f(\hat{n}) |n-1\rangle \langle n|, \quad \hat{A}^\dagger = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n} f^*(\hat{n}) |n\rangle \langle n-1|. \quad (4.43)$$

Utilizando los resultados anteriores el conmutador $[\hat{A}, \hat{A}^\dagger]$ es

$$F(\hat{n}) = [\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = (\hat{n} + 1)f(\hat{n} + 1)f^\dagger(\hat{n} + 1) - \hat{n}f(\hat{n})f^\dagger(\hat{n}) \quad (4.44)$$

$$= (\hat{n} + 1)f^2(\hat{n} + 1) - \hat{n}f^2(\hat{n}). \quad (4.45)$$

Mientras que el q -conmutador es

$$G(\hat{n}) = \left[\hat{A}, \hat{A}^\dagger \right]_q = (\hat{n} + 1)f(\hat{n} + 1)f^\dagger(\hat{n} + 1) - q\hat{n}f(\hat{n})f^\dagger(\hat{n}) \quad (4.46)$$

$$= (\hat{n} + 1)f^2(\hat{n} + 1) - q\hat{n}f^2(\hat{n}) \quad q \in \mathbb{R}. \quad (4.47)$$

Es importante resaltar que las funciones $f(\hat{n})$ pueden depender de parámetros continuos que, por cierto, es el caso de las q -deformaciones.

Con este esquema algebraico se pueden construir f -estados coherentes $|\alpha, f\rangle$ para sistemas anarmónicos considerando un modo

$$\hat{A}|\alpha, f\rangle = \alpha|\alpha, f\rangle; \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (4.48)$$

descomponiendo $|\alpha, f\rangle$ en el espacio de Fock

$$|\alpha, f\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle, \quad (4.49)$$

y utilizando la Ec. 4.43, la ecuación de eigenvalores 4.48 es

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n}f(\hat{n})|n-1\rangle \langle n| C_m |m\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_m |m\rangle, \quad (4.50)$$

de donde obtenemos una regla de recurrencia para los coeficientes C_n

$$C_{n+1}\sqrt{n+1}f(n+1) = \alpha C_n, \quad (4.51)$$

y en términos de C_0

$$C_n = C_0 \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!} [f(n)]!}, \quad (4.52)$$

donde $[f(n)]! = f(0)f(1) \cdots f(n)$.

De esta manera, el f -estado coherente en el espacio de Fock es

$$|\alpha, f\rangle = C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!} [f(n)]!} |n\rangle. \quad (4.53)$$

Estos estados coherentes -a diferencia de los de Gazeau-Klauder- no muestran en general estabilidad temporal ya que su hamiltoniano es de la forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left(\hat{A}^\dagger \hat{A} + \hat{A} \hat{A}^\dagger \right) = \frac{1}{2} \left[\hat{n} f^2(\hat{n}) + (\hat{n} + 1) f^2(\hat{n} + 1) \right], \quad (4.54)$$

con lo cual el operador de evolución temporal es

$$\hat{U}(t) = \exp \left[-it\hat{H}(\hat{n}) \right] = \exp \left\{ -\frac{it}{2} \left[\hat{n}f^2(\hat{n}) + (\hat{n} + 1)f^2(\hat{n} + 1) \right] \right\}, \quad (4.55)$$

que aplicado a $|\alpha, f\rangle$ no permite redefinir α de tal forma que $|\alpha, f\rangle_t$ siga siendo un f -estado coherente.

La interpretación de Manko *et al* consiste en lo siguiente: a un tiempo t el oscilador armónico ha sido deformado a un tipo de f -oscilador, y la deformación ahora es del tipo

$$F_f(\hat{n}, t) = \exp \left\{ -\frac{it}{2} \left[\hat{n}f^2(\hat{n}) + (\hat{n} + 1)f^2(\hat{n} + 1) \right] \right\}; \quad (4.56)$$

es decir, inicialmente ($t = 0$) se tiene un estado coherente -un eigenestado de \hat{a} - que a un tiempo t evoluciona a un $F_f(t)$ -estado coherente. Sin embargo, como veremos en nuestros resultados, es posible empatar el formalismo de Gazeau-Klauder con el de Manko *et al*, y, por lo tanto, construir f -estados coherentes con estabilidad temporal.

En la representación de Heisenberg el operador $\hat{a}(t)$ queda expresado como

$$\hat{a}(t) = \hat{a} \exp[-it\omega(\hat{n})], \quad (4.57)$$

donde la frecuencia de vibración depende de \hat{n} y es

$$\omega(\hat{n}) = \frac{1}{2} \left[(\hat{n} + 1)f^2(\hat{n} + 1) - (\hat{n} - 1)f^2(\hat{n} - 1) \right]. \quad (4.58)$$

La cual es una generalización de la ecuación 4.39.

Es fácil calcular las dispersiones para estos estados coherentes $|\alpha, f\rangle$ a partir de las expresiones

$$\hat{a} = \frac{1}{f(\hat{n} + 1)} \hat{A}; \quad \hat{a}^\dagger = \hat{A}^\dagger \frac{1}{f(\hat{n} + 1)}. \quad (4.59)$$

Lo que es importante resaltar de las expresiones para las dispersiones en \hat{x} y \hat{p} , es que son las dispersiones del oscilador armónico más correcciones que se expresan en términos de la deformación.

Es importante mencionar que esta generalización es para espectros discretos; espectros continuos no son tomados en cuenta.

4.2.1. Construcción de estados coherentes para el q -oscilador

Para construir en el formalismo de Manko *et al.* los estados coherentes del q -oscilador partimos de la expresión para la $f(\hat{n})$ [34], la cual es

$$f(\hat{n}) = \sqrt{\frac{(q^{\hat{n}} - q^{-\hat{n}})}{\hat{n}(q - q^{-1})}} = \sqrt{\frac{1 \sinh \lambda \hat{n}}{\hat{n} \sinh \lambda}} = f_q(\hat{n}); \quad (4.60)$$

con $f_q(0) = \mathbb{I}$; $\lambda = \ln q$, $\lambda \in \mathbb{R}$.

El estado coherente para el q -oscilador es

$$|\alpha, f_q\rangle = C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!} \left[\sqrt{\frac{\sinh \lambda n}{n \sinh \lambda}} \right]!} |n\rangle, \quad (4.61)$$

el cual podemos identificar fácilmente con el estado coherente para el q -oscilador construido por Biedenharn, y que en términos del q -operador de aniquilación es [34]

$$|\alpha\rangle_q = \exp_q \left(-\frac{1}{2} |\alpha|^2 \right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n \hat{a}_q^n}{[n]_q!} |0\rangle_q. \quad (4.62)$$

4.3. Construcción a través de la teoría de grupos

El estudio pionero de los estados coherentes en términos de grupos se debe a Klauder [30] quien siguiendo las ideas básicas de los estados coherentes desarrolló un conjunto de estados para grupos de Lie arbitrarios; la construcción completa fue realizada, de manera independiente, por Perelomov y Gilmore [37, 39]. La idea que subyace en estos trabajos es conectar los estados coherentes con el grupo dinámico de cada sistema físico [38]. Vimos a partir de los conmutadores expresados en (2.6) que el grupo de Heisenberg-Weyl (H_4) es el grupo dinámico para el oscilador armónico cuántico unidimensional. Con la teoría de grupos se construyen estados coherentes a través de la generalización de la tercer definición que mencionamos en el caso armónico. En esta construcción se parte del operador de desplazamiento para el grupo en cuestión.

Esta generalización se basa no sólo en el hecho de que los estados de Glauber pueden ser

definidos en términos de un grupo y su operador de desplazamiento (definición 3), sino también en que las definiciones 1 y 2 presentan, respectivamente, los siguientes inconvenientes:

- (a) para un espacio de Hilbert de dimensión finita no se puede definir un estado coherente como eigenfunción del operador de aniquilación;
- (b) los estados de mínima incertidumbre sólo pueden ser construidos para sistemas clásicamente integrables en los cuales existan coordenadas y momentos canónicos tales que el hamiltoniano pueda ser reducido a uno de oscilador armónico.

Existe un algoritmo [17] para construir estados coherentes a partir de un grupo dinámico dado. Para realizar esta construcción se tiene que identificar:

- (a) El grupo dinámico D y su álgebra \mathfrak{g} . Las propiedades algebraicas del sistema cuántico están determinadas por el álgebra \mathfrak{g} ya que

$$\hat{H} = H(\hat{T}_i), \quad (4.63)$$

donde $\{\hat{T}_i\}$ son los generadores del grupo. Por otra parte, el álgebra \mathfrak{g} está definida por

$$[\hat{T}_i, \hat{T}_j] = \sum_k C_{ij}^k \hat{T}_k. \quad (4.64)$$

En esta última ecuación C_{ij}^k son las constantes de estructura de \mathfrak{g} .

- (b) El espacio de Hilbert V^Λ . Para el hamiltoniano de la ecuación 4.63, el espacio físico V^Λ tiene una representación unitaria e irreducible Γ^Λ para el grupo G .

- (c) Un estado de referencia $|\Phi_0\rangle$. Este estado se elige normalizándolo a la unidad

$$\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle = 1; \quad |\Phi_0\rangle \in V^\Lambda, \quad (4.65)$$

y su elección no es única. El estado $|\Phi_0\rangle$ determina la estructura de los estados coherentes y del espacio fase del sistema dinámico.

A partir de estas identificaciones se construyen los estados coherentes mediante tres pasos:

1. Subgrupo de estabilidad. Se obtiene el subgrupo H de G cuyos elementos dejan invariante al estado de referencia hasta un factor de fase. Es decir,

$$h |\Phi_0\rangle = |\Phi_0\rangle \exp \{i\phi(h)\}, \quad h \in H; \quad H \subset G. \quad (4.66)$$

El factor de fase es irrelevante al determinar valores esperados.

2. El espacio cociente G/H . Los elementos $g \in G$ se descomponen en el producto de dos elementos: uno del grupo H , y otro del espacio cociente G/H , el cual es invariante,

$$g = \Omega h, \quad g \in G, \quad h \in H, \quad \Omega \in G/H. \quad (4.67)$$

3. Los estados coherentes $|\Lambda, \Omega\rangle$. Estos están definidos como la acción de los elementos del espacio cociente sobre el estado extremal:

$$|\Lambda, \Omega\rangle \equiv \Omega |\Phi_0\rangle. \quad (4.68)$$

Los estados coherentes perservan las propiedades algebraicas y topológicas del espacio cociente G/H .

4.3.1. Construcción de estados coherentes para H_4

Para el grupo $H_4 = \{\hat{a}, \hat{a}^\dagger, \hat{n}, \mathbb{I}\}$ tenemos las relaciones de conmutación dadas en los conmutadores expresados en (2.6). Con esto hemos identificado para el oscilador armónico cuántico unidimensional su grupo de simetría y el álgebra que lo caracteriza. Elegimos, además, el espacio de Fock como el espacio de Hilbert en el cual construimos los estados coherentes, de tal forma que el estado extremal o de referencia es el estado de vacío $|0\rangle$.

Este estado es invariante, hasta un factor de fase, por los elementos h tal que

$$h = \exp \{i(\delta\hat{n} + \varphi\mathbb{I})\}. \quad (4.69)$$

Así que el subgrupo H es $U(1) \otimes U(1)$. Una representación del espacio cociente $H_4/U(1) \otimes U(1)$ es [17]

$$D(\alpha) = \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}), \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (4.70)$$

$D(\alpha)$ es precisamente el operador de desplazamiento de la Ec. 2.12. Los estados coherentes para H_4 son

$$|\alpha\rangle = \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a})|0\rangle. \quad (4.71)$$

La construcción explícita la hicimos en la sección 1.2.

4.3.2. Construcción de estados coherentes para $SU(2)$

Un grupo de Lie muy importante y útil en física es $SU(2)$. Este grupo, como mencionamos en la sección 2.3, es el grupo de simetría para el oscilador armónico bidimensional y también para el potencial de Morse. El grupo $SU(2)$, como es bien conocido en la literatura cuántica [40] [41], describe estados de dos niveles, por ejemplo, sistemas atómicos con dos estados energéticos y sistemas de espín $\frac{1}{2}$.

Para realizar la construcción de los estados coherentes de $SU(2)$ se parte de las relaciones de conmutación del grupo [39]

$$[\hat{J}_0, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm, \quad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_0. \quad (4.72)$$

El espacio de Hilbert para $SU(2)$ es

$$\{|jm\rangle, m = j, j-1, j-2, \dots, -j+1, -j; j = \text{entero o semientero}\}.$$

Aquí los estados $|jm\rangle$ son simultáneamente eigenestados de dos operadores del grupo, el operador J_0 y el operador de Casimir J^2 ,

$$\hat{J}^2 |jm\rangle = j(j+1) |jm\rangle, \quad (4.73)$$

$$\hat{J}_0 |jm\rangle = m |jm\rangle. \quad (4.74)$$

Todo estado $|jm\rangle$ puede ser obtenido [40] mediante la acción del operador \hat{J}_+ sobre el estado $|j-j\rangle$

$$|jm\rangle = \begin{bmatrix} 2j \\ j+m \end{bmatrix}^{-\frac{1}{2}} \frac{(\hat{J}_+)^{j+m}}{(j+m)!} |j-j\rangle. \quad (4.75)$$

Además $|j - j\rangle$ se elige como estado base (también podría elegirse $|jj\rangle$ y utilizar el operador de descenso \hat{J}_-). A partir del estado extremal $|j - j\rangle$, se identifica al subgrupo de estabilidad que

lo deja invariante. Este subgrupo es $U(1) : \{\hat{J}_0\}$ ya que

$$h|j - j\rangle = |j - j\rangle \exp(i\varphi), \quad h \in U(1). \quad (4.76)$$

Una representación para el espacio cociente $SU(2)/U(1)$ es [17]

$$\Omega(\varsigma) = \exp\left(\varsigma \hat{J}_+ - \varsigma^* \hat{J}_-\right), \quad \varsigma \in \mathbb{C}. \quad (4.77)$$

De tal forma que los estados coherentes para $SU(2)$ son

$$|j, \varsigma\rangle = \Omega(\varsigma) |j - j\rangle = \exp\left(\varsigma \hat{J}_+ - \varsigma^* \hat{J}_-\right) |j - j\rangle. \quad (4.78)$$

Así podemos ver que en el operador de desplazamiento $\exp\left(\varsigma \hat{J}_+ - \varsigma^* \hat{J}_-\right)$ los operadores \hat{J}_+ y \hat{J}_- son análogos a los operadores de creación y aniquilación, \hat{a}^\dagger y \hat{a} , respectivamente, en H_4 . Para obtener de manera explícita los estados coherentes $|j, \varsigma\rangle$ se puede utilizar una fórmula Baker-Campbel-Hausdorff (BCH) [39] para $SU(2)$, y entonces

$$\exp\left(\varsigma \hat{J}_+ - \varsigma^* \hat{J}_-\right) = \exp\left(\tau \hat{J}_+\right) \exp\left[\ln(1 + |\tau|^2) \hat{J}_0\right] \exp\left(-\tau^* \hat{J}_-\right) \quad (4.79)$$

$$= \exp\left[\ln(1 + |\tau|^2) \hat{J}_0\right] \exp\left(\tau \hat{J}_+\right) \exp\left(-\tau^* \hat{J}_-\right), \quad (4.80)$$

donde

$$\varsigma = \frac{\theta}{2} \exp(-i\phi), \quad \tau = \frac{\varsigma \sin|\varsigma|}{|\varsigma| \cos|\varsigma|} = \exp(-i\phi) \tan \frac{\theta}{2}; \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi. \quad (4.81)$$

El operador $\Omega(\varsigma)$ tiene una representación unitaria de la forma

$$\hat{U}_1(\alpha) = \sum_j \exp\left(\alpha_j \hat{J}_j\right), \quad \alpha_j \in \mathbb{C}. \quad (4.82)$$

Otra manera de desentrelazar el operador en cuestión, sin utilizar fórmulas BCH, es a través de otra representación unitaria para $SU(2)$ de la forma

$$\hat{U}_2(\beta) = \Pi_j \exp\left(\beta_j \hat{J}_j\right), \quad (4.83)$$

con el parámetro β_j real o complejo. Una manera de realizar esto es la que hace Truax [42], la cual consiste en un proceso de diferenciación. Se resuelve un sistema de ecuaciones diferenciales cuyas soluciones determinan los parámetros β_j en $\hat{U}_2(\beta)$. Rodney Truax realiza este procedimiento tanto para $SU(2)$ como para $SU(1, 1)$. En el primer caso encuentra que

$$\Omega(\varsigma) = \exp\left(\varsigma \hat{J}_+ - \varsigma^* \hat{J}_-\right) \quad (4.84)$$

$$= \exp\left\{\left(\frac{\varsigma}{|\varsigma|}\right) \tan |\varsigma| \hat{J}_+\right\} \exp\left\{-2(\ln \cos |\varsigma|) \hat{J}_0\right\} \exp\left\{-\left(\frac{\varsigma^*}{|\varsigma|}\right) \tan |\varsigma| \hat{J}_-\right\} \quad (4.85)$$

$$= \exp\left[\ln(1 + |\tau|^2) \hat{J}_0\right] \exp\left(\tau \hat{J}_+\right) \exp\left(-\tau^* \hat{J}_-\right), \quad (4.86)$$

con las mismas relaciones expresadas en (4.81).

De esta manera los estados coherentes para $SU(2)$ son

$$|j, \varsigma\rangle = \exp\left[\ln(1 + |\tau|^2) \hat{J}_0\right] \exp\left(\tau \hat{J}_+\right) \exp\left(-\tau^* \hat{J}_-\right) |j - j\rangle. \quad (4.87)$$

Aquí el operador $\exp\left(-\tau^* \hat{J}_-\right)$ aplicado al estado base es la identidad, y con la Ecs. 4.74 y 4.75

$$|j, \varsigma\rangle = \frac{1}{(1 + |\tau|^2)^j} \sum_{m=-j}^{+j} |j, m\rangle \begin{bmatrix} 2j \\ j + m \end{bmatrix}^{\frac{1}{2}} \cos^{j-m} \frac{\theta}{2} \left[\exp(-i\phi) \sin \frac{\theta}{2} \right]^{j+m} \quad (4.88)$$

Ya que el espacio geométrico de $SU(2)/U(1)$ es la 2-esfera, los estados coherentes viven en S^2 comúnmente llamada esfera de Bloch. Más adelante veremos que estos estados coherentes corresponden al potencial de Morse; sin embargo, en este caso existe degeneración en el número cuántico m .

Es importante mencionar que el grupo $SU(2)$ se puede contraer en H_4 . Arecchi *et al.* [25] realizaron la contracción, y de esta manera contrajeron los estados de Bloch con los de Glauber,

y también las relaciones de incertidumbre que para los estados de Glauber son

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \quad (4.89)$$

y para los de Bloch [42]

$$\Delta J_1 \Delta J_2 = \frac{1}{2} |\langle J_3 \rangle|. \quad (4.90)$$

La contracción se hace en el límite en el cual el radio de la esfera de Bloch tiende a infinito.

4.3.3. Construcción de estados coherentes para $SU(1, 1)$

La construcción de estados coherentes para el grupo $SU(2)$ mostrada anteriormente se hizo a partir de la definición de Peremolov y Gilmore, es decir, como la acción del operador de desplazamiento sobre un estado extremal. Fueron Barut y Girardello [47] quienes generalizaron la definición de estados coherentes como eigenfunciones de un operador de aniquilación para grupos no compactos, y la ejemplificaron con el grupo $SU(1, 1)$. Este grupo, como ya mencionamos, está relacionado con el espectro continuo del potencial de Morse.

La construcción de estados coherentes para $SU(1, 1)$, en una representación discreta, es la siguiente. Se parte de las reglas de conmutación que definen el álgebra de Lie del grupo,

$$[L^+, L^-] = -L_{12}, [L_{12}, L^\pm] = \pm L^\pm. \quad (4.91)$$

El operador de Casimir es

$$Q = -L_{12}(L_{12} - 1) + 2L^+L^- = -L_{12}(L_{12} + 1) + 2L^-L^+, \quad (4.92)$$

donde

$$L^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} (L_{13} \pm iL_{23}), \quad (4.93)$$

$$L_{12} = \frac{1}{2} \sigma_3. \quad (4.94)$$

Por lo tanto,

$$L^{\pm} = \frac{i}{2\sqrt{2}} (\sigma_1 \pm i\sigma_2). \quad (4.95)$$

La base de vectores $|\Phi, m\rangle$ en el espacio de Hilbert para una representación de $SU(1, 1)$ discreta definen las siguientes relaciones

$$L_{12} |\Phi, m\rangle = (E_0 + m) |\Phi, m\rangle, \quad (4.96)$$

$$L^+ |\Phi, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\Phi + E_0 + m + 1)(E_0 - \Phi + m)} |\Phi, m + 1\rangle, \quad (4.97)$$

$$L^- |\Phi, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\Phi + E_0 + m)(E_0 - \Phi + m - 1)} |\Phi, m - 1\rangle, \quad (4.98)$$

$$Q |\Phi, m\rangle = \Phi (\Phi + 1) |\Phi, m\rangle. \quad (4.99)$$

E_0 es un invariante arbitrario del grupo, y para una representación discreta, E_0 y el invariante de Casimir no son independientes. Esto es

$$\Phi + E_0 = 0. \quad (4.100)$$

La defición generalizada de estados coherentes es

$$L^- |z\rangle = z |z\rangle, \quad z \in \mathbb{C}. \quad (4.101)$$

Y como el estado coherente $|z\rangle$ es una combinación lineal de la base de vectores $\{|\Phi, m\rangle\}$, utilizando la relación expresada en la Ec. 4.98,

$$|z\rangle = \sqrt{\Gamma(-2\Phi)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\sqrt{2}z)^m}{[m!\Gamma(-2\Phi + m)]^{\frac{1}{2}}} |\Phi, m\rangle, \quad -2\Phi = 1, 2, 3, \dots \quad (4.102)$$

El producto interno entre estos estados coherentes es

$$\langle z' | z \rangle = \Gamma(-2\Phi) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2z'^*z)^m}{m!\Gamma(-2\Phi + m)} = F_1(-2\Phi; 2z'^*z), \quad (4.103)$$

y la norma

$$\langle z | z \rangle = \Gamma(-2\Phi) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{|\sqrt{2}z|^{2m}}{m!\Gamma(-2\Phi + m)} = F_1(-2\Phi; 2|z|^2). \quad (4.104)$$

Utilizando la relación

$$J_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu F_1(\nu+1; -z^2/4), \quad (4.105)$$

la norma de $|z\rangle$ se expresa como

$$\langle z|z\rangle = \Gamma(-2\Phi) \left(i\sqrt{2}|z|\right)^{2\Phi+1} J_{-2\Phi-1}\left(2\sqrt{2}i|z|\right). \quad (4.106)$$

4.3.4. Estados coherentes atómicos

En el trabajo de Arecchi *et al.* se construyen estados coherentes atómicos en óptica cuántica. El sistema que estudian consiste en un conjunto de átomos de dos niveles energéticos interactuando con un campo electromagnético transversal cuyo hamiltoniano es

$$\hat{H} = \hbar \sum_k \omega_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \hbar \sum_{k,\alpha} \omega_k \hat{\sigma}_z^\alpha + \hbar \sum_{k,\alpha} \left(g_k \hat{a}_k \hat{\sigma}_+^\alpha + g_k^* \hat{a}_k^\dagger \hat{\sigma}_-^\alpha \right), \quad (4.107)$$

donde el primer término es simplemente el hamiltoniano del campo electromagnético libre, el segundo el hamiltoniano del sistema atómico libre, y el tercero el hamiltoniano de interacción del sistema atómico con el campo electromagnético. Los operadores de Pauli para cada átomo cumplen las reglas de conmutación

$$\left[\hat{\sigma}_z^{(\alpha)}, \hat{\sigma}_\pm^{(\alpha')} \right] = \pm \hat{\sigma}_\pm^{(\alpha)} \delta_{\alpha\alpha'}, \quad \left[\hat{\sigma}_+^{(\alpha)}, \hat{\sigma}_-^{(\alpha')} \right] = 2 \hat{\sigma}_z^{(\alpha)} \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (4.108)$$

Y se pueden definir para el sistema completo a los operadores \hat{J}_z, \hat{J}_+ y \hat{J}_- como

$$\hat{J}_z = \sum_\alpha \hat{\sigma}_z^\alpha, \quad \hat{J}_\pm = \sum_\alpha \hat{\sigma}_\pm^{(\alpha)}. \quad (4.109)$$

De esta manera $SU(2)$ es el grupo dinámico que describe un sistema atómico de dos niveles en interacción con un campo electromagnético. Los estados coherentes son, por supuesto, los expresados en la Ec. 4.88.

Por último, es importante señalar que el trabajo de Arecchi *et al.*, en el contexto de la teoría de grupos y los estados coherentes, reproduce resultados de un trabajo clásico de Dicke [22] sobre coherencia en procesos de radiación espontánea.

4.3.5. Construcción de estados coherentes para FGL

Las funciones generalizadas de Laguerre (FGL) forman un conjunto completo que puede utilizarse para construir estados coherentes. Existen tres métodos reportados [47, 48] para realizar esto: utilizando teoría de grupos un método consiste en definir el estado coherente (e.c.) como eigenfunción del operador de aniquilación, y el otro en expresar el e.c. como el estado que resulta de la aplicación del operador de desplazamiento sobre el estado base; el tercer método consiste en construir el estado coherente a través del formalismo de acción. Además estas funciones (FGL), que no son eigenfunciones del hamiltoniano de Morse, se pueden utilizar en la construcción de estados coherentes para el potencial de Morse en el contexto de la teoría de supersimetría en mecánica cuántica [49].

Operadores de ascenso y descenso para las funciones generalizadas de Laguerre

Partiendo de la definición para las funciones generalizadas de Laguerre,

$$\psi_n^\alpha(y) = \sqrt{\frac{n! y^{\alpha+1} \exp(-y)}{\Gamma(n + \alpha + 1)}} L_n^\alpha(y), \quad \alpha > -1, \quad (4.110)$$

y con la relación de recurrencia expresada en la Ec. A.8 del apéndice A, podemos identificar operadores de ascenso y descenso, \hat{A}^\dagger y \hat{A} , respectivamente, actuando en las funciones $\psi_n^\alpha(y)$

$$\hat{A}^\dagger \psi_n^\alpha(y) = \left[-y \frac{d}{dy} - \frac{1}{2} (2n + \alpha + 1 - y) \right] \psi_n^\alpha(y), \quad (4.111)$$

$$\hat{A} \psi_n^\alpha(y) = \left[y \frac{d}{dy} - \frac{1}{2} (2n + \alpha + 1 - y) \right] \psi_n^\alpha(y). \quad (4.112)$$

O equivalentemente

$$\hat{A}^\dagger \psi_n^\alpha(y) = -\sqrt{(n+1)(n+\alpha+1)} \psi_{n+1}^\alpha(y), \quad (4.113)$$

$$\hat{A} \psi_n^\alpha(y) = -\sqrt{n(n+\alpha)} \psi_{n-1}^\alpha(y); \quad (4.114)$$

es decir,

$$\hat{A}^\dagger |n, \alpha\rangle = -\sqrt{(n+1)(n+\alpha+1)} |n+1, \alpha\rangle, \quad (4.115)$$

$$\hat{A} |n, \alpha\rangle = -\sqrt{n(n+\alpha)} |n-1, \alpha\rangle. \quad (4.116)$$

Estas funciones generalizadas de Laguerre son eigenfunciones del hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{A}^\dagger \hat{A}, \quad (4.117)$$

el cual conduce a la ecuación de eigenvalores

$$\hat{H} \psi_n^\alpha(y) = e_n \psi_n^\alpha(y), \quad (4.118)$$

donde

$$e_n = n(n+\alpha). \quad (4.119)$$

Como mencionamos anteriormente, estas funciones no son eigenfunciones del potencial de Morse. Sin embargo, como vimos en el capítulo 2 están relacionadas con estas últimas. De hecho, el hamiltoniano de Morse es tridiagonal en la base de las FGL,

$$\begin{aligned} \langle m | \hat{H}_{Morse} |n\rangle &= [2n(n+\alpha) + E_0((\alpha+1)/2)] \delta_{m,n} \\ &- (n-1) \sqrt{n(\alpha+n)} \delta_{m+1,n} \\ &- (m-1) \sqrt{m(\alpha+m)} \delta_{m,n+1}. \end{aligned} \quad (4.120)$$

Estados coherentes para las FGL a través de la teoría de grupos asociada al álgebra $\{\hat{A}, \hat{A}^\dagger, \hat{A}_3\}$

A partir de los operadores \hat{A}^\dagger y \hat{A} identificados anteriormente, se procede a construir los estados coherentes mediante el formalismo de teoría de grupos. Para esto se encuentra el grupo dinámico de simetría para el hamiltoniano de la Ec. 4.117 de la siguiente manera.

El conmutador $[\hat{A}, \hat{A}^\dagger]$ actuando sobre las funciones generalizadas de Laguerre es

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] \psi_n^\alpha(y) = (2n + \alpha + 1) \psi_n^\alpha(y). \quad (4.121)$$

Se define un operador \hat{A}_3 de tal forma que

$$\hat{A}_3 \psi_n^\alpha(y) = \frac{1}{2} (2n + \alpha + 1) \psi_n^\alpha(y). \quad (4.122)$$

De esta manera los operadores \hat{A} , \hat{A}^\dagger y \hat{A}_3 actuando sobre el conjunto $\{|n, \alpha\rangle\}$ generan un álgebra $su(1, 1)$

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 2\hat{A}_3, \quad [\hat{A}_3, \hat{A}^\dagger] = \hat{A}^\dagger, \quad [\hat{A}_3, \hat{A}] = -\hat{A}. \quad (4.123)$$

Identificando el estado de referencia como $|0, \alpha\rangle$, el operador de desplazamiento para el espacio cociente $SU(1, 1)/U(1)$ es

$$D(\xi) = \exp\left(\xi \hat{A}^\dagger - \xi^* \hat{A}\right), \quad \xi \in \mathbb{C}. \quad (4.124)$$

Por lo tanto, el estado coherente es

$$|\xi, \alpha\rangle = \exp\left(\xi \hat{A}^\dagger - \xi^* \hat{A}\right) |0, \alpha\rangle, \quad (4.125)$$

lo cual nos lleva a

$$|\zeta, \alpha\rangle = (1 - |\zeta|^2)^{\alpha+1} \exp\left(\zeta \hat{A}^\dagger\right) |0, \alpha\rangle, \quad (4.126)$$

donde $\zeta = \frac{\xi}{|\xi|} \tanh |\xi|$ y $|\zeta| < 1$. Esta última ecuación nos conduce finalmente a

$$|\zeta, \alpha\rangle = (1 - |\zeta|^2)^{\alpha+1} \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\binom{n+\alpha}{n}} \zeta^n |n, \alpha\rangle. \quad (4.127)$$

4.4. Construcción de Nieto y Simmons para potenciales generales

La última generalización para estados coherentes que estudiaremos (y que encontramos reportada en el literatura) es la de Nieto y Simmons [8]. Ésta combina dos de las tres definiciones de estados coherentes para el oscilador armónico (equivalentes en éste último). Así los estados coherentes de Nieto-Simmons son construidos a través de un operador análogo al de aniquilación

y cumplen a su vez con una relación de mínima incertidumbre. Esta generalización que se hace es aplicable a potenciales generales. En su trabajo original, Nieto y Simmons estudiaron casos unidimensionales, pero posteriormente aplicaron su método a potenciales de más dimensiones [10, 11, 12, 13, 14, 15]. La idea física que subyace aquí consiste en construir estados que tengan, al igual que los estados de Glauber, la propiedad clásica de que sus variables canónicas manifiesten un comportamiento sinusoidal.

Las generalizaciones a través de la teoría de grupos para la definición de estados coherentes (como eigenfunciones de un operador de aniquilación y estados que resultan de la aplicación del operador de desplazamiento sobre el estado base) no siempre, y ese es el caso para el potencial de Morse, pueden resolverse de forma cerrada ya que el espectro discreto no está uniformemente espaciado y/o el potencial presenta una parte continua. La idea de Nieto y Simmons consiste en considerar, para un potencial general, estados en los cuales es posible realizar una transformación de tal forma que existen dos variables denotadas por X_c y P_c que exhiben un comportamiento sinusoidal propiamente clásico. Además, X_c es función de la variable física x . Es decir,

$$X_c = A \sin(\omega_c t + \varphi), \quad (4.128)$$

$$P_c = m \dot{X}_c, \quad (4.129)$$

$$\dot{P}_c = -m\omega_c X_c, \quad (4.130)$$

donde ω_c es una frecuencia, y m la masa característica del sistema físico. Esto es posible si

$$m\ddot{x} = -\frac{dV(x)}{dx}, \quad (4.131)$$

se impone la condición de que

$$P_c = pX'_c, \quad (4.132)$$

donde X'_c no es sino $\frac{dX_c}{dx}$. La forma en que X_c depende de x se deduce de la siguiente manera.

Las Ecs. 4.128, 4.129 y 4.130 expresan a un oscilador armónico. Se define a la energía ε , de

éste,

$$\frac{1}{2m}P_c^2 + \frac{m\omega_c^2}{2}X_c^2 = \varepsilon = \frac{m\omega_c^2}{2}A^2. \quad (4.133)$$

Entonces,

$$\frac{1}{\sqrt{2m}}P_c = \omega_c \sqrt{\frac{1}{2}m(A^2 - X_c^2)}, \quad (4.134)$$

pero con la condición expresada en la Ec. 4.132 tenemos que

$$\frac{p}{\sqrt{2m}} \frac{dX_c}{dx} = \omega_c \sqrt{\frac{1}{2}m(A^2 - X_c^2)}. \quad (4.135)$$

Como la energía, E , del sistema físico del cual partimos es

$$E = \frac{1}{2m}p^2 + V(x), \quad (4.136)$$

en la Ec. 4.135 podemos eliminar p , y así obtenemos

$$X_c' = \frac{dX_c}{dx} = \omega_c \left(\frac{\frac{1}{2}m(A^2 - X_c^2)}{E - V(x)} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.137)$$

A partir de lo anterior se procede a construir los operadores X y P , los cuales generan una relación de incertidumbre. Se elige por conveniencia al primer operador como

$$X \equiv X_c. \quad (4.138)$$

Y el operador \hat{P} se construye de manera simétrica,

$$P \equiv \frac{-i\hbar}{2} \left(\frac{d}{dx} X' + X' \frac{d}{dx} \right). \quad (4.139)$$

Es trivial demostrar que ambos operadores cumplen la siguiente relación de conmutación

$$[X, P] = i\hbar (X')^2. \quad (4.140)$$

Es importante mencionar que este conmutador nos muestra claramente que la transformación realizada en esta construcción no es canónica. No sólo eso: tampoco se trata de una deformación

algebraica como la que mencionamos en la construcción de Manko *et al.*. Además, es obvio que se recupera el caso armónico cuando $X = X_c = x$. También tenemos la relación de incertidumbre

$$\frac{(\Delta X)^2 (\Delta P)^2}{\langle (X')^2 \rangle^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (4.141)$$

Y con esto se construye un operador, A^- , análogo al de aniquilación para el oscilador armónico, de tal forma que

$$A^- \psi_\alpha(x) \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{X}{\Delta X} + i \frac{P}{\Delta P} \right) \psi_\alpha(x) = \alpha \psi_\alpha(x), \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (4.142)$$

A partir de los operadores X y P , expresados en las Ecs. 4.138 y 4.139, se cumple la siguiente ecuación de movimiento,

$$\dot{X} = -i\hbar [X, H] = P/m. \quad (4.143)$$

Sin embargo, la ecuación de movimiento clásica para P no se cumple ya que el estado coherente ψ_α es una superposición de eigenestados de energía, y, en general, la frecuencia ω_c depende de la energía. Otra diferencia con el caso armónico, en esta generalización, consiste en que los operadores de ascenso y descenso, A_n^+ y A_n^- , respectivamente, dependen de manera explícita del estado n . Y debido a esto, en general, no se cumple que $(A_n^-)^\dagger = A_n^+$. Esta dependencia hace menos clara la relación de estos estados con los que resultan de la generalización de Perelomov y Gilmore. Sin embargo, como veremos más adelante, al menos para el potencial de Morse, existe una equivalencia entre estados coherentes desplazados y estados coherentes de Nieto y Simmons.

4.4.1. Construcción de estados coherentes para el potencial de Morse

Entre los diversos potenciales a los cuales aplican su método Nieto y Simmons se encuentra el potencial de Morse [9]. Presentaremos sus resultados por ser el tema de estudio del presente trabajo. La construcción que hacen no incluye el espectro continuo.

Utilizando el potencial de Morse en las ecuaciones 4.137 y 4.132, tenemos las siguientes soluciones,

$$X_c = \exp[\beta R] - D/(D - E) = A \sin(\omega_c t), \quad (4.144)$$

$$P_c = m\dot{R}\beta \exp[\beta R] = m\omega_c A \cos(\omega_c t), \quad (4.145)$$

con

$$A = \sqrt{DE}/(D - E), \quad (4.146)$$

$$\omega_c = \sqrt{2\beta^2(D - E)/m}. \quad (4.147)$$

Entonces las ecuaciones de movimiento para X_c y P_c son

$$\dot{X}_c = P_c/m, \quad (4.148)$$

$$\dot{P}_c = -m\omega_c^2 X_c = -2\beta^2(D - E)X_c. \quad (4.149)$$

Los operadores cuánticos X y P están dados por

$$X = \exp[z] - D/(D - H - \varepsilon_0/4), \quad P = \frac{\hbar\beta^2}{2i} \left(\exp(z) \frac{d}{dz} + \frac{d}{dz} \exp(z) \right), \quad (4.150)$$

con $z = \exp(\beta R)$.

En la expresión para X , $\varepsilon_0/4$ representa el punto cero de la energía. Se determinan las ecuaciones de movimiento, las cuales resultan ser

$$\dot{X} = \frac{-i}{\hbar} [X, H] = P/m, \quad (4.151)$$

$$\dot{P} = \frac{-i}{\hbar} [P, H] = -\beta^2 (\{X, D - H\} + \{\exp(z), \varepsilon_0/4\}), \quad (4.152)$$

cuyas soluciones son

$$\begin{aligned} X(t) &= \exp(iHt/\hbar) X_0 \exp(-iHt/\hbar) \\ &= X_0 \exp(-i\omega_0 t) \left[\cos(\omega_H t) + \frac{i}{2} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{D - H}} \sin(\omega_H t) \right] \\ &+ (P_0/\hbar\beta^2) \exp(-i\omega_0 t) \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{D - H}} \sin(\omega_H t), \end{aligned} \quad (4.153)$$

y

$$\begin{aligned}
 P(t) &= \exp(iHt/\hbar) P_0 \exp(-iHt/\hbar) \\
 &= P_0 \exp(-i\omega_0 t) \left[\cos(\omega_H t) - \frac{i}{2} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{D-H}} \sin(\omega_H t) \right] \\
 &\quad - (\hbar\beta^2 X_0) \exp(-i\omega_0 t) \left(\frac{D-H-\varepsilon_0/4}{\varepsilon_0} \right) \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{D-H}} \sin(\omega_H t), \quad (4.154)
 \end{aligned}$$

donde $\omega_0 = \varepsilon_0/\hbar$ y $\omega_H = \frac{2\varepsilon_0}{\hbar} \sqrt{\frac{D-H}{\varepsilon_0}} = \sqrt{\frac{2\beta^2}{m}(D-H)}$. Aunque no es obvio, los operadores $X(t)$ y $P(t)$ son hermitianos.

Con estos resultados se procede a encontrar el estado coherente que satisface la ecuación de eigenvalores que nos interesa (Ec. 4.142), y que se puede expresar como

$$\left(\frac{X}{\Delta X} + i \frac{P}{\Delta P} \right) \psi_{cs}(x) = \left(\frac{\langle X \rangle}{\Delta X} + i \frac{\langle P \rangle}{\Delta P} \right) \psi_{cs}(x), \quad (4.155)$$

y con la relación de incertidumbre de la Ec. 4.141,

$$\left(X + i \frac{\langle G \rangle}{2\langle \Delta P \rangle^2} P \right) \psi_{cs}(x) = \left(\langle X \rangle + i \frac{\langle G \rangle}{2\langle \Delta P \rangle^2} \langle P \rangle \right) \psi_{cs}(x), \quad G = \hbar (X')^2. \quad (4.156)$$

Ya que el operador X involucra a H en el denominador que aparece en su segundo miembro, el cálculo de G y la solución de la última ecuación son aproximados, y ambos se obtienen mediante un desarrollo perturbativo. Así pues, los estados coherentes obtenidos por Nieto y Simmons para el potencial de Morse son una aproximación en su propio formalismo. Ésta consiste en lo siguiente.

Para el caso particular en el cual el estado coherente es el estado base ψ_0 , la profundidad pozo es relativamente grande o $\langle n \rangle \ll D/\varepsilon_0$, sólo pocos (los primeros) estados de número son significantes en la construcción del estado coherente. Entonces se realiza la aproximación

$$(D - H - \varepsilon_0/4) \rightarrow (D - \langle E \rangle - \varepsilon_0/4) \quad (4.157)$$

en el denominador involucrado en el operador X , y este último se reduce a

$$X = \exp(z) - D/(D - \langle E \rangle - \varepsilon_0/4). \quad (4.158)$$

El conmutador de X con P resulta ser

$$[X, P] = iG = i\beta^2 \hbar \exp(2z). \quad (4.159)$$

La solución de la Ec. 4.156 es

$$\psi_{cs} = N(C, \lambda) \exp[-(\lambda - 1/2)z] \exp[-C \exp(-z)], \quad (4.160)$$

$$N(C, \lambda) = \sqrt{\beta} (2u)^{\lambda-1/2} / \sqrt{\Gamma(2\lambda - 1)}, \quad (4.161)$$

$$C = (\lambda - 1) \langle \exp(z) \rangle + i \langle P \rangle / \hbar \beta^2 \equiv u + iv. \quad (4.162)$$

En las tres expresiones anteriores, $\lambda = N + \frac{1}{2}$, donde N es el número de estados ligados del pozo de potencial (no confundir con $N(C, \lambda)$).

Podemos expresar este estado coherente aproximado como una superposición de estados de número, y obtenemos

$$\psi_{cs} = \frac{1}{\beta} N(C, \lambda) \sum_{n=0}^{\lambda-1/2} N(n, \lambda) O(n, C, \lambda) |n\rangle, \quad (4.163)$$

con

$$O(n, C, \lambda) = \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j}{j!} \binom{2\lambda - n - 1}{n - j} \left(\frac{2}{1 + C/\lambda} \right)^{N-n+j} \Gamma(2\lambda - n - 1 + j). \quad (4.164)$$

Por último, la relación entre las dispersiones dada en la Ec. 4.141 es para este caso

$$(\Delta X)^2 (\Delta P)^2 = \left(\frac{u^2}{2(\lambda - 1)^2 (\lambda - 3/2)} \right) \left(\frac{(\hbar \beta^2)^2 u^2}{2(\lambda - 3/2)} \right). \quad (4.165)$$

Capítulo 5

Estados coherentes para el potencial de Morse

Hemos revisado las diversas generalizaciones de estados coherentes para sistemas anarmónicos. Asimismo al estudiar el potencial de Morse, es evidente que, por tener un número finito de estados ligados, el espectro discreto de este potencial no forma un conjunto completo. Por esto, la construcción de estados coherentes en este caso no es nada trivial, ya que para realizarla de manera correcta hay que integrar el espectro continuo. Procederemos a construir los estados coherentes para el potencial de Morse utilizando únicamente el espectro discreto, lo cual es tan sólo una aproximación. Esta se justifica ya que es precisamente en la parte discreta donde existe propiamente la molécula. Construimos, pues, estados coherentes -en esta aproximación- en el formalismo de Gazeau-Klauder, de Manko *et al.* y de teoría de grupos. Como vimos en la sección anterior, Nieto y Simmons ya realizaron esta construcción en su formalismo.

5.1. Espectro discreto

5.1.1. Formalismo de Gazeau-Klauder

Encontramos ρ_n a partir de

$$E_n = -D + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega\chi \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \quad (5.1)$$

$$E_0 = -D + \frac{\hbar\omega}{2} \left(1 - \frac{\chi}{2}\right) \quad (5.2)$$

$$e_n = \frac{E_n - E_0}{\hbar\omega} = n[1 - \chi(n + 1)] \quad (5.3)$$

Por lo tanto,

$$\rho_n = \prod_{n=1}^{N-1} n[1 - \chi(n + 1)] = n! \prod_{n=1}^{N-1} [1 - \chi(n + 1)] = n!\chi^n \prod_{n=1}^{N-1} (2N + 1 - n - 1) \quad (5.4)$$

$$= n!\chi^n \frac{\Gamma(2N)}{\Gamma(2N - n)} \quad (5.5)$$

La propuesta de estado coherente es

$$|J, \gamma\rangle = N^{-1}(J) \sum_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{\Gamma(2N - n)J^n}{n!\chi^n\Gamma(2N)}} \exp(-ie_n\gamma) |n\rangle, \quad (5.6)$$

donde la constante de normalización es

$$N^2(J) = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{J^n\Gamma(2N - n)}{n!\chi^n\Gamma(2N)} \quad (5.7)$$

Los estados coherentes así construidos cumplen los requerimientos (a), (b) y (c) mencionados en la sección 4.1, pero no el (d). Esto último lo podemos ver fácilmente

A partir de la definición de los estados coherentes de Gazeau-Klauder, de la ecuación 4.4

$$\langle J, \gamma | \hat{H} | J, \gamma \rangle = N^{-2}(J) \sum \frac{\omega e_n J^n}{\rho_n}, \quad (5.8)$$

Para que esta expresión cumpla la identidad de acción se tendría que satisfacer que

$$\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\omega e_n J^n}{\rho_n} = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\omega e_n J^{n+1}}{\rho_n}, \quad (5.9)$$

lo cual no es posible, y la causa se encuentra en el hecho de que el espectro es finito.

5.1.2. Formalismo de Manko *et al.*

En este formalismo no se ajusta la escala de la energía a diferencia del formalismo anterior (Gazeau-Klauder). Podemos, por lo tanto, utilizar el hamiltoniano de un oscilador armónico cuántico deformado incluyendo el vacío o no.

En el primer caso utilizamos el hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(\hat{A}^\dagger \hat{A} + \hat{A} \hat{A}^\dagger \right) \quad (5.10)$$

Obtenemos

$$\hat{H} |n\rangle = \frac{\hbar \omega}{2} [f^\dagger(\hat{n}) \hat{a}^\dagger \hat{a} f(\hat{n}) + \hat{a} f(\hat{n}) f^\dagger(\hat{n}) \hat{a}^\dagger] |n\rangle, \quad (5.11)$$

y utilizando las ecuaciones 4.40

$$\hat{H} |n\rangle = \frac{\hbar \omega}{2} [f^2(\hat{n}) \hat{n} + f^2(\hat{n} + 1) (\hat{n} + 1)] |n\rangle. \quad (5.12)$$

La expresión de E_n para el potencial de Morse es

$$E_n = \frac{\hbar \omega}{2} \left[(2n + 1) - \frac{\chi}{2} (2n + 1)^2 \right], \quad (5.13)$$

por lo tanto proponemos

$$f(\hat{n}) = \sqrt{\alpha + \beta \hat{n}}, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}. \quad (5.14)$$

De las dos ecuaciones anteriores, y ajustando el espectro, encontramos

$$f(\hat{n}) = \sqrt{1 - \chi \hat{n}}. \quad (5.15)$$

Ahora utilizamos el hamiltoniano

$$\hat{H} = \hbar \omega \hat{A}^\dagger \hat{A}. \quad (5.16)$$

El procedimiento para encontrar $f(\hat{n})$ es el mismo que acabamos de realizar y, en este caso,

$$f(\hat{n}) = \sqrt{1 - \chi(\hat{n} + 1)}. \quad (5.17)$$

Construimos los estados coherentes para el potencial de Morse utilizando estos resultados.

Primero utilizamos el hamiltoniano de la Ec. 5.16,

$$|\alpha, f\rangle = C_0 \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!} [\sqrt{1 - \chi(\hat{n} + 1)}]!} |n\rangle, \quad (5.18)$$

y vemos que $\sqrt{n!} [\sqrt{1 - \chi(\hat{n} + 1)}]!$ es la expresión de la ρ_n en el formalismo de Gazeau-Klauder para el potencial de Morse; por lo tanto,

$$|\alpha, f\rangle = C_0 \sum_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{\Gamma(2N - n)}{n! \chi^n \Gamma(2N)}} \alpha^n |n\rangle. \quad (5.19)$$

Para el hamiltoniano de la Ec. 5.10,

$$|\alpha, f\rangle = C_0 \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!} [\sqrt{1 - \chi \hat{n}}]!} |n\rangle \quad (5.20)$$

$$= C_0 \sum_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{\Gamma(2N - n - 1)}{n! \chi^n \Gamma(2N - 1)}} \alpha^n |n\rangle. \quad (5.21)$$

Estos estados coherentes no muestran estabilidad temporal. Sin embargo, si identificamos α de manera análoga a la forma en que se hace en la construcción de Gazeau-Klauder -un número complejo en términos de su módulo y su fase-, sí obtenemos f -estados coherentes con estabilidad temporal.

5.1.3. Formalismo de grupos

En la literatura científica de modelos algebraicos está reportada la conexión de los eigenestados del potencial de Morse con el álgebra $\mathfrak{su}(2)$, o equivalentemente mediante los estados $SU(2) \supset SO(2)$ a través del hamiltoniano [44]:

$$\hat{H}_{Morse} = \frac{\hbar\omega}{N} (J^2 - J_Z^2) = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) \quad (5.22)$$

Los estados coherentes para el potencial de Morse son

$$|j, \zeta\rangle = \cos^{2j} \left(\frac{|\zeta|}{\sqrt{N}} \right) \sum_{m=-j}^j \left[\frac{|\zeta|}{\zeta^*} \tan \left(\frac{|\zeta|}{\sqrt{N}} \right) \right]^{j+m} |J, -m\rangle \quad (5.23)$$

ver en las relaciones de conmutación dadas en las Ecs. 5.34. Podemos definir un operador $2\hat{A}_3$ como

$$2\hat{A}_3 = [\hat{A}(s), \hat{A}^\dagger(s)] = 2s\mathbb{I} - [\hat{A}(s) + \hat{A}^\dagger(s)]. \quad (5.43)$$

A partir de esta definición encontramos que

$$[\hat{A}_3, \hat{A}^\dagger] = -2\hat{A}_3, \quad [\hat{A}_3, \hat{A}] = 2\hat{A}_3. \quad (5.44)$$

Estos operadores $\{\hat{A}, \hat{A}^\dagger, \hat{A}_3\}$ no definen un álgebra $su(1, 1)$. Sin embargo, sí forman un álgebra cerrada y, por lo tanto, un grupo.

A partir del grupo y su álgebra, así como de la identificación del estado base $|0\rangle$, construimos un operador que deje invariante a éste salvo una fase. Definimos un operador en términos de los generadores del grupo que para $|0\rangle$ satisfaga la siguiente ecuación de eigenvalores:

$$(a\hat{A}^\dagger + b\hat{A} + c\hat{A}_3) |0\rangle = \hat{A}_0 |0\rangle = s |0\rangle, \quad a, b, c \in \mathbb{R}. \quad (5.45)$$

Los valores para las constantes a, b , y c son

$$a = \frac{1}{2}, \quad b = 0, \quad c = 1. \quad (5.46)$$

Por lo tanto,

$$\hat{A}_0 = \frac{1}{2}\hat{A}^\dagger + \hat{A}_3. \quad (5.47)$$

Al aplicar el operador de desplazamiento $D(\zeta)$ desentrelazado al estado base $|0\rangle$ se obtiene el estado coherente

$$|\zeta\rangle = D(\zeta) |0\rangle = \exp\left(\ln[1 - |\zeta|^2] \hat{A}_0\right) \exp\left(\zeta \hat{A}^\dagger\right) \exp\left(\zeta^* \hat{A}\right) |0\rangle. \quad (5.48)$$

Este estado coherente es prácticamente el obtenido en la Ec. 5.42.

La construcción de estados coherentes para el potencial de Morse en el contexto de supersimetría incorpora el espectro continuo, pero la forma en que lo hace es discretizándolo, lo que es obvio a través de los operadores escalera que utiliza.

Sin embargo, esta suma la restringimos a los términos con significado físico para el potencial de Morse, donde el número de estados ligados esta dado por $N = J$. Así:

$$|j, \zeta\rangle = \cos^{2j} \left(\frac{|\zeta|}{\sqrt{N}} \right) \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{|\zeta|}{\zeta^*} \tan \left(\frac{|\zeta|}{\sqrt{N}} \right) \right]^n |N, n\rangle \quad (5.24)$$

En esta última expresión se han elegido las m negativas -podrían haber sido las positivas- en la construcción de estados coherentes para $SU(2)$ hecha en la sección 3.3.2.

Funciones generalizadas de Laguerre y la descripción supersimétrica del potencial de Morse

Como preparativo para estudiar la descripción supersimétrica del potencial de Morse es conveniente partir del hamiltoniano de Morse [49]

$$\hat{H}_{Morse}(s) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V_0 \left[s + \frac{1}{2} - \exp(-\gamma \hat{X}) \right]^2, \quad (5.25)$$

donde s , V_0 y γ son parámetros reales del potencial e introduciendo operadores adimensionales

$$\hat{x} = \gamma \hat{X}, \quad \hat{p} = \frac{1}{\sqrt{2mV_0}} \hat{P}, \quad (5.26)$$

con $\gamma \hbar / \sqrt{2mV_0} = 1$, de tal forma que $[\hat{x}, \hat{p}] = i$ y

$$\hat{h}_{Morse}(s) = \frac{\hat{H}_{Morse}(s)}{V_0} = \hat{p}^2 + \left[s + \frac{1}{2} - \exp(-\hat{x}) \right]^2. \quad (5.27)$$

Si redefinimos el parámetro s como

$$s = \frac{\alpha + 1}{2}, \quad (5.28)$$

el hamiltoniano de la Ec. 5.27 es

$$\hat{h}_{Morse}(\alpha) = \hat{p}^2 + \left[\frac{\alpha}{2} + 1 - \exp(-\hat{x}) \right]^2. \quad (5.29)$$

De acuerdo a la teoría de supersimetría en mecánica cuántica (SUSY QM son sus siglas en inglés) [50] para este potencial se pueden introducir operadores escalera $\hat{A}(s)$ y $\hat{A}^\dagger(s)$, de tal

manera que $\hat{A}(s)$ aniquile el estado base, y el hamiltoniano sea factorizable:

$$\hat{A}(s) |\Psi_0(s)\rangle = 0, \quad \hat{H}(s) = \hat{A}^\dagger(s) \hat{A}(s) + E_0(s). \quad (5.30)$$

Los operadores $\hat{A}(s)$ y $\hat{A}^\dagger(s)$ para el potencial de Morse en SUSY son

$$\hat{A}(s) = s - \exp(-\hat{x}) + i\hat{p}, \quad \hat{A}^\dagger(s) = s - \exp(-\hat{x}) - i\hat{p}. \quad (5.31)$$

La forma en que los operadores supersimétricos extienden el álgebra de Lie es la siguiente:

$$\hat{A}(s+n) = \hat{A}(s) + n\mathbb{I}, \quad (5.32)$$

donde n es un número cualquiera. El álgebra de estos operadores está expresada en los siguientes conmutadores:

$$\left[\hat{A}(s+m), \hat{A}(s+n) \right] = \left[\hat{A}^\dagger(s+m), \hat{A}^\dagger(s+n) \right] = 0, \quad (5.33)$$

$$\left[\hat{A}(s+m), \hat{A}^\dagger(s+m) \right] = 2s\mathbb{I} - \left[\hat{A}(s) + \hat{A}^\dagger(s) \right]. \quad (5.34)$$

Los elementos de matriz para los operadores $\hat{A}(s+k)$ y $\hat{A}^\dagger(s+k)$, con k un entero arbitrario, son

$$\langle m | \hat{A}(s+k) | n \rangle = \sqrt{n(2s+m)} \delta_{m+1,n} - (m-k) \delta_{m,n}, \quad (5.35)$$

$$\langle m | \hat{A}^\dagger(s+k) | n \rangle = \sqrt{m(2s+n)} \delta_{m,n+1} - (n-k) \delta_{m,n}, \quad (5.36)$$

Los estados denominados de pseudo-número están definidos por la siguiente serie infinita:

$$|0\rangle \equiv |\Psi_0(s)\rangle, |1\rangle \equiv C_1^{-1} \hat{A}^\dagger(s) |0\rangle, \dots, |n\rangle \equiv C_n^{-1} \hat{A}^\dagger(s+n-1) |n-1\rangle \dots, \quad n \in \mathbb{N}^+ \quad (5.37)$$

con la constante de normalización $C_n = \sqrt{n(2s+n-1)}$.

Estos estados de pseudo-número, en términos de la variable $y = 2 \exp(-x)$ son

$$\psi_n(y) := \langle y | n \rangle = C_n^{-1} \left(y + \frac{\partial}{\partial y} + (s+n-1) - \frac{y}{2} \right) \psi_{n-1}(y), \quad (5.38)$$

con $\psi_0(y) := \langle y | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Gamma(2s)}} y^s \exp(-y/2)$. Comparando la Ec. 5.38 con la fórmula de Rodrigues para las funciones generalizadas de Laguerre $L_n^\alpha(y)$, los estados de pseudo-número normalizados, en términos de la variable α , son

$$\psi_n^\alpha(y) = \left[\Gamma(\alpha + 1) \binom{n + \alpha}{n} \right]^{-\frac{1}{2}} y^{(\alpha+1)/2} \exp(-y/2) L_n^\alpha(y). \quad (5.39)$$

Esta última ecuación es prácticamente la Ec. (4.110) de la sección anterior.

Utilizando los operadores supersimétricos se define el estado coherente $|\zeta\rangle$ de manera análoga al caso del oscilador armónico

$$|\zeta\rangle = g(\zeta) \left\{ \mathbb{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\zeta^n}{n!} \hat{A}^\dagger(s+n-1) \cdots \hat{A}^\dagger(s) \right\} |0\rangle, \quad \zeta \in \mathbb{C}; \quad (5.40)$$

donde $g(\zeta)$ es una constante de normalización.

La construcción explícita de $|z\rangle$ es

$$|\zeta\rangle = g(\zeta) \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\binom{n + \alpha}{n}} \zeta^n |n, \alpha\rangle, \quad (5.41)$$

y normalizando

$$|\zeta\rangle = (1 - |\zeta|^2)^{\frac{\alpha+1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\binom{n + \alpha}{n}} \zeta^n |n, \alpha\rangle, \quad |\zeta| < 1. \quad (5.42)$$

Estos estados coherentes coinciden con los construidos para el potencial de Morse por Nieto en su formalismo [9].

Álgebra de los operadores supersimétricos del potencial de Morse

Como Benedict y Molnár mencionan en su trabajo [49], los operadores supersimétricos construidos para el potencial de Morse no son la clase $so(2, 1) \cong su(1, 1) \cong sp(1, R)$. Esto lo podemos

5.2. Espectro completo

En la sección anterior hemos construido estados coherentes para el potencial de Morse, pero utilizando únicamente el espectro discreto. Ahora incorporaremos el espectro continuo. De esta manera, nuestra construcción será mejorada. Exploramos esencialmente un par de propuestas. La primera consiste en los estados desplazados como estados coherentes para el potencial de Morse. Esta propuesta, como veremos, está relacionada (en el espectro discreto) con la generalización de Nieto-Simmons y, como ya vimos en el capítulo anterior, con la teoría de grupos. La segunda propuesta que exploramos se inscribe en el formalismo de Gazeau-Klauder para espectro discreto y continuo, el cual expusimos en el capítulo cuatro. Y como vimos en la construcción realizada para el espectro discreto del potencial de Morse, el formalismo de Gazeau-Klauder se puede empatar con el de Manko *et al.*

5.2.1. Estados coherentes desplazados para el potencial de Morse

Proponemos definir al estado coherente del potencial de Morse, incorporando tanto el espectro discreto como el continuo, de la siguiente manera

$$|N, b\rangle_{EDM} = \sum_{n=0}^{N-1} \zeta_{N,n}^{\pm} |n\rangle + \int_0^{\infty} \zeta_{N,E}^{\pm} |E\rangle dE, \quad (5.49)$$

donde los coeficientes $\zeta_{N,n}^{\pm}$ y $\zeta_{N,E}^{\pm}$, para los estados discretos y continuos, respectivamente, son los coeficientes de Franck-Condon que resultan de proyectar una función de onda vibracional base de un potencial de Morse, cuando este último es desplazado de su posición de equilibrio, en términos del conjunto de funciones vibracionales y continuas del nuevo potencial de Morse desplazado, que es en donde evolucionará. Por construcción, estos estados están normalizados. La estabilidad temporal no es obvia, aunque tanto los estados del discreto como los del continuo son eigenfunciones del hamiltoniano de Morse. Las propiedades de estos estados las analizaremos más adelante. Primero justificaremos esta propuesta de estado coherente.

Estados desplazados de Morse y su relación con los factores de Franck Condon

En física molecular el *Principio de Franck Condon* (PFC) fue establecido clásicamente por J. Franck en 1925 [56], y con una base cuántica por E. Condon en 1926 [57]. Este principio se basa en la aproximación de Born-Oppenheimer, es decir, en el hecho de que el movimiento de los núcleos es mucho más lento que el de los electrones. El PFC establece que un electrón puede realizar una transición tan rápidamente que los núcleos tienen posiciones y velocidades muy cercanas a las que tenían antes de la transición electrónica. Después de ésta, los núcleos se encuentran descritos por la función de onda nuclear original que se ve forzada a evolucionar en el potencial asociado a la nueva configuración electrónica. A través de este principio se explican fácilmente el espectro de bandas que presentan moléculas diatómicas, el cual se origina a través de transiciones electrónicas.

El nuevo potencial difiere del original en alguno o varios de sus parámetros. En el caso en que la única diferencia apreciable sea la posición de equilibrio, se darán las condiciones para generar los estados coherentes desplazados de Morse. Estos estados resultan de considerar la representación más cercana al estado vibracional de dicho potencial en términos de sus eigenestados -vibracionales y de dispersión- asociados a un potencial idéntico al original salvo un desplazamiento de su posición de equilibrio [52]. Los estados coherentes desplazados de Morse son equivalentes a los estados coherentes de Nieto para el potencial de Morse [9], que a su vez coinciden con la construcción de estados coherentes de Morse en el contexto de supersimetría en mecánica cuántica [49], y estos últimos son los mismos que resultan de la construcción de estados coherentes para funciones de Laguerre generalizadas a través de teoría de grupos [48].

Cálculo de los factores de Franck Condon para el potencial de Morse

Los factores de Franck Condon representan la probabilidad de transición de un estado inicial vibracional a un determinado estado final vibracional o de dispersión, y se definen como el

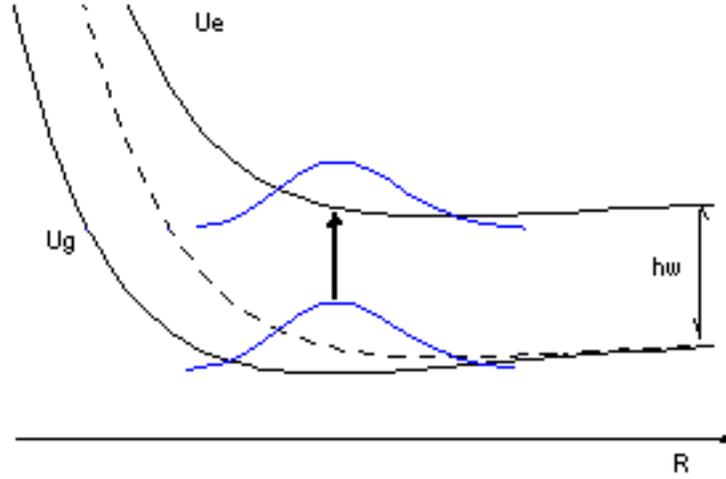


Figura 5.1: Transición de Franck Condon.

cuadrado de la integral de traslape entre el estado inicial y el final. Esta integral no es nula debido a que los estados finales y el original no son ortogonales dada la diferencia entre los parámetros que caracterizan a los dos potenciales nucleares. En el caso en que ambos potenciales preserven su forma y únicamente difieran en su posición de equilibrio el factor de Franck Condon es

$$FFC = \left| \langle j(R'_o) | i(R_o) \rangle \right|^2, \quad (5.50)$$

donde i representa el estado inicial con posición de equilibrio R_o , y j representa el estado final con posición de equilibrio R'_o .

Estos factores han sido reportados por diferentes autores tanto para la aproximación armónica del potencial [59, 60] como para el caso de potenciales de Morse [61, 62, 63, 64, 65]. En este último, en el caso discreto, la integral de traslape -cuyo módulo al cuadrado es el FFC - entre un estado vibracional desplazado $|Nv\rangle$ a otro $|Nv'\rangle$ es

$$I_{N,v}^{\pm} = \frac{C_{N,v'}^{\pm} C_{N,v}^{\pm}}{\beta} \sum_{\substack{0 \leq n \leq v' \\ 0 \leq m \leq v}} \frac{(-1)^{m+n} (2N-v)! (2N-v')! u^N \left(\frac{2}{1+u}\right)^B \Gamma(B)}{(v'-n)! (v-m)! (2N-2v'+n)! (2N-2v+m)! m! n!}, \quad (5.51)$$

donde β es el inverso del alcance del potencial, $C_{N,v'}^\pm$ y $C_{N,v}^\pm$ son las constantes de normalización, $u = \exp(\mp\beta b)$, b es el desplazamiento, y $B = 2N - v - v' + n + m$.

Partimos de la función vibracional desplazada, la cual en la representación de coordenadas es

$$\langle z | N, 0 \rangle_b = C_{N0} \exp(\mp N\beta b) z^N \exp\left[-\frac{z \exp(\mp\beta b)}{2}\right], \quad C_{N0} = \sqrt{\frac{\beta}{\Gamma(2N)}} \cos^N(\text{Im}[b]). \quad (5.52)$$

Partir de esta función vibracional base desplazada, que evoluciona en un potencial de Morse no desplazado, es equivalente a considerar la función de onda vibracional no desplazada cuya evolución ocurre en un nuevo potencial desplazado. Ambas opciones representan al mismo estado desplazado que hemos propuesto como estado coherente. Por convención utilizamos el estado de la ecuación 5.52. Entonces la expresión 5.51 se reduce a

$$\zeta_{N,v}^\pm = \frac{C_{N,v'}^\pm C_{N,0}^\pm}{\beta} \sum_{n=0}^{v'} \frac{(-1)^n (2N - v')! \Gamma(2N - v' + n) u^N}{(v' - n)! (2N - 2v' + n)! n!} \left(\frac{2}{1+u}\right)^{2N-v'+n}. \quad (5.53)$$

Cálculos explícitos [52] muestran que para desplazamientos reales $b \sim -0,4\beta^{-1}$ y $N = 14$ (adecuado por ejemplo para la molécula H_2) la representación del estado base vibracional del potencial de Morse en términos de los estados del nuevo potencial requiere las correcciones asociadas a estados del continuo .

Los *FFC* para los estados en el continuo del potencial de Morse tomando como estado inicial el estado base del mismo desplazado por una cantidad b expresado en la Ec 5.52 requieren evaluar la integral

$$\begin{aligned} \langle E | N, 0 \rangle_b &= C_{N0} C_E \exp(\mp N\beta b) \int_0^\infty \frac{dz}{z} \exp\left(-\frac{z \exp(\mp\beta b)}{2}\right) \\ &\quad \{ A(\varepsilon) {}_1F_1(-N + i\varepsilon, 2i\varepsilon + 1; z) z^{N+i\varepsilon} + c.c. \}, \end{aligned} \quad (5.54)$$

que calculamos con la fórmula [53, 55]

$$\int_0^\infty \frac{dz}{z} z^\rho \exp(-sz) {}_1F_1(a, b; pz) = s^{-\rho} \Gamma(\rho) {}_2F_1\left(a, \rho; b; \frac{p}{s}\right). \quad (5.55)$$

Por lo tanto la integral expresada en la Eq. 5.54 es

$$\begin{aligned} \zeta_{N,E}^{\pm} &= \langle E | N, 0 \rangle_b = C_{N0} C_E \exp(\mp N \beta b) \\ &\left\{ \frac{\Gamma(-2i\varepsilon)}{\Gamma(-N - i\varepsilon)} \Gamma(N + i\varepsilon) x^{N+i\varepsilon} F_{21}(-N + i\varepsilon, N + i\varepsilon; 2i\varepsilon + 1; x) \right. \\ &\left. + \frac{\Gamma(2i\varepsilon)}{\Gamma(-N + i\varepsilon)} \Gamma(N - i\varepsilon) x^{N-i\varepsilon} F_{21}(-N - i\varepsilon, N - i\varepsilon; -2i\varepsilon + 1; x) \right\}, \end{aligned} \quad (5.56)$$

donde $x = \left(\frac{2}{1 + \exp(\mp \beta b)} \right)$. Utilizando la definición para las funciones hipergeométricas [54], este último resultado se reescribe

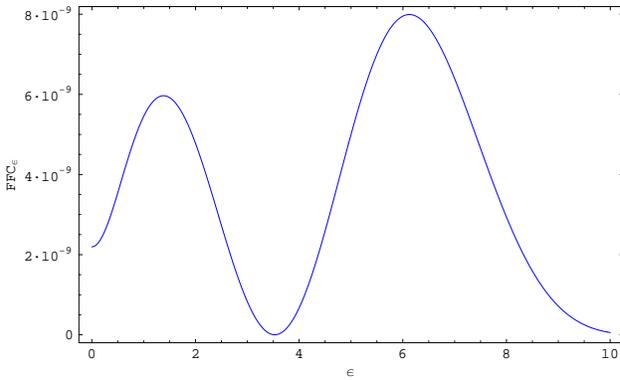
$$\begin{aligned} C_{N0} C_E 2i\varepsilon \exp(\mp N \beta b) \left| \frac{\Gamma(2i\varepsilon)}{\Gamma(-N + i\varepsilon)} \right|^2 \\ \left\{ x^{N+i\varepsilon} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k - N + i\varepsilon) \Gamma(k + N + i\varepsilon)}{\Gamma(1 + k + 2i\varepsilon) \Gamma(k + 1)} x^k \right. \\ \left. - x^{N-i\varepsilon} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k - N - i\varepsilon) \Gamma(k + N - i\varepsilon)}{\Gamma(1 + k - 2i\varepsilon) \Gamma(k + 1)} x^k \right\} \end{aligned} \quad (5.57)$$

La integral de traslape, en la escala de ε , es

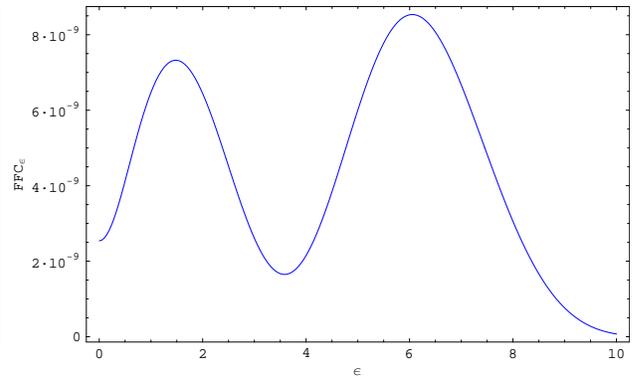
$$\begin{aligned} \zeta_{N,\varepsilon}^{\pm} &= \frac{i\varepsilon}{\sqrt{2\pi\Gamma(2N)}} \exp(\mp N \beta b) \left| \frac{\Gamma(2i\varepsilon)}{\Gamma(-N + i\varepsilon)} \right| \\ &\left\{ x^{N+i\varepsilon} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k - N + i\varepsilon) \Gamma(k + N + i\varepsilon)}{\Gamma(1 + k + 2i\varepsilon) \Gamma(k + 1)} x^k \right. \\ &\left. - x^{N-i\varepsilon} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k - N - i\varepsilon) \Gamma(k + N - i\varepsilon)}{\Gamma(1 + k - 2i\varepsilon) \Gamma(k + 1)} x^k \right\}. \end{aligned} \quad (5.58)$$

Es evidente que los *FFC* del espectro continuo, expresados en las series anteriores, tienen valores divergentes para desplazamientos positivos ($b > 0$).

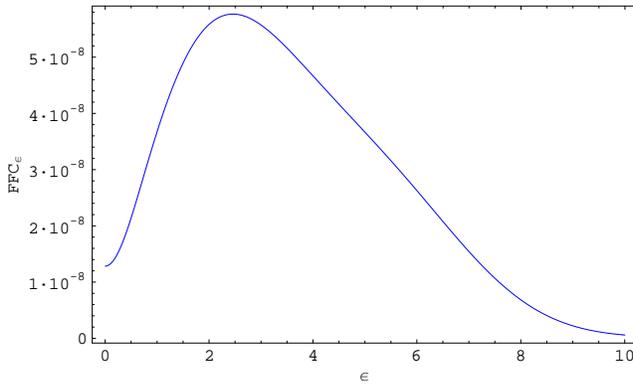
A continuación presentamos algunas gráficas relacionadas con estos coeficientes. Primero mostramos diversos *FFC* de las funciones continuas para distintos desplazamientos. Después reproducimos la función de onda vibracional desplazada en términos de las funciones del espectro completo del mismo potencial de Morse sin desplazar. Finalmente, presentamos el comportamiento del parámetro x en función de un desplazamiento imaginario.



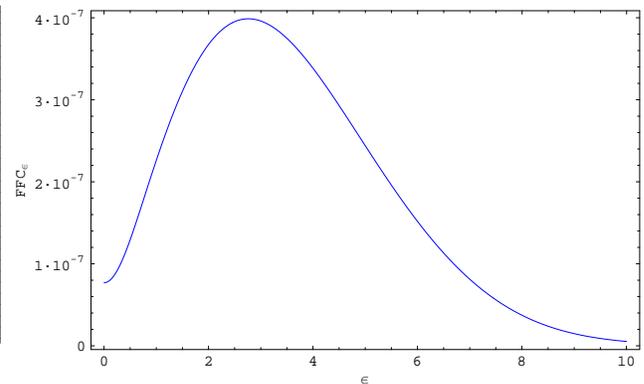
(i)



(ii)

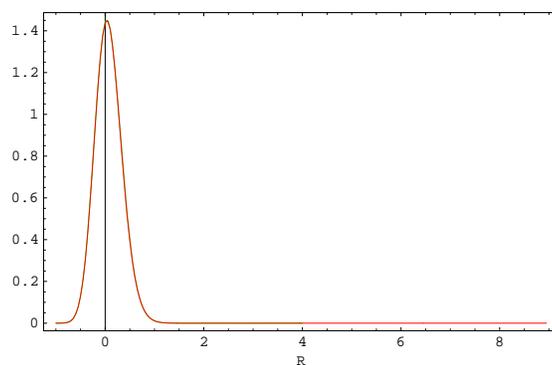


(iii)

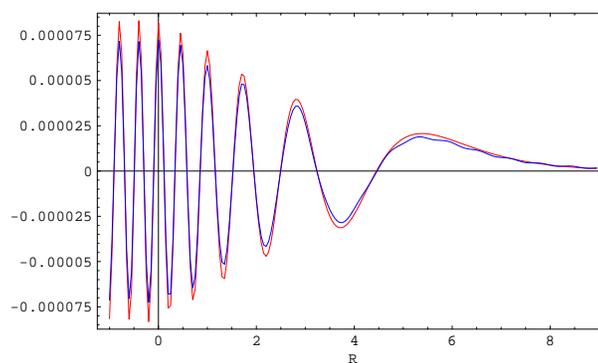


(iv)

Figura 5.2: Gráficas de los FFC para los estados de dispersión en función de ε , y diversos desplazamientos: i) $b = -0,4\beta^{-1}$, ii) $b = (-0,4 + 0,01i)\beta^{-1}$, iii) $b = (-0,4 + 0,05i)\beta^{-1}$ y $b = (-0,4 + 0,1i)\beta^{-1}$.

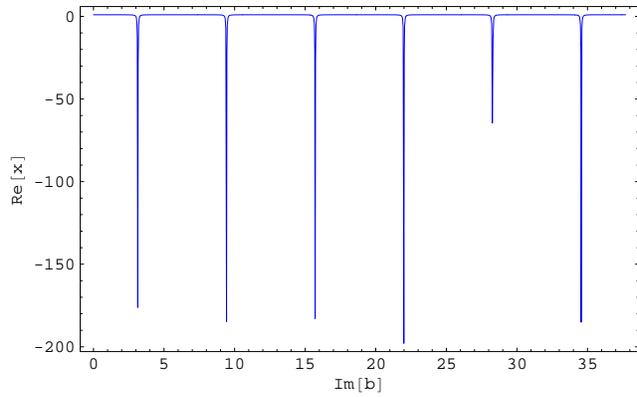


(i)

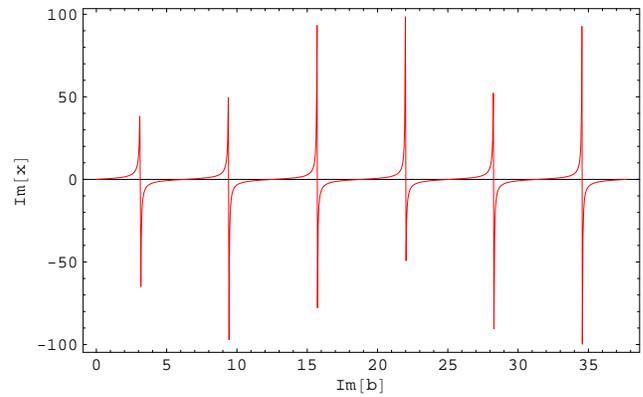


(ii)

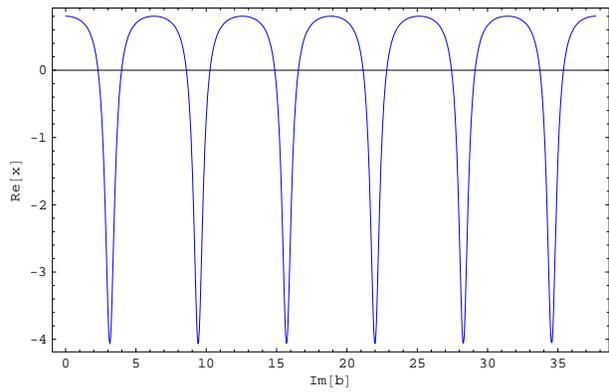
Figura 5.3: Gráficas relacionadas con la función de onda vibracional desplazada ($b = -0,4\beta^{-1}$):
 i) Superposición de la función de onda desplazada (línea verde) y la contribución de las eigenfunciones del espectro discreto del potencial de Morse sin desplazar (línea roja), y ii) Superposición de la diferencia (línea roja) entre la gráficas anteriores y la contribución de las eigenfunciones del espectro continuo del potencial de Morse sin desplazar (línea azul).



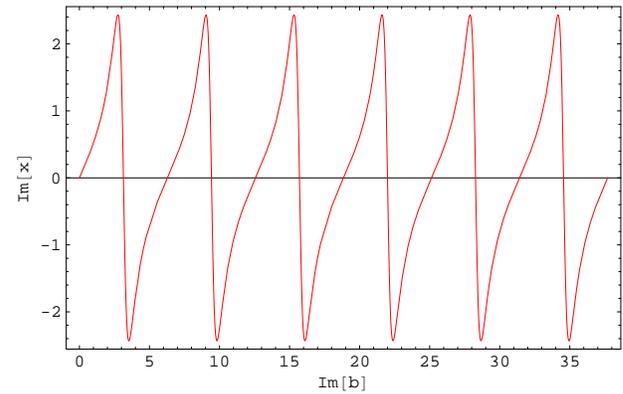
(i)



(ii)



(iii)



(iv)

Figura 5.4: Gráficas del comportamiento del factor x en términos de la parte imaginaria de b .

En i y ii consideramos $Re[b] = -0,01\beta^{-1}$, mientras que en iii y iv $Re[b] = -0,4\beta^{-1}$.

Comparación de los estados desplazados y los estados coherentes de Nieto-Simmons

Los coeficientes de Franck Condon que obtuvimos anteriormente están calculados en términos de un desplazamiento de la función vibracional base. Estos coeficientes, como ya mencionamos, son los mismos -aunque con diferente expresión- que los que resultan de proyectar la función base vibracional en términos de las eigenfunciones de un potencial de Morse desplazado, cuyo cálculo explícito es, en el caso discreto, el siguiente:

$$\zeta_{N,v}^{\pm} = \frac{C_{N,v'}^{\pm} C_{N,0}^{\pm}}{\beta} \sum_{n=0}^{v'} \frac{(-1)^n (2N - v')! \Gamma(2N - v' + n) u^{N-v'+n}}{(v' - n)! (2N - 2v' + n)! n!} \left(\frac{2}{1+u} \right)^{2N-v'+n}. \quad (5.59)$$

Estos coeficientes son los mismos coeficientes de la construcción de estados coherentes para el potencial de Morse hecha por Nieto y Simmons, que volvemos a escribir:

$$O(n, C, \lambda) = \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j}{j!} \binom{2\lambda - n - 1}{n - j} \left(\frac{2}{1 + C/\lambda} \right)^{N-n+j} \Gamma(2\lambda - n - 1 + j). \quad (5.60)$$

Así, hemos mostrado que la propuesta de estados coherentes como estados desplazados para el potencial de Morse coinciden tanto con la construcción de Nieto como con la de Benedict y Molnár en la parte discreta.

5.2.2. Estados coherentes para el potencial de Morse en el formalismo de Gazeau-Klauder

Dentro del formalismo de Gazeau-Klauder, proponemos la definición de estado coherente para el potencial de Morse como

$$\begin{aligned} |J, \gamma\rangle &= a_1(J) \sum_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{\Gamma(2N - n) J^n}{n! \chi^n \Gamma(2N)}} \exp(-ie_n \gamma) |n\rangle \\ &+ a_2(J) \exp(-i\phi) \int_0^{\infty} \frac{1}{f(E)} \exp(-iE\gamma) |E\rangle dE. \end{aligned} \quad (5.61)$$

Como mencionamos en la subsección 4.1.3., la construcción de Gazeau-Klauder para el espectro discreto-continuo no es completa dentro de sus requerimientos. Sin embargo, esta propuesta

que hacemos tiene como base su trabajo, pero con ligeras diferencias. La continuidad del estado coherente expresado en la Eq. 5.61 está garantizada, ya que es la suma de dos tipos de estados, discretos y continuos, que se encuentran en subespacio diferentes en los cuales son continuos. Hemos mantenido el mismo parámetro de acción J en ambos términos, con el propósito de obtener explícitamente la identidad de acción. Las constantes $a_1(J)$ y $a_2(J)$ no son más que las funciones escalares (que ya no dependen de γ) por determinar en la Eq. 4.33. El cálculo explícito de las constantes $a_1(J)$ y $a_2(J)$ están en el apéndice C, y se obtienen de la normalización del estado coherente y de la identidad de acción, es decir,

$$\langle J, \gamma | J, \gamma \rangle = 1, \quad (5.62)$$

$$\langle J, \gamma | H | J, \gamma \rangle = J\hbar\omega. \quad (5.63)$$

Mantenemos la fase ϕ propuesta por Gazeau y Klauder, para eliminar elementos matriciales no diagonales. Y ahora justificaremos los factores involucrados tanto en la suma de estados discretos como en la integral de estados continuos. Es evidente que partimos del estado coherente aproximado que ya determinamos en 5.1.1. A éste le incorporamos el continuo de la siguiente manera.

En el estado coherente de la Ec. 5.6, hacemos una identificación de $n \rightarrow N - i\varepsilon$, en los términos de la suma excepto en el factor exponencial, de tal forma que el estado coherente manifieste estabilidad temporal. En la integral de la Ec. 5.61 aparece una función que se puede determinar a partir de los coeficientes de Franck-Condon que calculamos anteriormente, con la misma identificación $n \rightarrow N - i\varepsilon$. Así, identificamos a la función $f(E)$

$$\frac{1}{f(E)} = \frac{1}{f(\varepsilon)} \sqrt{\frac{dE}{dk}}, \quad \text{con } \varepsilon = \sqrt{2\mu E}/\beta\hbar = \frac{k}{\beta}, \quad (5.64)$$

y donde

$$\frac{1}{f(\varepsilon)} = \frac{(-1)^N \Gamma(N + 1 - i\varepsilon)}{2 \cosh(\pi\varepsilon)} \sqrt{\frac{\Gamma(N + i\varepsilon) J^{N-i\varepsilon}}{\Gamma(N + 1 - i\varepsilon) \chi^{N-i\varepsilon} \Gamma(2N)}}. \quad (5.65)$$

En este caso, $s = J$, pero el término en la integral, evidentemente, no es J^E sino $J^{N-i\varepsilon}$.

La constante γ garantiza la estabilidad temporal.

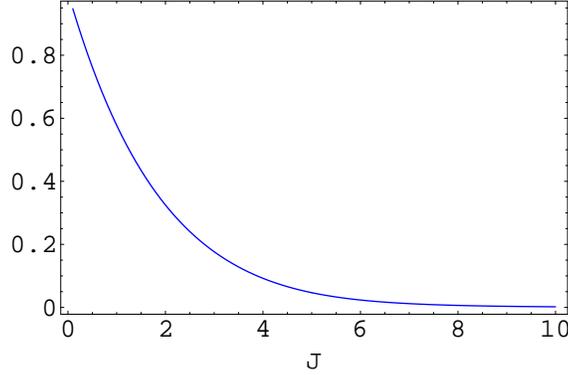


Figura 5.5: Comportamiento de $|a_1(J)|$ en función de J .

Ahora sólo definimos los coeficientes de Gazeau-Klauder, los cuales sólo nos dan el peso de cada estado vibracional y de dispersión en el estado coherente, como

$$\zeta_{N,n}^{GK} = \sqrt{\frac{\Gamma(2N-n)J^n}{n!\chi^n\Gamma(2N)}} \exp(-i\gamma e_n), \quad (5.66)$$

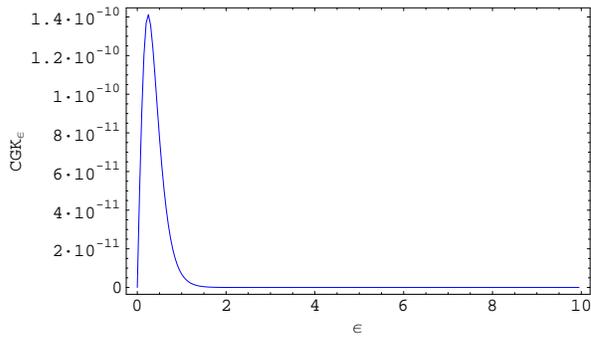
$$\zeta_{N,E}^{GK} = \frac{1}{f(E)} \exp(-iE\gamma). \quad (5.67)$$

En las gráficas siguientes vemos el comportamiento del módulo al cuadrado de los coeficientes anteriores para los estados continuos en función de ε , para cuatro diferentes J . Esto es

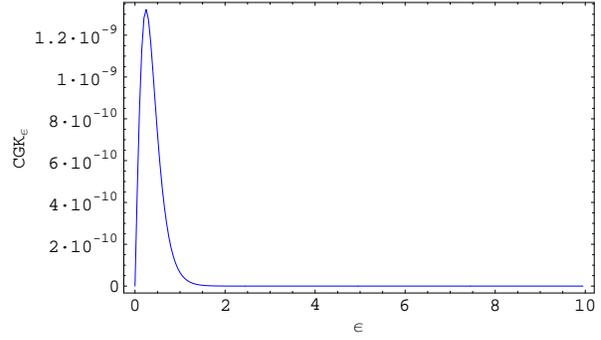
$$CGK_\varepsilon = |\zeta_{N,\varepsilon}^{GK}|^2. \quad (5.68)$$

En todas ellas el comportamiento es similar, aunque por supuesto para J mayores los coeficientes tienen valores más significativos. Esto último es obvio, ya que estamos en un régimen donde el espectro continuo juega un papel más relevante.

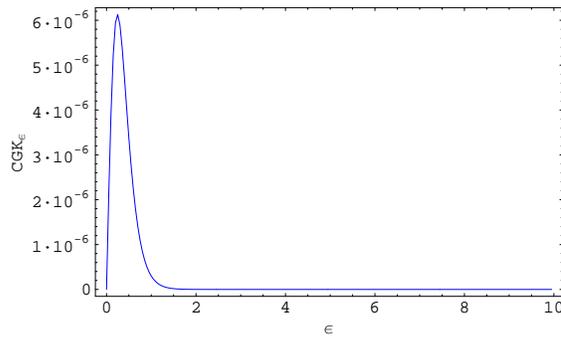
Aunque estos coeficientes no tiene un significado físico salvo el que mencionamos -peso de las eigenfunciones- notamos que la incorporación de los estados del continuo en la construcción de Gazeau-Klauder es significativamente diferente a la que surge de los estados desplazados.



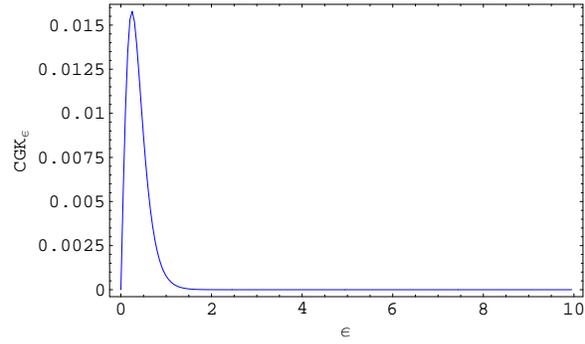
(i)



(ii)



(iii)



(iv)

Figura 5.6: Gráficas de los CGK_ϵ para i) $J = 0,01$, ii) $J = 0,5$, iii) $J = 1$ y iv) $J = 2$.

5.2.3. Evolución en el espacio de fase y dispersiones de los estados coherentes de Morse

Una vez que hemos hecho la construcción de estados coherentes moleculares para el potencial de Morse incorporando el espectro continuo, en dos formalismos distintos, es necesario estudiar sus propiedades. Con esto nos referimos a la evolución en el espacio fase de los valores medios de la posición y el momento, así como también a la evolución temporal de sus dispersiones. En primer lugar, debemos comparar con el caso armónico, en el cual la evolución en el espacio fase ocurre en una elipse cerrada, y se trata de estados de mínima dispersión. Sabemos que no es el caso del potencial de Morse; sin embargo, queremos saber qué tanto se parece. Nos interesa, asimismo, ver de qué manera influye la incorporación del continuo en nuestros estados y estudiar casos límites. Por último, también es importante el estudio comparativo de las dos construcciones que hicimos.

Estados desplazados de Morse

A partir de la definición del estado desplazado de Morse (EDM) como estado coherente, el valor esperado de un operador cuántico \hat{O} es

$$\begin{aligned}
{}_{EDM} \langle N, b | \hat{O} | N, b \rangle_{EDM} &= \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} \zeta_{N,m}^{*\pm} \zeta_{N,n}^{\pm} \exp\left(i\frac{\epsilon_m t}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{\epsilon_n t}{\hbar}\right) \langle m | \hat{O} | n \rangle \\
&+ \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \zeta_{N,E_1}^{*\pm} \zeta_{N,E_2}^{\pm} \exp\left(i\frac{E_1 t}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{E_2 t}{\hbar}\right) \langle E_1 | \hat{O} | E_2 \rangle dE_1 dE_2 \\
&+ 2Re \left[\sum_{n=0}^{N-1} \int_0^{\infty} \zeta_{N,E}^{*\pm} \zeta_{N,n}^{\pm} \exp\left(i\frac{Et}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{\epsilon_n t}{\hbar}\right) \langle E | \hat{O} | n \rangle dE \right]
\end{aligned} \tag{5.69}$$

Los operadores que nos interesan son el valor medio de la diferencia entre la posición y la posición de equilibrio $R - R_0$, el momento esperado p , valor cuadrático medio de la diferencia entre la posición y la posición de equilibrio $(R - R_0)^2$ y el momento cuadrático medio p^2 . Los

elementos de matriz para estos operadores están dados en el apéndice B.

El modelo de estados desplazados es aplicable en un intervalo de desplazamientos alrededor de $-0,4\beta^{-1}$ para el caso real. De hecho, un desplazamiento de $-\beta^{-1}$ ya no es físico. Si hay desplazamientos con parte imaginaria, ésta debe estar alrededor de 0.1 (en unidades naturales). Una vez incorporando el continuo, los valores esperados se mantienen dentro de la misma región, pero con trayectorias algo distintas. En el caso de desplazamientos con parte imaginaria, tomando 0.1 como máximo, la trayectoria en el espacio fase es muy diferente, y la región aumenta. Las dispersiones aumentan mucho si los desplazamientos no son puramente reales.

En todas nuestras gráficas de dispersiones y evolución en el espacio fase de los valores esperados $\langle X(t) \rangle$ y $P \langle(t)\rangle$, las curvas rojas se refieren al estado coherente que incorpora tanto el espectro discreto como el continuo, y las curvas azules son las del estado coherente que sólo utiliza el espectro discreto.

En todas las construcciones de Gazeau-Klauder hemos utilizado los siguientes valores para las dos fases involucradas: $\phi = 0$ y $\gamma = 1$. Asimismo, la unidad de longitud corresponde a la unidad natural del potencial de Morse, es decir, $[L] = \beta^{-1}$. Tomamos como unidad de masa dos veces la masa reducida del sistema, $[M] = 2\mu_R$. Y, finalmente, el valor de la constante de Planck para en nuestros cálculos numéricos es

$$\hbar = \frac{1,054}{16,7076}, \quad (5.70)$$

lo que implica que la escala de tiempo es

$$[T] = \left[\frac{2\mu_R}{m_p} \right] \left[\frac{\beta^{-2}}{(1\text{\AA})^2} \right] 10^{-14} s, \quad (5.71)$$

donde m_p es la masa del protón. Para el caso de la molécula de hidrógeno,

$$[T] \sim 10^{-14} s, \quad (5.72)$$

lo que en nuestros cálculos significa decenas de *femtosegundos*.

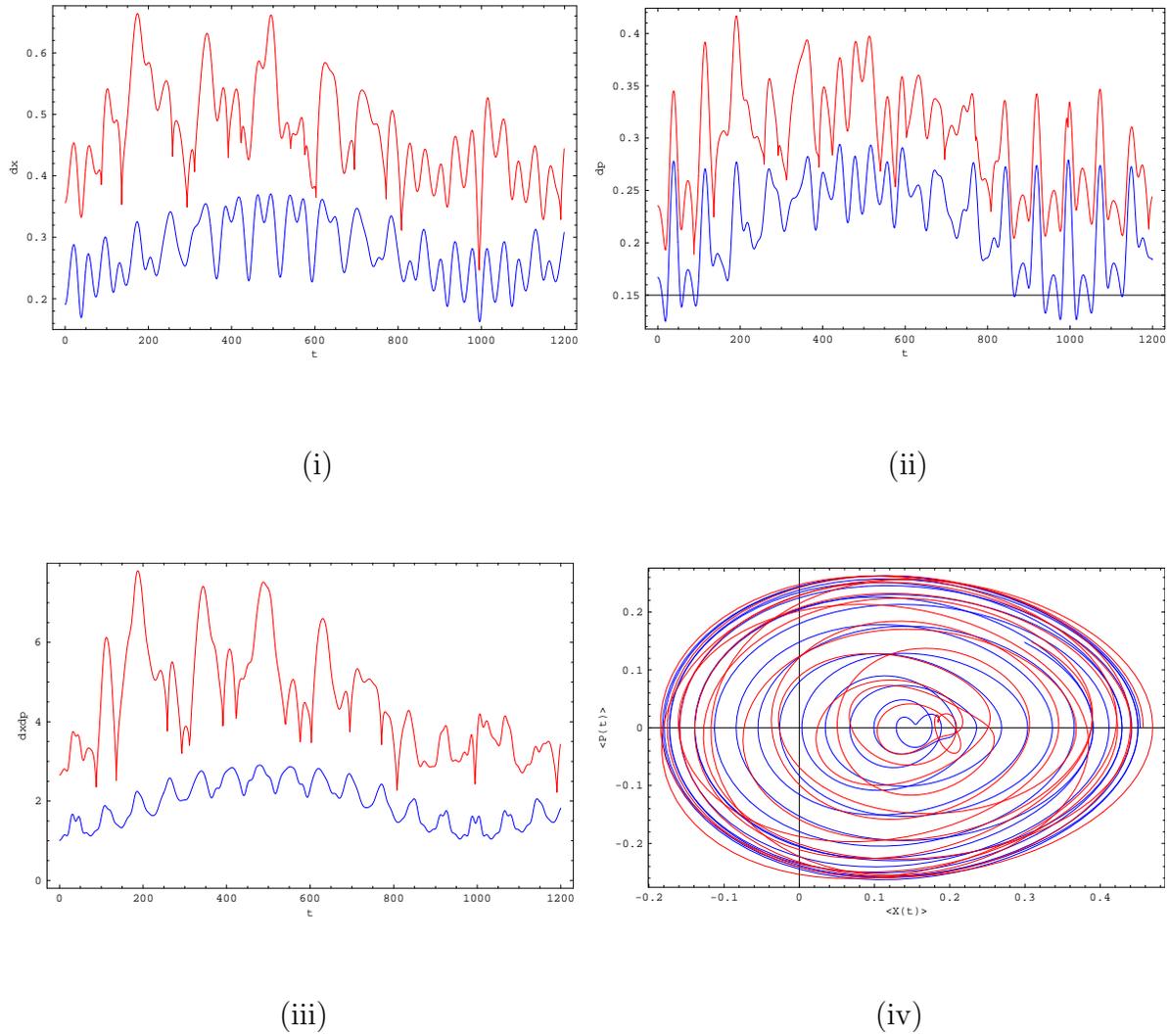
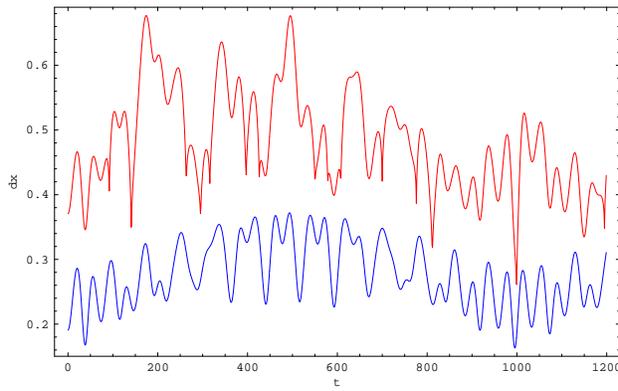
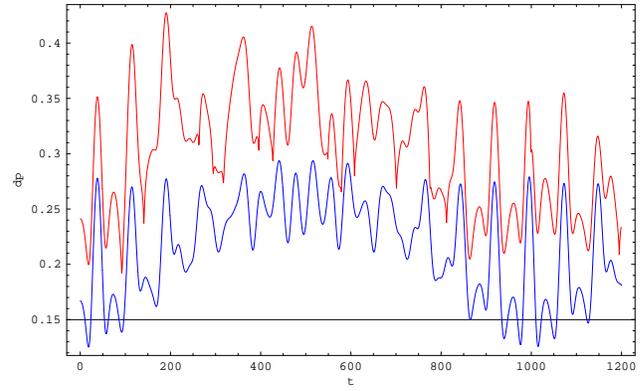


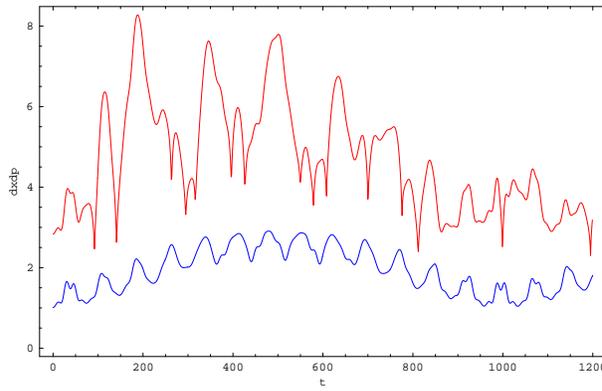
Figura 5.7: Gráficas de la evolución temporal en las dispersiones dx , dp y su producto, $dx dp / (\hbar/2)$, así como de la evolución de los valores esperados $\langle X(t) \rangle$ y $\langle P(t) \rangle$, con un desplazamiento $b = -0,4\beta$.



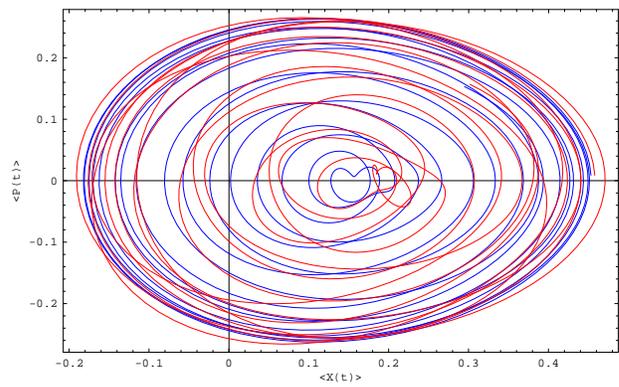
(i)



(ii)



(iii)



(iv)

Figura 5.8: Gráficas de la evolución temporal en las dispersiones dx , dp y su producto, $dx dp / (\hbar/2)$, así como de la evolución de los valores esperados $\langle X(t) \rangle$ y $\langle P(t) \rangle$, con un desplazamiento $b = -0,4\beta + 0,01i$.

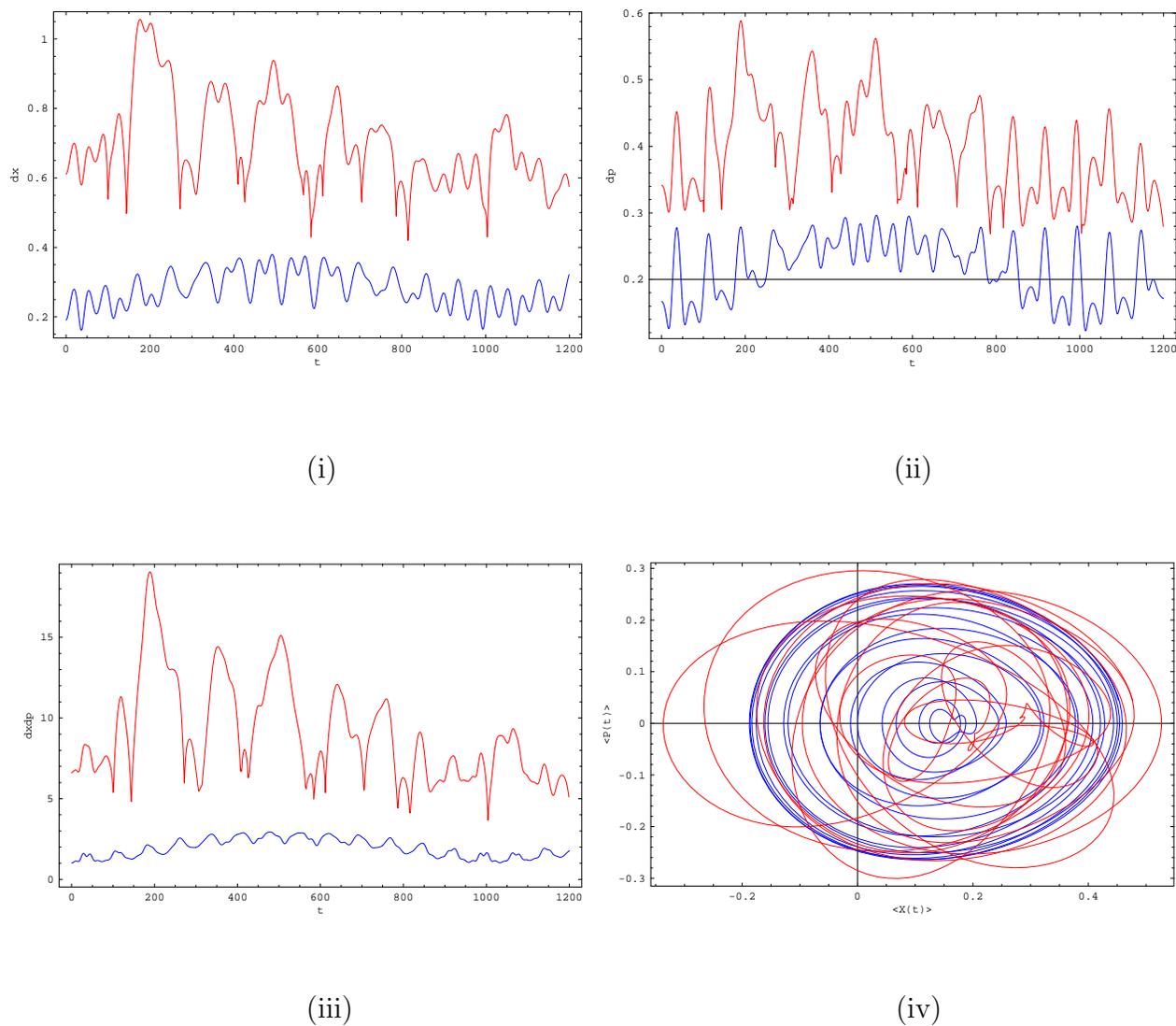
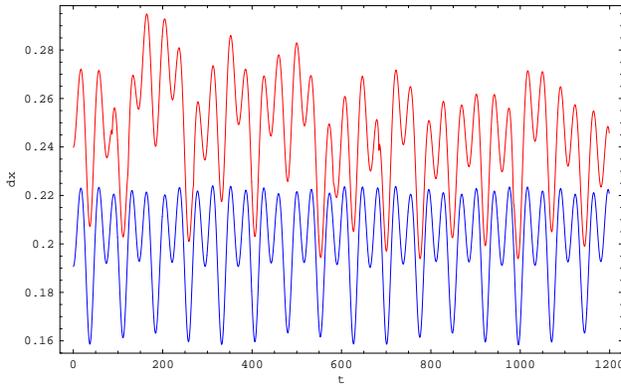
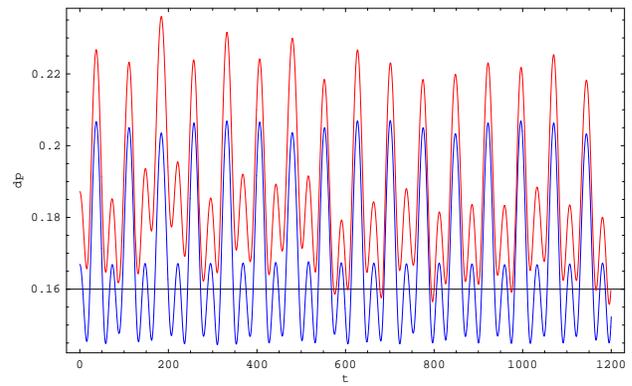


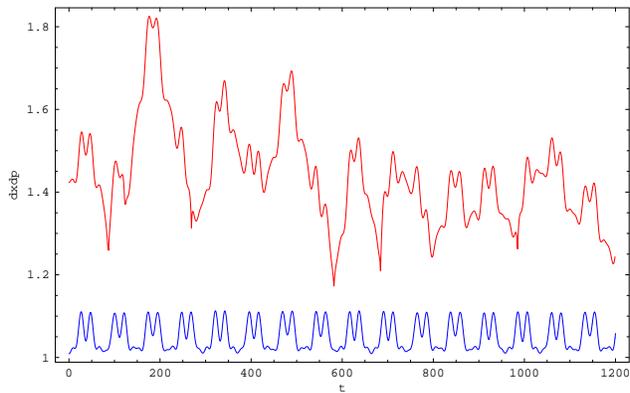
Figura 5.9: Gráficas de la evolución temporal en las dispersiones dx , dp y su producto, $dx dp / (\hbar/2)$, así como de la evolución de los valores esperados $\langle X(t) \rangle$ y $\langle P(t) \rangle$, con un desplazamiento $b = -0,4\beta + 0,05i$.



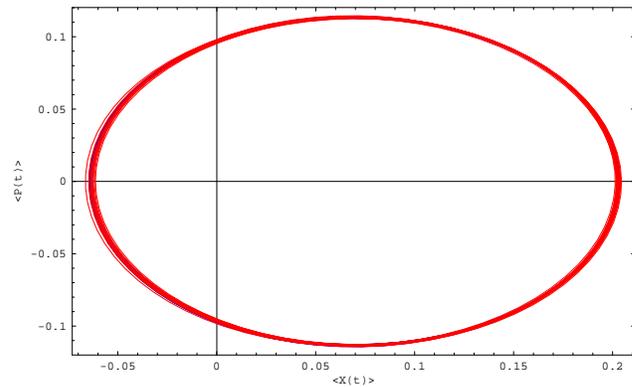
(i)



(ii)

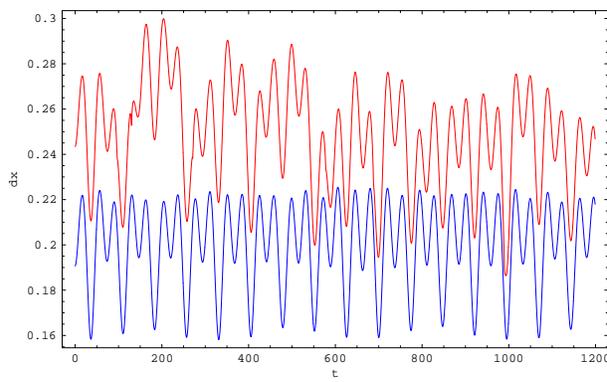


(iii)

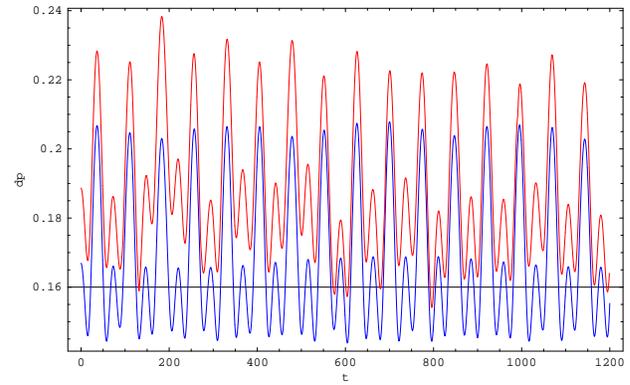


(iv)

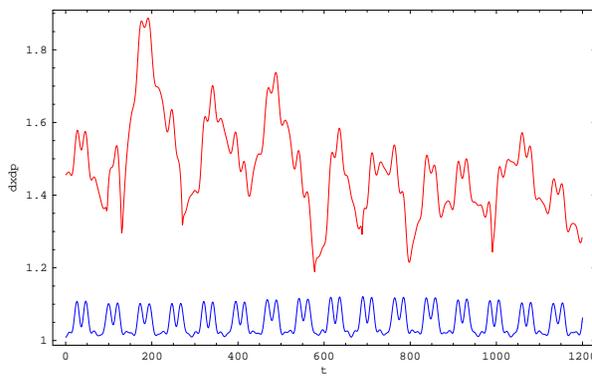
Figura 5.10: Gráficas de la evolución temporal en las dispersiones dx , dp y su producto, $dx dp / (\hbar/2)$, así como de la evolución de los valores esperados $\langle X(t) \rangle$ y $\langle P(t) \rangle$, con un desplazamiento $b = -0,15\beta$.



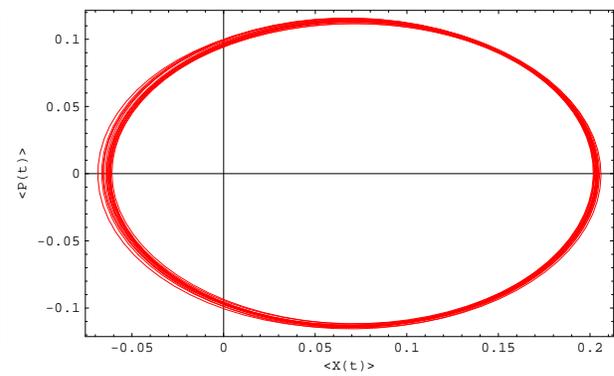
(i)



(ii)



(iii)



(iv)

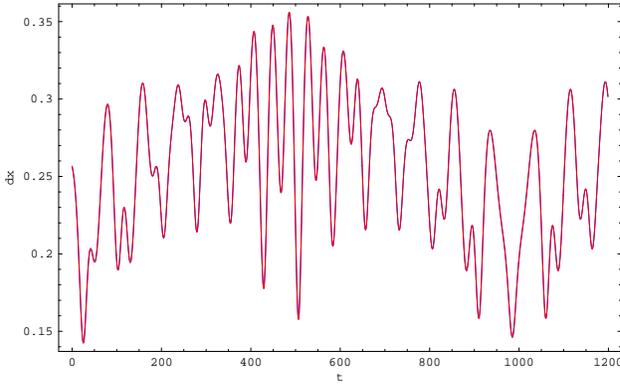
Figura 5.11: Gráficas de la evolución temporal en las dispersiones dx , dp y su producto, $dx dp / (\hbar/2)$, así como de la evolución de los valores esperados $\langle X(t) \rangle$ y $\langle P(t) \rangle$, con un desplazamiento $b = -0,15\beta + 0,01i$.

Estados coherentes en el formalismo Gazeau-Klauder

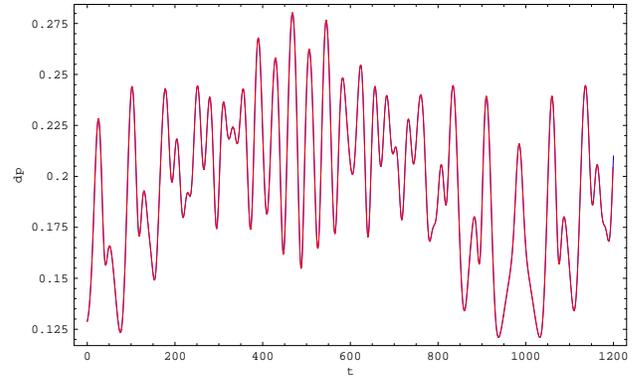
De manera análoga a la que procedimos con los estados desplazados, ahora hacemos los mismos cálculos para el estado coherente en el formalismo de Gazeau-Klauder. Entonces el valor esperado de un operador cuántico \hat{O} es

$$\begin{aligned}
{}_{GK} \langle J, \gamma | \hat{O} | J, \gamma \rangle_{GK} &= |a_1(J)|^2 \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} \zeta_{N,m}^{*GK} \zeta_{N,n}^{GK} \exp\left(i\frac{\epsilon_m t}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{\epsilon_n t}{\hbar}\right) \langle m | \hat{O} | n \rangle \\
&+ |a_2(J)|^2 \int_0^\infty \int_0^\infty \zeta_{N,E_1}^{*GK} \zeta_{N,E_2}^{GK} \exp\left(i\frac{E_1 t}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{E_2 t}{\hbar}\right) \langle E_1 | \hat{O} | E_2 \rangle dE_1 dE_2 \\
&+ 2Re \left[a_2^*(J) a_1(J) \sum_{n=0}^{N-1} \int_0^\infty \zeta_{N,E}^{*GK} \zeta_{N,n}^{GK} \exp\left(i\frac{Et}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{\epsilon_n t}{\hbar}\right) \langle E | \hat{O} | n \rangle dE \right],
\end{aligned} \tag{5.73}$$

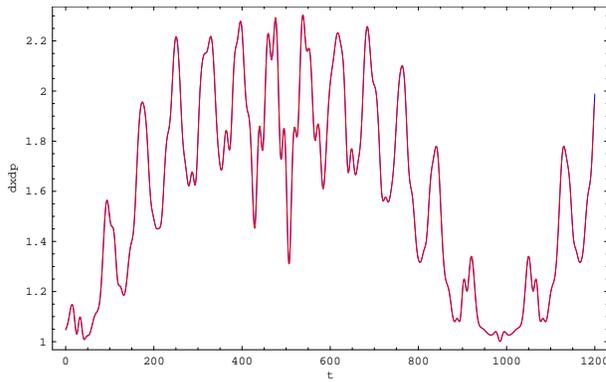
En la construcción de Gazeau-Klauder el análogo al desplazamiento en los estados desplazados es el parámetro J , relacionado con la acción. Sin embargo, la $f(E)$ propuesta tiene un comportamiento distinto a los *CFC*. Por el propio comportamiento de la $a_1(J)$ nos interesan estados coherentes de Gazeau-Klauder alrededor de $J = 2$. Este último caso, que es más interesante que $J = 1$ porque en éste último no hay cambios muy significativos del estado coherente –aunque sí visibles–, mantiene las formas de las dispersiones, pero aumentándolas de manera análoga al estado desplazado con $b = -0,4\beta$. Aunque una diferencia importante es que el área del espacio fase de un estado de GK, con $J = 2$, es aproximadamente 4 veces mayor a un estado desplazado $b = -0,4\beta$.



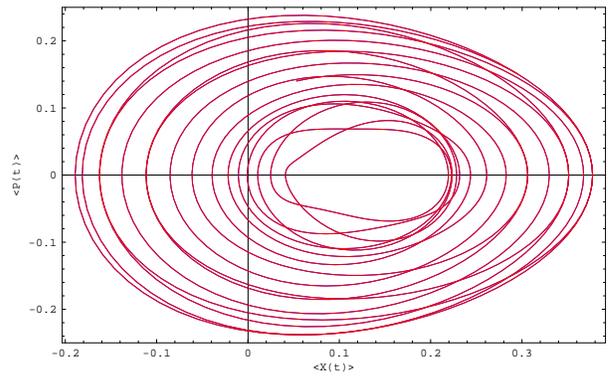
(i)



(ii)

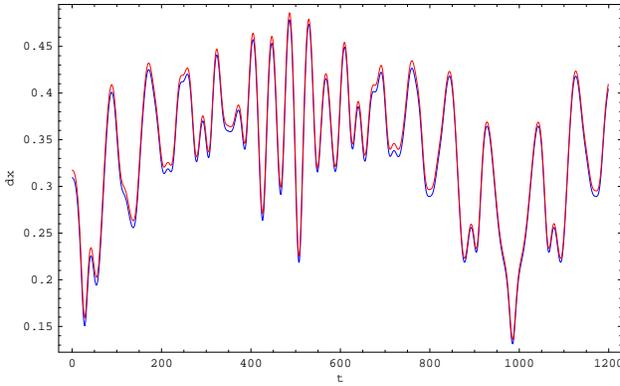


(iii)

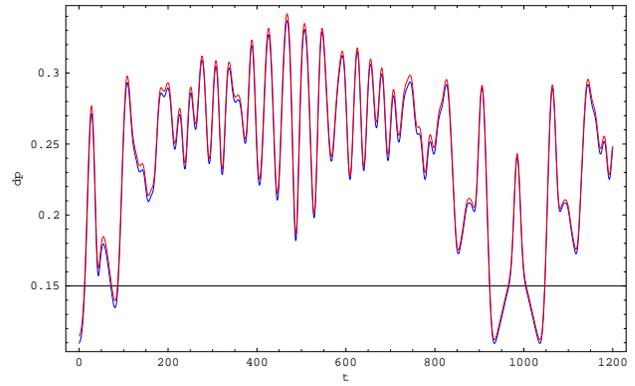


(iv)

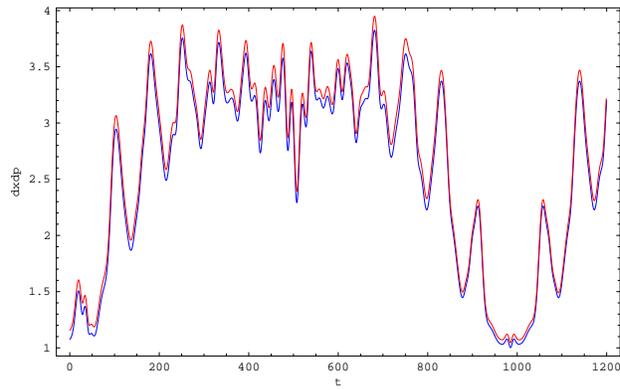
Figura 5.12: Gráficas de la evolución temporal en las dispersiones dx , dp y su producto, $dx dp / (\hbar/2)$, y de la evolución de los valores esperados $\langle X(t) \rangle$ y $\langle P(t) \rangle$, para $J = 0,5$.



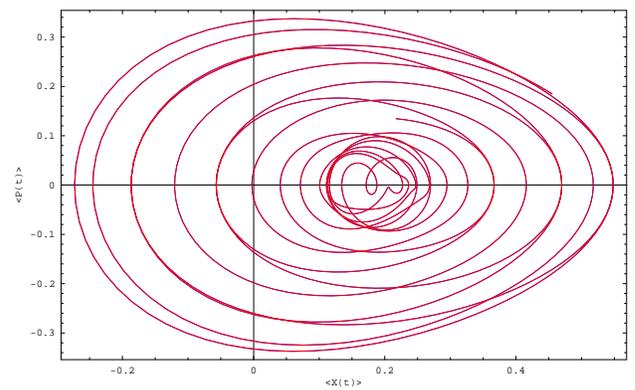
(i)



(ii)

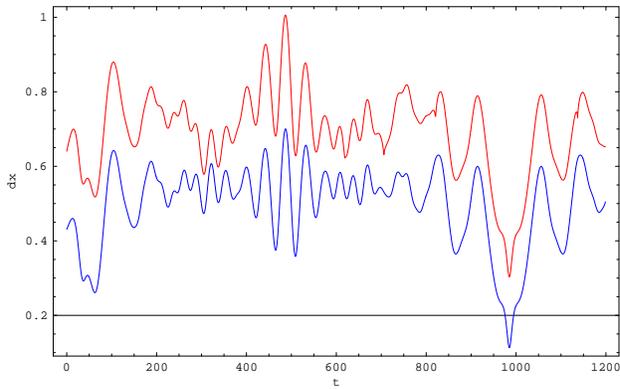


(iii)

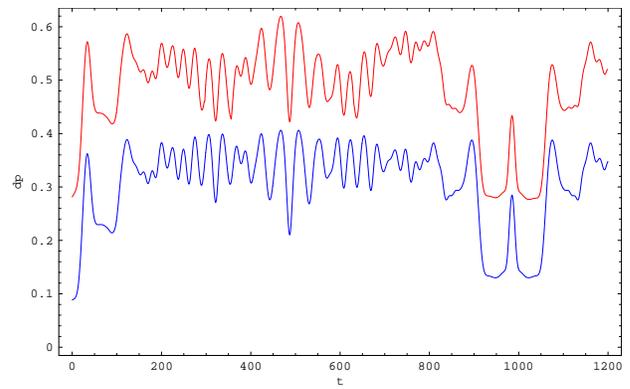


(iv)

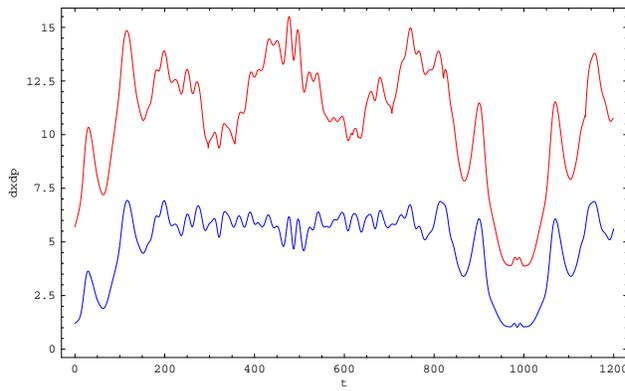
Figura 5.13: Gráficas de la evolución temporal en las dispersiones dx , dp y su producto, $dx dp / (\hbar/2)$, y de la evolución de los valores esperados $\langle X(t) \rangle$ y $\langle P(t) \rangle$, para $J = 1$.



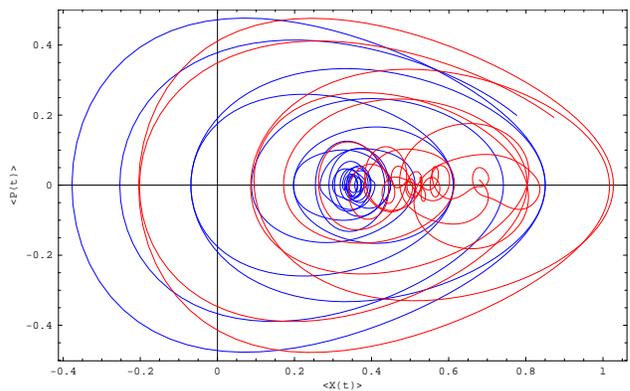
(i)



(ii)

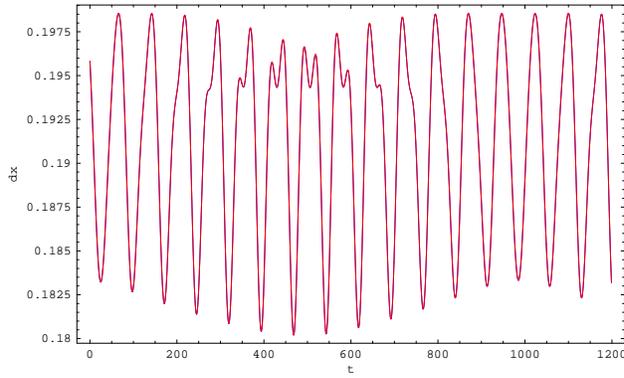


(iii)

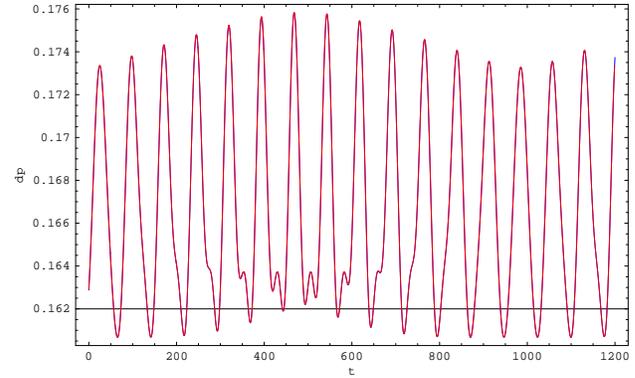


(iv)

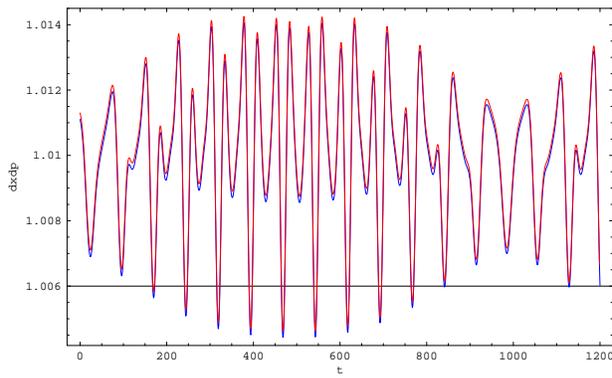
Figura 5.14: Gráficas de la evolución temporal en las dispersiones dx , dp y su producto, $dx dp / (\hbar/2)$, y de la evolución de los valores esperados $\langle X(t) \rangle$ y $\langle P(t) \rangle$, para $J = 2$.



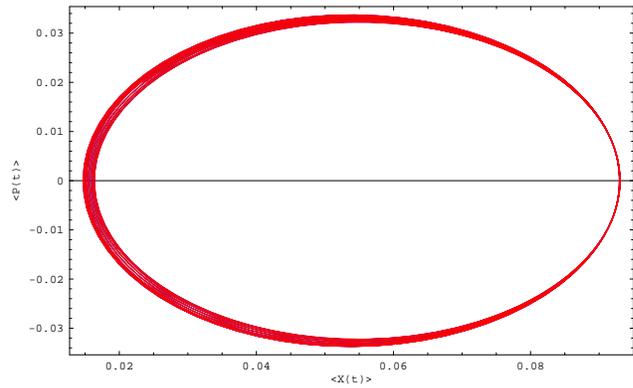
(i)



(ii)



(iii)



(iv)

Figura 5.15: Gráficas de la evolución temporal en las dispersiones dx , dp y su producto, $dx dp / (\hbar/2)$, y de la evolución de los valores esperados $\langle X(t) \rangle$ y $\langle P(t) \rangle$, para $J = 0,01$.

Capítulo 6

Conclusiones

Hemos construido dos generalizaciones de estados coherentes para el potencial de Morse incluyendo tanto el conjunto de eigenfunciones del espectro discreto, lo que ya ha sido ampliamente explorado en la literatura, como el conjunto de eigenfunciones del espectro continuo.

Los estados desplazados de Morse, que son paquetes moleculares generados a través de transiciones de Franck Condon, son tan completos como el conjunto de eigenfunciones del potencial de Morse, y son viables, dentro de ciertos intervalos en sus parámetros, teórica y experimentalmente. La incorporación de las eigenfunciones del espectro continuo, que es en principio una mejor construcción teórica, nos permite concluir que los desplazamientos a realizar deben ser en la dirección adecuada, es decir, en aquella donde el modelo de potencial tiene significado físico y representa un sistema molecular. Por otra parte, al considerar desplazamientos imaginarios, lo que no es otra cosa que cambio en el momento, también encontramos un intervalo de validez del modelo. De hecho, estos estados coherentes desplazados presentan resonancias a determinados cambios en el momento -desplazamientos imaginarios-, cuando éstas son múltiplos impares de π (en las unidades que utilizamos). La estabilidad temporal de los estos estados coherentes moleculares no es evidente, sin embargo, su trayectoria en el espacio fase se mantiene en una zona definida del mismo. Los casos estudiados de estados desplazados no presentan compresión

(*squeezing*).

La construcción de Gazeau-Klauder que hicimos es fundamentalmente teórica; no es clara su viabilidad experimental. Sin embargo, la incorporación del continuo también presenta intervalos de validez y mejoran la construcción puramente discreta. Es claro que esta construcción tiene en lo fundamental las características del caso armónico. La traducción de estos estados a un sistema físico real se encuentra en el parámetro J , el cual está relacionado con la acción. Hay, sin embargo, una diferencia entre el caso armónico y estos estados de Gazeau-Klauder. Estos últimos, por construcción, cumplen una identidad que es, en el caso armónico, la de acción. Empero para el potencial de Morse la acción no es precisamente el parámetro J de la construcción, sino un parámetro I bien definido que diverge para la incorporación de las eigenfunciones del espectro continuo. Es decir,

$$J \neq I. \quad (6.1)$$

Esto último lo vemos más claramente a través del hamiltoniano. En el caso armónico, para la base de estados coherentes, el hamiltoniano se puede expresar en términos del parámetro J que sí representa la acción como

$$H = J, \quad J = |\alpha|^2; \quad (6.2)$$

pero para el potencial de Morse el hamiltoniano no depende lineal sino cuadráticamente de la acción. A diferencia de los estados desplazados, los estados coherentes de Gazeau-Klauder sí presentan compresión (*squeezing*) en todos los casos estudiados aquí.

La incorporación de las eigenfunciones del espectro continuo del potencial es una mejora muy significativa a las construcciones reportadas en la literatura, incluyendo a la que se hace a través de SUSY. Además, estos estados son interesantes porque abren la posibilidad de incorporar los estados del continuo, pero evitando la disociación molecular.

Una posible ampliación de este trabajo consiste en que, para el caso de estados desplazados moleculares, el paquete de onda electrónico original puede no ser transferido completamente a otros paquetes electrónicos (como aquí se consideró), y entonces, al tener una fracción en el

original estado electrónico, se presentaría entrelazamiento cuántico entre los dos estados electrónicos con sus respectivos estados vibracionales. Así, los estados coheretes moleculares podrían ser útiles en información cuántica. Como aquí hemos considerado al estado electrónico original en el estado base vibracional, estos estados desplazados moleculares entrelazados serían

$$|EDM\rangle = \chi |\downarrow\rangle |0\rangle + \delta |\uparrow\rangle |EDM^*\rangle \quad (6.3)$$

También es posible que la extensión de estos conceptos a más dimensiones permita estudiar sistemas caóticos en el régimen cuántico.

Pero ante todo es necesario aplicar estas construcciones en el estudio de la dinámica molecular de sistemas describibles por el potencial de Morse.

Apéndice A

Polinomios generalizados de Laguerre

La definición de los polinomios generalizados de Laguerre es

$$L_n^\alpha(y) = \frac{1}{n!} y^{-\alpha} \exp(y) \frac{d^n}{dy^n} [y^{n+\alpha} \exp(-y)] = \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n+\alpha}{n-m} \frac{y^m}{m!}, \quad (\text{A.1})$$

donde $\binom{p}{n} = \frac{p(p-1)\dots(p-n+1)}{1\cdot 2\cdot 3\dots n}$, $\binom{p}{0} = 1$ y $L_n^0(y) = L_n(y)$.

Estos polinomios satisfacen la ecuación diferencial

$$\left[y \frac{d^2}{dy^2} + (\alpha - y + 1) \frac{d}{dy} + n \right] L_n^\alpha(y) = 0, \quad (\text{A.2})$$

y las relaciones de recurrencia

$$(n+1) L_{n+1}^\alpha(y) - (2n + \alpha + 1 - y) L_n^\alpha(y) + (n + \alpha) L_{n-1}^\alpha(y) = 0, \quad (\text{A.3})$$

$$y \frac{d}{dy} L_n^\alpha(y) = n L_n^\alpha(y) - (n + \alpha) L_{n-1}^\alpha(y). \quad (\text{A.4})$$

Definiendo las funciones generalizadas de Laguerre como

$$\psi_n^\alpha(y) = \sqrt{\frac{n! y^{\alpha+1} \exp(-y)}{\Gamma(n + \alpha + 1)}} L_n^\alpha(y), \quad \alpha > -1, \quad (\text{A.5})$$

Estas funciones, $\psi_n^\alpha(y)$, satisfacen la siguiente condición de ortonormalidad:

$$\int_0^\infty \psi_n^\alpha(y) \psi_{n'}^\alpha(y) y^{-1} dy = \delta_{nn'}. \quad (\text{A.6})$$

Podemos expresar la Ec. A.2 en términos de $\psi_n^\alpha(y)$ como

$$\left[y \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{4} \left(2\alpha + 2 - y + \frac{1 - \alpha^2}{y} \right) + n \right] \psi_n^\alpha(y) = 0, \quad (\text{A.7})$$

y la relación de recurrencia definida en la Ec. A.3

$$\sqrt{(n + \alpha + 1)(n + 1)} \psi_{n+1}^\alpha(y) + \sqrt{(n + \alpha)n} \psi_{n-1}^\alpha(y) - (2n + \alpha + 1 - y) \psi_n^\alpha(y) = 0. \quad (\text{A.8})$$

Apéndice B

Elementos de matriz para el potencial de Morse

El espectro completo de Morse incluye, como se menciona en el capítulo 3, una parte discreta y una continua. La evolución temporal de los valores esperados de la posición y el momento, así como la evolución de las dispersiones, para los estados coherentes requiere la determinación de los elementos de matriz para los operadores \hat{X} , \hat{X}^2 , \hat{p} y \hat{p}^2 , los cuales son de tres tipos: elementos de matriz entre estados vibracionales, elementos de matriz de traslape entre estados vibracionales y de dispersión, y elementos de matriz entre estados de dispersión.

B.1. Elementos de matriz entre estados vibracionales.

Estos elementos están reportados en un trabajo de Sage [66], en donde se obtienen a partir de la siguiente relación

$$\langle n+j | z^\lambda | n \rangle = C_{N,n+j} C_{N,n} \sum_{l=0}^n \binom{l-\lambda}{l+j} \binom{l+j-\lambda}{l} \Gamma(2N + \lambda - n - j - l) / (n-l)!, \quad (\text{B.1})$$

y aquí $C_{N,n+j}$ y $C_{N,n}$ son las constantes de normalización de los estados vibracionales $|n+j\rangle$ y $|n\rangle$, respectivamente; N es el número de estados vibracionales del pozo; z es la variable natural del potencial de Morse, y λ es un entero positivo.

Los elementos de matriz para $(R - R_0)^m$ se determinan en función de z^λ a partir de

$$(R - R_0)^m = (-1/\beta)^m (d/d\lambda)^m (z/2a)^\lambda |_{\lambda=0}. \quad (\text{B.2})$$

De tal forma que los elementos de matriz diagonales asociados a la posición son

$$\langle n | R - R_0 | n \rangle = \frac{1}{\beta} \ln(2a) - \frac{C_{N,n}^2}{\beta} \sum_{l=0}^n \frac{\Gamma(2N - n - l)}{(n-l)!} \{2[\psi(1) - \psi(l+1)] + \psi(2N - n - l)\}, \quad (\text{B.3})$$

donde $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x) = \left(\frac{\partial \Gamma(x)}{\partial x}\right)/\Gamma(x)$ es la función digamma. Y los elementos no diagonales están dados por

$$\langle n+j | R - R_0 | n \rangle = \frac{1}{\beta} C_{N,n+j} C_{N,n} \frac{(-1)^{j+1}}{j} \sum_{l=0}^n \frac{\Gamma(2N - n - j - l)}{(n-l)!}. \quad (\text{B.4})$$

Por otra parte, los elementos de matriz para el operador de momento p vienen dados por

$$\langle n+j | p | n \rangle = i\beta\hbar C_{N,n+j} C_{N,n} (-1)^{j+1} (1 - \delta_{j,0}) \frac{\Gamma(2N - n - j + 1)}{2\Gamma(n+1)}, \quad (\text{B.5})$$

relación que se determina a partir de

$$\langle n+j | [R, H] | n \rangle = \frac{i\hbar}{\mu} \langle n+j | p | n \rangle. \quad (\text{B.6})$$

Los elementos de matriz asociados al cuadrado del operador de posición se determinan mediante la relación dada por la Ec. B.1, y utilizando la expresión dada por la Ec. B.2, y así los elementos diagonales son

$$\begin{aligned} \langle n | (R - \bar{R}_0)^2 | n \rangle &= \frac{C_{N,n}^2}{\beta^2} \sum_{l=0}^n \frac{\Gamma(2N - n - l)}{(n-l)!} \left\{ 2\psi'(l+1) + \psi'(2N - n - l) \right. \\ &\quad \left. - 2\psi'(1) + [2\psi(1) - 2\psi(l+1) + \psi(2N - n - l)] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

B.2. ELEMENTOS DE MATRIZ ENTRE ESTADOS VIBRACIONALES Y DE DISPERSIÓN.97

en donde $\psi'(x) = \frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$ es la función trigamma, y $\bar{R}_0 = R_0 + \frac{1}{\beta} \ln(2a)$. Los elementos de matriz no diagonales son

$$\begin{aligned} \langle n+j | (R - \bar{R}_0)^2 | n \rangle &= \frac{2(-1)^j C_{N,n+j}^2 C_{N,n}^2}{j \beta^2} \sum_{l=0}^n \frac{\Gamma(2N - n - j - l)}{(n-l)!} \{ \psi(j+1) \\ &+ \psi(j) + \psi(2N - j - n - l) - \psi(l+1) + \psi(l+j+1) \}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

En los dos últimos casos, utilizamos la variable \bar{R}_0 ya que el cálculo es más limpio. Y al momento de calcular las dispersiones podemos seguir utilizando esta variable, y recordar que

$$\langle i | R - \bar{R}_0 | j \rangle = \langle i | R - R_0 | j \rangle + \frac{1}{\beta} \langle i | \ln(2a) | j \rangle, \quad (\text{B.9})$$

y lo mismo sucede en elementos de matriz del continuo, y del discreto-continuo.

Para determinar los elementos de matriz del operador p^2 se utiliza el hamiltoniano, el cual tiene como eigenfunciones a los estados vibracionales, y la relación de Sage expresada en la Ec. B.1,

$$p^2 = 2\mu(H - U(R)). \quad (\text{B.10})$$

Los elementos diagonales de p^2 son

$$\langle n | p^2 | n \rangle = \beta^2 \hbar^2 (N - n) \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{B.11})$$

y los no diagonales son

$$\begin{aligned} \langle n+j | p^2 | n \rangle &= (-1)^j \frac{\beta^2 \hbar^2}{2} \\ &[2nj + j(j+1) - (2N+1)(j-1)]. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

B.2. Elementos de matriz entre estados vibracionales y de dispersión.

Para determinar estos elementos en los operadores que nos interesan $(\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{X}}^2, \hat{\mathbf{p}} \text{ y } \hat{\mathbf{p}}^2)$, y también los que involucran exclusivamente estados de dispersión, se requiere obtener los elementos

de matriz para un operador definido como

$$z^r (\log z)^s, \quad (\text{B.13})$$

con r y s números enteros mayores o iguales a cero. Matsumoto los reporta en un trabajo, pero su resultado tiene un error (lo que es evidente ya que obtiene cantidades imaginarias cuando los valores esperados son reales). El procedimiento para obtener los elementos de matriz es, simplemente, calcular el traslape del operador genérico anterior entre un estado de dispersión $|E\rangle$ y uno vibracional $|n\rangle$. Esto es

$$\langle n | z^r (\log z)^s | E \rangle. \quad (\text{B.14})$$

Primero determinamos el elemento de matriz

$$\langle n | z^r | E \rangle, \quad (\text{B.15})$$

el cual queda expresado por la integral

$$\langle n | z^r | E \rangle = \frac{C_E C_{N,n} A(\varepsilon)}{\beta} \int_0^\infty z^{\rho_2-1} \exp(-z) L_n^{2b_n}(z) {}_1F_1(-N + i\varepsilon, 1 + 2i\varepsilon; z) dz + c.c., \quad (\text{B.16})$$

donde $\rho_2 = r + b_n + i\varepsilon$.

Esta integral se calcula con la fórmula siguiente

$$\int_0^\infty z^{\rho-1} \exp(-tz) L_\nu^\alpha(pz) {}_1F_1(c, d; qz) dz = t^{-\rho} \frac{\Gamma(\alpha + \nu + 1) \Gamma(\rho)}{\Gamma(\alpha + 1) \nu!} F_2\left(\rho, -\nu, c; \alpha + 1, d; \frac{p}{t}, \frac{q}{t}\right), \quad (\text{B.17})$$

y el resultado buscado es

$$\langle n | z^r | E \rangle = \frac{C_E C_{N,n}}{\beta} \frac{\Gamma(2b_n + n + 1) A(\varepsilon)}{\Gamma(2b_n + 1)} \Gamma(\rho_2) {}_3F_2(\rho_2, -n, -N + i\varepsilon; 2b_n + 1, 1 + 2i\varepsilon; 1, 1) + c.c. \quad (\text{B.18})$$

Con este último resultado podemos determinar el elemento de matriz expresado en la Ec. B.14, ya que

$$\langle n | z^r (\log z)^s | E \rangle = \frac{d^s}{d\rho_2^s} \left\{ \frac{C_E C_{N,n} A(\varepsilon)}{\beta} \int_0^\infty z^{\rho_2-1} \exp(-z) L_n^{2b_n}(z) {}_1F_1(-N + i\varepsilon, 1 + 2i\varepsilon; z) dz \right\} + c.c.,$$

es decir,

$$\begin{aligned}
 \langle n | z^r (\log z)^s | E \rangle &= \frac{d^s}{d\rho_2^s} \left\{ \frac{C_E C_{N,n} A(\varepsilon)}{\beta} \Gamma(\rho_2) {}_3F_2(\rho_2, -n, -N + i\varepsilon; 2b_n + 1, 1 + 2i\varepsilon; 1, 1) \right\} + c.c. \\
 &= \frac{d^s}{d\rho_2^s} \left\{ \frac{C_E C_{N,n} A(\varepsilon)}{\beta} \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(\rho_2 + k) (-n)_k (-N + i\varepsilon)_k}{k! (2b_n + 1)_k (1 + 2i\varepsilon)_k} \right\} + c.c. \quad (\text{B.19})
 \end{aligned}$$

A partir de este último resultado podemos determinar los fácilmente los siguientes elementos de matriz

$$\langle n | (R - \bar{R}_0) | E \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{d}{d\rho_2} \left\{ \frac{C_E C_{N,n} A(\varepsilon)}{\beta} \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(\rho_2 + k) (-n)_k (-N + i\varepsilon)_k}{k! (2b_n + 1)_k (1 + 2i\varepsilon)_k} \right\} + c.c. \quad (\text{B.20})$$

$$\langle n | (R - \bar{R}_0)^2 | E \rangle = \frac{1}{\beta^2} \frac{d^2}{d\rho_2^2} \left\{ \frac{C_E C_{N,n} A(\varepsilon)}{\beta} \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(\rho_2 + k) (-n)_k (-N + i\varepsilon)_k}{k! (2b_n + 1)_k (1 + 2i\varepsilon)_k} \right\} + c.c. \quad (\text{B.21})$$

en las dos últimas expresiones $\rho_2 = b_n + i\varepsilon$

Utilizando la definición de $\psi(x)$, es trivial mostrar que

$$\frac{d^2 \Gamma(x)}{dx^2} = \Gamma(x) [\psi^{(2)}(x) + \psi^{(1)}(x)], \quad (\text{B.22})$$

y las ecuaciones anteriores son

$$\langle n | (R - \bar{R}_0) | E \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{C_E C_{N,n} A(\varepsilon)}{\beta} \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(\rho_2 + k) \psi^{(1)}(\rho_2 + k) (-n)_k (-N + i\varepsilon)_k}{k! (2b_n + 1)_k (1 + 2i\varepsilon)_k} + c.c. \quad (\text{B.23})$$

$$\begin{aligned}
 \langle n | (R - \bar{R}_0)^2 | E \rangle &= \frac{1}{\beta^2} \frac{C_E C_{N,n} A(\varepsilon)}{\beta} \sum_{k=0}^n \left\{ \frac{\Gamma(\rho_2 + k) (-n)_k (-N + i\varepsilon)_k}{k! (2b_n + 1)_k (1 + 2i\varepsilon)_k} \right. \\
 &\quad \left. [\psi^{(2)}(\rho_2 + k) + \psi^{(1)}(\rho_2 + k)] \right\} + c.c., \quad (\text{B.24})
 \end{aligned}$$

con $\rho_2 = b_n + i\varepsilon$.

Ahora con ayuda del conmutador expresado en la Ec. B.6 obtenemos

$$\begin{aligned}
 \langle n | p | E \rangle &= \frac{-i\mu}{\hbar} \langle n | [R, H] | E \rangle = \frac{i\mu}{\hbar} (E_n - E) \langle n | R | E \rangle \\
 \langle n | p | E \rangle &= -\frac{1}{\beta} \frac{i\mu}{\hbar} (E_n - E) \left\{ \frac{C_E C_{N,n} A(\varepsilon)}{\beta} \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(\rho_2 + k) \psi^{(1)}(\rho_2 + k) (-n)_k (-N + i\varepsilon)_k}{k! (2b_n + 1)_k (1 + 2i\varepsilon)_k} + c.c. \right\} \quad (\text{B.25})
 \end{aligned}$$

Para determinar los elementos de matriz de p^2 utilizamos el hamiltoniano, de tal forma que

$$\begin{aligned}\langle n | p^2 | E \rangle &= -2\mu \langle n | U(R) | E \rangle \\ &= -2\mu D \langle n | \exp[-2\beta(R - R_0)] - 2 \exp[-\beta(R - R_0)] | E \rangle,\end{aligned}\quad (\text{B.26})$$

y como

$$D = \frac{\beta^2 \hbar^2}{2\mu} \left(N + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (\text{B.27})$$

entonces

$$\begin{aligned}\langle n | p^2 | E \rangle &= -\beta^2 \hbar^2 \left(N + \frac{1}{2} \right)^2 \langle n | \exp[-2\beta(R - R_0)] - 2 \exp[-\beta(R - R_0)] | E \rangle \\ &= -\beta^2 \hbar^2 \left(N + \frac{1}{2} \right)^2 \left[\frac{1}{(2a)^2} \langle n | z^2 | E \rangle - \frac{1}{a} \langle n | z | E \rangle \right].\end{aligned}\quad (\text{B.28})$$

Es decir,

$$\begin{aligned}\langle n | p^2 | E \rangle &= -\beta^2 \hbar^2 \left(N + \frac{1}{2} \right)^2 \frac{C_E C_{N,n} A(\varepsilon)}{\beta} \left\{ \frac{1}{(2a)^2} \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(1 + b_n + i\varepsilon + k) (-n)_k (-N + i\varepsilon)_k}{k! (2b_n + 1)_k (1 + 2i\varepsilon)_k} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{a} \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(b_n + i\varepsilon + k) (-n)_k (-N + i\varepsilon)_k}{k! (2b_n + 1)_k (1 + 2i\varepsilon)_k} \right\} + c.c.\end{aligned}\quad (\text{B.29})$$

B.3. Elementos de matriz entre estados de dispersión.

Al igual que en el apartado anterior, nos interesa determinar los elementos de matriz del operador genérico $z^r (\log z)^s$, pero entre estados de dispersión. Esto es

$$\langle E_1 | z^r (\log z)^s | E_2 \rangle. \quad (\text{B.30})$$

La integral a evaluar es

$$\begin{aligned}
& \langle E_1 | z^r | E_2 \rangle = \\
& \frac{C_{E_1} C_{E_2}}{\beta} \left\{ A(\varepsilon) A(\eta) \int_0^\infty z^{i(\varepsilon+\eta)+r-1} \exp(-z) {}_1F_1(-N+i\varepsilon, 1+2i\varepsilon; z) {}_1F_1(-N+i\eta, 1+2i\eta; z) dz \right. \\
& + A(\varepsilon) A^*(\eta) \int_0^\infty z^{i(\varepsilon-\eta)+r-1} \exp(-z) {}_1F_1(-N+i\varepsilon, 1+2i\varepsilon; z) {}_1F_1(-N-i\eta, 1-2i\eta; z) dz \left. \right\} \\
& + c.c.
\end{aligned} \tag{B.31}$$

Aquí utilizamos la misma notación de Matsumoto

$$\rho_3 = i(\varepsilon + \eta) + r, \tag{B.32}$$

$$\rho_4 = i(\varepsilon - \eta) + r; \tag{B.33}$$

ε y η se refieren a E_1 y E_2 , respectivamente, de la siguiente manera

$$\varepsilon = \sqrt{2\mu E_1} / \beta \hbar, \tag{B.34}$$

$$\eta = \sqrt{2\mu E_2} / \beta \hbar; \tag{B.35}$$

sin embargo, esto último es simétrico si cambiamos ε por η . En nuestros cálculos, utilizamos la convención expresada en las Ecs. B.34 y B.35.

Utilizando la fórmula

$$\int_0^\infty \exp(-tz) z^{\rho-1} F(a, b; pz) F(c, d; qz) dz = t^{-\rho} \Gamma(\rho) {}_3F_2\left(\rho, a, c; b, d; \frac{p}{t}, \frac{q}{t}\right), \tag{B.36}$$

determinamos

$$\begin{aligned}
\langle E_1 | z^r | E_2 \rangle &= \frac{C_{E_1} C_{E_2}}{\beta} \left\{ A(\varepsilon) A(\eta) \Gamma(\rho_3) {}_3F_2(\rho_3, i\varepsilon - N, i\eta - N; 1 + 2i\varepsilon, 1 + 2i\eta; 1, 1) \right. \\
&+ A(\varepsilon) A^*(\eta) \Gamma(\rho_4) {}_3F_2(\rho_4, i\varepsilon - N, -i\eta - N; 1 + 2i\varepsilon, 1 - 2i\eta; 1, 1) \left. \right\} + c.c.,
\end{aligned} \tag{B.37}$$

y utilizando la definición de la función trigonométrica,

$$\begin{aligned} \langle E_1 | z^r | E_2 \rangle &= \frac{C_{E_1} C_{E_2}}{\beta} \left\{ A(\varepsilon) A(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_3 + k) (i\varepsilon - N)_k (i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 + 2i\eta)_k} \right. \\ &+ \left. A(\varepsilon) A^*(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_4 + k) (i\varepsilon - N)_k (-i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 - 2i\eta)_k} \right\} + c.c. \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

Entonces

$$\begin{aligned} \langle E_1 | z^r (\log z)^s | E_2 \rangle &= \frac{C_{E_1} C_{E_2}}{\beta} \left\{ A(\varepsilon) A(\eta) \frac{d^s}{d\rho_3^s} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_3 + k) (i\varepsilon - N)_k (i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 + 2i\eta)_k} \right. \\ &+ \left. A(\varepsilon) A^*(\eta) \frac{d^s}{d\rho_4^s} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_4 + k) (i\varepsilon - N)_k (-i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 - 2i\eta)_k} \right\} + c.c. \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

Con esta última expresión calculamos fácilmente los elementos de matriz $\langle E_1 | (R - \bar{R}_0) | E_2 \rangle$ y $\langle E_1 | (R - \bar{R}_0)^2 | E_2 \rangle$, los que quedan expresados como

$$\begin{aligned} \langle E_1 | (R - \bar{R}_0) | E_2 \rangle &= -\frac{1}{\beta} \frac{C_{E_1} C_{E_2}}{\beta} \left\{ A(\varepsilon) A(\eta) \frac{d}{d\rho_3} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_3 + k) (i\varepsilon - N)_k (i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 + 2i\eta)_k} \right. \\ &+ \left. A(\varepsilon) A^*(\eta) \frac{d}{d\rho_4} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_4 + k) (i\varepsilon - N)_k (-i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 - 2i\eta)_k} \right\} + c.c. \end{aligned} \quad (\text{B.40})$$

$$\begin{aligned} \langle E_1 | (R - \bar{R}_0)^2 | E_2 \rangle &= \frac{1}{\beta^2} \frac{C_{E_1} C_{E_2}}{\beta} \left\{ A(\varepsilon) A(\eta) \frac{d^2}{d\rho_3^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_3 + k) (i\varepsilon - N)_k (i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 + 2i\eta)_k} \right. \\ &+ \left. A(\varepsilon) A^*(\eta) \frac{d^2}{d\rho_4^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_4 + k) (i\varepsilon - N)_k (-i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 - 2i\eta)_k} \right\} + c.c., \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

con $\rho_3 = i(\varepsilon + \eta)$ y $\rho_4 = i(\varepsilon - \eta)$. O bien,

$$\begin{aligned} \langle E_1 | (R - \bar{R}_0) | E_2 \rangle &= -\frac{C_{E_1} C_{E_2}}{\beta^2} \left\{ A(\varepsilon) A(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_3 + k) \psi^{(1)}(\rho_3 + k) (i\varepsilon - N)_k (i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 + 2i\eta)_k} \right. \\ &\quad \left. + A(\varepsilon) A^*(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_4 + k) \psi^{(1)}(\rho_4 + k) (i\varepsilon - N)_k (-i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 - 2i\eta)_k} \right\} + c.c \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

$$\begin{aligned} \langle E_1 | (R - \bar{R}_0)^2 | E_2 \rangle &= \frac{C_{E_1} C_{E_2}}{\beta^3} \left\{ A(\varepsilon) A(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\Gamma(\rho_3 + k) (i\varepsilon - N)_k (i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 + 2i\eta)_k} \right. \right. \\ &\quad \left. \left[\psi^{(2)}(\rho_3 + k) + \psi^{(1)}(\rho_3 + k) \right] \right. \\ &\quad \left. + A(\varepsilon) A^*(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \left(\left[\psi^{(2)}(\rho_4 + k) + \psi^{(1)}(\rho_4 + k) \right] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \frac{\Gamma(\rho_4 + k) (i\varepsilon - N)_k (-i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 - 2i\eta)_k} \right) \right\} \\ &\quad + c.c. \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$

Determinamos el elemento de matriz para p ,

$$\begin{aligned} \langle E_1 | p | E_2 \rangle &= \frac{i\mu}{\hbar} \langle E_1 | [H, R] | E_2 \rangle \\ &\quad \frac{i\mu}{\hbar} (E_1 - E_2) \langle E_1 | R | E_2 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

es decir,

$$\begin{aligned} \langle E_1 | p | E_2 \rangle &= \frac{i\mu}{\hbar} (E_2 - E_1) \\ &\quad \left[\frac{C_{E_1} C_{E_2}}{\beta^2} \left\{ A(\varepsilon) A(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_3 + k) \psi^{(1)}(\rho_3 + k) (i\varepsilon - N)_k (i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 + 2i\eta)_k} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + A(\varepsilon) A^*(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_4 + k) \psi^{(1)}(\rho_4 + k) (i\varepsilon - N)_k (-i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 - 2i\eta)_k} \right\} + c.c \right] \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

Finalmente nos interesa determinar los elementos de matriz de p^2

$$\begin{aligned} \langle E_1 | p^2 | E_2 \rangle &= -\beta^2 \hbar^2 \left(N + \frac{1}{2} \right)^2 \langle E_1 | \exp[-2\beta(R - R_0)] - 2 \exp[-\beta(R - R_0)] | E_2 \rangle \\ &= -\beta^2 \hbar^2 \left(N + \frac{1}{2} \right)^2 \left[\frac{1}{(2a)^2} \langle E_1 | z^2 | E_2 \rangle - \frac{1}{a} \langle E_1 | z | E_2 \rangle \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.46})$$

Los elementos de matriz del lado derecho de esta igualdad son

$$\langle E_1 | z | E_2 \rangle = \frac{C_{E_1} C_{E_2}}{\beta} \left\{ A(\varepsilon) A(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_3 + k) (i\varepsilon - N)_k (i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 + 2i\eta)_k} \right. \quad (\text{B.47})$$

$$\left. + A(\varepsilon) A^*(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_4 + k) (i\varepsilon - N)_k (-i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 - 2i\eta)_k} \right\} + c.c., \quad (\text{B.48})$$

aquí $\rho_3 = i(\varepsilon + \eta) + 1$ y $\rho_4 = i(\varepsilon - \eta) + 1$;

$$\langle E_1 | z^2 | E_2 \rangle = \frac{C_{E_1} C_{E_2}}{\beta} \left\{ A(\varepsilon) A(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_3 + k) (i\varepsilon - N)_k (i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 + 2i\eta)_k} \right. \quad (\text{B.49})$$

$$\left. + A(\varepsilon) A^*(\eta) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\rho_4 + k) (i\varepsilon - N)_k (-i\eta - N)_k}{k! (1 + 2i\varepsilon)_k (1 - 2i\eta)_k} \right\} + c.c. \quad (\text{B.50})$$

con $\rho_3 = i(\varepsilon + \eta) + 2$ y $\rho_4 = i(\varepsilon - \eta) + 2$.

Apéndice C

Determinación de las constantes $a_1(J)$ y $a_2(J)$

Partimos de la propuesta de estado coherente que formulamos

$$\begin{aligned} |J, \gamma\rangle &= a_1(J) \sum_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{\Gamma(2N-n)J^n}{n!\chi^n\Gamma(2N)}} \exp(-ie_n\gamma) |n\rangle \\ &+ a_2(J) \exp(-i\phi) \int_0^\infty \frac{1}{f(E)} |E\rangle dE. \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Para determinar las constantes $a_1(J)$ y $a_2(J)$ necesitamos hacer uso de dos condiciones: la normalización y la identidad de acción. Esto es

$$\langle J, \gamma | J, \gamma \rangle = 1, \quad (\text{C.2})$$

$$\langle J, \gamma | H | J, \gamma \rangle = J\hbar\omega. \quad (\text{C.3})$$

Utilizando la definición dada en la Ec. C.1, estas dos condiciones se traducen a

$$1 = |a_1(J)|^2 \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\Gamma(2N-n)J^n}{n!\chi^n\Gamma(2N)} + |a_2(J)|^2 \int_0^\infty \frac{J^N \sqrt{N^2 + \varepsilon^2} \Gamma(N+i\varepsilon) \Gamma(N-i\varepsilon)}{4 [\cosh(\pi\varepsilon)]^2 \Gamma(2N) \chi^N} \left(\frac{dE}{d\varepsilon}\right)^2 \frac{1}{\beta} d\varepsilon, \quad (\text{C.4})$$

$$1 = |a_1(J)|^2 \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\Gamma(2N-n)J^{n-1}e_n}{n!\chi^n\Gamma(2N)} + |a_2(J)|^2 \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^\infty \frac{J^{N-1} \sqrt{N^2 + \varepsilon^2} \Gamma(N+i\varepsilon) \Gamma(N-i\varepsilon) \hbar^2 \beta^2 \varepsilon^2}{4 [\cosh(\pi\varepsilon)]^2 \Gamma(2N) \chi^N} \left(\frac{dE}{d\varepsilon}\right)^2 \frac{1}{\beta} d\varepsilon. \quad (\text{C.5})$$

Con este sistema de ecuaciones, podemos determinar fácilmente a las constantes $a_1(J)$ y $a_2(J)$.

Definimos las siguientes expresiones

$$A \equiv \frac{\hbar\beta}{2m\omega} \int_0^\infty \frac{J^{N-1} \sqrt{N^2 + \varepsilon^2} \Gamma(N+i\varepsilon) \Gamma(N-i\varepsilon) \varepsilon^2}{4 [\cosh(\pi\varepsilon)]^2 \Gamma(2N) \chi^N} \left(\frac{dE}{d\varepsilon}\right)^2 d\varepsilon - \frac{1}{\beta} \int_0^\infty \frac{J^N \sqrt{N^2 + \varepsilon^2} \Gamma(N+i\varepsilon) \Gamma(N-i\varepsilon)}{4 [\cosh(\pi\varepsilon)]^2 \Gamma(2N) \chi^N} \left(\frac{dE}{d\varepsilon}\right)^2 d\varepsilon, \quad (\text{C.6})$$

$$B \equiv \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\Gamma(2N-n)J^n}{n!\chi^n\Gamma(2N)} - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\Gamma(2N-n)J^{n-1}e_n}{n!\chi^n\Gamma(2N)}, \quad (\text{C.7})$$

$$C \equiv \left\{ \frac{\hbar\beta}{2m\omega} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\Gamma(2N-n)J^n}{n!\chi^n\Gamma(2N)} \int_0^\infty \frac{J^{N-1} \sqrt{N^2 + \varepsilon^2} \Gamma(N+i\varepsilon) \Gamma(N-i\varepsilon) \varepsilon^2}{4 [\cosh(\pi\varepsilon)]^2 \Gamma(2N) \chi^N} \left(\frac{dE}{d\varepsilon}\right)^2 d\varepsilon - \frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\Gamma(2N-n)J^{n-1}e_n}{n!\chi^n\Gamma(2N)} \int_0^\infty \frac{J^N \sqrt{N^2 + \varepsilon^2} \Gamma(N+i\varepsilon) \Gamma(N-i\varepsilon)}{4 [\cosh(\pi\varepsilon)]^2 \Gamma(2N) \chi^N} \left(\frac{dE}{d\varepsilon}\right)^2 d\varepsilon \right\}, \quad (\text{C.8})$$

donde $\frac{dE}{d\varepsilon} = \frac{\hbar^2 \beta^2 \varepsilon}{m}$. Con esto último podemos expresar a las constantes $a_1(J)$ y $a_2(J)$

$$|a_1(J)|^2 = \frac{A}{C}, \quad |a_2(J)|^2 = \frac{B}{C}. \quad (\text{C.9})$$

Bibliografía

- [1] Naturwissenschaften **14**, 664 (1926).
- [2] J. R. Klauder, Ann. Phys. **11**, 0123 (1960).
- [3] R. J. Glauber, Phys. Rev. **131**, 2766 (1963).
- [4] E. C. Sudarshan, Phys. Rev. Lett. **10**, 277 (1963).
- [5] P. M. Morse, Phys. Rev. **34**, 57 (1929).
- [6] J. P. Gazeau and J. R. Klauder, J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 123 (1999).
- [7] V. I. Manko *et al.*, Physica Scripta **55**, 528 (1997).
- [8] M. M. Nieto and L. M. Simmons Jr, Phys. Rev. Lett. **41**, 207 (1978).
- [9] M. M. Nieto and L. M. Simmons Jr., Phys. Rev. A **19**(2), 438 (1979).
- [10] M. M. Nieto and L. M. Simmons Jr., Phys. Rev. D **20**(6), 1321 (1979).
- [11] M. M. Nieto and L. M. Simmons Jr., Phys. Rev. D **20**(6), 1332 (1979).
- [12] M. M. Nieto and L. M. Simmons Jr., Phys. Rev. D **20**(6), 1342 (1979).
- [13] M. M. Nieto and L. M. Simmons Jr., Phys. Rev. D **22**(2), 391 (1980).
- [14] M. M. Nieto and L. M. Simmons Jr., Phys. Rev. D **22**(2), 403 (1980).

- [15] M. M. Nieto and L. M. Simmons Jr., *Phys. Rev. D* **23**(4), 927 (1981).
- [16] B. M. Garraway and K. Suominen, *Rep. Prog. Phys.* **58**, 365 (1995).
- [17] Zhang, Feng and Gilmore, *Rev. of Mod. Phys.* **62**, 867 (1990).
- [18] Luis de la Peña, *Introducción a la Mecánica cuántica*. Fondo de Cultura Económica. Segunda Edición, 1991.
- [19] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford Science Publications.
- [20] D. F. Walls and G. J. Milburn, *Quantum Optics*. Springer-Verlag. 1994.
- [21] F. L. Pilar, *Elementary Quantum Chemistry*. McGraw Hill. 1968.
- [22] R. H. Dicke, *Phys. Rev.* **93**, 99 (1954).
- [23] D. Campos, *Fundamentos de Física atómica y molecular*. Universidad Nacional de Colombia, 1997.
- [24] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. Second Edition, New York.
- [25] F. T. Arecchi, *et al.*, *Phys. Rev. A* **6**, 2211 (1972).
- [26] G. A. Baker Jr., *Phys. Rev.* **103**, 1119 (1956).
- [27] A. Frank and P. van Isacker, *Algebraic Methods in Molecular and Nuclear Structure Physics*. Wiley Interscience, New York, 1994.
- [28] P. Cordero and S. Hojman, *Lett. Nuovo Cimento* **IV**, 1123 (1970).
- [29] J. R. Klauder, *J. Math. Phys.* **4**, 1055 (1963).
- [30] J. R. Klauder, *J. Math. Phys.* **4**, 1058 (1963).
- [31] J. R. Klauder, *Phy. Rev. D***19**, 2349 (1979).

- [32] J. R. Klauder, *Ann. Phys.* **18**, 1735 (1993).
- [33] J. R. Klauder, *Ann. Phys.* **237**, 147 (1995).
- [34] L. C. Biedenharn, *J. Phys.* **A22**, L873 (1989).
- [35] E. K. Sklyanin, *Funct. Anal, Appl* **16**, 262 (1982).
- [36] P. P. Kulish and N. Y. Reshetikhin, *J. Sov. Math.* **23**, 2435 (1983).
- [37] A. M. Perelomov, *Commun. Math. Phys.* **26**, 222 (1972).
- [38] A. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*. Springer, 1985.
- [39] R. Gilmore, *Ann. Phys.* **74**, 391 (1972).
- [40] Messiah, *Quantum Mechanics*. Dover Editions.
- [41] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*. Wiley.
- [42] D. Rodney Truax, *Phys. Rev. D* **31**, 1988 (1985).
- [43] K. Wodkiewicz and J. H. Eberly, *J. Opt. Soc. Am. B* **2**, 458 (1985).
- [44] J. Recamier *et al.*, *Int. J. of Quant. Chem.* **89**, 494 (2002).
- [45] B. Roy and P. Roy, *Phys. Lett.R A* **296**, 187 (2002).
- [46] S. Kais and R. D. Levine, *Phys. Rev. A* **41**, 2301 (1990).
- [47] A. O. Barut and L. Girardello, *Commun. Math. Phys.* **21**, 41 (1971).
- [48] A. Jellal, *Mod. Phys. Lett. A*
- [49] M. G. Benedict and B. Molnár, *Phys. Rev. A* **60**, R1737 (1999).
- [50] R. Dutt *et al.*, *Am. J. Phys.* **56** (2), 163 (1988).

- [51] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, Quantum Mechanics of One and Two -Electron Systems (Berlin Springer) p 107.
- [52] A. Hernández, Tesis de maestría: Estados desplazados de Morse, Directora de tesis: Dra. Rocío Jáuregui UNAM (2003)
- [53] A. Matsumoto, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **21**, 2863 (1988). **2**, 458 (1985).
- [54] M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of mathematical functions. Dover Publications, Inc., New York, 1972.
- [55] A. P. Prudnikov, Y. A. Brychkov and O. I. Marichev, Integrals and Series, Volume I: Elementary Functions, Volume II: Special Functions. Gordon and Breach Science Publishers. 1992.
- [56] J. Franck, Faraday Soc. **21**, part 3 (1925).
- [57] E. Condon, Phys.Rev. **28**, 1182 (1926).
- [58] N. Rosen, J. of Chem. Phys. **1**, 319 (1933).
- [59] E. Hutchisson, Phys.Rev. **36**, 410 (1930).
- [60] F. Ausbacher, Z. Naturforsch. **14a**, 589 (1959).
- [61] E. Hutchisson, Phys. Rev. **37**, 45 (1931).
- [62] F. Iachello and M. Ibrahim, J. Chem. Phys. **A102**, 9427 (1998).
- [63] M. Carvajal *et al.*, Phys. Rev. A **59**, 3462 (1999).
- [64] A. Frank, J. of Math. Chem. **25**, 383 (1999).
- [65] A. Matsumoto and K. Iwamoto, J. Quant. Spectros. Radiant. Transfer. **50**, 103 (1993).

[66] M. L. Sage, Chem. Phys. **35**, 375 (1978).

[67] R. Graham and M. Höhnerbach, Phys. Rev. A **43**, 3966 (1991).