

00382

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ALGUNOS PROBLEMAS PROBABILISTAS DE LA

MECANICA CUANTICA

T E S I S

Que para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS (FISICO)

P R E S E N T A

FRANCISCO SOTO ECUIBAR

00382
1982

México D.F.

1982

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE

Capítulo 1 . Introducción.

Capítulo 2 . Una generalización de la fórmula de Feynman

Etc.

Capítulo 3 . La Mecánica Cuántica en el espacio de fases.

Capítulo 4 . La no recurrencia del átomo de hidrógeno en
la Electrodinámica Estocástica.

CAPITULO 1

INTRODUCCION

Introducción.

Es bien conocido que desde el nacimiento de la mecánica cuántica surgieron una serie de problemas de interpretación, que más de 50 años después continúan siendo materia de debate [Dunge 56, Jammer 66 y 74, Dampor 75, de la Peña 79, Brody 80 y referencias en estos trabajos]. De manera esquemática y simplificada podemos decir que en este debate se han enfrentado el realismo y el idealismo filosóficos, el objetivismo y el subjetivismo y las nociones de causalidad y acausalidad; desde un punto de vista fundamental y a expensas de la precisión, podemos afirmar que dos interpretaciones físicas se han definido en esta discusión: una es la llamada ortodoxa o de Copenhague y la otra se conoce como estadística.

La interpretación ortodoxa generalmente se caracteriza por ser idealista y subjetiva, además de que sus adherentes tienen tendencia a adoptar una posición acausal; entre los principales adeptos a esta interpretación podemos nombrar a Bohr, Born, Dirac, Heisenberg y Pauli.

La interpretación estadística se sustenta en supuestos realistas y objetivos, y sus adeptos sostienen, en general, una posición causal; Einstein, Slater y Kemble son algunos de los adherentes a esta interpretación.

Desde luego existen posiciones intermedias; por ejemplo,

Schrödinger sostiene una posición realista y causal pero subjetiva; Landé, Margenau, Popper y Blokhintsev sostienen una posición realista y objetiva pero acausal.

Continuando en este esquema simplificado es posible afirmar que el meollo del conflicto se encuentra en la respuesta que dan unos y otros a la pregunta: ¿La mecánica cuántica describe el comportamiento de un sólo sistema o de un ensemble de sistemas? La escuela de Copenhague sostiene que la mecánica cuántica describe el comportamiento de un sólo sistema, por tanto es una teoría completa y la naturaleza es esencialmente acausal: "El buen dios juega a los dados". Los seguidores de la interpretación estadística afirman que la mecánica cuántica describe el comportamiento de un ensemble de sistemas y no de un sistema en lo individual, es pues una teoría incompleta y el problema de la causalidad no queda resuelto (aunque como señalamos más arriba los adeptos de esta interpretación tienen tendencia a sostener una posición causal).

Hasta el momento la física no ha podido dar razón a alguna de estas dos interpretaciones, debido principalmente a que ambas aceptan como válido el formalismo de la mecánica cuántica; por tanto la posición que uno tome al respecto involucra en gran medida su "concepción del mundo" (posición filosófica, criterios acerca de la belleza de una teoría, peso que se da al poder ex-

plativo de una teoría, etc., etc.). Para aclarar que mucha gente piensa que los experimentos del tipo Bell proporcionan una evidencia de carácter experimental en favor de la interpretación ortodoxa; sin embargo, en este punto encontramos también un conjunto de opiniones contradictorias; en este trabajo pasamos por alto este problema y enviamos al lector interesado a la literatura: [Bell 64, Ballentine 70, Belinfante 72, Wigner 70, Peeres 78, de la Peña y Brody, Jammer 66 y 74, Brody 80 y referencias en estos trabajos].

Pueden darse muchos argumentos en favor y en contra de ambas interpretaciones; la ortodoxa es la más extendida, pero desde un cierto punto de vista, la estadística es más productiva porque nos invita a profundizar, nos invita a buscar teorías más fundamentales que expliquen los fenómenos cuánticos (quizás en la forma en que la mecánica estadística "explica" la termodinámica). Insistimos en que para un ortodoxo dicha explicación no existe y buscar teorías más fundamentales es por ello un absurdo.

El aceptar la interpretación estadística nos enfrenta a un conjunto de problemas. El primero de ellos se deriva del nombre de la interpretación; en efecto, al afirmar que la mecánica cuántica no es una teoría completa sino una teoría estadística se impone la tarea de verificarlo. Que la mecánica cuántica sea una teoría estadística quiere decir que dado un sistema podemos

asociarle una distribución de probabilidad en algún espacio adecuado y un conjunto de funciones definidas en ese espacio que representen las variables dinámicas (observables) del sistema; esta distribución de probabilidad y estas funciones deben satisfacer ciertas condiciones que permitan tener una verdadera teoría probabilista y que los resultados previstos concuerden con los de la teoría cuántica; para evitar complicaciones innecesarias enunciaremos estas condiciones en términos de una densidad de probabilidad f (en lugar de una distribución) y para el caso de un sistema con un sólo grado de libertad, de tal manera que nuestro espacio de fases es (p, q) donde q es la posición y p el momento; seguimos de cerca la exposición de T. Brody [80]. Los requisitos son:

1.- La densidad de probabilidad $f(p, q)$ debe satisfacer las siguientes condiciones:

a.- f real y $f(p, q) \geq 0$ en casi todos los puntos (1.1.1)

b.-
$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(p, q) dp dq = 1 \quad (1.1.2)$$

c.-
$$\int_{-\infty}^{\infty} f(p, q) dp = |\Psi(q)|^2 \quad (1.1.3)$$

y

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(p,q) dq = |\phi(p)|^2 \quad (1.1.3b)$$

donde $\Psi(q)$ es la función de onda en el espacio de configuración del estado en cuestión y $\phi(p) = h^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(q) \exp(\frac{i}{h} pq) dq$ es la función de onda correspondiente en el espacio de impulsos.

ii.- Dado un operador cuántico \hat{A} debe existir una función $a(p,q)$ tal que

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a(p,q) f(p,q) dp dq \quad (1.1.4)$$

iii.- Además si tenemos un operador \hat{B} que es una función $B(\hat{\Lambda})$, la correspondiente función $b(p,q)$ del espacio de fases debe satisfacer

$$b = B(a) \quad (1.1.5)$$

Shewell [73] ha demostrado que dada una función de onda Ψ no existe una regla única para construir una densidad $f(p,q)$ que satisfaga i y ii. Además, Cohen [66b y 66c] ha mostrado que no puede existir una función $f(p,q)$ que satisfaga simultáneamente i ii y iii para cualquier función B . De lo anterior parece ser que está uno obligado a concluir que la mecánica cuántica no es una teoría estadística en el sentido tradicional del término. Esto sin embargo no elimina la posibilidad de que lo sea en algún sentido más amplio; por ejemplo, en un espacio de fases ampliado

(una idea sería considerar el espacio de fases aumentado con alguna otra variable dinámica; tendríamos entonces un espacio de fases de $3n$ dimensiones en lugar de $2n$).

La conclusión de que la mecánica cuántica no es una teoría estadística es un poco sorprendente si se toma en cuenta que existen construcciones en el espacio de fases alternativas a ella y que dichas construcciones han encontrado aplicación en varios campos de la física cuántica. Las cosas se presentan como si la mecánica cuántica fuera una teoría cuasi-probabilista (ver por ejemplo [Moyal 49a]) y esta característica es uno de los argumentos que nos inclinan a pensar que quizás sea una teoría estadística en algún sentido más amplio.

Los primeros elementos para la construcción de una teoría cuántica en el espacio de fases fueron dados por Wigner [32] y Moyal [49a] los completo en 1949. Wigner introdujo una función en el espacio de fases que está dada como:

$$F(\hat{r}, \hat{p}) = \frac{1}{h^{2n}} \text{Tr} \left[\hat{E} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \exp \left\{ \frac{i}{h} [(\hat{r} - \hat{r}') \cdot \hat{p} + (\hat{p} - \hat{p}') \cdot \hat{r}] \right\} \lambda \mu d\lambda d\mu \right] \quad (1.1.6)$$

donde \hat{E} es la matriz de densidad del sistema en cuestión, \hat{r} es el operador de posición y \hat{p} es el operador de impulso. En el caso de un estado puro con función de onda $\Psi(\vec{q})$, (1.1.6) se escri

de

$$F(\vec{r}, \vec{p}) = h^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} \psi^* \left(\vec{r} + \frac{1}{2} \vec{v} \right) e^{i\vec{p} \cdot \vec{v}} \psi \left(\vec{r} - \frac{1}{2} \vec{v} \right) d\vec{v} \quad (1.1.7)$$

Es fácil convencerse que la función de Wigner $F(\vec{p}, \vec{q})$ satisface los requerimientos b y c (ecuaciones (1.1.2) y (1.1.3)) del punto i; sin embargo, es igualmente fácil convencerse mediante un ejemplo que a de i no se satisface: la función de Wigner toma en general valores negativos. Debido a esto último y a que en las aplicaciones se le utiliza como una verdadera densidad de probabilidad frecuentemente se le llama pseudo-distribución de Wigner.

Una vez construida la función que equivale a la densidad de probabilidad en el espacio de fases hay que encontrar una regla que asocie funciones en el espacio de fases a operadores. Se puede demostrar que la elección de una de estas reglas de correspondencia es equivalente a fijar la "distribución" en el espacio de fases. La regla de correspondencia asociada a la función de Wigner es la llamada regla de Weyl [28], que en una dimensión es

$$\exp(i\vec{q} \cdot \vec{r} + i\vec{r} \cdot \vec{p}) \longleftrightarrow \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r} + i\vec{r} \cdot \vec{p}) \quad (1.1.8)$$

o equivalentemente la simetrización total

$$q^N p^N \longleftrightarrow \frac{1}{2^N} \sum_{l=0}^N \binom{N}{l} q^{N-l} p^l \quad (1.1.9)$$

La función de Wigner es la función en el espacio de fases que la regla de Weyl asocia con la matriz de densidad (salvo un factor). Si \hat{A} es un operador y $a(\vec{p}, \vec{q})$ la función del espacio de fases asociada mediante la regla de Weyl, es fácil demostrar que [de Groot 74]

$$\langle \hat{A} \rangle = h^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} a(\vec{p}, \vec{q}) F(\vec{p}, \vec{q}) d\vec{p} d\vec{q} \quad (1.1.10)$$

como lo exige la condición ii. Cabe aclarar que un problema surge cuando se tiene un sistema en un estado propio Ψ_n de un cierto operador (digamos \hat{H} para fijar ideas) y se quieren calcular desviaciones normales; obviamente la teoría cuántica da una desviación nula, mientras que el cálculo mediante integración en el espacio de fases es en general no nulo (excepto si la distribución es una delta de Dirac; para una discusión más amplia de estos problemas ver [Brody 80]).

Usando la regla de Weyl se puede encontrar la dinámica en el espacio de fases [Wigner 32, Moyal 49a, de Groot 74]. La ecuación de evolución de la función de Wigner es la transformada de Weyl de la ecuación de von Neumann para la evolución de la matriz de densidad. Con la notación definida en la ecuación (3.2.5) se escribe

$$\frac{\partial F(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\partial t} = \frac{2}{h} \left[\text{sech} \frac{h}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}} \right) \right] H_W(\vec{r}, \vec{q}) F(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (1.1.11)$$

donde $H_W(p, q)$ es la función que la regla de Weyl hace corresponder al operador Hamiltoniano \hat{H} .

Existen otras formulaciones de la mecánica cuántica en el espacio de fases; Cohen [66a] ha logrado construir una familia de ellas. La regla de correspondencia introducida por él es, en n dimensiones,

$$\exp(i\alpha q + i\tau p) \longleftrightarrow g(\theta, \tau) \exp(i\alpha\hat{Q} + i\tau\hat{P}) \quad (1.1.12)$$

y la función de "distribución" correspondiente para estados puros con función de onda Ψ está dada como:

$$F(p, q; \alpha) = \frac{1}{h^n} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\tau p} \left[\frac{1}{h^n} (\alpha q + \tau p - \alpha v) \right] \Psi(\alpha, \tau)$$

$$\Psi^*(v - \frac{1}{2}\tau) \Psi(v + \frac{1}{2}\tau) dv \quad (1.1.13)$$

Para que la función $F(p, q; \alpha)$ satisfaga b y c del punto 1 es necesario y suficiente que

$$g(\theta, 0) = g(0, \tau) = 1 \quad (1.1.14a)$$

y

$$g^*(\theta, \tau) = g(-\theta, -\tau) \quad (1.1.14b)$$

pero aparte de esto la función g es arbitraria y puede depender del tiempo (para simplificar omitimos dichas dependencias).

Para encontrar como evoluciona en el tiempo la función de C_0

hen (1.1.13) (o la correspondiente expresión para una mezcla) se procede igual que en el caso de la función de Wigner; es decir, se aplica la transformación (1.1.12) a la ecuación de evolución de la matriz de densidad; la expresión que se obtiene es complicada y como no será utilizada en este trabajo enviamos una vez más al trabajo de Cohen [66a].

Casos particulares de la regla de correspondencia de Cohen son: 1.- La regla de Weyl para $g(\theta, \tau)$ 2.- Para $g(\theta, \tau) = \cos(\theta\tau h/2)$ se tiene la regla de simetrización (la función correspondiente es la de Margenau-Hill-Mehta) 3.- Para $g(\theta, \tau) = \sin(\theta\tau h/2)/(\theta\tau h/2)$. Un caso que es inexplicablemente poco conocido es el dado por

$$g(\theta, \tau) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(q)|^2 |\phi(p)|^2 e^{i\tau p} \left[-\frac{1}{2}(\alpha q + \tau p) \right] dq dp}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(v - \frac{1}{2}\tau) e^{i\tau p} \left(-\frac{1}{2}\alpha v \right) \Psi(v + \frac{1}{2}\tau) dv} \quad (1.1.14)$$

y que lleva a

$$F(p, q) = |\Psi(q)|^2 |\phi(p)|^2 \quad (1.1.15)$$

La importancia de este ejemplo estriba en que (1.1.15) es una distribución conjunta perfectamente bien definida (no negativa en todo el espacio de fases), de la cual es posible deducir en la forma usual las desigualdades de Heisenberg; lo que demuestra que es totalmente erróneo creer que estas últimas prohíben la e-

existencia de una mutación distribución en el espacio de fases. Claro está, que esta distribución presenta otros problemas [Cohen 66a, Brody 80].

Tratemos de resumir la situación: Por un lado tenemos los resultados de Thewell y Cohen que nos dicen que la mecánica cuántica no puede ser interpretada de manera consistente como una teoría estadística y, por otro lado, hemos visto que existe toda una familia de formulaciones "cuasi-probabilistas" de la mecánica cuántica y además que dichas formulaciones han demostrado ser de utilidad en diversas aplicaciones.

Una actitud posible ante esta situación es decir que dichas construcciones son útiles, pero que son formales; no es posible sacar de ellas ninguna conclusión respecto a la realidad; son formulaciones cuasi-probabilistas, no probabilistas. La otra actitud consiste en decir que si bien el formalismo actual de la mecánica cuántica no corresponde a una verdadera teoría estadística la analogía con este tipo de teoría es lo suficientemente fuerte para pensar que algo más profundo pueda existir detrás; desde este punto de vista vale la pena explorar aún más las formulaciones en el espacio de fases (este estudio puede, por ejemplo, sugerir modificaciones al formalismo actual).

Consistentemente con nuestra adopción de la interpretación estadística nosotros elegimos la segunda opción y estudiamos al-

gunos aspectos de la formulación de la mecánica cuántica en el espacio de fases. Las expresiones involucradas en la formulación de Cohen no permiten, dada su generalidad, hacer muchas conclusiones; por ello en el capítulo 3 de este trabajo estudiamos algunos aspectos de la formulación de Weyl-Wigner-Moyal que es un caso particular de la formulación de Cohen; con lo expuesto hasta este momento es imposible justificar la elección de esta formulación entre todas las otras (el que haya sido la primera no es, en principio, un argumento de peso en su favor); el único argumento que podemos esgrimir en favor de esta elección es de carácter pragmático; en efecto, la función de Wigner ha sido la más utilizada; es decir, es la que mayor éxito ha tenido en las aplicaciones.

Cabe señalar que Krüger y Poffyn [76] demostraron que solamente la función de Wigner satisface las condiciones de invariancia galileana, unitaridad, realidad y normalización; el mismo resultado se obtiene si se exige la invariancia galileana, el que la partícula libre se comporte clásicamente y que se obtengan las distribuciones mezcladas correctas; sin embargo, este resultado pierde toda la importancia teórica que podría tener cuando notamos que la condición de invariancia galileana sólo es satisfecha por los sistemas lineales [Brody 82].

El aspecto al que prestamos mayor atención en el capítulo 3 es el de la negatividad de la función de Wigner. Para estados puros en una dimensión Hudson [74] (y parcialmente Piquet [74]) ya mostró que únicamente los estados con función de onda Gaussiana tienen función de Wigner no negativa; en este trabajo (sección 3.3) se generaliza dicha demostración a n dimensiones y se muestra, además, que sólo los sistemas lineales conservan en su evolución temporal el carácter no negativo de la función de Wigner. En el caso de mezclas no existe aún una caracterización de los estados con función de Wigner no negativa; sin embargo, en este trabajo avanzamos un poco en ese sentido mostrando que la función de Green de la ecuación de evolución (1.1.11) de un sistema no lineal toma valores negativos para todo tiempo $t > 0$ (sección 3.6). También en el capítulo 3 analizamos algunas modificaciones que se han propuesto a la función de Wigner para tener una distribución de probabilidad (una función no negativa). Los resultados obtenidos en el capítulo 3 refuerzan la idea de que no en la distribución de Wigner la que hará de la mecánica cuántica una teoría estadística.

El segundo problema a que se debe enfrentar quien acepta la interpretación estadística es que al ser la mecánica cuántica una teoría incompleta queda abierta la pregunta acerca de la existencia de otra teoría más completa y fundamental. Entre los in-

tentos que se han realizado en esta dirección quisiéramos mencionar primeramente a las teorías de variables ocultas (ver [Bellinfante 72, Jammer 74] y referencias en estos trabajos), que si bien no tuvieron todo el éxito que se desearía mostraron que es posible hacer tales construcciones; podría uno atreverse a conjeturar que el relativo fracaso de las teorías de variables ocultas se debe a que intentan reproducir exactamente a la mecánica cuántica. El trabajo que se ha realizado en favor y en contra de este tipo de teorías ha llevado a la conclusión de que en caso de ser posible construir una teoría más completa que la mecánica cuántica, deberá ser de naturaleza estocástica [Brody 80]. Principalmente dos teorías estocásticas alternativas a la mecánica cuántica se han construido, una es la llamada mecánica cuántica estocástica y la otra es la electrodinámica estocástica.

Podemos considerar que la mecánica cuántica estocástica nace con un trabajo de Pónyes [52] en el cual se trata de interpretar a la mecánica cuántica como un proceso de Markov en el espacio de configuración; en esta misma dirección se dirigieron los trabajos de Kerschaw [64] y de Gomsar [65]. Estos trabajos tienen el defecto de querer interpretar estrictamente el proceso cuántico como un movimiento browniano. Nelson [66] desarrolla un formalismo matemático para describir la dinámica del proceso cuántico y logra derivar la ecuación de Schrödinger independiente del

tiempo ; aún cuando Nelson utiliza el lenguaje markoviano , en su trabajo se halla el germen de la respuesta a las objeciones levantadas contra la teoría ; en efecto , basándose en los trabajos de Nelson , L. de la Peña [57 y 62] desarrolla aún más el formalismo de la teoría , hasta cierto punto le da un sentido físico y , lo más importante , hace ver que el proceso subyacente a la mecánica cuántica tiene un carácter esencialmente distinto al del proceso browniano . Cabe señalar que Kevella [57] dedujo también la ecuación de Schrödinger de una formulación estocástica , pero los métodos utilizados en su trabajo son un poco pesados y no permiten avanzar más allá . Desde entonces se han desarrollado un gran número de trabajos en el tema (para un análisis más detallado del desarrollo de la teoría enviamos al lector a la revisión efectuada recientemente por A. Otero [32]).

Al sostener que los fenómenos cuánticos no son sino el resultado de un proceso estocástico subyacente , la mecánica cuántica estocástica explica un gran número de hechos ; sin embargo , el poder explicativo no es el único mérito de la teoría . Por un lado se permitió entender varios aspectos de la teoría de procesos estocásticos y también ha estimulado el desarrollo de métodos y técnicas en esta misma teoría ; por otro lado , su estudio ha originado la creación de métodos formales en la mecánica cuántica ; una ilustración de esta última afirmación la damos en el capítu-

lo 2. Ahí resolvemos de manera exacta el problema de valores propios de una clase amplia de Hamiltonianos ; esto lo logramos mediante una generalización de la fórmula de Feynman-Kac , cuya derivación es una consecuencia de la utilización de los métodos de la integral funcional en la mecánica cuántica estocástica . El estudio realizado en ese capítulo tiene implicaciones teóricas y prácticas ; las implicaciones teóricas aún no han sido estudiadas y no hablamos de ellas , mientras que algunas de las prácticas se analizan someramente .

Si bien la mecánica cuántica estocástica presenta una serie de aspectos positivos , tanto desde el punto de vista de la comprensión como del formal , hay que analizarla críticamente . Hay dos tipos de críticas expuestas en contra de la teoría : unas son de tipo técnico y tienen que ver , en su mayor parte , con el carácter Markoviano del proceso subcuántico . Otras son más fundamentales y se refieren a que es una teoría ad hoc ; en efecto , la teoría ha sido construida para reproducir la mecánica cuántica y no puede proporcionar ninguna indicación acerca del origen de la estocasticidad [de la Peña y cetero 78 , Brody 80 , Jammer 74 , Otero 82] . Este carácter fenomenológico de la teoría constituye una seria limitación tanto conceptual como metodológica y nos obliga a estudiar otras posibilidades .

Entre todas las alternativas la que nos parece más convincente es la de la electrodinámica estocástica (EDE). Esta teoría ha sido inventada de manera independiente por varios autores; en orden cronológico tenemos primero a Kalitsin [53], en 1954 a Adirovich y Fedoretzki [54] y a Braffort y colaboradores [Braffort y Tzara 54; Braffort, Epiguel y Tzara 54], en 1956 a Sokolov y Tumanov [56] y por último, en 1963 a Marshall [63] quien le dio el nombre y la dotó de cierta consistencia formal. Posteriormente la teoría ha sido desarrollada principalmente por Boyer [68], Santos [75], de la Peña y Cotto [75] y Claverie y Diner [75].

Las bases físicas de la EDE son simples: Una de las razones para desear a las teorías clásicas en la explicación del micro mundo es la inestabilidad del átomo de Rutherford; el argumento, bien conocido, se basa en que las leyes de la electrodinámica clásica predicen que toda partícula cargada radia cuando es acelerada y, por tanto, pierde energía; sin embargo, es fácil convencerse de que este argumento es incompleto. El argumento es válido para una partícula aislada, pero el electrón de un átomo no está aislado; todas las otras cargas del universo emiten radiación mediante el mismo mecanismo, y como estas radiaciones son incoherentes, el electrón se encontrará sumergido en un campo de radiación estocástico que le suministrará energía.

Permítanos decir que la EDE es la electrodinámica clásica con la hipótesis de que existe un campo electromagnético estocástico que llena todo el espacio. Hay varios argumentos para caracterizar al campo estocástico de fondo (por ejemplo, el requerir que el espectro sea un invariante relativista [Marshall 65a, Boyer 69] o que la energía del estado base del oscilador armónico sea la misma que en la mecánica cuántica [Braffort y Tzara 54, Marshall 63]; se encuentra que debe de tener media cero y densidad espectral

$$S(\omega) = \frac{2\hbar}{3c^3} |\omega|^3 \quad (1.1.16)$$

es decir, tiene propiedades equivalentes a las del campo de vacío de la electrodinámica cuántica (la diferencia estriba en que a este último se le considera virtual mientras que en la EDE se le considera real).

En el caso de sistemas lineales las predicciones de la EDE son bastante satisfactorias [Santos 74; Boyer 75; Claverie y Diner 77; de la Peña y Cotto 76, 77, 78a y 78b]. Sin embargo, los resultados obtenidos para sistemas no lineales, como el oscilador armónico [Pasquera 80a, 80b y 80c; Claverie 80] y el problema de Kepler [Claverie, de la Peña y Diner 77; Marshall y Claverie 80; Claverie 80; Pasquera 80a y 80b] no están de acuerdo con la teoría cuántica.

En el capítulo 4 de esta tesis demostramos que el proceso que la EDE asocia, en su estado actual, al átomo de hidrógeno es no recurrente. Físicamente esto quiere decir que la EDE produce un átomo de hidrógeno que se auto-ioniza (cabe señalar que lo mismo sucede en la mecánica cuántica cuando se utiliza en los cálculos la matriz de densidad de equilibrio a temperatura mayor que cero (ver [Brillouin 39] y la sección 4.6). Analizamos también algunas de las posibles razones de este comportamiento y basados en ellas sugerimos algunas posibles líneas de investigación.

Finalmente quisiéramos decir que el objetivo principal de esta introducción es demostrar que aún cuando los temas tratados en los diferentes capítulos de este trabajo no parecen tener conexión alguna, forman parte importante de un plan de trabajo mucho más general que tiene como objetivo una mejor comprensión de los fenómenos del micro-mundo, y por ende, de la mecánica cuántica. Desde la perspectiva aquí presentada el orden de los capítulos que siguen debería ser 3, 2 y 4; sin embargo, en la presentación hemos escogido un orden decreciente de ortodoxia.

CAPITULO 2

UNA GENERALIZACION DE LA FORMULA DE FEYNMAN-KAC

2.1 Introducción.

En 1942, R.P. Feynman inventó en su tesis doctoral una nueva formulación de la mecánica cuántica; este trabajo nunca fue publicado completo, pero la parte de mayor interés apareció en 1948 [Feynman 48]. En su forma más simple, el postulado de Feynman es que el propagador o función de Green $K(\bar{x}', t' | \bar{x}, t)$ para la función de onda $\Psi(\bar{x}, t)$ de un sistema, definido por

$$\Psi(\bar{x}', t') = \int K(\bar{x}', t' | \bar{x}, t) \Psi(\bar{x}, t) d\bar{x} \quad (2.1.1)$$

puede ser escrito como la integral de la exponencial de $1/\hbar$ veces la acción sobre todas las trayectorias $\bar{x}(t)$ que llevan al sistema del punto \bar{x} al tiempo t al punto \bar{x}' al tiempo t' ; es decir, que

$$K(\bar{x}', t' | \bar{x}, t) = A \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[\bar{x}(t)]\right\} d[\bar{x}(t)] \quad (2.1.2)$$

donde la acción está definida en la forma tradicional

$$S[\bar{x}(t)] = \int_t^{t'} L dt \quad (2.1.3)$$

con L el Lagrangiano y A un factor de normalización ([Feynman 48, Hibbs 60, Feynman y Hibbs 65]).

En un principio el trabajo de Feynman no fue bien acogido por la comunidad de físicos, debido aparentemente a su carácter poco usual y muy novedoso [Dyson 81]; sin embargo, algunas gentes familiarizadas con la teoría de procesos estocásticos

cos notaron inmediatamente que existía una analogía entre la integral inventada por Feynman y la integral que había sido introducida varios años antes por N. Wiener en su análisis del movimiento browniano [Wiener 23, 24 y 30]. En particular, M. Kac demostró [Kac 49] que si consideramos la ecuación diferencial parcial

$$\frac{\partial f(\bar{x}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \nabla^2 f(\bar{x}, t) - V_0(\bar{x}) f(\bar{x}, t) \quad (2.1.4)$$

con condiciones muy generales para la función $V_0(x)$ (por ejemplo que sea acotada por abajo), la solución fundamental o función de Green $G(\bar{x}, \bar{y}; t)$ es única y dada como

$$G(\bar{x}, \bar{y}; t) = \int_{\mathcal{N}(\bar{x}, \bar{y}; t)} \exp\left\{-\int_0^t V_0[\bar{x}(s)] ds\right\} D_{W(\bar{x}(\cdot); \bar{y}; t)} \quad (2.1.5)$$

donde $D_{W(\bar{x}(\cdot); \bar{y}; t)}$ es la medida condicional de Wiener y el conjunto $\mathcal{N}(\bar{x}, \bar{y}; t)$ es la clase de funciones continuas con valores vectoriales que satisfacen las condiciones $\bar{x}(0) = \bar{x}$ y $\bar{x}(t) = \bar{y}$ (ver [Kac 49 y 60, Gel'fand y Yaglom 60, Bruch 61, Simon 79 y Glimm y Jaffe 81]).

Para entender la analogía entre las expresiones (2.1.2) y (2.1.5) notemos primeramente que para tiempos imaginarios (2.1.4) no es sino la ecuación de Schrödinger. A partir de esta consideración, eliminemos la unidad imaginaria i de (2.1.2) y pensemos en la partícula libre; en ese caso la integral que resulta puede efectuarse y es posible demostrar que es equivalente

matemáticamente a la medida de Wiener. En otras palabras, (2.1.5) es (2.1.2) con tiempo imaginario y con la parte cinética de la acción incorporada en $D_W(\bar{x}|\bar{y};it)\bar{x}$.

La expresión (2.1.5) es conocida como la fórmula de Feynman-Kac. Es claro, que esta fórmula puede ser vista como la solución a un problema "perturbativo": en efecto, la medida de Wiener se construye a partir de la solución de la ecuación (2.1.4) con $V_0 = 0$ [Kac 60], y a partir del conocimiento de dicha solución resolvemos el problema con $V_0 \neq 0$. Desde luego, el potencial $V_0(\bar{x})$ no necesita ser pequeño respecto al Hamiltoniano no perturbado $-1/2 \nabla^2$.

Basándonos en este punto de vista, en este capítulo generalizamos la fórmula de Feynman-Kac. La idea es que si tenemos un Hamiltoniano

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2m} \nabla^2 + V_0(\bar{x}) \quad (2.1.6)$$

podamos incluir no sólo la parte cinética de la acción en la medida, como en (2.1.5), sino también la parte correspondiente al potencial $V_0(\bar{x})$. Para ello, es necesario construir una generalización de la medida de Wiener que corresponda a (2.1.6), así como la medida de Wiener corresponde a la ecuación de Schrödinger de la partícula libre; esto es posible asociando de alguna manera un proceso de difusión al Hamiltoniano \hat{H}_0 . Es justamente

aquí donde interviene la mecánica cuántica estocástica, ya que es ella la que nos proporciona dicho proceso (sección 2.2). Conociendo dicho proceso podemos usar las técnicas usuales de la teoría de procesos de Markov para crear la generalización deseada de la medida de Wiener; en la sección 2.3 construimos dicha generalización, así como la integral correspondiente. Con estos elementos demostramos en la sección 2.4 el equivalente de (2.1.5) y otras fórmulas relacionadas. En la sección 2.5 se consideran dos desarrollos adicionales; el primero de ellos se obtiene en el caso particular en que el proceso de difusión asociado sea ergódico y el segundo cuando el proceso de difusión se define a partir de un estado excitado del Hamiltoniano \hat{H}_0 . Finalmente dedicamos la sección 2.6 a notas y conclusiones.

2.2 El proceso de difusión.

Consideremos la ecuación de Schrödinger estacionaria

$$\hat{H}_0 \Psi(\bar{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0(\bar{x}) \right] \Psi(\bar{x}) = E \Psi(\bar{x}) \quad (2.2.1)$$

definida en \mathbb{R}^d .

Por el momento supondremos que el potencial $V_0(\bar{x})$ es tal que (las condiciones explícitas que $V_0(\bar{x})$ debe satisfacer pueden ser vistas en el capítulo 3 de [Glimm y Jaffe 81]):

- 1.- Existe un estado base con función propia $\Psi_0^{(1)}$ y valor propio $E_0^{(1)}$.

ii).- La función $\psi_0^{(s)}$ del estado base puede ser escogida real y estrictamente positiva (es decir, $\psi_0^{(s)} > 0$).

En estas condiciones es posible definir la transformación T que actúa sobre las funciones multiplicándolas por $1/\psi_0^{(s)}$ [Jona-Lasinio et al 81] :

$$T = \frac{1}{\psi_0^{(s)}} \quad (2.2.2)$$

La transformación de semejanza correspondiente transforma el Hamiltoniano "renormalizado"

$$\frac{E_0^{(s)} - \hat{H}_s}{\hbar} \quad (2.2.3)$$

en el operador [Jona-Lasinio et al 81]

$$\hat{L}^b \equiv T \frac{E_0^{(s)} - \hat{H}_s}{\hbar} T^{-1} = \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + \bar{b}(\bar{x}) - V \quad (2.2.4a)$$

donde

$$\bar{b}(\bar{x}) = \frac{\hbar}{2m} \nabla \left[\ln \psi_0^{(s)2} \right] \quad (2.2.4b)$$

Es fácil reconocer que \hat{L}^b es el generador infinitesimal de un proceso de difusión que tiene $\hbar/2m$ como coeficiente de difusión y $\bar{b}(\bar{x})$ dado por (2.2.4b) como coeficiente de arrastre [Arnold 73]. Por tanto, a todo Hamiltoniano \hat{H}_s que satisfaga las suposiciones hechas al comienzo de esta sección podemos asociarle, mediante \hat{L}^b , un proceso de difusión. Dicho proceso será denotado por $\bar{X}(t)$.

Es importante insistir en que esta asociación es puramente formal. En efecto, notemos primeramente que estamos estudiando únicamente el problema estacionario (2.2.1); la evolución temporal del sistema cuántico no tiene nada que ver (al menos en este contexto) con aquella del proceso de difusión; la cual será utilizada únicamente como un artificio matemático. La segunda observación consiste en que el coeficiente de arrastre (2.2.4b) depende de $\psi_0^{(s)}$, por tanto no es un campo vectorial definido independientemente como en el caso de los procesos de difusión (para una discusión de este problema ver [Gilson 68, Krocklauer 74 Ghirardi et al 78 y Grabert et al 79]).

Los problemas espectrales de \hat{H}_s y \hat{L}^b son matemáticamente equivalentes y desde el punto de vista de la teoría de ecuaciones diferenciales parciales presentan, en general, las mismas dificultades. Sin embargo, en el caso de \hat{L}^b además de las técnicas usuales pueden usarse métodos probabilistas; de esta manera Jona-Lasinio et al han estudiado algunos problemas en el límite semi-clásico [Jona-Lasinio et al 81]. Otra aplicación de esta equivalencia será analizada en la sección 2.5.

Damos ahora algunas de las propiedades del proceso de difusión generado por (2.2.4):

1.- Es un proceso temporalmente homogéneo.

Esto se debe a que tanto el coeficiente de difusión como el de

arrastrado no dependen del tiempo.

2.- La densidad de probabilidad estacionaria o medida invariante del proceso es la densidad de probabilidad $|\psi_0^{(0)}|^2$ del estado base del Hamiltoniano asociado.

Para demostrar esto basta hacer ver que

$$\hat{L}^f |\psi_0^{(0)}|^2 = 0 \quad (2.2.6)$$

donde \hat{L}^f es el operador de Fokker-Planck u operador hacia adelante (forward). El operador de Fokker-Planck es adjunto del de Kolmogorov o hacia atrás (backward), y es fácil convencerse de que puede ser obtenido de (2.2.3) mediante la transformación T^{-1} (es decir, la transformación que consiste en multiplicación por $\psi_0^{(0)}$):

$$\hat{L}^f = T^{-1} \frac{E_0^{(0)} - \hat{H}_0}{\hbar} T \quad (2.2.7)$$

Así (2.2.6) se transforma en

$$\psi_0^{(0)} \frac{E_0^{(0)} - \hat{H}_0}{\hbar} |\psi_0^{(0)}|^2 \frac{1}{\psi_0^{(0)}} = 0$$

o bien

$$\psi_0^{(0)} \frac{E_0^{(0)} - \hat{H}_0}{\hbar} \psi_0^{(0)} = 0 \quad (2.2.8)$$

lo cual es evidentemente cierto ya que $\psi_0^{(0)}$ es una función propia de \hat{H}_0 , con valor propio $E_0^{(0)}$.

Por tanto, si se escoge $|\psi_0^{(0)}|^2$ como densidad de probabilidad inicial, el proceso de difusión obtenido es estacionario y la

densidad de probabilidad estacionaria es $|\psi_0^{(0)}|^2$; en lo sucesivo escogeremos como tiempo inicial $t=0$.

Como el proceso es estacionario la probabilidad de que tome el valor \bar{y} al tiempo t_f si al tiempo t_i ($t_i < t_f$) tenía el valor \bar{x} , depende de la diferencia $t = t_f - t_i$; a esta probabilidad se le llama de transición y la denotaremos $p(\bar{x}|\bar{y};t)$. Esta densidad de probabilidad de transición es la función de Green dependiente del tiempo de la ecuación de Kolmogorov o ecuación hacia atrás (ecuación backward; debido a esto pusimos un índice b en el generador infinitesimal \hat{L}^b); en otras palabras $p(\bar{x}|\bar{y};t)$ satisface la ecuación

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_x^b \right) p(\bar{x}|\bar{y};t) = \delta(\bar{x}-\bar{y}) \delta(t) \quad (2.2.9)$$

La definición (2.2.9) es equivalente a decir que $p(\bar{x}|\bar{y};t)$ es el núcleo integral del operador $e^{t\hat{L}^b}$; es decir, que dada u una función $f \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$

$$[e^{t\hat{L}^b} f](\bar{x}) = \int_{\mathbb{R}^d} p(\bar{x}|\bar{y};t) f(\bar{y}) d\bar{y} \quad (2.2.10)$$

Finalizamos esta sección resumiendo la situación: A todo \hat{H}_0 hamiltoniano \hat{H}_0 que tiene un estado base con función propia $\psi_0^{(0)}$ estrictamente positiva y explícitamente conocida, podemos asociarle un proceso de difusión estacionario con generador infinitesimal \hat{L}^b (dado por (2.2.4)) y con $|\psi_0^{(0)}|^2$ como densidad de

probabilidad inicial (al tiempo $t=0$) y estacionaria. Además el problema de valores propios de \hat{H}_0 es equivalente al de \hat{L}^D .

2.3 La medida generalizada de Wiener.

Pasamos ahora a construir la medida asociada al proceso de difusión $\bar{x}(t)$ y a definir, a partir de ella, una integral sobre las trayectorias. El procedimiento de construcción de la medida es bien conocido (ver [Arnold 73, Gikhman y Skorokhod 65 y Friedman 75]) y por ello aquí sólo daremos los lineamientos generales.

Se construyen primero las distribuciones de dimensión finita. Dados $t_0=0 < t_1 < \dots < t_n < \infty$, se tiene que

$$P[(\bar{x}(t_0), \dots, \bar{x}(t_n)) \in B] = \int_{B_0} \dots \int_{B_n} |\varphi_n^{(t)}(\bar{x}_n)|^2 \\ p(\bar{x}_0 | \bar{x}_1; t_0 - t_1) \dots p(\bar{x}_{n-1} | \bar{x}_n; t_n - t_{n-1}) d\bar{x}_0 \dots d\bar{x}_n \quad (2.3.1)$$

donde el conjunto cilíndrico B está dado como

$$B = B_0 \times B_1 \times \dots \times B_n$$

con $B_j = \{ \bar{x} \in \mathbb{R}^d \mid \bar{a}_j < \bar{x} < \bar{b}_j, \bar{a}_j \text{ y } \bar{b}_j \text{ dados} \}$ ($i=0,1,\dots,n$) y donde $\bar{a} < \bar{b}$ significa $(\bar{a})_j < (\bar{b})_j$ para toda $j=1,2,\dots,d$.

Las distribuciones de dimensión finita (2.3.1) constituyen un conjunto simétrico y compatible y podemos aplicar el teore-

ma siguiente [Arnold 74 página 22, Friedman 75 página 1] :

Teorema de extensión o de Kolmogorov. -- Para cada familia simétrica y compatible de funciones de distribución de dimensión finita existe un espacio de probabilidad $(\mathcal{A}, \mathcal{F}, P)$ y un proceso estocástico $\{X(t), t \in [t_0, T]\}$, definido en dicho espacio, que tiene como distribuciones finitas las dadas.

Es decir, la medida (2.3.1) definida sobre los conjuntos cilíndricos pueda ser extendida a la clase de todas las funciones vectoriales del parámetro t . Supondremos que la medida resultante está concentrada en la clase \mathcal{A} de funciones continuas definidas en el intervalo $[0, t]$; esto significa que la medida exterior de \mathcal{A} es uno, o también, que se satisface el criterio de Kolmogorov para la continuidad de las trayectorias. Esta medida será denotada $D^{H_0} \bar{x}$ (el índice superior H_0 se refiere al Hamiltoniano al cual está asociado el proceso de difusión).

Pasamos a definir ahora la integral sobre las trayectorias. Dada una funcional $F[X(s)]$ definida en \mathcal{A} continua y acotada,

$$\int_{\mathcal{A}} F[\bar{x}(s)] D^{H_0} \bar{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} F(\bar{x}_0, \dots, \bar{x}_n) |\varphi_n^{(t)}(\bar{x}_0)|^2$$

$$p(\bar{x}_0 | \bar{x}_n; t/n) \dots p(\bar{x}_{n-1} | \bar{x}_n; t/n) d\bar{x}_0 \dots d\bar{x}_n \quad (2.3.2)$$

donde la función $P(\bar{x}_0, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n)$ de $n+1$ variables se obtiene evaluando la funcional $F[X(s)]$ para la trayectoria escalonada $\bar{x}_n(s)$, que coincide con $\bar{X}(s)$ en los puntos $\bar{X}(t_0)=\bar{x}_0$, $\bar{X}(t_1)=\bar{x}_1, \dots, \bar{X}(t_n)=\bar{x}_n$ con $t_i = it/n, i=0,1,\dots,n$. La su posición hecha respecto a la continuidad de las trayectorias del proceso es suficiente para garantizar que (2.3.2) exista.

Desde luego, la integral de la funcional $F[X(s)]$ puede ser definida de una manera matemáticamente rigurosa. Para ello basta considerar el proceso canónico $((\mathbb{R}^d, \mathcal{F}, \mathbb{P}, \bar{X}(s))$ correspondiente a las distribuciones de dimensión finita (2.3.1) [Meyer 66]. Por hipótesis $\Gamma^*(\mathcal{A})=1$ (\mathbb{P}^* es la medida exterior asociada a \mathbb{P}) y podemos tomar la versión continua $(\mathcal{A}, \mathbb{B}(\mathcal{A}), \mathbb{D}^{\mathbb{H}^*} \bar{X}, \bar{X}(s))$ del proceso. Desde este punto de vista la integral funcional (2.3.2) no es sino el valor esperado de $F[X]$. A la medida $\mathbb{D}^{\mathbb{H}^*} \bar{X}$ la llamaremos medida generalizada de Wiener.

El lema siguiente establece de manera explícita la relación que existe entre el operador \tilde{L}^b y la integral funcional que acabamos de definir:

Lema 2.3.1 Sean f_0, f_1, \dots, f_n funciones de $L^\infty(\mathbb{R}^d)$ y $-\infty < s_0 < \dots < s_n < \infty$. Entonces

$$\int_{\mathcal{A}} f_0[\bar{X}(s_0)] \dots f_n[\bar{X}(s_n)] \mathbb{D}^{\mathbb{H}^*} \bar{X} = (\varphi_0^{\mathbb{H}^*} \varphi_1^{\mathbb{H}^*} f_0 e^{\tilde{L}^b f_1} \dots) \quad (2.3.3)$$

donde $t_i = s_i - s_{i-1}, i=1,2,\dots,n$.

Demostración. — Recordemos primeramente que $p(\bar{x}|\bar{y};t)$ es el núcleo integral de $e^{\tilde{L}^b}$; es decir, que si $f \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$,

$$[e^{\tilde{L}^b} f](\bar{x}) = \int_{\mathbb{R}^d} p(\bar{x}|\bar{y};t) f(\bar{y}) d\bar{y} \quad (2.3.4)$$

Por tanto, el lado derecho de (2.3.3) puede escribirse

$$\int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} f_0(\bar{x}_0) \dots f_n(\bar{x}_n) |\varphi_0^{\mathbb{H}^*}(\bar{x}_0)|^2 p(\bar{x}_0|\bar{x}_1;t_1) p(\bar{x}_1|\bar{x}_2;t_2) \dots p(\bar{x}_{n-1}|\bar{x}_n;t_n) d\bar{x}_0 d\bar{x}_1 \dots d\bar{x}_n \quad (2.3.5)$$

que debido a la definición dada en (2.3.2) puede escribirse como

$$\int_{\mathcal{A}} f_0[\bar{X}(s_0)] f_1[\bar{X}(t_1)] f_2[\bar{X}(t_1+t_2)] \dots f_n[\bar{X}(t_1+t_2+\dots+t_n)] \mathbb{D}^{\mathbb{H}^*} \bar{X}$$

Usando ahora la estacionaridad del proceso nos queda

$$\int_{\mathcal{A}} f_0[\bar{X}(s_0)] f_1[\bar{X}(s_0+t_1)] \dots f_n[\bar{X}(s_0+t_1+\dots+t_n)] \mathbb{D}^{\mathbb{H}^*} \bar{X}$$

lo cual nos da el lado izquierdo de (2.3.3) si hacemos $t_i = s_i - s_{i-1}$ con $i=1,2,\dots,n$.

Para finalizar esta sección introducimos otras dos medidas

que están estrechamente ligadas con $D^{H_0} \bar{x}$; estas son las medidas condicionales (existen algunas otras posibilidades de condicionamiento, pero en este trabajo no serán utilizadas):

a) La medida generalizada de Wiener con condicionamiento inicial.

Si en (2.3.1) no efectuamos la integración respecto a la variable \bar{x}_0 y dividimos entre $|\Psi_0^{(a)}|^2$ obtenemos otro conjunto compatible de distribuciones de dimensión finita. Se puede probar que la extensión de esta medida (hecha en la forma usual) está concentrada en el conjunto $\mathcal{L}(\bar{a}, 0)$ de funciones vectoriales continuas en $[0, t]$ que satisfacen la condición inicial $\bar{x}(0) = \bar{a}$ (para evitar confusiones la variable \bar{x}_0 ha sido sustituida por \bar{a}). Por razones evidentes la llamaremos medida generalizada de Wiener con condicionamiento inicial y la denotaremos $D_{(\bar{a}, 0)}^{H_0} \bar{x}$.

Debe notarse que en el caso específico de la partícula libre la medida que corresponde a la de Wiener es $D_{(\bar{a}, 0)}^{H_0} \bar{x}$ y no $D^{H_0} \bar{x}$; esta última no es normalizable en el caso de la partícula libre.

b) La medida generalizada y condicional de Wiener. Las distribuciones de dimensión finita de esta medida se obtienen de las de $D_{(\bar{a}, 0)}^{H_0} \bar{x}$ eliminando la integración sobre la variable "final" \bar{x}_t .

Esta medida está concentrada en el conjunto $\mathcal{L}(\bar{a}, 0; \bar{b}, t)$ de funciones vectoriales continuas en $[0, t]$ tales que $\bar{x}(0) = \bar{a}$ y $\bar{x}(t) = \bar{b}$; esta medida no está normalizada, la medida del espacio $\mathcal{L}(\bar{a}, 0; \bar{b}, t)$ es $p(\bar{a}|\bar{b}; t)$.

Es evidente que las tres medidas introducidas hasta ahora deben obtenerse unas de otras mediante integraciones apropiadas; a continuación damos, sin demostración, estas relaciones:

$$\int_{\mathcal{L}} F[\bar{x}(s)] D^{H_0} \bar{x} = \int_{\mathbb{R}^d} |\Psi_0^{(a)}(\bar{z})|^2 \left[\int_{\mathcal{L}(\bar{z}, 0)} F[\bar{x}(s)] D_{(\bar{z}, 0)}^{H_0} \bar{x} \right] d\bar{z} \quad (2.3.6)$$

$$\int_{\mathcal{L}(\bar{z}, 0)} F[\bar{x}(s)] D^{H_0} \bar{x} = \int_{\mathbb{R}^d} \left[\int_{\mathcal{L}(\bar{z}, 0; \bar{b}, t)} F[\bar{x}(s)] D_{(\bar{z}, 0; \bar{b}, t)}^{H_0} \bar{x} \right] d\bar{b} \quad (2.3.7)$$

2.4 La fórmula generalizada de Feynman-Kac.

Consideremos ahora el problema de un Hamiltoniano H que se puede escribir en la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V \quad (2.4.1)$$

donde \hat{H}_0 es un Hamiltoniano que satisface las condiciones de las secciones precedentes y V es un potencial que debe satisfacer ciertas condiciones de regularidad que serán precisadas un poco más adelante. Como ya se indicó aún cuando (2.4.1) está escrito en la forma de un problema perturbativo, el potencial V no necesita ser "pequeño". Pasamos a demostrar la fórmula generalizada de Feynman-Kac, pero antes recordamos al lector que un operador simétrico \hat{O} es esencialmente autoadjunto si su ce-

radura \hat{O}^{**} es autoadjunta [Kato 66 página 209].

Teorema 2.4.1 Sea $V(\bar{x})$ una función de \mathbb{R}^d en \mathbb{R} continua y acotada por abajo y \hat{H} esencialmente autoadjunto. Entonces

$$(f \psi_0^{(n)}, e^{-t \frac{\hat{H}_n - E_0^{(n)}}{\hbar}} g \psi_0^{(n)}) = \int_{\Omega} f^*[\bar{x}(0)] g[\bar{x}(t)] e^{-\frac{t}{\hbar} \int_0^t V[\bar{x}(s)] ds} \mathcal{D}^{\mu_0} \bar{x} \quad (2.4.2)$$

para todas $f, g \in L^2(\mathbb{R}^d, |\psi_0^{(n)}|^2 dx)$.

Demostración.— Sea I el miembro izquierdo de (2.4.2). Usando (2.4.1) y la fórmula del producto de Trotter,

$$I = \lim_{n \rightarrow \infty} (f \psi_0^{(n)}, [e^{-\frac{t}{\hbar} \frac{\hat{H}_0 - E_0^{(n)}}{\hbar}} e^{-\frac{t}{\hbar} \frac{V}{\hbar}}]^n g \psi_0^{(n)}) \quad (2.4.3)$$

De la definición de \hat{L}^b (ecuaciones (2.2.4)) podemos poner

$$\exp\left\{-\frac{t}{\hbar} \frac{\hat{H}_0 - E_0^{(n)}}{\hbar}\right\} = T^{-1} e^{\frac{t}{\hbar} \hat{L}^b} T \quad (2.4.4)$$

Así

$$I = \lim_{n \rightarrow \infty} (f \psi_0^{(n)}, \psi_0^{(n)} [e^{\frac{t}{\hbar} \hat{L}^b} e^{-\frac{t}{\hbar} \frac{V}{\hbar}}]^n g) \quad (2.4.5)$$

que por el lema 2.3.1 se puede poner como

$$I = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} f^*[\bar{x}(0)] g[\bar{x}(t)] \prod_{j=1}^n e^{-\frac{t}{\hbar} \frac{1}{\hbar} V[\bar{x}(t_j)]} \mathcal{D}^{\mu_0} \bar{x} \quad (2.4.6)$$

Como la trayectoria \bar{x} es continua en casi todas partes

$$\frac{t}{n} \sum_{j=1}^n V[\bar{x}(jt/n)] \rightarrow \int_0^t V[\bar{x}(s)] ds$$

cundo $n \rightarrow \infty$, para casi toda \bar{x} . Además, el integrando en (2.4.6) está dominado por $|f[\bar{x}(0)]| |g[\bar{x}(t)]| \exp(-t \|V\|_{\infty})$ que es tal que

$$\int_{\Omega} |f[\bar{x}(0)]| |g[\bar{x}(t)]| e^{-\frac{t}{\hbar} \|V\|_{\infty}} \mathcal{D}^{\mu_0} \bar{x} \leq \int_{\Omega} |f[\bar{x}(0)]|$$

$$|g[\bar{x}(t)]| \mathcal{D}^{\mu_0} \bar{x} = (|f|, e^{t \hat{L}^b} |g|) < \infty$$

o sea que pertenece a L^1 . Entonces, por el teorema de convergencia dominada de Lebesgue

$$I = \int_{\Omega} f^*[\bar{x}(0)] g[\bar{x}(t)] \exp\left\{-\frac{t}{\hbar} \int_0^t V[\bar{x}(s)] ds\right\} \mathcal{D}^{\mu_0} \bar{x}$$

lo cual completa la demostración.

Las condiciones que impone este teorema al potencial V son muy restrictivas; en particular, el potencial Coulombiano está excluido. Sin embargo, es posible extenderlo a una clase más amplia de potenciales V . A continuación enunciamos en forma de teorema esta extensión; la demostración no la damos ya que es similar a la dada por Simon 79 para el caso de la forma usual de Feynman-Kac. Antes vamos a recordar algunas definiciones: Dada V , se define $V_+ = \sup(V, 0)$ y $V_- = -\inf(V, 0)$; además que $f \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^d \setminus \Lambda)$ significa que $\int_{\Omega} |f| d\bar{x} < \infty$, para todo

subconjunto B de $\mathbb{R}^d \setminus A$ que sea compacto (es decir, $|f|$ es localmente integrable).

Teorema 2.4.2 Sea $V \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^d \setminus A)$, donde A es un conjunto cerrado de medida cero; y tal que la norma relativa, con respecto a \hat{H}_0 , de V es menor que uno; es decir [Kato 69 página 190], $D(\hat{H}_0) \subset D(V)$ ($D(\hat{\delta})$ es el dominio del operador $\hat{\delta}$) y

$$|(h, Vh)| \leq \alpha (h, Hh) + \mathcal{C} (h, h) \quad (2.4.7)$$

con $0 \leq \alpha < 1$ y $\mathcal{C} \geq 0$ y para toda $h \in D(\hat{H}_0)$. Entonces (2.4.2) se satisface.

La expresión (2.4.2) no está escrita en la forma en que comúnmente se encuentra la fórmula de Feynman-Kac; por esta razón damos en el siguiente corolario la forma explícita del núcleo integral del operador $\exp(-t \frac{\hat{H} - E_0^{(0)}}{\hbar})$:

Corolario 2.4.1 Sea $K_t(\bar{a}, \bar{b})$ el núcleo integral de $\exp(-t \frac{\hat{H} - E_0^{(0)}}{\hbar})$, si las condiciones del teorema 2.4.2 se satisfacen

$$K_t(\bar{a}, \bar{b}) = \int_{\Omega(\bar{a}, 0; \bar{b}, t)} \frac{\psi_0^{(0)}[\bar{x}(0)]}{\psi_0^{(0)}[\bar{x}(t)]} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^t V[\bar{x}(s)] ds \right\} D_{(\bar{a}, 0; \bar{b}, t)}^{\mu_0} \bar{x} \quad (2.4.8)$$

Demostración. - Escribimos usando (2.3.6) y (2.3.7) la expresión (2.4.2) en términos de la medida $D_{(\bar{a}, 0; \bar{b}, t)}^{\mu_0} \bar{x}$ y después hacemos $\tau = \delta_2 / \psi_0^{(0)}$ y $\sigma = \delta_1 / \psi_0^{(0)}$.

Cuando \hat{H}_0 es el Hamiltoniano de la partícula libre, (2.4.8) se transforma en la fórmula de Feynman-Kac usual. La generalización que consiste en tomar el oscilador armónico como sistema "no perturbado" ya ha sido estudiada en la literatura (ver, por ejemplo, [Simon 79 y Glimm y Jaffe 81]).

Estudiemos ahora algunas de las consecuencias de la fórmula generalizada de Feynman-Kac. Primeramente derivamos expresiones para la energía y la función de onda del estado base de \hat{H} :

Corolario 2.4.2 Con las mismas hipótesis del teorema 2.4.2 se tiene

$$\inf \text{spec}(\hat{H} - E_0^{(0)}) \leq E_0 - E_0^{(0)} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \left[\int_{\Omega} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^t V[\bar{x}(s)] ds \right\} D_{\Omega}^{\mu_0} \bar{x} \right] \quad (2.4.9)$$

Demostración. - Simon ha dado la demostración en el caso en que \hat{H}_0 es el oscilador armónico [Simon 79 página 52]. Como en este caso se puede aplicar la misma prueba no creemos conveniente repetirla.

Corolario 2.4.3 Si las hipótesis del teorema 2.4.2 se satisfacen, entonces

$$\frac{\psi_0(E)}{(\psi_0, \psi_0^{(0)})} = \psi_0^{(0)}(\bar{x}) \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\int_{\Omega(E, 0)} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^t V[\bar{x}(s)] ds \right\} D_{(\bar{x}, 0)}^{\mu_0} \bar{x}}{\int_{\Omega} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^t V[\bar{x}(s)] ds \right\} D_{\Omega}^{\mu_0} \bar{x}} \quad (2.4.10)$$

Demostración.- Notemos primero que

$$\begin{aligned} e^{-t \frac{H-E_0^{(n)}}{\hbar}} \varphi_0^{(n)} &= e^{-t \frac{E_0-E_0^{(n)}}{\hbar}} e^{-t \frac{H-E_0}{\hbar}} \varphi_0^{(n)} = \\ &= e^{-t \frac{E_0-E_0^{(n)}}{\hbar}} \sum_n \varphi_n e^{-t \frac{E_n-E_0}{\hbar}} (\varphi_n, \varphi_0^{(n)}) \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

Por tanto

$$\frac{(\delta \bar{x}, e^{-t \frac{H-E_0^{(n)}}{\hbar}} \varphi_0^{(n)})}{(\varphi_0^{(n)}, e^{-t \frac{H-E_0^{(n)}}{\hbar}} \varphi_0^{(n)})} = \frac{\sum_n \varphi_n(\bar{x}) (\varphi_n, \varphi_0^{(n)}) e^{-t \frac{E_n-E_0}{\hbar}}}{\sum_n (\varphi_n, \varphi_0^{(n)})^2 e^{-t \frac{E_n-E_0}{\hbar}}} \quad (2.4.12)$$

Tomemos ahora el límite cuando $t \rightarrow \infty$. En el lado derecho de (2.4.12) tanto el numerador como el denominador tienen límites finitos; de hecho

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sum_n \varphi_n(\bar{x}) (\varphi_n, \varphi_0^{(n)}) e^{-t \frac{E_n-E_0}{\hbar}} = \varphi_0(\bar{x}) (\varphi_0, \varphi_0^{(n)}) \quad (2.4.13a)$$

y

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sum_n (\varphi_n, \varphi_0^{(n)})^2 e^{-t \frac{E_n-E_0}{\hbar}} = |(\varphi_0, \varphi_0^{(n)})|^2 \quad (2.4.13b)$$

Entonces

$$\frac{\varphi_0(\bar{x})}{(\varphi_0, \varphi_0^{(n)})} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{(\delta \bar{x}, e^{-t \frac{H-E_0^{(n)}}{\hbar}} \varphi_0^{(n)})}{(\varphi_0^{(n)}, e^{-t \frac{H-E_0^{(n)}}{\hbar}} \varphi_0^{(n)})} \quad (2.4.14)$$

Usando finalmente la fórmula generalizada de Feynman-Kac (ecuación (2.4.2)) y la definición de la medida condicional (ecuación (2.3.7)) obtenemos (2.4.10).

Es importante notar que tanto (2.4.9) como (2.4.10) no son expresiones formales, pueden calcularse realmente, aún cuando

dicho cálculo pueda presentar serias dificultades. Notese también que con expresiones en "forma cerrada" para la diferencia de energía $\Delta E_0 = E_0 - E_0^{(0)}$ y la función del estado base y por tanto reemplazan los desarrollos usuales de perturbaciones, los cuales pueden ser obtenidos a partir de ellas. Pasamos ahora a demostrar esta última afirmación; en el inciso a) obtenemos las fórmulas usuales de perturbación de Born a primer y segundo orden para la energía y en el b) a primer orden para la función de onda.

a) En (2.4.9) sustituimos V por λV y desarrollamos en potencias de λ , primero la exponencial y luego el logaritmo, para obtener

$$\begin{aligned} \Delta E_0 &= - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{E}{t} \left\{ - \frac{\lambda}{\hbar} \int_0^t \left[\int_0^s V[\bar{x}(s)] ds \right] D^N \bar{x} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\lambda^2}{2\hbar^2} \int_0^t \left[\int_0^s V[\bar{x}(s_1)] ds_1 \right] \left[\int_0^{s_2} V[\bar{x}(s_2)] ds_2 \right] D^N \bar{x} + O(\lambda^3) \right\} \end{aligned}$$

Usando ahora el teorema de Fubini para intercambiar la integral sobre las trayectorias y la integral temporal, tenemos

$$\Delta E_0^{(1)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\lambda}{t} \int_0^t \left[\int_{\Lambda} V[\bar{x}(s)] D^N \bar{x} \right] ds \quad (2.4.15)$$

y

$$\Delta E_0^{(2)} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\lambda^2}{\hbar t} \int_0^t \left[\int_0^{t-s} R_{VV}^*(\tau) d\tau \right] ds \quad (2.4.16)$$

donde R_{VV}^c es la función de dispersión

$$R_{VV}^c(\tau) = \int_{\Lambda} [V[\bar{X}(s_1)] - \langle V \rangle] [V[\bar{X}(s_2)] - \langle V \rangle] D^{n_0} \bar{X} \quad (2.4.17)$$

con $\langle V \rangle$ el valor medio de V , y $s_2 - s_1 = \tau$.

Para el término de primer orden (ecuación (2.4.15)) la integral sobre las trayectorias da trivialmente $\langle V \rangle$, que es una constante, y obtenemos la fórmula usual

$$\Delta E_0^{(1)} = (\psi_0^{(0)}, V \psi_0^{(0)}) = v_{00} \quad (2.4.18)$$

En el caso del término de segundo orden (2.4.16) notemos primero que del lema 2.3.1 y la ecuación (2.2.4a)

$$R_{VV}^c(\tau) = (\psi_0^{(0)}, V e^{\tau \frac{E_0^{(0)} - \hat{H}}{\hbar}} V \psi_0^{(0)}) - (\psi_0^{(0)}, V \psi_0^{(0)})^2$$

que usando la forma explícita de la resolvente de $\exp\{\tau \frac{E_0^{(0)} - \hat{H}}{\hbar}\}$

se transforma en

$$R_{VV}^c(\tau) = \sum_{k \neq 0} (\psi_k^{(0)}, V \psi_k^{(0)}) e^{\tau \frac{E_k^{(0)} - E_0^{(0)}}{\hbar}} (\psi_k^{(0)}, V \psi_k^{(0)})$$

Efectuando las integraciones sobre τ y s indicadas en (2.4.16) y tomando el límite se obtiene

$$\Delta E_0^{(2)} = \sum_{k \neq 0} \frac{|v_{0k}|^2}{E_k^{(0)} - E_0^{(0)}} \quad (2.4.19)$$

como se quería demostrar.

b) Igual que para la energía sustituimos λV por V en (2.4.10), desarrollamos en potencias de λ , primero la exponencial y luego

el denominador, y utilizamos el teorema de Fubini para intercambiar la integral sobre las trayectorias y la integral temporal, obteniéndose a primer orden en λ ,

$$\frac{\psi_0^{(1)}(\bar{x})}{(\psi_0, \psi_0^{(1)})} = \psi_0^{(0)}(\bar{x}) \lim_{t \rightarrow \infty} \left\{ 1 - \frac{\lambda}{\hbar} \int_0^t \left[\int_{\Lambda(s, s')} V[\bar{X}(s)] D^{n_0} \bar{X} \right] ds + \frac{\lambda}{\hbar} \int_0^t \left[\int_{\Lambda} V[\bar{X}(s)] D^{n_0} \bar{X} \right] ds \right\}$$

Usando ahora (2.3.6), el lema 2.3.1 y (2.2.4a)

$$\begin{aligned} \frac{\psi_0^{(1)}(\bar{x})}{(\psi_0, \psi_0^{(1)})} &= \lim_{t \rightarrow \infty} \left\{ \psi_0^{(0)}(\bar{x}) - \frac{\lambda}{\hbar} \int_0^t \left[e^{\tau \frac{E_0^{(0)} - \hat{H}}{\hbar}} V \psi_0^{(0)} \right](\bar{x}) ds + \right. \\ &+ \frac{\lambda}{\hbar} \psi_0^{(0)}(\bar{x}) \int_0^t \langle V \rangle ds \left. \right\} = \lim_{t \rightarrow \infty} \left\{ \psi_0^{(0)}(\bar{x}) - \frac{\lambda}{\hbar} \sum_{k \neq 0} \int_0^t e^{\tau \frac{E_k^{(0)} - E_0^{(0)}}{\hbar}} \psi_k^{(0)}(\bar{x}) v_{0k} ds + \right. \\ &+ \left. \frac{\lambda}{\hbar} \psi_0^{(0)}(\bar{x}) t \langle V \rangle \right\} \end{aligned}$$

Efectuando la integración sobre la variable t

$$\frac{\psi_0^{(1)}(\bar{x})}{(\psi_0, \psi_0^{(1)})} = \lim_{t \rightarrow \infty} \left\{ \psi_0^{(0)}(\bar{x}) + \lambda \sum_{k \neq 0} \frac{v_{0k}}{E_k^{(0)} - E_0^{(0)}} (1 - e^{\tau \frac{E_k^{(0)} - E_0^{(0)}}{\hbar}}) \psi_k^{(0)}(\bar{x}) \right\}$$

que da finalmente

$$\frac{\psi_0^{(1)}(\bar{x})}{(\psi_0, \psi_0^{(1)})} = \psi_0^{(0)}(\bar{x}) + \lambda \sum_{k \neq 0} \frac{v_{0k}}{E_k^{(0)} - E_0^{(0)}} \psi_k^{(0)}(\bar{x}) \quad (2.4.20)$$

que es la expresión usual a primer orden.

Hasta ahora hemos considerado únicamente valores esperados respecto al estado base $\psi_0^{(0)}$ del Hamiltoniano "no perturbado" \hat{H}_0 . Expresiones que involucran los valores esperados respecto al estado base ψ_0 de \hat{H} son útiles: así, siguiendo a Glimm y Jaffe

[En sección 3.4] derivamos ahora algunas fórmulas de ese tipo.

Corolario 2.4.4 Dadas $f_1, \dots, f_n \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$ y $s_0=0 < s_1 < s_2 < \dots < s_n < t$, se tiene

$$(\psi_0, f_1 e^{-(s_1-s_0)\frac{\hat{H}}{2}} f_2 \dots e^{-(s_n-s_{n-1})\frac{\hat{H}}{2}} f_n \psi_0) = (\psi_0, \psi_0^{(n)})^{-2}$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{\Omega} f_1[\bar{x}(s_1)] \dots f_n[\bar{x}(s_n)] e^{\lambda \tau} \left\{ -\frac{1}{h} \int_0^t (V[\bar{x}(s)] - E_0^{(n)}) \mathcal{D}^{M_0} \bar{x} \right. \quad (2.4.21)$$

Demostración. -- Para demostrar este corolario se procede igual que en el lema 2.3.1, sustituyendo el operador \hat{L}^b por \hat{H} y $p(\bar{x}|\bar{y};t)$ por (2.4.8); de esta manera se obtiene

$$(\psi_0^{(n)}, f_1 e^{-(s_1-s_0)\frac{\hat{H}}{2}} f_2 \dots f_n e^{-(s_n-s_{n-1})\frac{\hat{H}}{2}} \psi_0^{(n)}) = \int_{\Omega} f_1[\bar{x}(s_1)] \dots f_n[\bar{x}(s_n)] e^{\lambda \tau} \left\{ -\frac{1}{h} \int_0^t (V[\bar{x}(s)] - E_0^{(n)}) \mathcal{D}^{M_0} \bar{x} \right. \quad (2.4.22)$$

Haciendo $f_0 \equiv 1$, utilizando que \hat{H} es autoadjunto y la invariancia ante traslaciones temporales, podemos poner el lado izquierdo de (2.4.22) como

$$\left(e^{-(s_0+\frac{\tau}{2})\frac{\hat{H}}{2}} \psi_0^{(n)}, f_1 e^{-(s_1-s_0)\frac{\hat{H}}{2}} f_2 \dots f_n e^{-(s_n-s_{n-1})\frac{\hat{H}}{2}} \psi_0^{(n)} \right)$$

pero

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{-(\frac{\tau}{2}+\kappa)\frac{\hat{H}}{2}} \psi_0^{(n)} = (\psi_0, \psi_0^{(n)}) \psi_0$$

Tomando el límite cuando $t \rightarrow \infty$ se obtiene (2.4.21).

2.5 Otros desarrollos y aplicaciones.

En esta sección dos desarrollos adicionales son analizados:
1.- El primero se obtiene cuando además de las suposiciones 1 y ii de la sección 2 de este capítulo (es decir, que $\psi_0^{(n)}$ existe, es real y estrictamente positiva) suponemos que la función $\psi_0^{(n)}$ del estado base es de cuadrado integrable, o sea, que $\psi_0^{(n)} \in L^2(\mathbb{R}^d)$. En este caso el proceso de difusión tiene una nueva propiedad que es la siguiente:
3.- El proceso de difusión $\bar{X}(t)$ es ergódico.

Esta es una consecuencia directa de un teorema probado por Khas'minskii, que dice que un proceso de difusión que tiene una densidad de probabilidad estacionaria finita (integrable) es recurrente [Khas'minskii 60] (ver también [McKean 69, Stroock y Varadhan 79]). Como $\psi_0^{(n)}$ es la densidad de probabilidad estacionaria (supuesta aquí integrable) y como la recurrencia implica ergodicidad la propiedad 3 se sigue de inmediato.

Usando la ergodicidad del proceso vamos a escribir todas las fórmulas de la sección anterior como integrales temporales sobre una sola de las trayectorias. Para ello analizamos la definición de la integral funcional dada en la sección 2.3. De (2.3.2) tenemos (V es acotada y continua)

$$\int_{\Omega} F[\bar{x}(s)] \mathcal{D}^{M_0} \bar{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} F[\bar{x}_n(s)] \mathcal{D}^{M_0} \bar{x} \quad (2.5.1)$$

Como $\bar{x}_n(s)$ es una trayectoria "escalonada", $\rho[\bar{x}_n(u)]$ es lo que como una función de un número finito de variables (igual al número de "escalones") y cada término en el límite un valor escogido usual; por tanto, usando la propiedad de ergodicidad podemos escribir

$$\int_{\Omega} F[\bar{x}_n(s)] D^n \bar{x} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T F(\bar{x}_n(s+\tau) \dots \bar{x}_n(s+\tau)) d\tau \quad (2.5.2)$$

donde \bar{x}_0 es una trayectoria arbitraria.

Sustituyendo en (2.5.1) e intercambiando los límites encontramos que

$$\int_{\Omega} F[\bar{x}(s)] D^n \bar{x} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T F[\bar{x}_n(s+\tau)] d\tau \quad (2.5.3)$$

De esta manera es posible escribir la fórmula generalizada de Feynman-Kac como

$$\langle f | \psi_0^{(n)}, \exp[-t \frac{\hat{H} - E_0^{(n)}}{\hbar}] | \psi_0^{(n)} \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \int_{\Omega} f^*[\bar{x}_n(\tau)] g[\bar{x}_n(\tau+t)] \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau}^{\tau+t} V[\bar{x}_n(s)] ds\right\} d\tau \quad (2.5.4)$$

Es claro que se pueden escribir expresiones similares para las fórmulas (2.4.8), (2.4.9), (2.4.10) y (2.4.21).

Como los coeficientes de difusión y de arrastre del proceso son conocidos (ver (2.2.4)), podemos simular la trayectoria \bar{x} en una computadora y calcular numéricamente las integrales temporales involucradas en la fórmula (2.5.4) y en las que se ob-

tendrían de aquellas de la sección 2.4. Esto puede ser de gran utilidad en las aplicaciones ya que (2.4.2), (2.4.9) y (2.4.10) son soluciones exactas al problema de valores propios del Hamiltoniano \hat{H} .

Además de las aplicaciones posibles que acabamos de mencionar existe un ejemplo concreto de aplicación que no involucra a la fórmula generalizada de Feynman-Kac y es el siguiente:

La solución aproximada al problema de valores propios de un Hamiltoniano \hat{H}_0 cuya función de onda del estado fundamental es real, estrictamente positiva y de cuadrado integrable.

i.- Notemos primero que el problema espectral de \hat{H}_0 está resuelto si se conoce su resolvente, o bien, por las consideraciones precedentes, si se conoce la resolvente de \hat{L}^b , es decir, el núcleo $G(\bar{x}, \bar{y}; z)$ del operador $(\hat{L}^b - z)^{-1}$. Sin embargo, es evidente que

$$G(\bar{x}, \bar{y}; z) = \int_0^{\infty} e^{-zt} p(\bar{x}|\bar{y}; t) dt \quad (2.5.5)$$

y por tanto, nuestro problema está resuelto si podemos calcular $p(\bar{x}|\bar{y}; t)$.

ii.- Mostramos ahora que

$$p(\bar{x}|\bar{y}; t) = \frac{\mathcal{B}_{\bar{x}, \bar{y}}(\bar{x}, t)}{|\psi_0^{(n)}(\bar{x})|^2} \quad (2.5.6)$$

donde

$$\mathfrak{B}_{AB}(t) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} A(\bar{x}_1) B(\bar{x}_2) E_2(\bar{x}_1, t_1; \bar{x}_2, t_2) d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \quad (2.5.7)$$

es la función de correlación de dos funciones A y B, $P_2(\bar{x}_1, t_1; \bar{x}_2, t_2)$ es la densidad de probabilidad de que el punto esté en \bar{x}_1 al tiempo t_1 y en \bar{x}_2 al tiempo t_2 y finalmente $t = t_2 - t_1$.

En efecto, se tiene que

$$P_2(\bar{x}_1, t_1; \bar{x}_2, t_2) = p(\bar{x}) \bar{y}(t) |\Psi^{(n)}(\bar{x}_1)|^2 \quad (2.5.8)$$

ya que el proceso es estacionario y $|\Psi^{(n)}(\bar{x})|^2$ es la densidad de probabilidad estacionaria. Sustituyendo (2.5.8) en (2.5.7) y poniendo $A = \delta_{\bar{x}_1}$ y $B = \delta_{\bar{x}_2}$ se obtiene (2.5.6).

iii.- Hasta ahora hemos logrado sustituir el problema original de valores propios por el del cálculo de una función de correlación.

Usando la propiedad de ergodicidad, podemos escribir

$$\mathfrak{B}_{AB}(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A[\bar{x}_0(t+s)] B[\bar{x}_0(s)] ds \quad (2.5.9)$$

donde \bar{x}_0 es una trayectoria arbitraria del proceso.

iv.- Como antes mencionamos las trayectorias del proceso de difusión pueden ser simuladas en la computadora y la integral (2.5.9) calculada numéricamente. De hecho, la computadora puede proporcionarnos directamente una versión discreta de la resolvente $G(\bar{x}, \bar{y}; \tau)$, que a su vez puede ser tratada con las téc-

nicas de los aproximantes de Padé para obtener una versión analítica de ella, en la cual los polos (y por ende los valores y funciones propias) son evidentes.

Para terminar quisieramos señalar que el proceso de Wiener no es ergódico en más de dos dimensiones y que por tanto los resultados obtenidos en esta sección sólo son aplicables a la fórmula usual de Feynman-Kac en una y dos dimensiones.

II.- Hasta este momento nos hemos restringido al caso en que la función propia $\Psi^{(n)}$, que define el proceso $\bar{X}(t)$, sea estrictamente positiva; es claro que esta condición es necesaria para que el coeficiente de arrastre (2.2.4b) esté definido en todo el espacio \mathbb{R}^d . Sin embargo, en las aplicaciones será necesario considerar como "estado base" $\Psi^{(n)}$ funciones propias arbitrarias de \hat{H}_n , y estas generalmente no son estrictamente positivas.

La diferencia esencial cuando se consideran estados excitados $\Psi_i^{(n)}$ es la aparición de nodos (que denotaremos por Σ_n), es decir, de hipersuperficies del espacio de configuración a lo largo de las cuales $\Psi_i^{(n)}$ se anula (en el caso de una dimensión estas hipersuperficies nodales se reducen a puntos aislados). Estas hipersuperficies dividen el espacio de configuración en regiones (que denotaremos por D_n) donde $\Psi_i^{(n)}$ mantiene un signo dado (para información sobre las hipersuperficies nodales ver el capítulo VI de [Courant y Hilbert 37]).

En lo que se refiere al proceso de difusión asociado, la consecuencia de la existencia de hipersuperficies nodales es que el coeficiente de arrastre $\bar{b}(\bar{x}) = (h/2m) \nabla \ln(|\psi_0^{(n)}|^2)$ se hace infinito a lo largo de ellas. Además, cuando desde el interior de una cierta región \mathbb{D}_e se aproxima uno a una de estas hipersuperficies nodales, $(|\psi_0^{(n)}|^2)$ decrece a cero, de tal manera que su gradiente está dirigido hacia el interior de \mathbb{D}_e ; por tanto la hipersuperficie Z_n es una frontera repulsiva para la región \mathbb{D}_e . Así, si empezamos de un punto cualquiera en el interior de alguna de estas regiones, el proceso de difusión nunca nos llevara fuera de ella; en otras palabras, el proceso completo se divide en subprocesos que están asociados a cada una de las regiones.

En estas condiciones el proceso completo no es ergódico aún cuando $|\psi_0^{(n)}|^2$ sea integrable (ciertas condiciones de regularidad del teorema de Khas'minskii no son satisfechas); sin embargo, en este último caso cada subproceso será ergódico como puede verse aplicando el teorema de Khas'minskii. Desde un punto de vista práctico esta situación origina el siguiente problema: Cuando se considera un proceso "completamente" ergódico la evaluación de los valores medios correspondientes puede efectuarse mediante una integración temporal, pero ¿cómo se debe pro-

ceder en el caso de un proceso ergódico "a pedazos"? Podría pensarse en elegir un punto inicial en cada una de las regiones, obtener los valores medios condicionales correspondientes y entonces calcular el valor medio global (el peso asociado con el dominio \mathbb{D}_e es $\int_{\mathbb{D}_e} |\psi_0^{(n)}(\bar{x})|^2 d\bar{x}$). Sin embargo, este procedimiento tiene la desventaja de requerir la determinación de un punto inicial dentro de cada región \mathbb{D}_e , lo cual puede ser muy difícil cuando las regiones son numerosas.

Debido a lo anterior, proponemos el procedimiento alternativo siguiente: Escogemos un umbral ϵ suficientemente pequeño y en la definición (2.2.4b) del coeficiente de arrastre sustituimos $|\psi_0^{(n)}|^2$ por $f_\epsilon(\bar{x}) = \sup [|\psi_0^{(n)}(\bar{x})|^2, \epsilon]$. De esta manera aparece una probabilidad pequeña, pero distinta de cero, para las transiciones entre las diferentes regiones \mathbb{D}_e y recuperamos la ergodicidad "completa". Los valores medios calculados usando este proceso modificado tendrán un error relativo del orden de ϵ .

Existen varios ejemplos de situaciones en las cuales es natural usar como estado "base" un estado excitado de \hat{H}_0 ; aquí mencionamos únicamente uno que muestra claramente la importancia de la generalización considerada [Claverie y Soto Egibar 82]: se trata de la capacidad para tomar en cuenta las restricciones de simetría impuestas por el principio de exclusión

de Pauli a las funciones de estado de un sistema de muchos fermiones .

2.6 Notas y conclusiones.

Antes que nada quisiéramos hacer notar que expresiones en alguna manera equivalentes a nuestra fórmula generalizada de Feynman-Kac ya han sido consideradas en la literatura (ver por ejemplo la sección 3.4 de [Clima y Jaffe 81]). Sin embargo , el punto de vista es diferente y las fórmulas son formales ; en este tipo de tratamiento todo se construye a partir del oscilador armónico para el que las demostraciones están fuertemente basadas en el hecho de que el proceso de difusión asociado es Gaussiano.

Concluimos por tanto , que nuestra contribución consiste esencialmente en la utilización simultánea del proceso de difusión de la mecánica cuántica estocástica [Nelson 66 , Pava y Palla 67 y de la Peña 69] y de los métodos de integración funcional . Esta unificación permite eliminar la "restricción" Gaussiana e ir a un Hamiltoniano \hat{H} , bastante general.

Algunas de las ventajas de nuestro método son las siguientes : i) Es posible tratar estados en subespacios de una simetría dada, tomando en cuenta el principio de exclusión de Pauli ; ii) Se obtiene una solución al problema de "perturbacio-

no" adaptadas a la simetría (este problema surge cuando un "subsistema" se trata usando las funciones de sus subsistemas) ; iii) Es un método bien adaptado a los cálculos numéricos con computadora.

CAPITULO 3

LA MECANICA CUANTICA EN EL ESPACIO DE FASES

3.1 Introducción.

Como ya señalamos en el capítulo 1, el problema de la interpretación de la mecánica cuántica está íntimamente relacionado con el problema de su formulación en el espacio de fases. Señalamos también que existen muchas de estas formulaciones, pero que ninguna de ellas puede ser considerada como consistente desde el punto de vista probabilista [Shewell 59, Cohen 66a y 66b, Brody 80]; sin embargo, tales formulaciones han sido aplicadas con éxito y merecen que se les continúe estudiando.

En este capítulo analizamos algunos aspectos de la formulación de Weyl-Wigner-Woyal. En la sección 3.2 damos los elementos necesarios: definimos la transformación de Weyl y la función de Wigner. Las propiedades de esta última se analizan en la sección 3.3; ahí demostramos que, en el caso de estados puros, sólo los estados con función de onda Gaussiana tienen función de Wigner no negativa. Las secciones 3.4, 3.5 y 3.6 están dedicadas al problema de la evolución temporal de la función de Wigner; para estados puros se muestra (sección 3.5), que sólo los sistemas lineales conservan el carácter inicial no negativo de la función de Wigner; en la sección 3.6 se prueba que para todo sistema no lineal a todo $t > 0$, la función de Green de la ecuación de evolución de la función de Wigner toma valores nega-

tivos. Por último dedicamos la sección 3.7 al estudio de una modificación propuesta para "suavizar" la función de Wigner y hacerla no negativa; concluimos que dicha modificación está en contradicción con los resultados experimentales.

3.2 La transformación de Weyl y la función de Wigner.

La transformación de Weyl es un mapeo $a \rightarrow \hat{a}[a]$ del espacio de funciones $L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ en el álgebra $\mathcal{L}_0(L^2(\mathbb{R}^n))$ de operadores lineales continuos en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Este mapeo está dado explícitamente en la forma siguiente:

Dado $a(\vec{p}, \vec{q}) \in L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ su transformada de Weyl se define como

$$\hat{a}[a] = \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} a(\vec{u}, \vec{v}) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} (\hat{q} \cdot \vec{u} + \hat{p} \cdot \vec{v})\right\} d\vec{u} d\vec{v} \quad (3.2.1)$$

donde \hat{q} es el operador de posición, \hat{p} el operador de impulso y $a(\vec{u}, \vec{v})$ es la transformada de Fourier de $a(\vec{p}, \vec{q})$, es decir,

$$a(\vec{u}, \vec{v}) = \frac{1}{h^{2n}} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} a(\vec{p}, \vec{q}) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} (\vec{q} \cdot \vec{u} + \vec{p} \cdot \vec{v})\right\} d\vec{p} d\vec{q} \quad (3.2.2)$$

Es posible construir la transformación inversa. Para ello consideramos un operador $\hat{a} \in \mathcal{L}_0(L^2(\mathbb{R}^n))$ y le hacemos corresponder una función $a(\vec{p}, \vec{q})$ en el espacio de fases $L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ dada como

$$a(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{1}{h^n} \text{Tr} \left[\hat{a} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} [(\vec{q} - \hat{q}) \cdot \vec{u} + (\vec{p} - \hat{p}) \cdot \vec{v}]\right\} d\vec{u} d\vec{v} \right] \quad (3.2.3)$$

donde $\text{Tr} [\]$ significa la traza del operador en el paréntesis.

Tanto las funciones a como los operadores \hat{A} pueden depender explícitamente del tiempo; hemos omitido dicha dependencia para aligerar la notación.

Consideremos ahora dos operadores \hat{A} y \hat{B} ambos en el álgebra $\mathcal{L}_c(L^2(\mathbb{R}^n))$ y llamemos a $[\hat{A}]$ y $b[\hat{B}]$ a sus correspondientes transformadas inversas de Weyl. Es fácil demostrar [de Groot 74] que:

i.-

$$\hat{A}\hat{B} \rightarrow \left[\exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial \bar{p}}, \frac{\partial}{\partial \bar{q}} \right) \right\} \right] a(\bar{p}, \bar{q}) b(\bar{p}, \bar{q}) \quad (3.2.4a)$$

ii.-

$$\frac{1}{2} \{A, B\} \rightarrow \left[\cos \left\{ \frac{i}{2\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial \bar{p}}, \frac{\partial}{\partial \bar{q}} \right) \right\} \right] a(\bar{p}, \bar{q}) b(\bar{p}, \bar{q}) \quad (3.2.4b)$$

iii.-

$$-\frac{i}{\hbar} [A, B] \rightarrow \left[\frac{2}{\hbar} \cos \left\{ \frac{i}{2\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial \bar{p}}, \frac{\partial}{\partial \bar{q}} \right) \right\} \right] a(\bar{p}, \bar{q}) b(\bar{p}, \bar{q}) \quad (3.2.4c)$$

donde \rightarrow indica la transformación inversa de Weyl y

$$\left(\frac{\partial}{\partial \bar{p}}, \frac{\partial}{\partial \bar{q}} \right) a(\bar{p}, \bar{q}) b(\bar{p}, \bar{q}) =$$

$$\sum_{\mu=1}^n \left[\frac{\partial}{\partial \bar{x}_\mu} \frac{\partial}{\partial (\bar{x}_\mu)_\mu} - \frac{\partial}{\partial (\bar{x}_\mu)_\mu} \frac{\partial}{\partial \bar{x}_\mu} \right] a(\bar{x}_\mu, \bar{x}_\mu) b(\bar{x}_\mu, \bar{x}_\mu) \Big|_{\substack{\bar{p}_\mu = \bar{p}_\mu = \bar{p} \\ \bar{q}_\mu = \bar{q}_\mu = \bar{q}}} \quad (3.2.5)$$

donde $(\bar{x})_\mu$ es la μ -ésima componente del vector \bar{x} .

Las siguientes propiedades de la transformación de Weyl nos serán útiles [de Groot 74]:

a.- Con la misma notación que en (3.2.4) se tiene

$$\text{Tr } \hat{A}\hat{B} = h^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} a(\bar{p}, \bar{q}) b(\bar{p}, \bar{q}) d\bar{p} d\bar{q} \quad (3.2.6)$$

b.- La función a en el espacio de fases es real si y sólo si el operador \hat{A} asociado es autoadjunto.

Hacemos a definir ahora la función de Wigner [Wigner 32, Moyal 49a, de Groot 74]. La función de Wigner es la transformada inversa de Weyl de la matriz de densidad dividida por h^n ; denotándola por $F(\bar{p}, \bar{q})$ tenemos la siguiente expresión explícita

$$F(\bar{p}, \bar{q}) = \frac{1}{h^n} \text{Tr} \left[\hat{\rho} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(\bar{q}-\hat{Q}) \cdot \bar{u} + (\bar{p}-\hat{P}) \cdot \bar{v}] \right\} d\bar{u} d\bar{v} \right] \quad (3.2.7)$$

En el caso de un estado puro, con función de onda $\Psi(\bar{q})$ en el espacio de configuración, (3.2.7) toma la forma dada por [Wigner 32]:

$$F(\bar{p}, \bar{q}) = \frac{1}{h^n} \int_{\mathbb{R}^n} \Psi^*(\bar{q} + \frac{1}{2}\bar{v}) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \bar{p} \cdot \bar{v} \right) \Psi(\bar{q} - \frac{1}{2}\bar{v}) d\bar{v} \quad (3.2.8)$$

La expresión para el valor esperado de un operador \hat{A} se deduce fácilmente de la fórmula cuántica $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho})$ y de (3.2.6); se obtiene

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} a(\bar{p}, \bar{q}) F(\bar{p}, \bar{q}) d\bar{p} d\bar{q} \quad (3.2.9)$$

Esta expresión nos hace pensar en la función de Wigner como una distribución de probabilidad en el espacio de fases; sin embargo, mostraremos más adelante que la analogía no es del todo adecuada.

3.3 Propiedades de la función de Wigner.

Enunciaremos ahora algunas de las propiedades de la función de Wigner :

a.- La función de Wigner es real.

Esto se puede ver directamente de su definición (3.2.7) o a partir de la propiedad b, enunciada en la sección anterior, de la transformación de Weyl.

b.- La integral sobre todo el espacio de fases de la función de Wigner es la unidad.

Esta propiedad se demuestra usando (3.2.9) y el hecho de que la traza de la matriz de densidad es uno.

c.- Para un estado puro se tiene,

$$\int_{\mathbb{R}^n} P(\bar{p}, \bar{q}) d\bar{p} = |\Psi(\bar{q})|^2 \quad (3.3.1a)$$

y

$$\int_{\mathbb{R}^n} \Psi(\bar{p}, \bar{q}) d\bar{q} = |\phi(\bar{p})|^2 \quad (3.3.1b)$$

donde $\phi(\bar{p})$ es la función de onda en la representación de impulsos ; es decir,

$$\phi(\bar{p}) = h^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} \Psi(\bar{q}) \exp\left(\frac{i}{h} \bar{p} \cdot \bar{q}\right) d\bar{q} \quad (3.3.2)$$

d.- La función de Wigner de un estado puro es no negativa si y sólo si la función de onda en el espacio de configuración es Gaussiana ; en otras palabras, si

$$\Psi(\bar{q}) = \exp\left\{-\frac{1}{2} [\bar{q}^+ \mathbf{A} \bar{q} + 2\bar{b} \cdot \bar{q} + c]\right\} \quad (3.3.3)$$

donde \mathbf{A} es una matriz compleja tal que $|\text{Re } \mathbf{A}| > 0$, \bar{b} es un vector complejo arbitrario y c una constante de normalización.

Demostración.- La demostración en el caso unidimensional se debe a Hudson [74] (cabe señalar que Fiquet [74] publicó una demostración de esta propiedad, pero su trabajo es parcialmente erróneo (ver [Coto Eguibar y Claverie 82a])).

La generalización presentada aquí es original [Coto Eguibar y Claverie 82a] :

1.- Suficiencia de la condición. Para encontrar la función de Wigner asociada con la función de estado (3.3.3) basta sustituir esta última en (3.2.8) y utilizar el resultado siguiente

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{i\bar{r}} \left[-\frac{1}{2} \bar{x}^+ \mathbf{B} \bar{x} + \bar{c} \cdot \bar{x}\right] d\bar{x} = \frac{(2\pi)^{n/2}}{|\mathbf{B}|^{1/2}} \exp\left[\frac{i}{2} \sum_{j=1}^n \frac{(\bar{r}_j \cdot \bar{c}_j)^2}{\mu_j}\right] \quad (3.3.4)$$

donde $|\mathbf{B}| > 0$, \bar{r}_j ($j=1,2,\dots,n$) son los vectores propios derechos de \mathbf{B} y μ_j ($j=1,2,\dots,n$) los correspondientes valores propios. Se encuentra entonces que la función de Wigner está dada como

$$F(\bar{p}, \bar{q}) = [n^{n/2} h^n |\text{Re } \mathbf{A}|^{1/2}]^{-1} \exp\left\{-\left[\bar{q}^+ \text{Re } \mathbf{A} \bar{q} + 2 \text{Re } \bar{b} \cdot \bar{q} + c\right] - \sum_{j=1}^n \frac{[\bar{r}_j \cdot (\bar{q}^+ \text{Im } \mathbf{A} + \text{Im } \bar{b} + \bar{r}_j/a)]^2}{2_j}\right\} \quad (3.3.5)$$

donde \hat{e}_j ($j=1,2,\dots,n$) son los vectores propios derechos de teA y λ_j ($j=1,2,\dots,n$) sus correspondientes valores propios. Por tanto, la función de Wigner de una función de estado multidimensional Gaussiana es una distribución Gaussiana de varias variables y es siempre no negativa.

2.- Necesidad de la condición.

i.- Queremos encontrar el conjunto de funciones de estado que dan una función de Wigner no negativa. Denotamos este conjunto por Ω y consideramos un elemento arbitrario Ψ en Ω ; definimos en el espacio complejo \mathbb{C}^n la función compleja $J(z)$ como

$$J(z) \doteq \exp(c/2) \langle \Psi | \Psi_{z,\bar{z}} \rangle \quad (3.3.6)$$

donde $\Psi_{z,\bar{z}}$ es de la forma

$$\Psi_{z,\bar{z}} = \exp \left[-\frac{1}{2} (\bar{q}^* A q + 2z\bar{q} + c) \right] \quad (3.3.7)$$

con $A = \mathbb{1}$ y

$$\langle \Psi | \Psi_z \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \Psi^*(\bar{q}) \Psi_z(\bar{q}) d\bar{q} \quad (3.3.8)$$

La función $J(z)$ tiene las siguientes propiedades:

a.- Es una función entera. Este es un hecho evidente si se toma en cuenta su definición (ecuación (3.3.6)) y las ecuaciones (3.3.7) y (3.3.8).

b.- No tiene ceros en \mathbb{C}^n . Para demostrar esto utilizamos la siguiente propiedad [Hudson 74 y Pool 66]:

$$\int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} F_{\Psi}^*(\bar{p},\bar{q}) F_{\Psi_z}(\bar{p},\bar{q}) d\bar{p} d\bar{q} = \frac{1}{(2\pi)^n} |\langle \Psi | \Psi_z \rangle|^2 \quad (3.3.9)$$

que sustituida en (3.3.6) nos da

$$|J(z)|^2 = e^c (z\pi)^n \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} F_{\Psi}^*(\bar{p},\bar{q}) F_{\Psi_{z,\bar{z}}}(\bar{p},\bar{q}) d\bar{p} d\bar{q} \quad (3.3.10)$$

y como $F_{\Psi_{z,\bar{z}}}(\bar{p},\bar{q}) > 0$ para toda $\bar{z} \in \mathbb{C}^n$ y $\Psi \in \Omega$ (lo cual implica que $F_{\Psi}(\bar{p},\bar{q}) \geq 0$) tenemos

$$|J(z)|^2 > 0 \quad \text{para toda } \bar{z} \in \mathbb{C}^n \quad (3.3.11)$$

como queríamos demostrar.

c.- Su orden de crecimiento \mathcal{O} es menor o igual a dos ($\mathcal{O} \leq 2$). Recordemos primero que dada una función $f: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}$ se define su orden de crecimiento \mathcal{O} como $\mathcal{O} = \lim_{R \rightarrow \infty} [\ln \ln M(R) / \ln R]$ donde $M(R) = \sup_{|z|=R} |f(z)|$ (para un tratamiento completo de esta definición ver la sección 26 de [Fuchs 63]). De la definición (3.3.6) tenemos

$$|J(z)|^2 \leq \exp(c) \|\Psi\|^2 \|\Psi_{z,\bar{z}}\|^2 \quad (3.3.12)$$

Pero es fácil convencerse usando (3.3.4) que

$$\|\Psi_{z,\bar{z}}\|^2 = \exp(-c) (\pi)^{n/2} \exp[(\operatorname{Re} z)^2] \quad (3.3.13)$$

y por tanto

$$|J(z)|^2 \leq \pi^{n/2} \|\Psi\|^2 \exp[(\operatorname{Re} z)^2] \quad (3.3.14)$$

Como el orden de crecimiento de $\exp[(\sigma z)^2]$ es obviamente dos, concluimos que $\rho \leq 2$ para $|J(z)|^2$ y por tanto, también para $J(z)$. Cabe notar que esta propiedad implica que el orden de crecimiento de $J(z)$ como función de una sola de sus variables, las otras estando fijas, es también menor o igual a dos.

El análisis anterior adquiere su significado cuando notamos que $J(i\bar{y})$ es la transformada de Fourier de la función $\exp(-\bar{y}^2/2)$ $\Psi^*(\bar{y})$ y que las propiedades a-c son suficientes para caracterizar $J(z)$ y por tanto Ψ . Pasamos a mostrar esta última afirmación.

ii.- El teorema restringido de Hadamard.

En el caso de una dimensión, Hudson [74] utiliza el teorema de factorización de Hadamard [Boas 54]: Si $f(z)$ es una función entera de orden de crecimiento ρ con un cero de multiplicidad m en el origen, se tiene

$$f(z) = z^m e^{Q(z)} P(z) \quad (3.3.15)$$

donde $Q(z)$ es un polinomio de grado $r \leq \rho$ y $P(z)$ es el producto canónico (de género s) formado con los ceros (diferentes de $z = 0$) de $f(z)$.

Con este teorema y las propiedades a-c de $J(z)$ vemos que necesariamente

$$J(z) = \exp(\alpha z^2 + \beta z + \gamma) \quad (3.3.16)$$

es decir, $\exp(q^2/2) \Psi^*(q)$ es Gaussiana o sea que $\Psi(q)$ misma es Gaussiana.

Regresemos al caso de n dimensiones. Lo primero que se ocurre es utilizar una generalización a n dimensiones del teorema de Hadamard para caracterizar a $J(z)$; sin embargo, hasta donde nosotros sabemos, tal generalización no existe. La dificultad que se encuentra uno al querer generalizar el teorema a n dimensiones es que los ceros y polos de la función en cuestión no son aislados; este problema se elimina cuando se nota que en nuestro caso la función que queremos caracterizar tiene una propiedad adicional que no se supone en el teorema de Hadamard; dicha propiedad es que la función no tiene ceros. En este caso podemos demostrar el siguiente teorema:

Versión restringida (en n dimensiones) del teorema de Hadamard.- Si $f(z)$ es una función entera con orden de crecimiento ρ y sin ceros, se tiene que

$$f(z) = e^{Q(z)} \quad (3.3.17)$$

donde $Q(z)$ es un polinomio de grado $r \leq \rho$.

Demostración.- La demostración será efectuada únicamente para el caso de dos variables, ya que el caso de n variables es engorroso y no aporta nada nuevo.

Fijemos z_2 en $f(z_1, z_2)$; tenemos una función entera de z_1 ,

con orden de crecimiento menor o igual que ℓ (ver la observación en el párrafo que sigue a la ecuación (3.3.14)) y sin ceros. Usando el teorema de factorización de Hadamard podemos escribirlo como $\exp\left\{\sum_{j=1}^{\ell} \alpha_j z_1^j\right\}$ con $r \leq \ell$ y donde α_j ($j=1, 2, \dots, r$) dependen de z_2 , que por otra parte es arbitrario pero finito. Escribimos por tanto

$$f(z_1, z_2) = \exp\left\{\sum_{j=1}^r \alpha_j(z_2) z_1^j\right\} \quad (3.3.18)$$

en el conjunto

$$\mathbb{D}_1 = \{z_1, z_2 : z_1 \in \mathbb{C}, 0 \leq |z_2| \leq M\} \quad (3.3.19)$$

Figurando ahora z_1 y procediendo de la misma manera concluimos que

$$f(z_1, z_2) = \exp\left\{\sum_{k=1}^s \beta_k(z_1) z_2^k\right\} \quad (3.3.20)$$

con $s \leq \ell$ y en el conjunto

$$\mathbb{D}_2 = \{z_1, z_2 : 0 \leq |z_1| \leq N, z_2 \in \mathbb{C}\} \quad (3.3.21)$$

Como $f(z_1, z_2)$ es una función entera sin ceros podemos definir su logaritmo $Q(z_1, z_2)$ que será una función entera univaluada en \mathbb{C}^2 . Por tanto, de (3.3.18) y (3.3.20) deducimos que

$$\sum_{j=1}^r \alpha_j(z_2) z_1^j = \sum_{k=1}^s \beta_k(z_1) z_2^k \quad (3.3.22)$$

en $\mathbb{D}_1 \cap \mathbb{D}_2$, ya que estas dos funciones son dos expresiones distintas de una misma función $Q(z_1, z_2) = \ln f(z_1, z_2)$.

Diferenciando (3.3.22) n veces ($n \leq s$) con respecto a z_2 (lo cual es posible ya que $Q(z_1, z_2)$ es una función entera) obtenemos

$$\sum_{j=1}^r \alpha_j^{(n)}(z_2) z_1^j = \sum_{k=n}^s \frac{k!}{(k-n)!} \beta_k(z_1) z_2^{k-n} \quad (3.3.23)$$

$$n = 1, 2, \dots, s$$

que haciendo $z_2=0$ nos da

$$\beta_n(z_1) = \sum_{j=1}^r \frac{\alpha_j^{(n)}(0)}{n!} z_1^j \quad (3.3.24)$$

$$n = 1, 2, \dots, s$$

para toda z_1 tal que $0 \leq |z_1| < N$. Sustituyendo en la expresión (3.3.20) se encuentra que

$$Q(z_1, z_2) = \sum_{j=1}^r \sum_{k=1}^s \frac{\alpha_j^{(k)}(0)}{k!} z_1^j z_2^k \quad (3.3.25)$$

en $\mathbb{D}_1 \cap \mathbb{D}_2$. Si denotamos por brevedad $\alpha_j^{(k)}(0)/k! = \gamma_{jk}$ llegamos a que

$$\ln f(z_1, z_2) = Q(z_1, z_2) = \sum_{j=1}^r \sum_{k=1}^s \gamma_{jk} z_1^j z_2^k \quad (3.3.26)$$

en $\mathbb{D}_1 \cap \mathbb{D}_2$. La expresión (3.3.26) es de hecho válida en todo conjunto acotado de \mathbb{C}^2 ya que tanto M como N son finitos pero arbitrarios.

Como $Q(z_1, z_2)$ es una función entera en \mathbb{C}^2 , es fácil deducir por continuación analítica [Cartan 63] que (3.3.26) y por tanto

$$f(z_1, z_2) = \exp \left[\sum_{j=1}^r \sum_{k=1}^s \gamma_{jk} z_1^j z_2^k \right] \quad (3.3.27)$$

es válido en todo \mathbb{C}^2 .

Falta solamente demostrar que el grado del polinomio $J(z_1, z_2)$ es \mathcal{E} como máximo; es decir, que $\gamma_{jk} = 0$ siempre que $j + k > \mathcal{E}$. Suponiendo que este no es el caso y tomando $z_1 = z_2 = R$ (real) se concluye fácilmente que el grado de crecimiento de $f(z_1, z_2)$ sería mayor que \mathcal{E} en contradicción con la hipótesis hecha; así que $\gamma_{jk} = 0$ para $j+k > \mathcal{E}$ y la prueba está terminada.

iii.- Utilizaremos ahora la versión restringida del teorema de Hadamard para encontrar la forma de $J(\mathbb{E})$. En efecto, $J(\mathbb{E})$ satisface todas las condiciones del teorema con un orden de crecimiento igual a dos, así que la podemos escribir como

$$J(\mathbb{E}) = \exp \left\{ \sum_{\substack{j_1, \dots, j_n=1 \\ (j_1 + \dots + j_n \leq \mathcal{E})}} \alpha_{j_1, \dots, j_n} z_1^{j_1} \dots z_n^{j_n} + \sum_{j=1}^n e_j z_j + \gamma \right\} \quad (3.3.28)$$

Ahora

$$J(i\bar{y}) = \exp \left\{ - \sum_{\substack{j_1, \dots, j_n=1 \\ (j_1 + \dots + j_n \leq \mathcal{E})}} \alpha_{j_1, \dots, j_n} y_1^{j_1} \dots y_n^{j_n} + \sum_{j=1}^n e_j y_j + \gamma \right\} \quad (3.3.29)$$

y también de la definición de J ,

$$J(i\bar{y}) = \int_{\mathbb{R}^n} \Psi^*(\bar{q}) \exp(-\bar{q}^2/2 - i\bar{y} \cdot \bar{q}) d\bar{q}$$

lo que quiere decir que la transformada de Fourier de $\exp(-\bar{q}^2/2)$ $\Psi^*(\bar{q})$ es una Gaussiana multidimensional y, por tanto, $\Psi(\bar{q})$ también lo es. Para completar la demostración es necesario probar que toda Gaussiana es solución de la ecuación de Schrödinger; en la sección 3.5 mostramos que este es el caso y que el potencial involucrado debe ser cuadrático; esto último implica que la ecuación de von Neumann se reduce a la ecuación de Liouville y que la no negatividad de la función de Wigner se consigue.

La propiedad que acabamos de demostrar para la función de Wigner también puede ser enunciada de la siguiente manera: d'.- Únicamente los estados coherentes [Glauber 63] tienen función de Wigner no negativa.

La equivalencia de los enunciados d y d' se debe a que el conjunto de estados coherentes y el conjunto de funciones de la forma (3.3.3) están relacionados por una transformación canónica [Guichardet 72].

Este segundo enunciado pone de manifiesto la importancia del conjunto de funciones con función de Wigner no negativa, ya que los estados coherentes generan el espacio de Hilbert simétrico

co (o espacio de Fock) correspondiente y además, son fundamentales en óptica cuántica.

Terminamos esta sección recalcando que no es conocido ningún teorema que establezca cuando la función de Wigner de una mezcla es no negativa.

3.4 La evolución temporal de la función de Wigner.

Dada la definición de la función de Wigner es claro que la ecuación que rige su evolución en el tiempo es la transformada de Weyl inversa de la ecuación de von Neumann

$$\frac{\partial \hat{c}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{c}] \quad (3.4.1)$$

que es la que rige la evolución temporal de la matriz de densidad Usando (3.2.4c) se tiene [Moyal 49a]:

$$\frac{\partial F(\vec{p}, \vec{q}, t)}{\partial t} = \frac{\pi}{\hbar} \left[\text{sen} \frac{\pi}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}} \right) \right] H_w(\vec{p}, \vec{q}) F(\vec{p}, \vec{q}, t) \quad (3.4.2)$$

donde $H_w(\vec{p}, \vec{q})$ es la transformada inversa de Weyl del operador $H_{\hat{c}}$ miltoniano H y la notación es la definida en (3.2.5).

La ecuación de evolución (3.4.2) fué deducida de una manera diferente por Moyal ([49a] secciones 6 y 7). Expondremos los principales momentos de dicha deducción para establecer algunas relaciones que nos serán útiles más adelante. La relación fundamental entre $F(\vec{p}, \vec{q}, t)$ y $F(\vec{p}, \vec{q}, 0)$ es

$$F(\vec{p}, \vec{q}, t) = \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} K(\vec{p}, \vec{q} | \vec{p}_0, \vec{q}_0; t) F(\vec{p}_0, \vec{q}_0, 0) d\vec{p}_0 d\vec{q}_0 \quad (3.4.3)$$

donde $K(\vec{p}, \vec{q} | \vec{p}_0, \vec{q}_0; t)$ juega el papel de una distribución condicional. Más adelante mostraremos que el núcleo $K(\vec{p}, \vec{q} | \vec{p}_0, \vec{q}_0; t)$ es en realidad una pseudo-distribución ya que en general puede ser no negativo. De (3.4.3) es posible demostrar [Moyal 49a y 49b; Pawula 65, 67a y 67b] que $F(\vec{p}, \vec{q}, t)$ satisface la ecuación de evolución siguiente:

$$\frac{\partial F(\vec{p}, \vec{q}, t)}{\partial t} = \sum_{\nu, \lambda} \frac{c_{\nu, \lambda}}{\lambda!} \sum_{k=0}^{\infty} \left[\prod_{j=1}^k \frac{c_{\nu, \lambda}^{(j)}}{\lambda_j!} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}_j} \right)^{k_j} \right] \left[\prod_{h=1}^k \frac{c_{\nu, \lambda}^{(h)}}{\lambda_h!} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{q}_h} \right)^{k_h} \right] \left[\alpha_{(\nu), (\lambda)}(\vec{p}, \vec{q}) F(\vec{p}, \vec{q}, t) \right] \quad (3.4.5)$$

donde (ν) designa el conjunto de las ν 's y (λ) el de las λ 's y los coeficientes $\alpha_{(\nu), (\lambda)}(\vec{p}, \vec{q})$ son los momentos "derivados" dados por:

$$\alpha_{(\nu), (\lambda)}(\vec{p}, \vec{q}) = \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \left\{ \prod_{i=1}^m [(\vec{q}_i - (\vec{p}_i)]^{\nu_i} \right\} \left\{ \prod_{j=1}^n [(\vec{q}_j - (\vec{p}_j)]^{\lambda_j} \right\} \frac{K(\vec{p}, \vec{q} | \vec{p}_0, \vec{q}_0; t)}{t} d\vec{p}_0 d\vec{q}_0 \quad (3.4.6)$$

El núcleo $K(\vec{p}, \vec{q} | \vec{p}_0, \vec{q}_0; t)$ está dado como

$$K(\bar{u}, \bar{v} | \bar{p}, \bar{q}; \epsilon) = S(\bar{u} - \bar{p}) S(\bar{v} - \bar{q}) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\epsilon^{n+1}}{(n+1)!} \int_{\mathbb{R}^n} \dots \int_{\mathbb{R}^n} S(\bar{u}, \bar{v} | \bar{u}_1, \bar{v}_1, \dots) \dots \\ \dots S(\bar{u}_n, \bar{v}_n | \bar{p}, \bar{q}) d\bar{u}_1, d\bar{v}_1, \dots, d\bar{u}_n, d\bar{v}_n \quad (3.4.7)$$

con

$$S(\bar{u}, \bar{v} | \bar{p}, \bar{q}) = \frac{1}{2^{2n}} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} [H_n(\bar{p} + \frac{1}{2}\bar{u}, \bar{q} - \frac{1}{2}\bar{v}) - H_n(\bar{p} - \frac{1}{2}\bar{u}, \bar{q} + \frac{1}{2}\bar{v})] \\ \exp\left\{-\frac{1}{2\epsilon} [\bar{u} \cdot (\bar{p} - \bar{u}) + \bar{v} \cdot (\bar{q} - \bar{v})]\right\} d\bar{u} d\bar{v} \quad (3.4.8)$$

En principio los coeficientes $\alpha(\nu), (\lambda) (\bar{p}, \bar{q})$ pueden obtenerse de las ecuaciones (3.4.6) u (3.4.8); sin embargo, en la práctica es muy difícil de hacer. Podemos saber cómo son, gracias a la otra deducción de la ecuación de evolución; comparando (3.4.5) con (3.4.2) se encuentra que

$$\alpha(\nu), (\lambda) (\bar{p}, \bar{q}) = 0 \quad \text{si} \quad \sum_{j=1}^n (\nu_j + \lambda_j) \text{ es par} \quad (3.4.9a)$$

$$\alpha(\nu), (\lambda) (\bar{p}, \bar{q}) = (-1)^{\sum_{j=1}^n \lambda_j} \left(\frac{\epsilon}{2\pi}\right)^{\sum_{j=1}^n (\nu_j + \lambda_j) - 1} \prod_{j=1}^n \left(\frac{\epsilon}{2\pi}\right)^{\lambda_j} \prod_{j=1}^n \left(\frac{\epsilon}{2\pi}\right)^{\nu_j} H_n(\bar{p}, \bar{q}) \\ \text{si} \quad \sum_{j=1}^n (\lambda_j + \nu_j) \text{ es impar} \quad (3.4.9b)$$

En todo lo anterior no se ha supuesto en ningún momento que

las funciones F y K sean verdaderas distribuciones de probabilidad. Esto es importante ya que en el caso que nos interesa no lo son en general.

En la sección 3.3 demostramos que en el caso de estados puros sólo las funciones de onda Gaussianas tienen funciones de Wigner no negativas. Cabe entonces hacerse la pregunta ¿qué sucede con el carácter (negatividad o no negatividad) de la función de Wigner cuando evoluciona en el tiempo de acuerdo a la ecuación (3.4.2)? Esta pregunta puede parecer trivial, pero no lo es como lo muestra el que Moyal en su conocido artículo de 1949 [Moyal 49a] haya dado una respuesta incorrecta. Moyal pensaba (sección 15 de [Moyal 49a]) que para que la formulación de la mecánica cuántica en el espacio de fases fuera consistente debería de ser posible demostrar que la no negatividad de la función de Wigner se conserva cuando evoluciona en el tiempo según la ecuación (3.4.2). Él dió una "demostración" de esta propiedad para sistemas aislados con al menos una coordenada cíclica y en un estado puro; su "demostración" es incorrecta como mostramos a continuación [Soto y Claverie 82b]:

Su argumento es el siguiente: Tomemos un sistema aislado que tiene al menos una coordenada cíclica θ y que está en un estado puro. Entonces

a) Efectuamos una transformación canónica del sistema de coordo-

nada original (p_1, q_1) al sistema (E, θ, P_1, Q_1) donde E es el momento conjugado de θ y P_1, Q_1 son los otros momentos y coordenadas transformados. El nuevo Hamiltoniano $H(E, \theta, P_1, Q_1)$ es tal que

$$\frac{\partial H}{\partial \theta} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial H}{\partial E} = \text{constante} = \omega \quad (3.4.10)$$

b) escribimos la ecuación de evolución (3.4.2) en el sistema (E, θ, P_1, Q_1) .

Siendo ω una constante la ecuación de evolución puede ser escrita

$$\frac{\partial F(\theta, \theta, P_1, Q_1)}{\partial t} + \omega \frac{\partial F(\theta, \theta, P_1, Q_1)}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial E} \left[\text{sen} \frac{\theta}{2} \left(\frac{\partial}{\partial P_1}, \frac{\partial}{\partial Q_1} \right) \right]$$

$$H(\theta, \theta, P_1, Q_1) F(\theta, \theta, P_1, Q_1, t) = 0 \quad (3.4.11)$$

c) En la ecuación anterior las variables t y θ pueden separarse de las otras mediante la sustitución

$$F(E, \theta, P_1, Q_1, t) = F_1(\theta, t) F_T(E, P_1, Q_1) \quad (3.4.12)$$

que nos da el siguiente par de ecuaciones

$$\frac{1}{F_1(\theta, t)} \left[\frac{\partial F_1(\theta, t)}{\partial t} + \omega \frac{\partial F_1(\theta, t)}{\partial \theta} \right] = 2i\mu \quad (3.4.13a)$$

$$\frac{1}{F_T(E, P_1, Q_1)} \left[\text{sen} \frac{\theta}{2} \left(\frac{\partial}{\partial P_1}, \frac{\partial}{\partial Q_1} \right) \right] H(E, \theta, P_1, Q_1) F_T(E, P_1, Q_1) = \frac{\theta}{1} \mu \quad (3.4.13b)$$

donde μ es una constante de separación.

d) Resolviendo la ecuación (3.4.13a) se encuentra la dependencia temporal

$$\exp \left[i \mu \left(t + \frac{\theta}{\omega} \right) \right] \quad (3.4.14)$$

Comparando esta dependencia temporal con el desarrollo de la función de Wigner en términos de funciones propias de la energía (expresión 8.1 de [Moyal 49a]) se obtiene que

$$F(\theta, \theta, P_1, Q_1, t) = \sum_{j,k} a_j^* a_k F_{jk}(\theta, P_1, Q_1) e^{i \left(\frac{E_j - E_k}{\hbar} \right) \left(t + \frac{\theta}{\omega} \right)} \quad (3.4.14b)$$

donde los a_j son los coeficientes del desarrollo de la función de onda en cuestión en términos de las funciones propias $\Psi_j(\vec{q})$ de la energía y las funciones $F_{jk}(\vec{p}, \vec{q})$ están definidas como (expresión 4.11 de [Moyal 49a])

$$F_{jk}(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{1}{h^n} \int_{\mathbb{R}^n} \Psi_j^*(\vec{q} + \frac{1}{2}\vec{v}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{v}\right) \Psi_k(\vec{q} - \frac{1}{2}\vec{v}) d\vec{v}$$

De (3.4.14b) Moyal concluye que si $F \geq 0$ para toda θ al tiempo $t=0$, entonces debe ser no negativa para todo tiempo $t > 0$.

Su "demostración" es incorrecta debido a tres errores:

1.- El primero y más grave lo comete en el paso b) donde Moyal escribe la ecuación de evolución (3.4.2) en el sistema transformado (E, θ, P_1, Q_1) , lo cual equivale a suponer que la transformación de Weyl es covariante respecto a las transformaciones canónicas del espacio de fases. Esta propiedad no se satisface como

mostré por primera vez van Hove [51], así que la ecuación de evolución (3.4.2) sólo es válida en términos de coordenadas curvilineas (curiosamente Moyal lo hace notar en la sección 6, página 105, de su artículo [Moyal 49a]). Uno puede convencerse fácilmente de esto considerando un ejemplo; el más sencillo que se ocurre es el de un oscilador bidimensional tratado primero en coordenadas cartesianas y luego en coordenadas polares. 2.- Aún cuando la transformación de Weyl fuera covariante el argumento de Moyal sería incorrecto debido a que el paso b) contiene otro error. En este paso se considera a ω como una constante independiente de las coordenadas y momentos, y esto no es cierto en general. Desde luego que es una constante de movimiento, pero esto no significa que sea una constante en relación a las otras variables del sistema; por ejemplo, en el problema de Kessler, cuyo hamiltoniano en variables de ángulo-acción es

$$H(J_1, J_2, J_3) = - \frac{m \kappa^2}{2(J_1 + J_2 + J_3)^2} \quad (3.4.15)$$

tenemos

$$\omega_1 = \frac{\partial H(J_1, J_2, J_3)}{\partial J_1} = \frac{m \kappa^2}{(J_1 + J_2 + J_3)^3} \quad (3.4.16)$$

que son funciones de las variables de acción. Por lo tanto, en general, el operador (2.21) con $[\frac{1}{2}(\partial/\partial J_1, \partial/\partial J_2)]$, de la ecuación

(3.4.2), generará derivadas no nulas de $\omega = \partial H / \partial J$ y dichas derivadas están ausentes en (3.4.11).

Solamente para sistemas lineales ω será una constante independiente de las variables del sistema; en ese caso la ecuación de evolución de la función de Wigner se reduce formalmente a la ecuación de Liouville, que preserva el carácter no negativo.

3.- El tercer error se encuentra en el paso d). En efecto, para que la conclusión ahí obtenida sea válida es necesario que

$$\frac{E_j - E_k}{h} = \frac{\theta}{\omega} \quad (3.4.17)$$

varie en 2π cuando θ recorre su gama de valores y esto no lo garantiza de ninguna manera el que θ sea una coordenada cíclica, así como tampoco el que sea una variable de ángulo.

Concluimos entonces que queda abierta la pregunta acerca de si la evolución, dada por (3.4.2), conserva o no el carácter no negativo de la función de Wigner. En la sección siguiente damos una respuesta negativa para el caso de estados puros y contestamos parcialmente en el caso general.

3.5 La evolución temporal de la función de Wigner para un estado puro.

Demostraremos ahora que solamente los sistemas lineales tienen la propiedad de que si al tiempo inicial (que tomamos como

cero) está en un estado puro cuya función de Wigner es no negativa, entonces dicha función será no negativa para todo tiempo [Soto y Claverie 82b]. Debido a la propiedad d de la sección 3.3 (página 3.5), podemos enunciar esta proposición de la manera equivalente siguiente: si tenemos un sistema no lineal cuya función de onda al tiempo $t=0$ está dada como

$$\Psi(\bar{q}, 0) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\bar{q}^* \Lambda \bar{q} + 2\bar{b} \cdot \bar{q} + c] \right\} \quad (3.5.1)$$

donde Λ es una matriz compleja tal que $|\text{Re } \Lambda| > 0$, \bar{b} un vector complejo arbitrario y c una constante de normalización; entonces para todo tiempo $t > 0$ (con la posible excepción de un conjunto discreto de tiempos) la función de Wigner tomará valores negativos.

Para demostrar esto recordamos que para que la función de Wigner sea no negativa a todo tiempo $t > 0$, la función de onda debe ser de la forma

$$\Psi(\bar{q}, t) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\bar{q}^* \Lambda(t) \bar{q} + 2\bar{b}(t) \cdot \bar{q} + c(t)] \right\} \quad (3.5.2)$$

con $\Lambda(t)$, $\bar{b}(t)$ y $c(t)$ funciones complejas del tiempo y $|\text{Re } \Lambda(t)| > 0$ para todo $t > 0$.

Tenemos que encontrar para que sistemas la solución de la ecuación de Schrödinger, con la condición inicial (3.5.1), tiene la forma (3.5.2). Para ello sustituimos (3.5.2) en la ecuación

de Schrödinger con un potencial $V(\bar{q})$ desconocido y encontramos (se utiliza la convención de Einstein para la suma)

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \Lambda^2(t) - i \frac{\hbar}{2} \dot{\Lambda}(t) \right]_{ij} (\bar{q})_i (\bar{q})_j + \left[\frac{\hbar^2}{2m} \Lambda(t) \bar{b}(t) - i \hbar \dot{\bar{b}}(t) \right]_i (\bar{q})_i + \left[\frac{\hbar^2}{2m} \bar{b}^2(t) - \frac{\hbar^2}{2m} \text{Tr } \Lambda(t) - \frac{1}{2} \hbar \dot{c}(t) \right] = V(\bar{q}) \quad (3.5.3a)$$

con condiciones iniciales

$$\Lambda(0) = \Lambda, \quad \bar{b}(0) = \bar{b} \quad \text{y} \quad c(0) = c \quad (3.5.3b)$$

Como las potencias de las $(\bar{q})_i$'s son linealmente independientes esta ecuación puede ser satisfecha a todo tiempo si y sólo si $V(\bar{q}) = \alpha_{ij}(\bar{q})_i (\bar{q})_j + \beta_i(\bar{q})_i + \gamma$; es decir, si el sistema es lineal tal y como queríamos demostrar.

Este resultado puede considerarse como la generalización de una propiedad demostrada mediante métodos muy diferentes por Guichardet (ver el lema 2.1, sección 2.2 de [Guichardet 72]) para estados coherentes. La generalización lograda aquí consiste en que la dispersión de la función de onda Gaussiana puede depender del tiempo, mientras que en el trabajo de Guichardet dicha dispersión es una constante (para detalles ver [Soto y Claverie, 82b]).

3.6 La función de Green de la ecuación de evolución.

Notemos primeramente que la función de Green de la ecuación

ESTA TESIS NO DEBE SALIR DE LA BIBLIOTECA

ESTA TESIS NO DEBE SALIR DE LA BIBLIOTECA

(3.4.2) o de su equivalente (3.4.5) con los coeficientes α_{ij} no es sino el núcleo $K(\bar{P}, \bar{q} | \bar{P}_0, \bar{q}_0; t)$ de la ecuación integral (3.4.3). Demostraremos que $K(\bar{P}, \bar{q} | \bar{P}_0, \bar{q}_0; t)$ no es en general una verdadera distribución de probabilidad; es decir, que puede tomar valores negativos. Más en concreto mostraremos que para todo sistema no lineal y todo tiempo $t > 0$, $K(\bar{P}, \bar{q} | \bar{P}_0, \bar{q}_0; t)$ toma valores negativos. Efectuaremos dicha demostración por reducción al absurdo, o sea que supondremos que el núcleo K es una verdadera distribución de probabilidad y llegaremos a una contradicción; esta contradicción será obtenida utilizando un teorema derivado por Pawula [65, 67a y 67b] para un proceso estocástico general; pasemos por tanto a estudiar el planteamiento de Pawula.

Pawula [65, 67a y 67b] ha derivado ecuaciones generalizadas de Fokker-Planck para la densidad de probabilidad condicional de un proceso estocástico arbitrario y ha encontrado las condiciones que se deben cumplir para que dichas ecuaciones sean de orden finito; considera un proceso estocástico $\bar{Y}(t)$ de M dimensiones y llama $p(\bar{Y}, t | Y, T)$ a su densidad de probabilidad, condicionada por un conjunto arbitrario (Y, T) de k valores Y con sus k tiempos de ocurrencia denotados por T , es decir, Y significa $\{\bar{Y}(t_1), \dots, \bar{Y}(t_k)\}$ y T está dado como $\{t_1, \dots, t_k\}$. A continuación muestra que si $t \notin T$ la función de densidad de probabilidad de transición satisface la siguiente ecuación generalizada de

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\bar{y}, t | Y, T) = \sum_{\substack{n_1, \dots, n_m=0 \\ n_1 + \dots + n_m \neq 0}} \left[\prod_{i=1}^m \frac{(-1)^{n_i}}{n_i!} \left(\frac{\partial}{\partial y_i} \right)^{n_i} \right] [A_{n_1, \dots, n_m} P(\bar{y}, t | Y, T)] \quad (3.6.1)$$

donde y_i es la i -ésima componente del vector \bar{Y} y

$$A_{n_1, \dots, n_m} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} E \left[\prod_{i=1}^m \{y_i(t + \Delta t) - y_i(t)\}^{n_i} | \bar{Y}, t; Y, T \right] \quad (3.6.2)$$

son los momentos condicionales derivados. El límite en (3.6.2) puede ser tomado por la derecha o por la izquierda, dando en un caso un coeficiente A^+ y en el otro uno A^- . Para un proceso de Markov al tomar el límite por la derecha obtenemos la ecuación de Fokker-Planck (o ecuación hacia adelante) y al tomarlo por la izquierda obtenemos la ecuación de Fokker-Planck del proceso invertido en el tiempo (ver el capítulo 13 de [Nelson 66b]); conviene insistir en que al tomar el límite por la izquierda no se obtiene la ecuación de Kolmogorov (o ecuación hacia atrás), ya que esta tiene los mismos coeficientes que la ecuación de Fokker-Planck (salvo el signo del coeficiente de arrastre), pero se encuentran antes de las derivaciones (ver por ejemplo el capítulo 2 de [Arnold 74]). En lo sucesivo consideraremos únicamente los coeficientes A^+ y omitiremos el superíndice $+$.

El teorema de Pawula establece las condiciones bajo las cuales la ecuación (3.6.1) es de orden finito en las variables y_1 ; antes de enunciarlo definimos los momentos derivados unidimensionales como $U_{n_1}^{(i)} = A_{0,0,\dots,n_1,0,\dots,0}$ ($i=1,2,\dots,M$), es decir,

$$U_{n_1}^{(i)} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} E \left[\{y_1(t+\Delta t) - y_1(t)\}^{n_1} \mid y_1, t; Y_{[1]}, T_{[1]} \right] \quad (3.6.3)$$

donde $t \in T_{[1]} \subset T$ y $Y_{[1]} \subset Y$. Es fácil ver que

$$U_{n_1}^{(i)} = E [A_{0,0,\dots,n_1,0,\dots,0} \mid y_1, t; Y_{[1]}, T_{[1]}] \quad (3.6.4)$$

donde $E[\cdot \mid y_1, t; Y_{[1]}, T_{[1]}]$ es el valor medio respecto a las variables y_j ($j \neq 1$) y respecto a todas las variables $Y(t_1)$ del conjunto Y , exceptuando aquellas que pertenecen al subconjunto $Y_{[1]}$. Podemos enunciar ahora el

Teorema de Pawula.— Si cada uno de los momentos derivados unidimensionales $U_{n_1}^{(i)}$ es finito y se anula para algún n_1 par, entonces

$$A_{n_1, \dots, n_M} = 0 \quad (\text{con probabilidad } 1) \quad (3.6.5)$$

para todo conjunto $\{n_1\}$ tal que $\sum_{i=1}^M n_i \geq 3$.

Este teorema nos dice que la ecuación generalizada de Fokker-Planck es de orden dos o de orden infinito. Una ecuación del tipo (3.6.1) de orden finito mayor que 2 tendrá siempre u-

na solución que toma valores negativos (para una discusión de este problema ver [Hinken y Vollmer 79]).

El teorema de Pawula fue enunciado aquí para los momentos derivados; sin embargo, un breve análisis de su demostración (lema 1 de la sección III de [Pawula 67a]) nos permite ver que también es válido para momentos ordinarios.

Supongamos ahora que el núcleo K de la ecuación (3.4.3) es una densidad de probabilidad (o sea que satisface las condiciones de una densidad de probabilidad). Con esta hipótesis la ecuación de Koyal (3.4.5) es un caso particular de la ecuación de Pawula y podemos aplicar el teorema; usando (3.4.9a) en (3.6.4) se obtiene trivialmente

$$U_{2m}^{(p)} = U_{2m}^{(q)} = 0 \quad \text{para toda } i \text{ y } m=1,2,\dots \quad (3.6.6)$$

es decir, todos los momentos derivados unidimensionales pares son nulos. De (3.4.9b) y (3.6.4) se ve también que los momentos derivados unidimensionales impares no son, en general, nulos, y podemos suponer que para todo sistema físico real son todos finitos.

Como las condiciones del teorema de Pawula se satisfacen concluimos de (3.6.5) que $\alpha(\nu, \lambda)(p, q) = 0$ si $\sum_{i=1}^M (\lambda_i + \nu_i) \geq 3$. Examinando una vez más las ecuaciones (3.4.9) vemos que esto es cierto únicamente para sistemas lineales. Así tenemos una

contradicción en el caso de sistemas no lineales; la única solución a esta contradicción es que la hipótesis que hemos hecho acerca de K sea falsa, o en otras palabras, que K no sea una distribución de probabilidad. Tenemos dos alternativas:

- $K(\beta, \bar{q} | \beta_0, \bar{q}_0; t)$ no es normalizable.
- $K(\beta, \bar{q} | \beta_0, \bar{q}_0; t)$ toma valores negativos.

La primera alternativa debe ser rechazada porque implica que algunos de los momentos derivados $\alpha_{(\nu), (\lambda)}(\beta, \bar{q})$ serían infinitos y es razonable suponer que este no es el caso para sistemas físicos finitos; nos queda por tanto sólo la segunda alternativa, o sea, que K toma valores negativos.

Es pertinente hacer varias aclaraciones [Moto y Claverie 82b]

- Estrictamente hablando la conclusión obtenida es válida únicamente para tiempos pequeños, ya que ha sido deducida de una propiedad de los momentos derivados que están definidos cuando $t \rightarrow 0$.
- El resultado es válido tanto para estados puros como para mezclas.
- El que K tome valores negativos no nos permite concluir que la función de Wigner lo haga también. En efecto, si examinamos la ecuación (3.4.3) vemos que en el cálculo de $F(\beta, \bar{q}, t)$ a partir de K está involucrada una integral y aún no sabemos si al efectuar la integración se van a obtener valores negativos.

4.- Debido a que la ecuación (3.4.5) está escrita para la función de Wigner podría pensarse que la conclusión que sacamos respecto al núcleo K es válida también para ella. Esto no es cierto ya que sólo se conocen los momentos de la pseudo-distribución K (ver la ecuación (3.4.6)) y no ha sido posible calcular a partir de ellos los de la función F .

3.7 La función modificada de Wigner.

En las secciones anteriores hemos demostrado que la función de Wigner no puede ser considerada como una distribución de probabilidad ya que toma valores negativos; sin embargo, es utilizada con éxito en varios campos de la física jugando el papel de una verdadera distribución de probabilidad; la justificación física de esta utilización se basa en la suposición de que la función será no negativa si se usa de manera que no se violen las desigualdades de Heisenberg. Mori, Oppenheim y Ross [62] conjeturaron que si la función de Wigner se integra sobre regiones del espacio de fases del orden de \hbar^{3n} , entonces se obtendrá una función no negativa, es decir, que si definimos $F_I(\beta, \bar{q})$ como

$$F_I(\beta, \bar{q}) = \int_{\beta - \frac{\hbar}{2}}^{\beta + \frac{\hbar}{2}} \int_{\bar{q} - \frac{\hbar}{2}}^{\bar{q} + \frac{\hbar}{2}} F(\beta', \bar{q}') d\beta' d\bar{q}' \quad (3.7.1)$$

se tendrá siempre $F_I(\beta, \bar{q}) \geq 0$. Efectuar la integración indicada en (3.7.1) es equivalente a "suavizar" la función de Wigner en

cada punto efectuando su convolución con una densidad que es constante (e igual a Δ^{-2n}) en un hipercubo de lado Δ centrado en el punto y cero fuera de él.

Algunos autores han propuesto una modificación menos fuerte [Cartwright 76 y Yoshihuku 77]. En lugar de tomar la convolución con la función indicadora del hipercubo centrado en el punto, toman la convolución con una Gaussiana "adecuada" (más adelante precisaremos cuáles son sus parámetros) también centrada en el punto; bajo ciertas condiciones esta función modificada de Wigner (PMW en lo que sigue) tiene todas las propiedades de una distribución de probabilidad. Nuestro objetivo en la presente sección es comparar las predicciones de esta función con los resultados cuánticos y con el experimento.

Definimos la PMW $W(\vec{p}, \vec{q})$ como (omitimos la dependencia temporal)

$$W(\vec{p}, \vec{q}) = \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \Psi(\vec{p}', \vec{q}') \mathcal{G}(\vec{p}' - \vec{p}, \vec{q}' - \vec{q}) d\vec{p}' d\vec{q}' \quad (3.7.2)$$

donde

$$\mathcal{G}(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{1}{(\pi \Delta \delta)^n} \exp \left[-\frac{|\vec{q}|^2}{\Delta^2} - \frac{|\vec{p}|^2}{\delta^2} \right] \quad (3.7.3)$$

y Δ, δ son los parámetros que determinan el ancho de la Gaussiana. Para un estado puro con función de estado Ψ tenemos la siguiente expresión explícita

$$W(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{1}{(2\pi^2 \delta \Delta \delta)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \Psi^*(\vec{q}' - \frac{1}{2}\vec{c}) \exp \left[-i \frac{\vec{c} \cdot \vec{p}}{\delta} \right] \exp \left[-\frac{|\vec{q}' - \vec{q}|^2}{\Delta^2} - \frac{|\vec{p}' - \vec{p}|^2}{\delta^2} \right] \Psi(\vec{q}' + \frac{1}{2}\vec{c}) d\vec{p}' d\vec{q}' d\vec{c} \quad (3.7.4)$$

La integración de las variables \vec{p}' se efectúa fácilmente y se obtiene

$$W(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{1}{(\pi \delta \Delta)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \Psi^*(\vec{q}' - \frac{1}{2}\vec{c}) \exp \left[-i \frac{\vec{c} \cdot \vec{p}}{\delta} - \frac{|\vec{q}' - \vec{q}|^2}{\Delta^2} \right] \exp \left[-\frac{\delta^2 |\vec{c}|^2}{4\Delta^2} \right] \Psi(\vec{q}' + \frac{1}{2}\vec{c}) d\vec{q}' d\vec{c} \quad (3.7.5)$$

Las propiedades de esta PMW son (para detalles ver [Cartwright 76 y Yoshihuku 77]):

- i.- Está normalizada en el espacio de fases.
- ii.- En el límite $\Delta \rightarrow 0, \delta \rightarrow 0$ se reduce a la función de Wigner.
- iii.- Si $\Delta \delta \geq \hbar$ es no negativa, es decir, una distribución de probabilidad.
- iv.- Si $f(\vec{p}, \vec{q})$ es una función arbitraria de \vec{p} y \vec{q} , y se define

$$\langle f(\vec{p}, \vec{q}) \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} f(\vec{p}, \vec{q}) W(\vec{p}, \vec{q}) d\vec{p} d\vec{q} \quad (3.7.6)$$

entonces

$$\langle \bar{q} \rangle = \langle \hat{q} \rangle_{QM} \quad (3.7.7a)$$

$$\langle \bar{q}^2 \rangle = \langle \hat{q}^2 \rangle_{QM} + \frac{n \Delta^2}{2} \quad (3.7.7b)$$

$$\langle \bar{p} \rangle = \langle \hat{p} \rangle_{QM} \quad (3.7.7c)$$

$$\langle \bar{p}^2 \rangle = \langle \hat{p}^2 \rangle_{QM} + \frac{n \Delta^2}{2} \quad (3.7.7d)$$

$$\langle \bar{q} \cdot \bar{p} \rangle = \langle (\hat{q} \cdot \hat{p} + \hat{p} \cdot \hat{q}) / 2 \rangle \quad (3.7.7e)$$

donde \hat{q} y \hat{p} son los operadores cuánticos usuales de posición e impulso, y

$$\langle \mathcal{E}(\bar{q}, \bar{p}) \rangle_{QM} = \langle \Psi | \mathcal{E}(\hat{q}, \hat{p}) | \Psi \rangle \quad (3.7.8)$$

Demostración.- Demostraremos únicamente (3.7.7a) y (3.7.7b) ya que las otras expresiones se demuestran de la misma manera, pero utilizamos la representación de impulsos de la ecuación (3.7.5). Consideremos una función $f(\bar{q})$, sustituimos (3.7.5) en (3.7.6), usamos que

$$\frac{1}{h^n} \int_{R^n} \exp \left[-i \frac{\bar{c} \cdot \bar{p}}{h} \right] d\bar{p} = \delta(\bar{c}) \quad (3.7.9)$$

y efectuamos la integración sobre \bar{c} para obtener

$$\langle f(\bar{q}) \rangle = \frac{1}{(\sqrt{\pi} \Delta)^n} \int_{R^n} \int_{R^n} \Psi^*(\bar{q}') f(\bar{q}) \Psi(\bar{q}) e^{-\pi \rho \left[-i \frac{\bar{q}' - \bar{q}}{\Delta} \right]} \Delta \bar{q} d\bar{q}' \quad (3.7.10)$$

es decir,

$$\langle f(\bar{q}) \rangle = \left\langle \int_{R^n} f(\bar{q}) \frac{e^{-i(\bar{q}' - \bar{q})^2 / \Delta^2}}{(\sqrt{\pi} \Delta)^n} \right\rangle_{QM}$$

Basta ahora tomar $f(\bar{q}) = \bar{q}$ y $f(\bar{q}) = |\bar{q}|^2$ para obtener (3.7.7a) y (3.7.7b) respectivamente.

V.- En una dimensión se tiene

$$\langle \bar{q}^N \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=0}^{[N/2]} \binom{N}{2i} \Gamma(i + \frac{1}{2}) \Delta^{2i} \langle \hat{q}^{N-2i} \rangle_{QM} \quad (3.7.11)$$

donde $[N/2]$ denota la parte entera de $N/2$. Existe una versión análoga para el impulso p .

Demostración.- Partiendo de la versión en una dimensión de la ecuación (3.7.10) y de que

$$\int_{R^n} \bar{q}^N e^{-\pi \rho \left[\frac{(\bar{q}' - \bar{q})^2}{\Delta^2} \right]} \Delta \bar{q} = \Delta \sum_{i=0}^{[N/2]} \binom{N}{2i} \Delta^{2i} \bar{q}^{N-2i} \Gamma(i + \frac{1}{2}) \quad (3.7.12)$$

se obtiene inmediatamente (3.7.11).

La versión para el impulso p se demuestra utilizando la representación en el espacio de impulsos de las ecuaciones (3.7.5) y (3.7.10).

Analizaremos ahora las predicciones de la PMW para el oscilador armónico, para el oscilador anarmónico y para el átomo de hidrógeno [Goto y Claverie 81].

I.- El oscilador armónico.

Estudiaremos únicamente el caso unidimensional (sección 3 de [Coto y Slavov 81]). La función de Wigner es conocida para los estados propios del Hamiltoniano [Bartlett y Moyal 49] y la FWW puede ser calculada para esos mismos estados. La función de Wigner $P^{(N)}(p, q)$ del N -ésimo estado propio es

$$P^{(N)}(p, q) = \frac{(-1)^N}{\pi^2 \Delta} \exp\left(-\frac{2}{\Delta \omega} H\right) L_N\left(\frac{4}{\Delta \omega} H\right) \quad (3.7.13)$$

donde H es el Hamiltoniano y $L_N(x)$ son los polinomios de Laguerre. Sustituyendo la expresión explícita de los polinomios de Laguerre y del Hamiltoniano en (3.7.13), usando el desarrollo del binomio de Newton para expresar las potencias de H , sustituyendo lo que resulta en (3.7.2) y efectuando la integración respecto a las variables p' y q' encontramos

$$W_{\alpha}(p, q) = \frac{(-1)^N}{\pi^2} \frac{1}{\Delta \omega} \langle \rightarrow \rho \left[-\frac{p^2}{\Delta^2} - \frac{q^2}{\Delta^2} \right] \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \sum_{k=0}^i \sum_{l=0}^{i-k} \frac{(-1)^k}{2^k}$$

$$\binom{N}{i} \binom{i}{k} \binom{2i-2k}{2k} \binom{2i-2k}{2j} \Gamma(i+k) \Gamma(j+k) \left(\frac{m \omega \Delta}{\hbar}\right)^{i-j} \left(\frac{\hbar}{4m\omega}\right)^{i-1} \quad (3.7.14)$$

$$\left(\frac{p^2}{\Delta^2}\right)^{i-k-j} \delta^{ij} \left(\frac{q^2}{\Delta^2}\right)^{i-1} \Delta^{2i}$$

donde

$$\Delta^2 = \frac{\hbar^2}{m \omega} + m \omega \hbar \quad (3.7.15a)$$

$$B^2 = \Delta^2 + \frac{\hbar}{m \omega} \quad (3.7.15b)$$

y $\binom{N}{m} = \frac{N!}{(N-m)! m!}$ son los coeficientes binomiales. Usando (3.7.14) podemos, al menos en principio, calcular el valor esperado de cualquier función de p y q ; sin embargo, como estamos interesados principalmente en la energía (para comparar con los resultados experimentales) las ecuaciones (3.7.7) nos bastan. Se tiene

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \right\rangle = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle q^2 \rangle$$

y de (3.7.7b) y (3.7.7d)

$$\langle E \rangle = \langle E \rangle_{qm} + \frac{\hbar^2}{4m} + \frac{m \omega^2}{4} \Delta^2 \quad (3.7.16)$$

Auf que la diferencia entre la energía predicha por la función de Wigner y la predicha por la FWW es una constante. En tanto que nuestro interés está centrado en las propiedades de transición es satisfactorio recobrar los valores correctos para las diferencias entre los niveles de energía. Sin embargo, existen un cierto número de predicciones que involucran a la energía del punto cero del oscilador, y desde luego, esta teoría las predeciría de manera incorrecta.

Es posible calcular también la dispersión en la energía, ρ_E

re el cálculo es demasiado largo y los resultados poco interesantes y por ello no los reproducimos aquí.

II.- El oscilador anarmónico.

Consideramos ahora un oscilador anarmónico con potencial perturbador $V(q) = \alpha q^3$ (ver la sección 4 de [Nota y Claverie 81]). La FMW no puede ser calculada explícitamente; sin embargo, la energía media puede ser fácilmente encontrada usando la expresión (3.7.11); se tiene

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 + \alpha q^3 \right\rangle \quad (3.7.17)$$

y con (3.7.7b), (3.7.7d) y (3.7.11) para $N=3$

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{1}{2m} \langle \hat{p}^2 \rangle_{QM} + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \hat{q}^2 \rangle_{QM} + \alpha \langle \hat{q}^3 \rangle_{QM} \\ &+ \frac{3}{2} \alpha \Delta^2 \langle \hat{q} \rangle_{QM} + \frac{\hbar^2}{4m} + \frac{m\omega^2}{4} \Delta^2 \end{aligned} \quad (3.7.18)$$

entonces

$$\langle E \rangle = \langle E \rangle_{QM} + \frac{\hbar^2}{4m} + \frac{m\omega^2}{4} \Delta^2 + \frac{3}{2} \alpha \Delta^2 \langle \hat{q} \rangle_{QM} \quad (3.7.19)$$

Si una transición se lleva a cabo de un estado N a otro N' la diferencia entre las energías está dada por

$$\langle E \rangle_{N'} - \langle E \rangle_N = \langle E \rangle_{N',QM} - \langle E \rangle_{N,QM} + \frac{3}{2} \alpha \Delta^2 (\langle \hat{q} \rangle_{N',QM} - \langle \hat{q} \rangle_{N,QM}) \quad (3.7.20)$$

Por tanto, difiere de la predicción cuántica en la cantidad

$$E = \frac{3}{2} \alpha \Delta^2 (\langle \hat{q} \rangle_{N',QM} - \langle \hat{q} \rangle_{N,QM}) \quad (3.7.21)$$

El valor esperado cuántico de \hat{q} puede ser calculado con la teoría de perturbaciones y el resultado a primer orden en α es

$$\langle \hat{q} \rangle_{N,QM} \approx -\frac{3}{m\omega} \alpha \langle N + \frac{1}{2} \rangle \quad (3.7.22)$$

Sustituyendo esta última ecuación en (3.7.21) encontramos

$$E = -\frac{9}{2m\omega^2} \alpha^2 \Delta^2 \langle N - N' \rangle \quad (3.7.23)$$

Vemos que para las energías de transición las predicciones de la FMW difieren de las cuánticas. Nótese que la primera corrección (3.7.23) es de orden α^2 y no de orden α .

III.- El átomo de hidrógeno.

Como en el caso del oscilador anarmónico, la FMW (al igual que la función de Wigner) no puede ser calculada explícitamente; sin embargo, la energía media involucra dos integraciones adicionales que permiten encontrarla (sección 5 de [Nota y Claverie 81]). El valor esperado de la energía es

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2m} \langle \hat{p}^2 \rangle - e^2 \langle \frac{1}{r} \rangle \quad (3.7.24)$$

donde m y e son la masa y carga del electrón. El valor de $\langle \hat{p}^2 \rangle$ ya lo hemos calculado (expresión (3.7.7d)); nos falta el valor de $\langle 1/r \rangle$. Para encontrarlo sustituimos (3.7.5) en (3.7.6) con

con $r(\vec{p}, \vec{q}) = |\vec{q}|^{-1}$ y obtenemos

$$\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{(\sqrt{\pi} h \Delta)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \exp(-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{h}) \exp(-\frac{\delta^2 |\vec{r}|^2}{4 \Delta^2})$$

$$\Psi^*(\vec{r}', \frac{\vec{p}}{h}) \frac{\exp[-i \vec{r}' \cdot \vec{r} / \Delta^2]}{r'} \Psi(\vec{r}, -\frac{\vec{p}}{h}) d\vec{r}' d\vec{r} d\vec{c} d\vec{p} \quad (3.7.25)$$

La integración sobre \vec{p} da

$$\int_{\mathbb{R}^3} \exp(-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{h}) = h^3 \delta(\vec{r}) \quad (3.7.26)$$

y la integración sobre \vec{c} reduce el cálculo del valor medio a

$$\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{(\sqrt{\pi} \Delta)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\vec{r}') \frac{\exp[-i \vec{r}' \cdot \vec{r} / \Delta^2]}{r'} \Psi(\vec{r}) d\vec{r}' d\vec{r} \quad (3.7.27)$$

La integración sobre \vec{r} es complicada y la efectuamos en el apéndice A; el resultado es

$$\langle \frac{1}{r} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\vec{r}') \frac{\text{erfc}(r'/\Delta)}{r'} \Psi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (3.7.28)$$

donde $\text{erf}(x)$ es la función error [Abramowitz y Stegun 65].

Auf tenemos

$$\langle \frac{1}{r} \rangle = \langle \frac{1}{r} \text{erfc}(\frac{r}{\Delta}) \rangle_{QM} \quad (3.7.29)$$

y el valor promedio de la energía es

$$\langle E \rangle = \langle E \rangle_{QM} + \frac{1}{4} \frac{\delta^2}{m} + e^2 \langle \frac{1}{r} \text{erfc}(r/\Delta) \rangle_{QM} \quad (3.7.30)$$

donde $\text{erfc}(x)$ es la función error complementaria

$$\text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x) \quad (3.7.31)$$

Estudiaremos ahora en detalle el estado base. La función de onda del estado base es

$$\Psi_0(\vec{r}) = \frac{a^{-3/2}}{\sqrt{\pi}} \exp(-\frac{r}{a}) \quad (3.7.32)$$

donde $a = \hbar^2 / m e^2$ es el radio de Bohr. La integración en (3.7.28) puede efectuarse (ver apéndice B) y nos da

$$\langle \frac{1}{r} \rangle_0 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{a}{\Delta^2} + \frac{1}{a} (1 - 2 \frac{a^2}{\Delta^2}) \exp(\frac{a^2}{\Delta^2}) \text{erfc}(\frac{a}{\Delta}) \quad (3.7.33)$$

que sustituida en (3.7.30) lleva a

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_0 - \langle E \rangle_{0, QM} &= \frac{e^2}{\Delta^2} - \frac{e^2}{\Delta^2} (1 - 2 \frac{a^2}{\Delta^2}) \exp(\frac{a^2}{\Delta^2}) \text{erfc}(\frac{a}{\Delta}) \\ &- \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{e^2}{\Delta^2} a + \frac{3}{4} \frac{\delta^2}{m} \end{aligned} \quad (3.7.34a)$$

Para simplificar escribimos esta expresión en unidades atómicas ($m=1$, $a=1$, $e=1$, $\hbar=1$)

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_0 - \langle E \rangle_{0, QM} &\equiv \epsilon_0(a, \delta) = 1 - (1 - 2 a^2) e^{a^2} \text{erfc}(a) \\ &- \frac{2}{\sqrt{\pi}} a + \frac{3}{4} \delta^2 \end{aligned} \quad (3.7.34b)$$

Queremos encontrar el mínimo de $\epsilon_0(\Delta, \delta)$ como función de Δ y δ , con la restricción $\Delta\delta \geq 1$ (que garantiza que la PMW es no negativa). Como Δ y δ son positivos, es claro que (3.7.34b) será mínimo para $\Delta\delta = 1$ y podemos escribir la función ϵ_0 como función de Δ solamente:

$$\epsilon_0(\Delta) = 1 - (1 - 2\Delta^2) e^{-\Delta^2} \operatorname{erfc}(\Delta) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Delta + \frac{3}{4} \frac{1}{\Delta^2} \quad (3.7.35)$$

El comportamiento de esta función es el siguiente:

- a.- Para $\Delta \rightarrow 0$, $\epsilon_0(\Delta) \rightarrow \infty$ ya que $\operatorname{erfc}(\Delta) \rightarrow 1$ cuando $\Delta \rightarrow 0$.
 b.- Para $\Delta \rightarrow \infty$, tenemos el desarrollo asintótico [Abramowitz y Stegun 65]

$$\operatorname{erfc}(\Delta) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\Delta} e^{-\Delta^2} \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \frac{(2m-1)!!}{(2\Delta^2)^m} + O(\Delta^{-2m-2}) \right] \quad (3.7.36)$$

donde $(2m-1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7 \dots (2m-1)$; sustituyendo en (3.7.35) tenemos

$$\begin{aligned} \epsilon_0(\Delta) \approx 1 - (1 - 2\Delta^2) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\Delta} \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \frac{(2m-1)!!}{(2\Delta^2)^m} + O(\Delta^{-2m-2}) \right] \\ + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Delta + \frac{3}{4} \frac{1}{\Delta^2} \end{aligned} \quad (3.7.37)$$

Entonces

$$\epsilon_0(\Delta) \approx 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\Delta} + \frac{3}{4} \frac{1}{\Delta^2} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Delta + \dots \quad (3.7.38)$$

cuando $\Delta \rightarrow \infty$.

c.- Los valores de $\epsilon_0(\Delta)$ pueden ser calculados numéricamente (Tabla I) y la línea continua de la figura 1 es la gráfica cuantitativa que tiene un mínimo en $\Delta_{\min} \approx 2.14$ con un valor $\epsilon_0(\Delta_{\min}) \approx 0.72$ u.a. (unidades atómicas).

Tabla I

Los valores de $\epsilon_0(\Delta)$, $\epsilon_{20}(\Delta)$ y $\epsilon_{21}(\Delta)$

Δ	$\epsilon_0(\Delta)$	$\epsilon_{20}(\Delta)$	$\epsilon_{21}(\Delta)$	Δ	$\epsilon_0(\Delta)$	$\epsilon_{20}(\Delta)$	$\epsilon_{21}(\Delta)$
0.1	75.009	75.001	75.000	3.8	0.773	0.131	0.108
0.2	18.750	18.754	18.750	4.0	0.750	0.129	0.107
0.3	8.392	8.341	8.333	4.2	0.737	0.127	0.107
0.4	4.780	4.699	4.688	4.4	0.729	0.126	0.107
0.5	3.128	3.015	3.000	4.6	0.721	0.126	0.108
0.6	2.247	2.103	2.084	4.8	0.707	0.126	0.109
0.7	1.730	1.554	1.531	5.0	0.713	0.126	0.111
0.8	1.406	1.199	1.173	5.4	0.723	0.127	0.114
0.9	1.193	0.956	0.928	5.8	0.733	0.129	0.117
1.0	1.069	0.794	0.753	6.2	0.743	0.132	0.121
1.1	0.949	0.656	0.623	6.6	0.750	0.134	0.125
1.2	0.818	0.560	0.525	7.0	0.757	0.137	0.129
1.3	0.678	0.485	0.449	7.5	0.763	0.141	0.134
1.4	0.529	0.426	0.389	8.0	0.773	0.144	0.138
1.5	0.376	0.376	0.341	8.5	0.779	0.148	0.143
1.6	0.248	0.340	0.302	9.0	0.785	0.151	0.147
1.7	0.135	0.309	0.271	9.5	0.790	0.153	0.151
1.8	0.0727	0.282	0.244	10.0	0.796	0.156	0.154
1.9	0.022	0.260	0.222	10.5	0.800	0.161	0.156
2.0	0.018	0.241	0.204	11.0	0.804	0.164	0.161
2.2	0.017	0.212	0.175	11.5	0.808	0.167	0.164
2.4	0.021	0.190	0.155	12.0	0.812	0.169	0.167
2.6	0.024	0.173	0.140	14.0	0.824	0.179	0.177
2.8	0.023	0.161	0.129	16.0	0.833	0.186	0.185
3.0	0.021	0.151	0.121	18.0	0.840	0.192	0.191
3.2	0.019	0.144	0.115	20.0	0.846	0.197	0.197
3.4	0.017	0.138	0.112	∞	1	0.200	0.200
3.6	0.016	0.134	0.109				

De la gráfica de $\epsilon_0(\Delta)$ y de la ecuación (3.7.34b) es evidente que el mejor valor de la energía (es decir, el más cer-

ciano al predicho por la mecánica cuántica) que la PFW puede predecir para $\langle E \rangle_0$ es

$$\langle E \rangle_0 = \langle E \rangle_{0, CM} + 0.72 \quad (3.7.39)$$

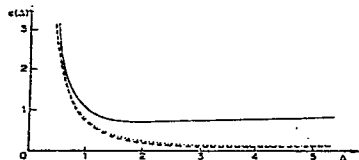


FIG. 1. Las funciones $E_0(\Delta)$ (línea continua), $E_{20}(\Delta)$ (línea punteada) y $E_{21}(\Delta)$ (línea a rayas).

Dado que $\langle E \rangle_{0, CM} = -\frac{1}{2}$, se encuentra que

$$\langle E \rangle_0 \approx +0.22 \text{ u.a.} \quad (3.7.40a)$$

$$\langle E \rangle_0 \approx +6.0 \text{ eV} \quad (3.7.40b)$$

que debe de ser interpretado como un átomo de hidrógeno ionizado. Es claro que las predicciones de la PFW difieren radicalmente de las de la teoría cuántica.

Estudiamos ahora el caso más general de estados excitados arbitrarios. Para ello sustituimos la función de onda $\Psi_N(\mathbf{r})$ del

estado excitado N en (3.7.28) y lo que resulta en (3.7.24); este cálculo es directo pero muy largo y por eso señalamos únicamente los pasos principales: i) La expresión explícita de las funciones propias excitadas $\Psi_N(\mathbf{r})$ se sustituye en (3.7.28). ii) Se efectúa la integración angular. iii) Se escriben los polinomios de Laguerre utilizando la fórmula de Rodrigues. iv) Se efectúa la integración respecto a la variable r y v) Se evalúan las derivadas que aparecen en la fórmula de Rodrigues. Entonces se obtiene

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{N, L} = -\frac{(N+1)!}{N^2 (N-1)!} \left(\frac{2\Delta^2}{N^2} \right)^{2l+1} \sum_{k=0}^{N-l-1} \sum_{j=k}^{N-l-1+k} \binom{N-l-1}{j-k}$$

$$\binom{2l+1+j}{j} \frac{(2\Delta^2/\mu^2)^j}{(2l+1+j)!(N-l-1-j)!} \left\{ e^{\Delta^2/\mu^2} \operatorname{erfc}\left(\frac{\Delta}{\mu}\right) A_N(2l+1+j) + \sum_{k=1}^{2l+1+j} \left(-\frac{N^2}{2\Delta^2}\right)^k A_N(2l+1+j-k) \left[e^{\Delta^2/\mu^2} \operatorname{erfc}\left(\frac{\Delta}{\mu}\right) + \frac{2}{\mu} B_m(\mu) \right] \right\} \quad (3.7.41)$$

donde

$$A_N(m) = \sum_{s=0}^{[m/2]} \frac{1}{s!(m-2s)!} \left(\frac{N}{2\Delta} \right)^{2s} \quad (3.7.42a)$$

y

$$B_n(k) = \sum_{p=0}^n \frac{k}{p!} \frac{(n\Delta)^p}{p!} H_{p-1} \left(\frac{\Delta}{n} \right) \quad (3.7.42b)$$

siendo $H_n(x)$ los polinomios de Hermite.

Basta examinar con un poco de cuidado (3.7.41) para darnos cuenta que también en este caso las predicciones de la FWH van a diferir de las de la mecánica cuántica. En efecto, vemos que dicha expresión depende del número cuántico N y también del número l , mientras que en la teoría cuántica la energía es independiente de l . Sin embargo, estudiaremos más en detalle los estados correspondientes a $N=2$; es decir, los estados con $N=2$, $l=0$ y $N=2$, $l=1$.

Para el estado s encontramos, después de sustituir $N=2$ y $l=0$ en (3.7.41) y el resultado en (3.7.30)

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{s_0} - \langle E \rangle_{s_0, qm} &\equiv \epsilon_{s_0}(\Delta, \delta) = \frac{1}{4} + \frac{3}{4} \delta^2 - \frac{1}{\sqrt{16}} \left(\Delta + \frac{3}{4} \Delta^3 + \frac{1}{8} \Delta^5 \right) \\ &+ \frac{1}{4} \left(\frac{\Delta^6}{16} + \frac{\Delta^4}{2} + \frac{3}{4} \Delta^2 - 1 \right) e^{\Delta^2/4} \operatorname{erfc} \left(\frac{\Delta}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.7.43)$$

y de la misma manera se tiene para el estado p

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{p_1} - \langle E \rangle_{p_1, qm} &\equiv \epsilon_{p_1}(\Delta, \delta) = \frac{1}{4} + \frac{3}{4} \delta^2 - \frac{1}{\sqrt{16}} \left(\Delta - \frac{\Delta^3}{16} + \frac{\Delta^5}{24} \right) \\ &+ \frac{1}{4} \left(\frac{\Delta^6}{48} + \frac{\Delta^4}{4} + 1 \right) e^{\Delta^2/4} \operatorname{erfc} \left(\frac{\Delta}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.7.44)$$

Siguiendo el mismo argumento que para el estado base parece evidente que el mejor acuerdo con la mecánica cuántica ocurrirá

para $\Delta \delta = 1$; tomamos entonces $\delta = \Delta^{-1}$ en ϵ_{20} y ϵ_{21} , y numéricamente calculamos algunos de sus valores (Tabla I). Las gráficas cualitativas son la línea punteada y la línea a rayas de la figura 1.

Examinando las transiciones entre los niveles $1s$, $2s$ y $2p$ surgen dos posibilidades:

(a) Para todos los sistemas se utiliza la misma Gaussiana (siempre el mismo Δ).

(b) Una Gaussiana distinta es utilizada para cada estado del sistema.

Examinemos en detalle ambas opciones:

(a) La misma Gaussiana se utiliza para todos los estados. De las gráficas de ϵ_{0s} , ϵ_{20} y ϵ_{21} vemos que en esencia hay tres casos distintos:

(ai) Si $\Delta \ll 1$, tenemos aproximadamente $\epsilon_{0s}(\Delta) \approx \epsilon_{20}(\Delta) \approx \epsilon_{21}(\Delta)$ y la FWH predice los valores correctos para la diferencia entre niveles; sin embargo, los valores de la energía son completamente erróneos, por ejemplo, si tomamos $\Delta \approx 0.1$ la diferencia entre las funciones $\epsilon_{21}(\Delta)$ es del orden de 10^{-3} u. a., mientras que $\langle E \rangle_0 \approx 74.51$ u. a. y $\langle E \rangle_{20} \approx \langle E \rangle_{21} \approx 74.88$ u. a.

(aii) Si $1 \leq \Delta \leq 10$, tenemos $\epsilon_{0s}(\Delta) - \epsilon_{20}(\Delta) \approx 0.7$ u. a. y $\epsilon_{20}(\Delta) - \epsilon_{21}(\Delta) \approx 10^{-2}$ u. a.; entonces $\langle E \rangle_{20} - \langle E \rangle_0 =$

$\langle E \rangle_{20, \text{QM}} - \langle E \rangle_{0, \text{QM}} + E_{20}(\Delta) - E_0(\Delta) \approx -0.32 \text{ u.a.}$, es decir, que la primera línea de emisión de la serie de Lyman se predice como una línea de absorción.

«iii) Si $\Delta \gg 10$, tenemos de (3.7.38), $E_0(\Delta) \approx 1$ a orden Δ^{-3} y de desarrollos similares para $E_{20}(\Delta)$ y $E_{21}(\Delta)$ encontramos que $E_{20}(\Delta) \approx E_{21}(\Delta) \approx 0.25$ también a orden Δ^{-3} ; así

$$\langle E \rangle_0 \approx +0.50 \text{ u.a.} \quad (3.7.44a)$$

y

$$\langle E \rangle_{20} \approx \langle E \rangle_{21} \approx +0.125 \text{ u.a.} \quad (3.7.44b)$$

con lo cual tenemos nuevamente una inversión de niveles y contradicción con la mecánica cuántica.

«) La función Gaussiana con la cual se "suaviza" la función de Wigner no es la misma para todos los estados. En este caso es claro que el mejor valor de Δ para cada estado es el mínimo de su función $E(\Delta)$ correspondiente; en particular para los estados 1s, 2s y 2p se tiene:

«i) Estado 1s (estado base). En este caso ya sabemos (ecuación (3.7.40)) que la energía está dada como

$$\langle E \rangle_{0, \text{min}} \approx +0.22 \text{ u.a.}$$

«ii) Estado 2s. El mínimo de $E_{20}(\Delta)$ es $\Delta_{\text{min}} \approx 4.73$ que corresponde a $E_{20}(\Delta_{\text{min}}) \approx +0.13 \text{ u.a.}$; así, de la ecuación (3.7.43) y del hecho que $\langle E \rangle_{20, \text{QM}} = -0.125 \text{ u.a.}$, encontramos

$$\langle E \rangle_{20, \text{min}} \approx +0.005 \text{ u.a.} \quad (3.7.45)$$

«iii) Estado 2p. Tenemos $\Delta_{\text{min}} \approx 4.12$ y $E_{21}(\Delta_{\text{min}}) \approx +0.11 \text{ u.a.}$; por tanto,

$$\langle E \rangle_{21, \text{min}} \approx -0.015 \text{ u.a.} \quad (3.7.46)$$

Apéndice A

Procedemos a la integración respecto a la variable F en la ecuación (3.7.27); denotando dicha integral por I , tenemos

$$I = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\exp[-|F' - F|^2/\Delta^2]}{r} dF \quad (3.A.1)$$

El cambio de variables

$$\lambda = \frac{|F| + |F' - F|}{|F'|} \quad (3.A.2a)$$

$$\mu = \frac{|F| - |F' - F|}{|F'|} \quad (3.A.2b)$$

$$\psi = \arctan \frac{\mu}{\lambda} \quad (3.A.2c)$$

donde (x, y, z) son las coordenadas cartesianas de \vec{r} , da

$$I = \frac{r'^3}{8} \int_0^\pi d\lambda \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\varphi (\lambda^2 - \mu^2) \frac{2 \exp[-r'(\lambda^2 - \mu^2)^{1/2} / a]}{r'} \quad (3.A.3)$$

que al integrar sobre φ queda

$$I = \frac{\pi}{2} r'^2 \int_0^\pi d\lambda \int_{-1}^1 d\mu (\lambda^2 - \mu^2) \exp\left[-\frac{r'}{4a^2} (\lambda^2 - \mu^2)^2\right] \quad (3.A.4)$$

Haciendo un nuevo cambio de variables,

$$\alpha = \lambda - \mu \quad \ell = \lambda \quad (3.A.5)$$

obtenemos

$$I = \frac{\pi}{2} r'^2 \int_0^\pi d\ell \int_{\ell-1}^{\ell+1} d\alpha \alpha \exp\left[-\frac{r'^2}{4a^2} \alpha^2\right] \quad (3.A.6)$$

que puede ser integrado para dar

$$I = \frac{(\sqrt{\pi} \Delta)^3}{r'} \operatorname{erf}\left(\frac{r'}{\Delta}\right) \quad (3.A.7)$$

Apéndice B

En este apéndice calculamos el valor esperado de $1/r$ en el estado base del átomo de hidrógeno. Sustituyendo (3.7.32) en

(3.7.28) se tiene

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_0 = \frac{a^{-3}}{\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{-2r'/a}}{r'} \operatorname{erf}\left(\frac{r'}{a}\right) d\vec{r}' \quad (3.B.1)$$

En coordenadas esféricas las integrales con respecto a θ y φ son resueltas fácilmente y se encuentra

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_0 = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty r' e^{-\frac{2r'}{a}} \operatorname{erf}\left(\frac{r'}{a}\right) dr' \quad (3.B.2)$$

que se puede integrar por partes dando

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_0 = \frac{4}{\sqrt{\pi} a^3 \Delta} \int_0^\infty (r' + \frac{a}{2}) \exp\left[-\frac{2r'}{a} - \frac{r'^2}{\Delta^2}\right] \quad (3.B.3)$$

que con la sustitución

$$u = \frac{r'}{a} + \frac{a}{2\Delta} \quad (3.B.4)$$

nos da la ecuación

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_0 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\Delta}{a^2} + \frac{1}{a} \left(1 - 2 \frac{\Delta^2}{a^2}\right) e^{\frac{\Delta^2}{a^2}} \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\Delta}{a}\right)\right] \quad (3.B.5)$$

que es lo que buscábamos.

CAPITULO 4

LA NO REPURENCIA DEL ATOMO DE HIDROGENO EN LA

ELECTRODINAMICA ESTOCASTICA

4.1 Introducción.

Entre las teorías propuestas como alternativas a la mecánica cuántica una de las más alentadoras por la claridad conceptual que proporciona es la electrodinámica estocástica (EDE). Las hipótesis físicas que constituyen la base de la teoría son la electrodinámica clásica y la existencia de un campo estocástico (atmérico o de punto cero) que llena el universo [Khalatnikov 53; Adirovich y Podgorretski 54; Braffort, Spiguel y Tzara 54; Marshall 63, 65a, y 65b; Boyer 75; Santos 75; de la Peña y Cetto 77, 78a y 78b; Claverie y Diner 76]. Usando varios argumentos es posible demostrar [Braffort, Spiguel y Tzara 54; Boyer 69; Marshall 63; Santos 74] que este campo estocástico tiene propiedades similares a las del campo de vacío de la electrodinámica cuántica; es decir, es Gaussiano con media nula y densidad espectral

$$S(\omega) = \frac{2\pi}{3c^3} |\omega|^3 \quad (4.1.1)$$

La teoría constituye un problema bien definido de la física matemática, pero la solución de problemas no triviales es bastante difícil debido principalmente al carácter no blanco del ruido asociado al campo de fondo; las técnicas requeridas para el tratamiento de sistemas no lineales han sido desarrolladas re-

cientemente [de la Peña y Cetto 77; Claverie, de la Peña y Diner 78; Marshall y Claverie 80; Pesquera 80a y 80b; Claverie y Pesquera 81] a partir de técnicas generales para el tratamiento de procesos estocásticos.

Para una partícula no relativista con carga la ecuación de movimiento en la EDE es la de Braffort-Marshall:

$$m \ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}(\mathbf{r}) + m\tau \dot{\mathbf{W}} + e \mathbf{E}(t) \quad (4.1.2)$$

donde m es la masa de la partícula, e su carga y $\tau = 2e^2/3mc^3$; $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ es la fuerza externa clásica y $\mathbf{E}(t)$ el campo eléctrico debido al campo de radiación de fondo. Este último término está escrito en la aproximación dipolar, que desprecia la fuerza magnética del campo de fondo y la dependencia espacial del campo eléctrico.

A partir de (4.1.2) y utilizando la ecuación estocástica de Liouville se ha derivado una ecuación generalizada de Fokker-Planck para la distribución en el espacio de fases [de la Peña y Cetto 77, 78a y 78b]; el proceso que se obtiene es definitivamente no Markoviano en dicho espacio. La fuerza de reacción de radiación de Lorentz-Dirac y la fuerza estocástica son pequeñas con respecto del Hamiltoniano determinista, lo que hace posible el uso de métodos perturbativos que permiten derivar, a partir de la ecuación generalizada de Fokker-Planck, ecuacio-

nes aproximadas de Fokker-Planck de tipo usual (ecuaciones diferenciales de segundo orden denotadas DPF en lo que sigue). El carácter no Markoviano del proceso origina que haya varias aproximaciones posibles; sin embargo, todas estas aproximaciones pueden ser reducidas a una DPF en términos de un número menor de variables, a saber, ciertas constantes relevantes del movimiento determinista no perturbado [Claverie, de la Peña y Diner 78; Marshall y Claverie 80; Claverie 80]. La ecuación reducida de FP también puede obtenerse directamente calculando mediante métodos perturbativos la variación de las constantes de movimiento relevantes bajo el efecto de la fuerza de reacción de radiación y de la fuerza estocástica y promediando estas variaciones para obtener los coeficientes de difusión y de arrastre [Claverie, de la Peña y Diner 78; Marshall y Claverie 80; Claverie 80].

Como ya dijimos en la introducción de este trabajo las predicciones de la ecuación reducida de FP son aceptables para los sistemas lineales, pero para sistemas no lineales, como el oscilador anarmónico y el átomo de hidrógeno, los resultados obtenidos hasta ahora están en contradicción con la mecánica cuántica [Claverie 80; Pequera 80a, 80b y 80c].

En este capítulo mostramos, usando un criterio desarrollado por Khraminskii [80], que para el problema de Kepler el proceso que describe la ecuación reducida de FP no es recurrente y

por tanto, tampoco es ergódico. Examinamos las implicaciones de esta propiedad y sus posibles causas.

4.2 El problema de Kepler estocástico.

En el problema de Kepler se tiene el potencial

$$V(r) = -\frac{K}{r} \quad (4.2.1)$$

donde K es una constante positiva. Un posible juego de variables adecuadas para escribir la ecuación reducida de FP son dos de las siguientes tres: la energía E de la partícula, su momento angular total M y la excentricidad ϵ ; estas tres cantidades están relacionadas por la fórmula

$$E = (1 + 2EM^2/\mu K^2)^{1/2} \quad (4.2.2)$$

También es útil en el tratamiento de este problema la variable auxiliar $\eta = (1 - \epsilon^2)^{1/2}$.

Ya que estamos interesados en estudiar únicamente los estados ligados, restringiremos nuestra atención al caso en que $E \leq 0$. Para dichos estados la ecuación reducida de FP está dada por [Marshall y Claverie 80; Claverie, de la Peña y Diner 78]:

$$\begin{aligned} 3\pi^2 M T \frac{\partial W}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial E} [D_E W] + \frac{\partial}{\partial M} [D_M W] + \frac{\partial}{\partial \epsilon} [D_\epsilon \frac{\partial W}{\partial E}] \\ & + \frac{\partial}{\partial E} [D_{EM} \frac{\partial W}{\partial M}] + \frac{\partial}{\partial M} [D_{ME} \frac{\partial W}{\partial E}] + \frac{\partial}{\partial \epsilon} [D_{\epsilon E} \frac{\partial W}{\partial M}] \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

donde

$$T = 2\pi X (m/2|E|)^{1/2} \quad (4.2.4)$$

es el periodo orbital. Los coeficientes son :

$$D_E = 16\pi^2 \tau m X^2 \left(\frac{E}{M} + \frac{1}{2} \frac{m X^2}{M^2} \right) \quad (4.2.5a)$$

$$D_M = 16\pi^2 \tau m X^2 \frac{1}{M} \quad (4.2.5b)$$

$$D_{EE} = 16\pi^2 \tau h M \frac{2|E|^{1/2}}{m X^2} \phi_2(\epsilon) \quad (4.2.5c)$$

$$D_{MM} = 16\pi^2 \tau h M |2E| \phi_1(\epsilon) \quad (4.2.5d)$$

$$D_{ME} = D_{EM} = 16\pi^2 \tau h M \frac{|2E|^{1/2}}{(m X^2)^{1/2}} \phi_2(\epsilon) \quad (4.2.5e)$$

donde las funciones $\phi_r(\epsilon)$ pueden ser expresadas como series en términos de funciones de Bessel, de la manera siguiente:

$$\phi_r(\epsilon) = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \text{sg}(n) n^r \left[\frac{\eta}{\epsilon} J_n(n\epsilon) + J'_n(n\epsilon) \right] \quad (4.2.6)$$

donde $\text{sg}(n)$ significa el signo de n . A estas funciones se les llama series de Kupteyn; un estudio completo de ellas, incluyendo su comportamiento asintótico cuando $\eta \rightarrow 0$, puede encontrarse en [Marshall 79].

Para tener bien definido el problema planteado por la ecuación (4.2.3) es necesario especificar su dominio de definición. A partir de consideraciones físicas, es claro, que el intervalo de variación de las variables E y M está dado por

$$\begin{aligned} -\infty < E \leq 0 \\ 0 \leq M \leq (m X^2 / |E|)^{1/2} \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

Es importante notar que en la forma en que está escrita la ecuación reducida de FP (ecuación (4.2.3)), los coeficientes de arrastre sólo dependen de la fuerza de reacción de radiación, mientras que los coeficientes de difusión quedan determinados sólo por la fuerza estocástica. Esta propiedad se satisface para cualquier problema en que la fuerza estocástica dependa únicamente del tiempo [Claverie 80], o más general aún, para cualquier problema cuya fuerza estocástica tenga una divergencia nula respecto a las variables del espacio de fases [Van Kampen 76; Peguera 80a y 80b].

La ecuación (4.2.3) puede escribirse en forma más compacta como sigue

$$\mathbf{m} \cdot \nabla_T \frac{\partial W}{\partial t} = \text{div} (\mathbf{S} W + \mathbf{D} \text{grad} W) \quad (4.2.8)$$

donde

$$\bar{D} = \begin{pmatrix} D_E \\ D_M \end{pmatrix} \quad D = \begin{pmatrix} D_{EE} & D_{EM} \\ D_{EM} & D_{MM} \end{pmatrix} \quad (4.2.9)$$

Introduciendo la corriente de probabilidad

$$\bar{J} \equiv \bar{D} W + D \text{ grad } W \quad (4.2.10)$$

podemos escribir de manera aún más compacta la ecuación reducida de FP como

$$\text{grad}^2 W + \frac{\partial W}{\partial t} = \text{div } \bar{J} \quad (4.2.11)$$

A nosotros nos interesa resolver únicamente la ecuación estacionaria; es decir, que si llamamos W_0 a la densidad de probabilidad estacionaria, nuestro problema es resolver la ecuación

$$\text{div } \bar{J} = \text{div} (W_0 \bar{D} + D \text{ grad } W_0) = 0 \quad (4.2.12a)$$

Notemos primeramente que toda constante es solución de esta ecuación. Desarrollándola se tiene

$$W_0 \text{ div } \bar{D} + \text{grad } W_0 \cdot \bar{D} + \text{div} (D \text{ grad } W_0) = 0 \quad (4.2.12b)$$

Como puede verse de (4.2.5a) y (4.2.5b) se cumple que

$$\text{div } \bar{D} = \frac{\partial D_E}{\partial E} + \frac{\partial D_M}{\partial M} = 0 \quad (4.2.13)$$

por lo que la ecuación (4.2.12b) se reduce en el caso del problema de Kepler a

$$\bar{D} \cdot \text{grad } W_0 + \text{div} (D \cdot \text{grad } W_0) = 0$$

que se cumple idénticamente si $\text{grad } W_0 = 0$, es decir, $W_0 = \text{constante}$. Cabe señalar que la solución constante no satisface la condición de flujo nulo de probabilidad en la frontera del dominio de definición (4.2.7). Esta condición, que se escribe $\bar{J} \cdot \bar{n} = 0$ donde \bar{n} es un vector unitario normal a la frontera en cuestión, parece natural para una buena solución.

Hasta la fecha no ha sido posible encontrar otra solución exacta de la ecuación reducida de FP; Claverie y Pesquera [Claverie y Pesquera 80; Pesquera 80a y 80b] han estado buscando soluciones de la forma $W_0 = \text{const. exp}(-\Psi)$ donde Ψ se expresa como una serie.

Suponiendo que existe al menos una solución distinta de la trivial podemos darnos una idea de su comportamiento modificando ligeramente los coeficientes (4.2.5) de la ecuación (4.2.3) de manera que se satisfaga la condición de balance detallado (CBD); es decir, que la corriente de probabilidad se anule [de la Peña 78; Claverie 80]

$$W_0 \bar{D} + D \text{ grad } W_0 = 0 \quad (4.2.13)$$

Dividiendo esta ecuación por W_0 y si D^{-1} existe (lo cual es el caso, con la excepción de algunas de las fronteras del dominio de definición) la CBD queda expresada como

$$D^{-1} \bar{D} = \text{grad} \log W_0 \quad (4.2.14)$$

o en otras palabras que $D^{-1} \bar{D}$ debe ser un campo gradiente. Una de las posibles modificaciones es

$$\Phi_1^{\text{mod}}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \varepsilon^{-2} \quad \text{y} \quad \Phi_2^{\text{mod}}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \frac{1 + \varepsilon^2/\varepsilon}{\varepsilon^2} \quad (4.2.15)$$

independientemente de cuál sea $\Phi_3(\varepsilon)$. Estas funciones modificadas coinciden con $\Phi_1(\varepsilon)$ y $\Phi_2(\varepsilon)$ respectivamente hasta el orden ε^3 cerca de 0 y divergen con la misma potencia de ε cuando ε tiende a 0; por tanto, el problema exacto satisfaca la CBD a lo largo de la frontera $\varepsilon=0$ y podemos esperar que la solución BD del problema modificado nos proporcione una aproximación a alguna solución estacionaria.

La solución BD del problema modificado es

$$W_0^{\text{mod}}(M) = \text{const.} \exp\left(-\frac{2M}{\varepsilon}\right) \quad (4.2.16)$$

Como los coeficientes de arrastre son los mismos que en el problema exacto la ecuación (4.2.13) sigue siendo válida y tenemos también la solución $W_0^{\text{mod}} = \text{constante}$.

Antes de soluciones, la constante y la aproximada, inevitablemente nos conducen a una integral divergente para la densidad de probabilidad completa $W_0 M^2 / \varepsilon^2$ (el factor M^2 / ε^2 se debe a que el elemento de volumen en el espacio de fases reducido (M, φ) es $M^2 / \varepsilon^2 dM d\varphi$). Físicamente esto quiere decir que W_0 corresponde a una difusión del electrón hacia el infinito (el átomo se auto-ioniza).

4.3 El criterio de Khua'minskii.

Sea $X(t)$ un proceso de difusión en un espacio métrico completo y σ -compacto (E, \mathcal{E}) y con probabilidad de transición $P(t, x, A)$, $t \geq 0$, $x \in A$ y $A \in \mathcal{B}$ donde \mathcal{B} es la σ -álgebra de conjuntos medibles generada por los conjuntos abiertos en el espacio (E, \mathcal{E}) . Se define un proceso de difusión recurrente como:

Definición 4.3.1. - Si existe un conjunto compacto K tal que para todos los puntos $x \in E$,

$$P_x \left\{ \text{existe una } t \text{ tal que } X(t) \in K \right\} = 1 \quad (4.3.1)$$

el proceso se llama recurrente.

Físicamente lo que esta definición nos dice es que casi todas (es decir, con probabilidad 1) las trayectorias del proceso cruzarán el compacto K [Khua'minskii 60]. Es posible demostrar [Khua'minskii 60] que las trayectorias de un proceso de difusión recurrente es densa en casi todas partes de E , y por tanto todo proceso de este tipo es ergódico.

Las siguientes propiedades de los procesos estocásticos multidimensionales nos serán muy útiles :

(1) La densidad de probabilidad estacionaria o medida invariante de un proceso recurrente es única. Dicha medida puede o no ser finita.

(2) Si un proceso tiene una densidad de probabilidad estacionaria finita , entonces es recurrente. Debido a (1) dicha medida será única.

Como consecuencia de (2) , si un proceso es no recurrente no puede tener una densidad de probabilidad estacionaria finita ; la medida invariante puede o no ser única , pero siempre será in finita. Desde el punto de vista físico un estado ligado corresponde a la existencia de una medida invariante finita , es decir a un proceso recurrente; mientras que un proceso no recurrente , teniendo una medida invariante infinita debe representar estados no ligados.

La distinción entre procesos recurrentes y no recurrentes es bastante clara desde el punto de vista físico y por ello sería deseable poder discernir las características de recurrencia de un proceso dado. Khas'minskii [60] ha elaborado criterios suficientes para el caso de un proceso de difusión ; estos criterios se basan en el conocimiento de los coeficientes de arrastre y de difusión del proceso. Para el problema de Kepler uno sólo de estos

criterios nos será útil y es a éste al que llamamos criterio de Khas'minskii ; pasamos a exponerlo , enviando al lector interesado en las otras versiones del criterio de Khas'minskii a su artículo [60] y a los libros [McKean 69 ; Stroock y Varadhan 79 ; Frohnerov y Rozanov 69] .

Es bien conocido en la teoría de procesos de Markov que el operador infinitesimal de Dynkin de un proceso de difusión en un dominio E de un espacio euclidiano de N dimensiones tiene la forma [Dynkin 61 y 65 ; Lamperti 77]

$$\hat{L} = \sum_{i,j=1}^N a_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^N b_i \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (4.3.2)$$

Suponemos ahora que este operador está dado en todo el espacio euclidiano \mathbb{R}^N y que los coeficientes a_{ij} , b_i son suficientemente suaves (por ejemplo , que su tercera derivada existe y es continua) y que dado un conjunto $\{\lambda_i ; i=1, \dots, N\}$

$$\sum_{i,j=1}^N a_{ij} \lambda_i^2 \lambda_j > 0 \quad \text{en } \mathbb{R}^N \quad \text{si} \quad \sum_{i=1}^N \lambda_i^2 \geq 0$$

Definimos

$$B_i(x_i) = \inf \frac{b_i(\bar{x})}{a_{ii}(\bar{x})} \quad (4.3.3a)$$

$$\bar{v}_i(x_i) = \sup \frac{v_i(x)}{a_{ii}(x)} \quad (4.2.3b)$$

donde el infimo y el supremo están tomados sobre todas las coordenadas exceptuando la i -ésima.

Con las suposiciones hechas y con estas definiciones podemos enunciar el criterio de Khas'minskii (ver el teorema II del suplemento, página 194, de [Khas'minskii 60]):

Criterio de Khas'minskii .- Para que un proceso de difusión no sea recurrente es suficiente que para alguna i , $1 \leq i \leq N$, alguna de las dos desigualdades

$$\int_{x_0}^{\infty} \alpha x f \left\{ - \int_{x_0}^x \bar{B}_i(y) dy \right\} dx < +\infty \quad (4.3.4a)$$

$$\int_{-\infty}^{x_0} \alpha x f \left\{ \int_x^{x_0} \bar{B}_i(y) dy \right\} dx < +\infty \quad (4.3.4b)$$

se satisfaga para toda x_0 .

4.4 La forma usual de la ecuación de Fokker-Planck.

Para aplicar el criterio de Khas'minskii al problema de Koller primero debemos de escribir la ecuación reducida de PF (ecuación (4.2.3)) en la forma en que se supone en dicho criterio; es decir, la ecuación debe de estar definida en todo el espacio

euclediano correspondiente (\mathbb{R}^2 en este caso) y debe estar en la forma hacia atrás (ecuación de Kolmogorov) que corresponde al operador infinitesimal de Dynkin. Cabe señalar que la condición de continuidad de las terceras derivadas de los coeficientes se satisface para ξ en el intervalo (0,1). La transformación que se necesita para poner a (4.2.3) en esta forma la llevamos a cabo en varios pasos.

i.- Con la idea de tener un dominio de definición más adecuado para efectuar la extensión a \mathbb{R}^2 pasamos de la representación E-M a la representación E- ξ .

ii.- Mediante otro cambio de variable extendemos la EFP en forma de corriente a todo \mathbb{R}^2 .

iii.- En la forma de corriente se tiene la densidad de probabilidad estacionaria pero incompleta, por ello en este paso incluimos el elemento de volumen en la densidad.

iv.- La ecuación que se obtiene en el paso anterior es una ecuación "mixta" (que tiene mezclados elementos de una ecuación hacia atrás y de una ecuación hacia adelante), así que en este paso la llevamos a una forma puramente hacia adelante.

Los pasos i y ii requieren que se conozca el comportamiento de los coeficientes de una EFP cuando se efectúa un cambio de coordenadas; es decir, que si se tiene

$$C \frac{\partial W}{\partial t} = \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left[D_i W + \sum_{j=1}^2 D_{ij} \frac{\partial W}{\partial \xi_j} \right] \right\} \quad (4.4.1)$$

y efectuamos un cambio de variables

$$\xi_i \longrightarrow \xi'_i \quad (i=1,2) \quad (4.4.2)$$

lo que queremos saber son los nuevos coeficientes D'_i y D'_{ij} y el nuevo elemento de volumen G' .

Este problema ha sido resuelto por M. Lax (ver sección 3 de [Lax 66]) para el caso en que la EFP está escrita para la densidad de probabilidad completa $P = GW$, y el resultado correspondiente para una ecuación de la forma (4.4.1) se encuentra en [Lax 66]. El resultado es el siguiente:

$$D'_i = \left| \det \frac{D(\xi)}{D(\xi')} \right| \sum_{k=1}^2 \frac{\partial \xi'_i}{\partial \xi_k} D_k ; \quad (i=1,2) \quad (4.4.3a)$$

$$D'_{ij} = \left| \det \frac{D(\xi)}{D(\xi')} \right| \sum_{k,l=1}^2 \frac{\partial \xi'_i}{\partial \xi_k} \frac{\partial \xi'_j}{\partial \xi_l} D_{kl} \quad (i,j=1,2) \quad (4.4.3b)$$

$$C' = \left| \det \frac{D(\xi)}{D(\xi')} \right| C \quad (4.4.3c)$$

donde $\det \frac{D(\xi)}{D(\xi')}$ es el jacobiano de la transformación (4.4.2).

Procedamos ahora al paso 1:

1.- El dominio de definición (4.2.7) de nuestra EFP (4.2.3) es bastante complicado, así que tenemos que efectuar un cambio de variables para obtener un dominio más adecuado para la extensión a \mathbb{R}^2 . Entre las posibles representaciones tenemos la de "energía-excentricidad" cuyo dominio es el rectángulo

$$\begin{aligned} -\infty &\leq E \leq 0 \\ 0 &\leq \epsilon \leq 1 \end{aligned} \quad (4.4.4)$$

y que implica el cambio de variables

$$\begin{aligned} E & \longrightarrow E \\ M & \longrightarrow \epsilon = \left[1 - \frac{2M^2}{\omega^2 K^2} |E| \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (4.4.5)$$

Los nuevos coeficientes se obtienen de las ecuaciones (4.4.3) y son (hemos omitido las primas)

$$D_E = 8\pi^3 \tau (\omega M)^{1/2} |2E|^{1/2} \frac{\epsilon}{\omega^2} (1-\epsilon^2) \quad (4.4.6a)$$

$$D_\epsilon = 24\pi^3 \tau (\omega M)^{1/2} |2E|^{1/2} \epsilon / \omega^2 \quad (4.4.6b)$$

$$D_{\xi\xi} = 16\pi^2 \tau \kappa |2\xi|^2 \varepsilon \phi_2(\varepsilon) \quad (4.4.6c)$$

$$D_{\xi\xi} = 16\pi^2 \tau \kappa |2\xi| \frac{\eta^2}{\varepsilon} [\eta^2 \phi_2(\varepsilon) - 2\eta \phi_1(\varepsilon) + \phi_0(\varepsilon)] \quad (4.4.6d)$$

$$D_{\xi\xi} = D_{\varepsilon\varepsilon} = 16\pi^2 \tau \kappa |2\xi|^2 \eta [\eta \phi_2(\varepsilon) - \phi_1(\varepsilon)] \quad (4.4.6e)$$

$$C = 16\pi^3 (\kappa \eta \eta')^{3/2} \frac{\varepsilon}{|2\xi|^{3/2}} \quad (4.4.6f)$$

ii.- El dominio de definición rectangular (4.4.4) es fácilmente extendible a \mathbb{R}^2 mediante un nuevo cambio de variables. Una, entre las muchas posibilidades, es

$$\begin{array}{ccc} \varepsilon & \longrightarrow & \varepsilon' = \ln |\varepsilon| \\ & & \varepsilon' = \operatorname{arctanh}(2\varepsilon^2 - 1) = \frac{1}{2} \ln \frac{\varepsilon^2}{1 - \varepsilon^2} \end{array} \quad (4.4.7)$$

que en la misma manera que en i da (nuevamente omitimos las pri-

mas) :

$$D_{\xi'} = -\varepsilon \eta^2 D_{\xi} \quad (4.4.8a)$$

$$D_{\xi'} = |\varepsilon| D_{\xi} \quad (4.4.8b)$$

$$D_{\xi'\xi'} = \frac{\varepsilon \eta^2}{\kappa} D_{\xi\xi} \quad (4.4.8c)$$

$$D_{\xi'\xi'} = \frac{|\varepsilon|}{\varepsilon \eta^2} D_{\xi\xi} \quad (4.4.8d)$$

$$D_{\xi'\xi'} = D_{\varepsilon'\varepsilon'} = -D_{\xi\xi} \quad (4.4.8e)$$

$$C' = \varepsilon \eta^2 |\varepsilon| C \quad (4.4.8f)$$

Tenemos ahora una EFP en forma de corriente (ecuación (4.4.1)) definida en todo \mathbb{R}^2 .

En los dos pasos siguientes pondremos esta ecuación en la forma usual ; es decir ,

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (G_i P) + \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (G_{ij} P) \quad (4.4.9)$$

donde

$$P = C W \quad (4.4.10)$$

es la densidad de probabilidad completa.

iii.- De la ecuación (4.4.1) es evidente que no puede escribirse (C es independiente del tiempo)

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{D_i}{C} P + \sum_{j=1}^2 D_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{P}{C} \right) \right] \right\} \quad (4.4.11)$$

o bien

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left[\frac{D_i}{C} + \sum_{j=1}^2 D_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{C} \right) \right] P + \sum_{j=1}^2 \frac{D_{ij}}{C} \frac{\partial P}{\partial x_j} \right\} \quad (4.4.12)$$

Definiendo

$$G_i = \frac{D_i}{C} - \sum_{j=1}^2 \frac{D_{ij}}{C^2} \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad (4.4.13a)$$

y

$$G_{ij} = \frac{D_{ij}}{C} \quad (4.4.13b)$$

podemos escribir la E.P. para la densidad completa como

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ G_i P + \sum_{j=1}^2 G_{ij} \frac{\partial P}{\partial x_j} \right\} \quad (4.4.14)$$

Si sustituimos los coeficientes (4.4.8) en (4.4.13) se encuentra

$$G_i = \frac{1}{\epsilon^2 C} \left[-D_i + \sum_{j=1}^2 \frac{D_{ij}}{\epsilon^2} + \frac{2(1-2\epsilon^2)}{\epsilon^2} D_{ii} \right] \quad (4.4.15a)$$

$$G_i = \frac{1}{\epsilon^2 C} \left[D_i - \sum_{j=1}^2 \frac{D_{ij}}{\epsilon^2} - \frac{2(1-2\epsilon^2)}{\epsilon^2} D_{ii} \right] \quad (4.4.15b)$$

$$G_i G_i = \frac{1}{\epsilon^4 C} \frac{D_{ii}}{C} \quad (4.4.15c)$$

$$G_i G_i = \frac{1}{\epsilon^4 C} \frac{D_{ii}}{C} \quad (4.4.15d)$$

$$G_i G_i = G_i G_i = - \frac{D_{ii}}{\epsilon^2 \epsilon^2 C} \quad (4.4.15e)$$

iv.- Si por último comparamos la ecuación (4.4.14) y la forma usual (4.4.9) encontramos

$$G_i = G'_i - \sum_{j=1}^2 \frac{\partial G_{ij}}{\partial x_j} \quad (i=1,2) \quad (4.4.16a)$$

$$G_{ij} = G'_{ij} \quad (i, j = 1, 2) \quad (4.4.16b)$$

La sustitución de (4.4.15) en estas expresiones nos lleva finalmente a :

$$G_{E'} = -g(E) \frac{E^2 + z}{\sqrt{E}} - 2f(E) \left[2 \frac{z-E}{E} \phi_3(E) + \frac{1}{\sqrt{E}} \phi_2(E) \right. \\ \left. + \frac{\sqrt{E}}{E} \phi_3'(E) - \frac{\sqrt{E}}{E} \phi_2'(E) \right] \quad (4.4.17a)$$

$$G_{E'} = \frac{z}{E} g(E) \frac{1}{\sqrt{E}} + \frac{f(E)}{E^2} \left[2 \frac{1+2E^2}{E} \phi_3(E) - 2 \frac{z+E^2}{E\sqrt{E}} \phi_2(E) \right. \\ \left. + \phi_1(E) - \sqrt{E} \phi_2'(E) + 2\sqrt{E} \phi_3'(E) - E \phi_1'(E) \right] \quad (4.4.17b)$$

$$G_{E'E'} = 4f(E) \frac{\phi_3(E)}{E} \quad (4.4.17c)$$

$$G_{E'E} = \frac{f(E)}{E^2} \left[\frac{\phi_3(E)}{E} - 2 \frac{\phi_2(E)}{E\sqrt{E}} + \frac{\phi_1(E)}{\sqrt{E}} \right] \quad (4.4.17d)$$

$$G_{E'E'} = G_{E'E} = \frac{2f(E)}{E^2} \left[\phi_3(E) - \frac{\phi_2(E)}{\sqrt{E}} \right] \quad (4.4.17e)$$

donde

$$g(E) = \frac{z}{m\sqrt{E}} |zE|^{-2} \quad (4.4.18a)$$

$$f(E) = \frac{C\sqrt{E}}{(m\sqrt{E})^{3/2}} |zE|^{3/2} \quad (4.4.18b)$$

Resumamos los resultados de esta sección: Mediante una serie de cambios de variables y transformaciones hemos llevado la

ET (4.4.3) con coeficientes (4.2.5) a una EFP usual (hacia adelante) dada por (4.4.9) con los coeficientes (4.4.17).

4.5 Aplicación del criterio de Khas'minskii al problema de Kepler.

Antes de pasar a aplicar el criterio de Khas'minskii al problema de Kepler quisiéramos hacer notar que los coeficientes (4.4.17) no corresponden aún a los del operador de Dynkin. En efecto, la ecuación (4.4.9) es la EFP o ecuación hacia adelante, mientras que el operador infinitesimal de Dynkin corresponde a la ecuación de Kolmogorov o hacia atrás. Para pasar de los coeficientes de una a los de la otra basta cambiar el signo del coeficiente de arrastre; por lo tanto las definiciones de esta sección tendrán un cambio de signo respecto a las de la sección anterior.

Para aplicar el criterio de Khas'minskii debemos calcular alguna de las cantidades (4.3.3) para alguna de las dos variables E' , E'' ; la elección más simple es $\underline{E}_{E'}(E')$. Mostraremos que $\underline{E}_{E'}(E') > 0$ y que entonces (4.3.4a) se satisface y que el proceso no es recurrente.

Para ello partimos de

$$D_{E'}(E, E) = - \frac{G_{E'}(E, E)}{G_{E'E'}(E, E)} \quad (4.5.1)$$

Sustituyendo (4.4.17a) y (4.4.17c) en esta expresión, se tiene

$$E_{\epsilon}(\epsilon, \epsilon) = \frac{\xi(\epsilon)}{\eta(\epsilon)} \frac{\xi(3-\eta)}{\eta^2 \phi_2(\epsilon)} + 2 + \frac{1}{2\phi_2(\epsilon)} \frac{d}{d\epsilon} [\eta^2 \phi_1(\epsilon) - \eta \phi_2(\epsilon)] \quad (4.5.2)$$

Usando (4.5.4a) para expresar la ϕ_2 de los paréntesis [] en términos de ϕ_2 y de sus derivadas, esta expresión puede ser transformada en

$$E_{\epsilon}(\epsilon, \epsilon) = 2 + \frac{\xi(\epsilon)}{\eta(\epsilon)} \frac{\xi(3-\eta)}{\eta^2 \phi_2(\epsilon)} + \frac{\xi}{\eta} \left(1 + \frac{1}{\eta}\right) \frac{\phi_2'(\epsilon)}{\phi_2(\epsilon)} + \frac{\eta}{\eta} \frac{\phi_2'(\epsilon)}{\phi_2(\epsilon)} + \frac{\xi\eta}{\eta} \frac{\phi_2''(\epsilon)}{\phi_2(\epsilon)} \quad (4.5.3)$$

Demostremos ahora que todos los términos de esta expresión son no negativos. Basta mostrar que ϕ_3 , ϕ_2 , ϕ_2' y ϕ_2'' lo son, puesto que $\xi, \eta \in [0, 1]$ y $\xi(\xi) \geq 0$; por ello enunciaremos el siguiente teorema:

Teorema 4.5.1. — Todas las funciones $\phi_r(\epsilon)$ con $r \geq 1$ (definidas por la expresión (4.2.6)) son series de potencias de ϵ con coeficientes no negativos.

Para hacer menos pesada la demostración de este teorema enunciaremos primero algunas de las propiedades de las funciones ϕ_r (ϵ) y establecemos algunos lemas.

Las funciones $\phi_r(\epsilon)$ obedecen las relaciones de recurren-

cia [Marshall 79]

$$\phi_{2r+1}(\epsilon) = \tilde{A} \phi_{2r}(\epsilon) \quad (4.5.4a)$$

$$\phi_{2r+2}(\epsilon) = (\tilde{A} + \tilde{B}) \phi_{2r+1}(\epsilon) \quad (4.5.4b)$$

donde

$$\tilde{A} f \doteq -\frac{1}{2\eta} \frac{d}{d\eta} \left(\frac{\xi^2}{\eta} f \right) = \frac{1}{2\xi} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{\xi^2}{\eta} f \right) \quad (4.5.5)$$

y

$$\tilde{B} f \doteq -\frac{1}{2\eta^2} \int_{\eta}^1 \frac{\xi'^2}{\eta^2 \xi} f d\eta' = -\frac{1}{2\eta^2} \int_0^{\xi} \frac{\xi'^2}{\eta^2 \xi} f d\xi' \quad (4.5.6)$$

Denotaremos por Λ el conjunto de funciones que admiten un desarrollo en series de potencias con coeficientes no negativos; es decir, que

$$\Lambda = \left\{ f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \text{ tales que } f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i \text{ con } a_i \geq 0 \forall i \right\} \quad (4.5.7)$$

Entonces

Lema 4.5.1. — Sea $f \in \Lambda$, entonces la derivada $f^{(n)}$ $\in \Lambda$ para toda n .

La demostración es trivial.

Lema 4.5.2. — Para todo n , $\eta^{-n} (1 - \varepsilon^2)^{-n/2} \in \Lambda$.

La demostración también es obvia.

Los dos siguientes lemas nos dicen que si $f(\varepsilon) \in \Lambda$, entonces $[\hat{\alpha}f](\varepsilon)$ y $[(\hat{\alpha}+\hat{\beta})f](\varepsilon)$ también están en Λ .

Lema 4.5.3. — Si $f(\varepsilon) \in \Lambda$, entonces $[\hat{\alpha}f](\varepsilon) \in \Lambda$.

Demostración. — Es claro que el producto de dos funciones en Λ también está en Λ ; por tanto, $(\varepsilon^2/\eta) f \in \Lambda$. Por el lema 4.5.1 $d/d\varepsilon [(\varepsilon^2/\eta) f] \in \Lambda$; pero esta serie tiene, por construcción, la particularidad de comenzar con la primera potencia de ε , así que al dividir por ε seguimos teniendo una serie genuina (con potencias de ε no negativas), que además conserva sus coeficientes no negativos tal y como queríamos demostrar.

Lema 4.5.4. — Si $f(\varepsilon) \in \Lambda$, entonces $[(\hat{\alpha}+\hat{\beta})f](\varepsilon) \in \Lambda$.

Demostración. — La demostración es un poco más complicada que la anterior. El procedimiento que seguiremos es el llamado "método de límites" que utiliza series dominantes con coeficientes no negativos y que fué usado originalmente por Cauchy para demostrar que existen soluciones de una ecuación diferencial ordinaria; la idea es obtener los coeficientes del desarrollo de Taylor de la solución de una ecuación diferencial mediante derivaciones sucesivas (ver, por ejemplo, [Ince 56]).

De las definiciones (4.5.5) y (4.5.6) se obtiene que para

cualquier función $f(\varepsilon)$ en el dominio de los operadores $\hat{\alpha}$ y $\hat{\beta}$

$$\frac{d}{d\varepsilon} [\eta^2 (\hat{\alpha}+\hat{\beta})f] = \frac{\varepsilon}{2} f'' + \frac{3}{2} \eta f' \quad (4.5.8)$$

Por otro lado, si diferenciamos directamente el lado izquierdo de (4.5.8) tenemos

$$\frac{d}{d\varepsilon} [\eta^2 (\hat{\alpha}+\hat{\beta})f] = \eta^2 \frac{d}{d\varepsilon} [(\hat{\alpha}+\hat{\beta})f] - 2\varepsilon (\hat{\alpha}+\hat{\beta})f \quad (4.5.9)$$

Sustituyendo el lado izquierdo de (4.5.9) por su expresión (4.5.8) y reordenando,

$$\frac{d}{d\varepsilon} [(\hat{\alpha}+\hat{\beta})f] = \frac{3\varepsilon}{\eta^2} (\hat{\alpha}+\hat{\beta})f + \frac{3}{2} \frac{1}{\eta} f' + \frac{3}{2\eta} f'' \quad (4.5.10)$$

Introduciendo la notación $g(\varepsilon) = [(\hat{\alpha}+\hat{\beta})f](\varepsilon)$ la ecuación (4.5.10) aparece como una ecuación diferencial para g :

$$\frac{dg}{d\varepsilon} = R(\varepsilon)g + s(\varepsilon) \quad (4.5.11)$$

donde $R(\varepsilon) = 2\varepsilon/\eta^2$ y $s(\varepsilon) = (3/2) f'/\eta + \varepsilon f''/\eta^2$.

Mostraremos ahora por inducción que $g^{(N)}(0) \geq 0$ para toda N . Para empezar tenemos

$$g^{(N)}(0) = g(0) = [(\hat{A} + \hat{b})f](\varepsilon) \Big|_{\varepsilon=0}$$

$$= \left[\left(\frac{1}{N!} + \frac{\varepsilon^2}{2N!} \right) f + \frac{\varepsilon}{2N!} f' \right]_{\varepsilon=0} - \frac{1}{2N!} \int_0^{\varepsilon^2} \frac{\varepsilon'^2}{N!} f \, d\varepsilon'$$

$$= f(0) \geq 0 \quad (4.5.12)$$

ya que por hipótesis $f \in \Lambda$. En el caso $N=1$ tenemos de (4.5.11)

$$g'(0) = R(0)g(0) + s(0)$$

Pero es claro que por la definición tanto $R(\varepsilon)$ como $s(\varepsilon)$ están en Λ (lemas 4.5.1 y 4.5.2), lo cual implica trivialmente que $R(0) \geq 0$ y $s(0) \geq 0$; por tanto, ya que $g(0) \geq 0$ (ecuación (4.5.12)) concluimos que $g'(0) \geq 0$.

Para el caso general procedemos de manera similar al caso $N=1$. Suponemos que $g^{(N-1)}(0) \geq 0$; derivando $N-1$ veces la ecuación (4.5.11) obtenemos

$$\frac{d^N g}{d\varepsilon^N} = \sum_{i=0}^{N-1} \binom{N-1}{i} \frac{d^{N-1-i} g}{d\varepsilon^{N-1-i}} \frac{d^i R(\varepsilon)}{d\varepsilon^i} + \frac{d^{N-1} s(\varepsilon)}{d\varepsilon^{N-1}} \quad (4.5.13)$$

de donde se deriva fácilmente que

$$g^{(N)}(0) = \sum_{i=0}^{N-1} \binom{N-1}{i} R^{(i)}(0) g^{(N-1-i)}(0) + s^{(N-1)}(0) \quad (4.5.14)$$

Tanto $R^{(i)}(0)$ ($i=0,1,\dots,N-1$) como $s^{(N-1)}(0)$ son no negativos (lema 4.5.1) y, por hipótesis, $g^{(N-1)}(0)$ también lo es para toda $i=0,1,\dots,N-1$; entonces concluimos que $g^{(N)}(0) \geq 0$ para toda N .

La demostración está terminada cuando nos convencemos que $g^{(N)}(0) \geq 0$ para toda N es equivalente a que $g \in \Lambda$.

Ahora tenemos todos los elementos para demostrar el teorema 4.5.1 y procedemos a hacerlo:

Demostración del teorema 4.5.1. — La demostración de este teorema se hace por inducción.

a. — Mostraremos primero que $\phi_1(\varepsilon) \in \Lambda$; para ello usamos la siguiente expresión para ϕ_1 [Marshall 79]:

$$\phi_1(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{u \operatorname{sen}^2 u \, du}{\sqrt{u^2 - \varepsilon^2 \operatorname{sen}^2 u}}$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\operatorname{sen}^2 u \, du}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 (\operatorname{sen} u)^2}} \quad (4.5.15)$$

Desarrollando el denominador $[1 - \varepsilon^2 (\operatorname{sen} u)^2]$ en serie de potencias de ε e intercambiando la suma con la integral, obtenemos

$$\phi_1(\varepsilon) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^{2i}}{\pi} \frac{(2i-1)!!}{(2i)!!} \int_0^{\pi} \operatorname{sen}^2 u \left(\frac{\operatorname{sen} u}{u} \right)^{2i} du \quad (4.5.16)$$

de donde se desprende claramente que $\phi_1 \in \Lambda$.

b.- Supongamos ahora que $\phi_{r_0}(\varepsilon) \in \Lambda$ para algún r_0 . De las relaciones de recurrencia (4.5.4) y de los lemas 4.5.3 y 4.5.4 se concluye que $\phi_r(\varepsilon) \in \Lambda$ para cualquier $r > r_0$. Pero de acuerdo al punto a de esta demostración $\phi_1 \in \Lambda$, por tanto, $\phi_r \in \Lambda$ para toda $r \geq 1$ y el teorema queda demostrado.

Regresemos ahora a la expresión (4.5.3) para $B_{2^k}(\varepsilon, \varepsilon)$. Es claro que $B_{2^k}(\varepsilon, \varepsilon) \geq 2$ ya que como hemos demostrado todos los términos en el lado derecho son no negativos; más precisamente, los términos después del 2 en el lado derecho de (4.5.3) son estrictamente positivos para $\varepsilon > 0$ y se anulan para $\varepsilon = 0$. Que los términos se anulan para $\varepsilon = 0$ es claro para el 2º, 3º y 5º ya que ε está factorizado; en lo que concierne al 4º término se tiene $\phi_{2^k}^*(0) = 0$ porque por definición (ver (4.2.6)) todas las series $\phi_{2^k}(\varepsilon)$ contienen sólo potencias pares de ε .

Tenemos entonces que

$$B_{2^k}(\varepsilon) \doteq \inf_{\varepsilon} B_{2^k}(\varepsilon, \varepsilon) = 2 \quad (4.5.17)$$

Sustituyendo este resultado en (4.3.4a) se llega a que

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{\infty} e^{-\lambda x} \left\{ - \int_{x_0}^x B_{2^k}(\varepsilon) d\varepsilon \right\} dx &= \int_{x_0}^{\infty} e^{-\lambda x} \left\{ -2 \int_{x_0}^x d\varepsilon \right\} dx \\ &= \frac{1}{\lambda} \int_0^{\infty} e^{-\lambda x} dx = \frac{1}{\lambda} \end{aligned} \quad (4.5.18)$$

Así que (4.3.4a) se satisface, por lo que el proceso de difusión cuya ecuación de FP es (4.2.3) no es recurrente.

4.6 Notas y conclusiones.

Quisiéramos hacer notar lo siguiente:

- i.- En la sección 4.3 vimos que si un proceso estocástico no es recurrente no existe ninguna medida invariante finita [Khas'minskií GO]. Por tanto, si existe una solución distinta de la trivial ($\psi_0 = \text{constante}$) también presentará el fenómeno de autoionización.
 - ii.- También señalamos que si la medida invariante no es única el proceso asociado no es recurrente [Khas'minskií GO]; de tal manera que el conocimiento de una solución estacionaria no negativa distinta de la trivial hubiera sido suficiente para establecer la no recurrencia. En el caso del problema de Kepler la existencia de soluciones estacionarias no negativas diferentes de la constante no ha sido demostrada rigurosamente; sin embargo, ya que hemos demostrado que el proceso no es recurrente su existencia parece muy probable. Una posibilidad sería demostrar la existencia de tales soluciones sujetándolas a condiciones de frontera distintas a las que satisface la solución constante, aún cuando restaría demostrar la no negatividad de dichas soluciones.
- El problema modificado de Kepler (sección 4.2) es un ejemplo

en que está la parte de la multiplicación de la solución (ver la constante y (4.2.13)) y esto basta para asegurar la no recurrencia. Otro ejemplo nos lo proporciona el sistema de Kepler en el campo de Rayleigh-Jeans ($S(\omega) = \omega^2$ constante) con la reacción de radiación de Lorentz-Dirac donde existen al menos dos soluciones, la constante y la distribución de Boltzman-Gibbs y ambas son infinitas [Claverie, Pesquera y Soto 80].

iii.- Los resultados que hemos obtenido podrían inclinarnos a creer que es necesario modificar la densidad espectral (4.1.1) sin cambiar la aparentemente bien establecida fuerza de reacción de radiación de Lorentz-Dirac; sin embargo, es ésta la responsable de este comportamiento [Claverie, Pesquera y Soto 80].

Como ya mencionamos los coeficientes de arrastre (4.2.5) en la forma de corriente dependen únicamente de la fuerza de reacción de radiación y la existencia de la solución constante depende a su vez de ellos (ver ecuación (4.2.13)), así que en todos los problemas en que intervenga esta reacción de radiación se tienen dos posibilidades:

- La solución es única y por tanto es necesariamente la constante que es infinita.
 - La solución no es única; entonces el proceso no es recurrente y sólo pueden existir medidas invariantes infinitas.
- Podríamos pensar que el caso b es el más probable, pero de to-

do algunas otras soluciones son insatisfactorias.

Es notable e inesperado que para el potencial de Coulomb con el término de reacción de radiación de Lorentz-Dirac y una fuerza estocástica cuyo espectro sea independiente de la posición y de la velocidad (o más en general, para toda fuerza estocástica con divergencia nula) no existe ninguna densidad espectral que permita un estado estacionario "razonable" (medida finita).

De los resultados de este capítulo podemos concluir que en su estado actual la EDE predice, a temperatura cero, un átomo de hidrógeno ionizado; este resultado puede parecer catastrófico, pero no lo es tanto cuando se toma en cuenta que la mecánica cuántica estadística predice un resultado similar para temperaturas mayores que cero. En efecto, la matriz de densidad cuántica está dada como

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{Tr } e^{-\beta \hat{H}}} \quad (4.6.1)$$

y el valor medio de un operador \hat{A} como

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) \quad (4.6.2)$$

así que para la energía tenemos

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\sum E_n e^{-\beta E_n}}{\sum e^{-\beta E_n}} \quad (4.6.3)$$

donde la suma se efectúa sobre todos los estados. Tomando en cuenta la degeneración se tiene

$$H = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n^2 E_n e^{-\beta E_n}}{\sum_{n=1}^{\infty} n^2 e^{-\beta E_n}} \quad (4.6.4)$$

La energía está dada como $E_n = -\alpha/n^2$ ($\alpha = me^4/2h^2$), así que la función de partición canónica

$$Z = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \exp(\beta\alpha/n^2) \quad (4.6.5)$$

diverge, y resulta que

$$\langle \hat{n} \rangle = 0 \quad (4.6.6)$$

es decir, el átomo de hidrógeno está ionizado a toda temperatura mayor que cero.

Referencias.

- Abramowitz M. y Stegun I.A. (editores); 1965; Handbook of Mathematical Functions (Dover, N.Y., 1965, 1972).
- Adirovich E.I. y Fedgoretskii M.I.; 1954; JETP 26, 150.
- Arnold L.; 1974; Stochastic Differential Equations (John Wiley and sons Inc.)
- Cartan H.; 1963; Théorie élémentaire des fonctions analytiques d'une ou plusieurs variables complexes (Hermann, Paris).
- Courant R. y Hilbert D.; 1937; Methods of Mathematical Physics (Interscience, N.Y.).
- Dallentine L.E.; 1970; Rev. Mod. Phys. 42, 358.
- Dartlett W.S. y Moyal J.E.; 1949; Proc. Camb. Phil. Soc. 45, 545.
- Deliafante P.J.; 1972; A Survey of Hidden-Variable Theories (Pergamon, Oxford).
- Bell J.S.; 1964; Physics 1, 195.
- Beno R.P.; 1954; Entire Functions (Academic Press, N.Y.)
- Boyer T.H.; 1968; Phys. Rev. 171, 1631.
; 1969; Phys. Rev. 182, 1374.
; 1975; Phys. Rev. D11, 790.
- Bruffort P., Spiguel M. y Tsuru G.; 1954; C.R. Acad. Sci. Paris 2813, 4329.

- Bruffort P. y Tsuru G.; 1954; C.R. Acad. Sci. Paris 282, 1779
- Brody T.A.; 1980; IFUNAM 30-06.
; 1982; comunicación personal.
- Brillouin L.; 1930; Les Statistiques Quantiques et leurs Applications II (Les Presses Universitaires de France).
- Brush S.G.; 1961; Rev. Mod. Phys. 33, 79.
- Bunge M.; 1956; Am. J. Phys. 24, 272.
- Campos I.; 1975; Algunos problemas filosóficos de la mecánica cuántica. Tesis profesional, Facultad de Ciencias, UNAM.
- Claverie P.; 1980; CIMM courses and lectures 261 (Springer-Verlag, Wien)
- Claverie P., de la Peña L. y Diner G.; 1977; "Stochastic electrodynamics of non-linear systems II. Derivation of a reduced Fokker-Planck equation in terms of relevant constants of motion" (no publicado).
- Claverie P. y Diner G.; 1973; C.R. Acad. Sci. Paris 2773, 579
; 1977; Int. J. of Quantum Chem. 12,
supp 1, 41.
- Claverie P. y Fesquera L.; 1982; Z. Phys. B, a publicarse.
- Claverie P., Pasquera L. y Soto P.; 1980; Phys Letters 80A,
113.
- Cohen L.; 1966a; J. Math. Phys. 7, 781.

- Cohen L. ; 1960b ; Environ. Sci. 11 , 317.
 ; 1960c ; Ph. D. thesis , Universidad de Yale.
- Comisar S.G. ; 1965 ; Phys. Rev. 133B , 1332.
- de Groot S. ; 1974 ; La transformation de Weyl et la fonction de Wiener : une forme alternative de la mécanique quantique (Les Presses de l'Université de Montreal).
- de la Peña L. ; 1967 ; Phys. Letters 24A , 603.
 ; 1968 ; J. Math. Phys. 10 , 1620.
 ; 1973 ; comunicación personal .
 ; 1976 ; Introducción a la Mecánica Cuántica (CECSA , México).
- de la Peña L. y Brody T.A. ; 1979 ; Nuovo Cim. 85A , 455 .
- de la Peña L. y Cetto A.M. ; 1975 ; Found. Phys. 5 , 355.
 ; 1976 ; Rev. Mex. de Fis. 25 , 1.
 ; 1977 ; J. Math. Phys. 18 , 1612.
 ; 1978a ; Ann. Fond. L. de Broglie 3 15.
 ; 1978b ; Found. Phys. 8 , 191.
- Dynkin E.B. ; 1961 ; Theory of Markov Processes (Prentice Hall , Englewood Cliffs N.J.).
 ; 1965 ; Markov Processes I (Springer-Verlag , Berlin)

- Dyson F. ; 1940 ; La Recherche 107 , 92.
- Economou E.N. ; 1979 ; Green's Functions in Quantum Physics (Springer-Verlag , Berlin).
- Fuella L.P. ; 1967 ; Ann. Inst. H. Poincaré VII , 77.
- Fényes I. ; 1952 ; Z. f. Physik 122 , 81.
- Feynman R.P. ; 1948 ; Revs. Mod. Phys. 20 , 367.
- Feynman R.P. y Hibbs A.R. ; 1965 ; Quantum Mechanics and Path Integrals (Mc Graw-Hill , N.Y.).
- Friedman A. ; 1975 ; Stochastic Differential Equations and Applications (Academic Press N.Y.).
- Fuks B.A. ; 1963 ; Introduction to the Theory of Analytic Functions of Several Complex Variables (American Math. Society , Providence R.I.).
- Fürth R. ; 1933 ; Z. f. Physik 81 , 143.
- Gel'fund I.M. y Yaglom A.M. ; 1961 ; J. Math. Phys. 2 , 48.
- Ghirardi G.G. , Omero G. , Rimini A. y Weber T. ; 1978 ; Riv. N. Cim. 1 , 1.
- Gilson J.C. ; 1968 ; Proc. Camb. Phil. Soc. 64 , 1061.
- Glauber R.J. ; 1963 ; Phys. Rev. 131 , 2766.
- Glimm J. y Jaffe A. ; 1981 ; Quantum Physics. A Functional Integral Point of View (Springer-Verlag , N.Y.).
- Grabert H. , Hänggi P. y Talkner P. ; 1979 ; Phys. Rev. A19 , 2440.

- Guichardet A. ; 1972 ; Symmetric Hilbert Spaces and related topics , Lectures Notes in Mathematics n 261 , Springer-Verlag.
- Hibbs A.R. ; 1960 ; en Mac 60 .
- Hudson R.L. ; 1974 ; Rep. Math. Phys. 6 , 249.
- Ince E.L. ; 1966 ; Continuous Differential Equations (Dover , N.Y.)
- Janner M. ; 1966 ; The Conceptual Development of Quantum Mechanics (Mc Graw-Hill N.Y.).
- ; 1974 ; The Philosophy of Quantum Mechanics (Wiley , N.Y.)
- Jona-Lasinio G. , Martinelli F. y Scoppola E. ; 1981 ; Phys . Rep. 77 , 331.
- Kac M. ; 1949 ; Trans. Am. Math. Soc. 65 , 1 .
- ; 1960 ; Probability and related topics in Physical Science , Capitulo IV (Interscience N.Y.)
- Kalitsin N.S. ; 1953 ; JETP 25 , 407.
- Kato T. ; 1966 ; Perturbation Theory for Linear Operators (Springer-Verlag , N.Y.)
- Kershaw D. ; 1964 ; Phys. Rev. 136 , 1850.
- Khan'minukii R.Z. ; 1960 ; Theor. Prob. Appl. 5 , 179.
- Kracklauer A.Z. ; 1974 ; Phys. Rev. D 10 , 1358.
- Krüger J. y Peiffyn A. ; 1976 ; Physica 85A , 84.
- Lamperti J. ; 1977 ; Stochastic Processes (Springer-Verlag N.Y.)

- Lux H. ; 1966 ; Rev. Mod. Phys. 38 , 541.
- Marshall T.W. ; 1963 ; Proc. Roy. Soc. A276 , 475.
- ; 1965a ; Proc. Camb. Phil. Soc. 61 , 537.
- ; 1965b ; Nuove Cim. 38 , 206.
- ; 1979 ; N.A.M.P. 30 , 1011.
- y Claverie P. ; 1980 ; J.Math. Phys. 21 , 1819.
- McKean H.P.Jr ; 1969 ; Stochastic Integrals (Academic Press)
- Meyer P.A. ; 1966 ; Probabilité et Potentiel (Hermann , Paris)
- Mori H. , Oppenheim I. y Ross J. ; 1962 ; en Studies in Statistical Mechanics I ; editores J. de Boer y G.E. Uhlenbeck (North-Holland , Amsterdam)
- Moyal J.E. ; 1949a ; Proc. Camb. Phil. Soc. 45 , 99.
- ; 1949b ; J. Royal Stat. Soc. B11 , 150.
- Nelson E. ; 1966a ; J. Math. Phys. 7 , 332.
- ; 1966b ; Dynamical Theories of Brownian motion.
- Otero A. ; 1982 ; Tesis de licenciatura , Facultad de Ciencias , UNAM.
- Pawula R.P. ; 1965 ; Ph. D. Tesis , California Institute of Technology.
- ; 1967a ; I.E.E.E. Trans. Inform. Theory 13 , 33.
- ; 1967b ; Phys. Rev. 162 , 186.
- Peres A. ; 1978 ; Am. J. Phys. 46 , 745.
- Pesquera L. ; 1980a ; Tesis doctoral , Santander , España.

- Fozguera L. ; 1950b ; Thesis Doctoral , Paris VI , France.
- Figuat G. ; 1974 ; I.R. Acad. Sci. Paris 272A , 107.
- Pool J.C.T. ; 1966 ; J. Math. Phys. 7 , 66.
- Prohorov Y.V. y Rozanov Y.A. ; 1969 ; Probability Theory (Springer , Berlin)
- Riesen H. y Vollmer H.D. ; 1979 ; Z. Physik B 35 , 313.
- Santos E. ; 1974 ; N. Cim. 123 , 57 .
; 1975 ; An. Fis. (España) 71 , 329 .
- Schrödinger E. ; 1931 ; Berliner Sitzungsberichte 1931 , 144.
- Shewell J.R. ; 1959 ; Am. J. Phys. 27 , 16.
- Simon B. ; 1979 ; Functional Interaction and Quantum Physics (Academic Press , N.Y.)
- Sokolov A.A. y Tumanov V.S. ; 1956 ; JETP 3 , 958.
- Soto P. y Claverie P. ; 1981 ; Physica 102A , 193.
; 1982a ; J. Math. Phys. (a publicarse)
; 1982b ; J. Math. Phys. (a publicarse)
- Strook D.W. y Varadhan ; 1979 ; Multidimensional Diffusion Processes (Springer-Verlag , Berlin)
- Surdin M. , Braffort P. y Taroni A. ; 1965 ; Nature 210 , 405.
- Van Hove L. ; 1951 ; Memoires de la Classe de Sciences XXVI , fascicule 6.
- Van Kampen N.G. ; 1976 ; Phys. Rep. 3 , 171.
- Weyl H. ; 1928 ; Group Theory (Mac Millan , N.Y.)

- Wiener N. ; 1923 ; J. Math. and Phys. 2 , 131.
; 1924 ; Proc. London Math. Soc. Ser. 2 , 22 , 454.
; 1930 ; Acta Mathematica 55 , 117 (especialmente 214-234)
- Wigner E.P. ; 1932 ; Phys. Rev. 40 , 749.
; 1970 ; Amer. J. Phys. 38 , 1005.