

Curso 2003/04
CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS/13
I.S.B.N.: 84-7756-608-9

EVA MARTÍN FIERRO

Los estados coherentes
en la descripción semiclásica
de la mecánica cuántica

Director
JOSÉ MARÍA GÓMEZ LLORENTE



SOPORTES AUDIOVISUALES E INFORMÁTICOS
Serie Tesis Doctorales

Agradecimientos

Quiero agradecer a mi director de tesis, D. José María Gómez Llorente, su buena disposición para tratar de transmitirme sus profundos conocimientos en diversos campos de la física. Agradezco asimismo la disponibilidad que ha mostrado en todo momento para atender mis frecuentes consultas en estos años.

A Daniel Alonso agradezco el interés que ha mostrado en mi formación. Su curiosidad innata, entusiasmo por aprender, y el rigor y honestidad en su forma de hacer ciencia son un ejemplo para mí.

Algunas de las figuras que aparecen en esta memoria se deben a la ayuda desinteresada de Antonia Ruiz. Su capacidad de trabajo ha sido un referente en estos años. Agradezco su talante colaborador y su sincera amistad.

A D. Florentino Borondo agradezco su cordial acogida durante mi estancia en la Universidad Autónoma de Madrid.

Agradezco a D. José Bretón su amable interés por que este trabajo avanzara convenientemente, a D. Gonzalo Muga y D. Jesús Plata el interés que han mostrado en mi trabajo, y a D. Vicente Delgado el apoyo recibido cuando decidí iniciar los estudios de postgrado.

Quiero expresar mi gratitud a los miembros del Departamento de Física Fundamental II por la grata acogida que me han brindado y el buen ambiente de trabajo en el que he trabajado estos años. Siempre es agradable sentirse cómoda en un lugar en el que pasas tantas horas. Quiero dar las gracias al grupo del “café de las cuatro”: Dani, Rafa, Toñi, Inés, Santi, Javi, José Pascual y Jose, por haber contribuido a crear esa atmósfera distendida en la que afrontar el trabajo resulta más sencillo.

Muestro mi agradecimiento a Inés de Vega por saber hacer de la discusión un placer y por entender el compañerismo más allá de una forma de compartir visiones similares de la ciencia.

Al resto de compañeros, Ángel, María José, Javier y también a Enrique, a quien he acudido en tantas ocasiones en busca de consejos sobre linux, agradezco el buen ambiente de trabajo creado en “la becaría”.

A Rafa, por arreglárselas para haber estado ahí siempre que he necesitado ánimo en momentos difíciles.

A José Pascual por sus entusiastas dosis de moral en estas últimas semanas.

A Carol, Víctor, Kike, Montse, Ana, Xavier, Rosi, David, Antonio, Gloria, Natalia, Laura, Agustín y Santiago por estos años compartiendo algo más que buenos momentos.

Debo un reconocimiento especial a mi familia, especialmente a mi madre por su apoyo moral y logístico en los últimos meses.

A Horacio, una isla de estabilidad en mi mar caótico. Por estar cerca estando lejos, y por más cosas de las que puedo escribir aquí.

Esta tesis ha sido financiada por la Consejería de Educación, Cultura y Deportes del Gobierno de Canarias, mediante una beca del proyecto de investigación PI 2/95 y una Beca de Tesis Doctoral, así como el proyecto BFM 2001-3343.

E. M. F.
Mayo de 2004

Índice general

Introducción	1
1. Formalismo de estados coherentes	1
1.1. Estados coherentes	1
1.2. Estados <i>squeezed</i>	6
1.3. Estructura algebraica de los estados coherentes	15
1.3.1. Representación matricial	15
1.3.2. Propiedades geométricas. Desarrollos en el espacio de Hilbert	21
1.3.3. Distribuciones en el espacio de fases	25
1.3.4. \mathcal{D} -álgebra	37
2. La función de onda en la representación de Bargmann	41
2.1. La función de onda estacionaria	42
2.2. Formalismo dependiente del tiempo	56
2.2.1. La función de onda dependiente del tiempo	56
2.2.2. Elementos de matriz del operador de evolución	65
2.2.3. Aproximación semiclásica al operador de evolución	69
3. Aproximaciones uniformes	79
3.1. Aproximación uniforme a la función de onda independiente del tiempo	79
3.1.1. Los casos límite $\lambda \rightarrow 0$ y $\lambda \rightarrow \infty$: Transformaciones no unitarias	90
3.2. Aproximación uniforme a las autofunciones. Condiciones de cuantización	113
4. Aproximación semiclásica a la densidad de estados	123
5. Aproximaciones variacionales	151
5.1. Método variacional estacionario	152
5.1.1. Límite semiclásico	159

5.1.2. Transformaciones de contacto	162
5.1.3. Un ejemplo: el oscilador cuártico	168
5.2. Método variacional dependiente del tiempo	189
5.2.1. El propagador semiclásico	198
5.2.2. Método variacional de Demkov	211
5.2.3. Un ejemplo: el medio Kerr	215
Conclusiones y perspectivas	231
APÉNDICES	235
A. Función normal asociada a un operador simétrico	235
B. La aproximación de fase estacionaria	245
C. La aproximación WKB a la función de onda	251
Bibliografía	258

Introducción

El principio de correspondencia de Bohr establece que la teoría cuántica debe reproducir los resultados de la física clásica en el límite de grandes números cuánticos. Así, considerando a la Mecánica Cuántica como una teoría más general que la Mecánica Clásica, esta última debe emerger de la primera en el límite semiclásico $\hbar \rightarrow 0$.

Los intentos de establecer una conexión entre las teorías cuántica y clásica han contribuido al desarrollo de métodos semiclásicos que, por una parte, pretenden proporcionar aproximaciones a magnitudes cuánticas en términos de ingredientes clásicos y, por otra, constituyen una manera de conseguir entender los procesos cuánticos en sí mismos, proporcionando una descripción más intuitiva de los mismos.

Los métodos WKB, basados en desarrollos asintóticos de magnitudes cuánticas en potencias de \hbar , proporcionan una aproximación semiclásica de las autofunciones cuánticas para sistemas monodimensionales. A pesar de disfrutar de la ventaja de ser muy simples, estas aproximaciones sufren un problema de divergencia en las cústicas, por lo que deben ser acompañadas de procedimientos extra de ajuste en los puntos de retroceso (las llamadas “fórmulas de conexión”).

El primer intento de proporcionar una aproximación semiclásica al propagador cuántico se debe a Van Vleck [Van28], que expresa esta magnitud cuántica en términos de la acción de trayectorias clásicas.

La conexión entre las mecánicas cuántica y clásica se presenta de forma natural en la formulación de la mecánica cuántica por integrales de camino de Feynman [Fey48]. En este caso, el propagador cuántico se expresa en términos de una integral que involucra una lagrangiana clásica y considera todos los caminos posibles que conectan los puntos inicial y final. Este formalismo resulta bastante adecuado para conseguir aproximaciones semiclásicas de las amplitudes de transición cuánticas, en las que la integral de camino se evalúa por el método de fase estacionaria.

Otra forma de abordar el problema de la correspondencia cuántico-clásica consiste en tratar de definir la mecánica cuántica en un espacio de fases mediante el uso de funciones de distribución [Hil84, Bal84, Lee95]. La principal ventaja de este método radica en el tratamiento de ecuaciones que involucran funciones escalares, y no operadores. Sin embargo, la no conmutatividad de los operadores cuánticos impide definir de forma única la función de distribución en el espacio de fases, de manera que es posible asociar distintas representaciones o *símbolos* a un operador dependiendo del esquema de ordenación de

operadores utilizado.

Existe una representación especialmente indicada para establecer comparaciones entre las teorías cuántica y clásica, que es la representación de estados coherentes. Estos estados fueron inicialmente introducidos [Sch26] como los estados cuánticos “más clásicos posibles” del oscilador armónico, esto es, estados con la mínima incertidumbre permitida por el principio de indeterminación de Heisenberg, que al evolucionar a lo largo de la trayectoria clásica no se deforman con el paso del tiempo, manteniendo su coherencia (de ahí su nombre). Sin embargo, estos estados pueden generalizarse y definirse matemáticamente para cualquier sistema cuántico a partir de las propiedades de su grupo dinámico asociado. Una de las principales ventajas que proporciona esta formulación radica en que el espacio de los parámetros que caracterizan un estado coherente posee dos estructuras geométricas: una estructura compleja y una estructura simpléctica, que los relacionan respectivamente con las dinámicas cuántica y clásica. Esta variedad actúa como espacio de fases para el sistema cuántico, permitiendo establecer una conexión entre la dinámica cuántica y la dinámica (en general compleja) en esta variedad.

Es posible formular una aproximación de tipo WKB para la función de onda en la representación de estados de Bargmann (definidos como estados coherentes no normalizados). En este formalismo desaparecen los problemas de divergencias en las cústicas que presenta la formulación WKB en la representación de coordenadas, y las funciones obtenidas son uniformes.

Un formalismo dependiente del tiempo posibilita la obtención de una aproximación semiclásica al propagador cuántico. Puesto que los estados coherentes forman una base que es sobrecompleta, la resolución de la identidad no es única, existiendo por tanto una gran variedad de propagadores semiclásicos basados en estados coherentes. La mayoría de estas aproximaciones están basadas en extensiones al espacio de fases del formalismo de integrales de camino. Pueden obtenerse no obstante aproximaciones válidas al propagador desde una formulación WKB dependiente del tiempo.

Tanto en el formalismo WKB como en el de integrales de camino, las expresiones obtenidas involucran el cálculo de trayectorias complejas que cumplen ciertas condiciones de contorno para los instantes final y el inicial. Los problemas técnicos para encontrar tales trayectorias han motivado los intentos por transformar este problema en un problema de valores iniciales (las conocidas IVR, *Initial Value Representation*).

Un procedimiento alternativo para estudiar las conexiones entre la mecánica cuántica y la clásica consiste en la evolución semiclásica de paquetes de onda gaussianos [Hel91, Lit86b]. Estas técnicas constituyen en realidad una versión de la teoría WKB en el espacio de fases y han resultado ser extremadamente útiles en la evaluación aproximada de autovalores cuánticos a través de la conexión entre dinámica (funciones de correlación) y espectro.

La validez general del principio de correspondencia entra en dificultades cuando la dinámica clásica muestra comportamiento caótico. Si la teoría cuántica, más fundamental que la mecánica clásica, debe

reproducir los resultados clásicos en el límite $\hbar \rightarrow 0$, es necesario explicar cómo surge el caos clásico en el límite semiclásico a partir de la ausencia de caos en la dinámica cuántica o, en sentido inverso, explicar cómo se produce la supresión cuántica de caos. En este contexto, ha habido un mayor número de estudios encaminados a cuantizar semiclásicamente sistemas clásicamente caóticos que en el sentido inverso: tratar de derivar una dinámica clásica caótica a partir de la dinámica cuántica. El estudio del Caos Cuántico debe forzosamente apelar a las técnicas semiclásicas para tratar de hacer uso de la información de la dinámica clásica caótica y relacionarla con los objetos cuánticos en estudio. Así, las fórmulas de traza de Gutzwiller [Gut67, Gut69, Gut70, Gut71] tratan de extraer información acerca del espectro cuántico a partir de una enumeración completa de las órbitas periódicas del sistema clásico.

En este trabajo se ha desarrollado un formalismo que pone de manifiesto la idoneidad de los estados de Bargmann para obtener una aproximación de determinados objetos cuánticos (función de onda, propagador, espectro) debido a la estructura compleja intrínseca que posee esta representación. Los cálculos se han llevado a cabo en sistemas monodimensionales, en los que resulta más sencillo comprobar los resultados comparándolos con los ya existentes en la literatura. En algunos casos la generalización de resultados a sistemas N -dimensionales es directa, mientras que en otros no lo es tanto, no sólo por la complicación del cálculo en sí, sino porque debe aludirse al tipo de dinámica clásica subyacente: integrable o hiperbólica. Con el desarrollo del formalismo en una dimensión, queda abierto el problema para su generalización a sistemas multidimensionales.

En el Capítulo 1 se presenta un resumen del formalismo de estados coherentes y de estados *squeezed*. Se muestra la estructura algebraica asociada a los mismos, así como la representación matricial de dicho álgebra. Se presentan brevemente algunas funciones de distribución definidas en el espacio de fases asociado a los estados coherentes (la representación \mathcal{R} , la Q , la \mathcal{P} , la de Wigner y la de Husimi, así como algunas representaciones generalizadas). Finalmente, se describe el llamado \mathcal{D} -álgebra, o álgebra diferencial asociado a los operadores a y a^\dagger en la representación de estados coherentes. Es necesario indicar que puede accederse al contenido de este capítulo en la literatura, y ha sido incluido en esta memoria para hacerla autocontenida.

En el Capítulo 2 se desarrolla una aproximación para la función de onda mediante una generalización del método WKB a la representación de Bargmann, tanto en un formalismo estacionario como dependiente del tiempo. En el formalismo estacionario se obtiene una expresión para la función de onda que es uniforme, y las condiciones de cuantización para la energía son consecuencia de imponer una condición de analiticidad a la función compleja obtenida. Un procedimiento análogo para la función de onda dependiente del tiempo conducirá a una aproximación semiclásica para el propagador cuántico en términos de la acción de trayectorias complejas, así como de su estabilidad. El uso de resoluciones de la identidad generalizadas en la representación de Bargmann permitirá obtener una expresión integral para el operador de evolución en forma de representación de valores iniciales (IVR).

En el Capítulo 3 se deriva una aproximación uniforme a la función de onda en la representación de coordenadas mediante el uso de transformaciones unitarias, así como no unitarias para ciertos casos límite. La expresión obtenida permite obtener la función de onda a partir de la integración de una trayectoria clásica a un periodo del movimiento, para el caso de sistemas ligados. Un procedimiento similar permitirá obtener las autofunciones de un hamiltoniano cuántico, así como las condiciones de cuantización, a partir de información puramente clásica.

En el Capítulo 4, haciendo uso de la expresión semiclásica para el propagador obtenida en el Capítulo 2, se obtiene una aproximación semiclásica para la densidad de estados de un sistema cuántico, reproduciendo la fórmula de Gutzwiller para la traza del operador de Green en una dimensión. La aplicación práctica a un sistema de doble pozo permite poner de manifiesto la idoneidad de los estados de Bargmann para describir fenómenos cuánticos como el *tunneling* gracias a la inherente estructura compleja de los mismos.

El Capítulo 5 muestra un esquema de aproximación diferente para aproximar el propagador cuántico. A partir de un *ansatz* de estado coherente generalizado para la función de onda se obtienen, mediante un procedimiento variacional, las ecuaciones de evolución para los parámetros que caracterizan el paquete coherente. Se analiza en detalle el orden en \hbar de las correcciones a esta aproximación, y se demuestra que, en el límite semiclásico, el método variacional permite reproducir la expresión semiclásica del propagador obtenida mediante un formalismo WKB en el Capítulo 2.

Finalmente se presenta una sección de Conclusiones y Perspectivas, en la que, además de discutir los principales resultados de este trabajo, se describe cualitativamente la posible generalización de estos métodos para el caso de sistemas N -dimensionales.

Se incluyen también tres Apéndices en los que se describen, respectivamente, la obtención de la función normal asociada a un operador simétrico, la aproximación de fase estacionaria para el caso de integrales complejas y el método WKB.

Capítulo 1

Formalismo de estados coherentes

1.1. Estados coherentes

Los estados coherentes del oscilador armónico, $|\alpha\rangle$, o estados de Glauber [Gla63a, Gla63b, Gla63c], se definen como los autoestados del operador de aniquilación del oscilador armónico, esto es:

$$a|\alpha\rangle = \tilde{\alpha}|\alpha\rangle, \quad (1.1)$$

donde el autovalor $\tilde{\alpha}$ es un número complejo. Esta variable incluye una dependencia con \hbar que conviene hacer explícita, de forma que escribiremos la ec. (1.1) como

$$a|\alpha\rangle = \hbar^{-1/2}\alpha|\alpha\rangle. \quad (1.2)$$

Estos estados pueden escribirse en términos de los estados de Fock o estados número, $|n\rangle$, como:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2\hbar} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{\hbar^n n!}} |n\rangle \quad (1.3a)$$

$$\langle\alpha| = e^{-|\alpha|^2/2\hbar} \sum_n \frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{\hbar^n n!}} \langle n|, \quad (1.3b)$$

donde se ha tenido en cuenta la actuación de los operadores de creación a^\dagger y aniquilación a , dada por

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$
$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

Las ecs. (1.3) muestran que la distribución de probabilidad de fotones en un estado coherente viene dada por una distribución de Poisson

$$P(n) = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{\hbar^n n!} e^{-|\alpha|^2} \equiv \frac{\langle n\rangle^n}{n!} e^{-\langle n\rangle}, \quad (1.4)$$

donde $|\alpha|^2 = \alpha\alpha^*$ es el número medio de fotones:

$$\langle n\rangle \equiv \langle \hat{n}\rangle \equiv \langle\alpha|a^\dagger a|\alpha\rangle = \frac{|\alpha|^2}{\hbar}, \quad (1.5)$$

siendo $\hat{n} = a^\dagger a$ el operador número, que actúa como

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle.$$

Las ecs. (1.3) demuestran asimismo que el estado coherente correspondiente a $\alpha = 0$ es el estado fundamental del oscilador, $|0\rangle$, definido por $a |0\rangle = 0$.

Los estados coherentes pueden construirse mediante la aplicación al estado de vacío de un operador unitario llamado *operador desplazamiento*, denotado por $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$. [NOTA: A lo largo de todo este trabajo los operadores serán denotados por un acento circunflejo, con la única excepción de los operadores de creación y destrucción, a^\dagger y a]. Así, teniendo en cuenta que un estado de Fock puede obtenerse mediante la aplicación sucesiva del operador de creación a^\dagger al estado fundamental $|0\rangle$,

$$|n\rangle = \frac{a^{\dagger n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad (1.6)$$

la ec. (1.3a) puede escribirse como

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2\hbar} e^{\hbar^{-1/2}\alpha a^\dagger} |0\rangle. \quad (1.7)$$

Ahora bien, teniendo en cuenta que $e^{-\hbar^{-1/2}\alpha^* a} |0\rangle = |0\rangle$ (ya que el operador de destrucción a aniquila el vacío y por tanto todas las potencias de a contenidas en la exponencial $e^{-\hbar^{-1/2}\alpha^* a}$ dan cero al aplicarlas al estado $|0\rangle$, excepto el término de orden más bajo, que es la unidad), añadir este término a la expresión (1.7) no cambia el resultado, de forma que ésta puede reescribirse como

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2\hbar} e^{\hbar^{-1/2}\alpha a^\dagger} e^{-\hbar^{-1/2}\alpha^* a} |0\rangle. \quad (1.8)$$

Este producto de operadores exponenciales puede reordenarse haciendo uso de las relaciones de Baker-Campbell-Hausdorff (BCH):

$$e^{\tilde{\alpha} a^\dagger - \tilde{\alpha}^* a} = e^{-|\tilde{\alpha}|^2/2} e^{\tilde{\alpha} a^\dagger} e^{-\tilde{\alpha}^* a} = e^{|\tilde{\alpha}|^2/2} e^{-\tilde{\alpha}^* a} e^{\tilde{\alpha} a^\dagger}. \quad (1.9)$$

Esta fórmula,¹ generalmente llamada fórmula de “desenredo” (del inglés *disentangling*), resulta extremadamente útil a la hora de calcular valores esperados de productos de operadores exponenciales,

¹En [Mes83] y [Lou90] puede verse la demostración de Glauber de este teorema. Este resultado se obtiene de la aplicación directa de un caso particular del teorema de Baker-Hausdorff de teoría de grupos [Nor80], según el cual si A y B son dos operadores que no conmutan entre sí y que satisfacen las condiciones

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0,$$

entonces se cumple la identidad

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

como se verá en los próximos capítulos. La fórmula BCH permite escribir el estado coherente (1.8) como

$$|\alpha\rangle = e^{\hbar^{-1/2}(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)}|0\rangle \equiv \hat{D}(\alpha, \alpha^*)|0\rangle, \quad (1.10)$$

donde

$$\hat{D}(\alpha, \alpha^*) \equiv e^{\hbar^{-1/2}(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)} \quad (1.11)$$

es el mencionado operador desplazamiento. Puesto que este operador es unitario

$$\hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) = \hat{D}(-\alpha, -\alpha^*) = \hat{D}^{-1}(\alpha, \alpha^*),$$

el estado coherente (1.10) está normalizado correctamente:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle 0|\hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*)\hat{D}(\alpha, \alpha^*)|0\rangle = \langle 0|0\rangle = 1.$$

La expresión (1.10) permite interpretar el estado coherente como una forma desplazada del estado fundamental del oscilador armónico, como puede verse a partir de la actuación del operador $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$ sobre los operadores a y a^\dagger :²

$$\hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) a \hat{D}(\alpha, \alpha^*) = a + \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \quad (1.13a)$$

$$\hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) a^\dagger \hat{D}(\alpha, \alpha^*) = a^\dagger + \frac{\alpha^*}{\sqrt{\hbar}}. \quad (1.13b)$$

Los estados coherentes *no son estados ortogonales*. El producto escalar de dos estados coherentes puede obtenerse fácilmente a partir de las expresiones (1.3) como

$$\langle\alpha|\beta\rangle = e^{-|\alpha|^2/2\hbar - |\beta|^2/2\hbar} \sum_{n,m} \frac{(\alpha^*)^n \beta^m}{\sqrt{\hbar^{n+m}} n! m!} \langle n|m\rangle,$$

que, debido a la ortonormalidad de los estados $|n\rangle$, se reduce a

$$\langle\alpha|\beta\rangle = e^{-\frac{1}{2\hbar}(|\alpha|^2 + |\beta|^2) + \frac{1}{\hbar}\alpha^*\beta}. \quad (1.14)$$

(Este resultado puede obtenerse asimismo escribiendo $\langle\alpha|\beta\rangle = \langle 0|\hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*)\hat{D}(\beta, \beta^*)|0\rangle$ y haciendo uso de las relaciones BCH, lo que confirma la equivalencia de las definiciones de estado coherente como autoestado del operador de aniquilación [ec. (1.2)] y como desplazamiento del estado de vacío [ec. (1.10)]). El módulo al cuadrado de este producto escalar viene dado por

$$|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 = e^{-\frac{1}{\hbar}|\alpha - \beta|^2}. \quad (1.15)$$

²Estas propiedades pueden demostrarse haciendo uso de las relaciones BCH y del teorema que establece que si A y B son dos operadores que no conmutan y ξ es un parámetro, entonces

$$e^{\xi A} B e^{-\xi A} = B + \xi[A, B] + \frac{\xi^2}{2!}[A, [A, B]] + \frac{\xi^3}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \dots, \quad (1.12)$$

para $A = a^\dagger$, $B = a$ y $\xi = \alpha$. [Lou90, Scu97]

Este resultado muestra que dos estados coherentes $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$ tienden a ser aproximadamente ortogonales para valores de α y β que sean suficientemente diferentes, esto es, en el límite $|\alpha - \beta| \gg 1$. El hecho de que los estados coherentes no formen un conjunto ortogonal parece haber sido el motivo por el que durante bastante tiempo (desde que fueron propuestos por Schrödinger [Sch26] en 1926 como los estados clásicos del oscilador armónico hasta que Glauber y Sudarshan [Gla63a, Gla63b, Gla63c, Sud63] los retomaron para su aplicación a la óptica cuántica en 1963) no fueron usados como vectores de base para el desarrollo de estados arbitrarios. Sin embargo, la ortogonalidad, a pesar de ser una propiedad conveniente para un conjunto de estados de base, no es necesaria. De hecho, los estados coherentes forman un continuo bidimensional de estados que son sobrecompletos, cumpliendo la relación de cierre [Gla63a]

$$\int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \langle\alpha| = \mathbf{1}. \quad (1.16)$$

Esta integral está extendida a todo el plano complejo α , y el elemento de volumen (real) viene dado por

$$d^2\alpha \equiv d(\operatorname{Re} \alpha) d(\operatorname{Im} \alpha). \quad (1.17)$$

(Este resultado puede comprobarse escribiendo el estado $|\alpha\rangle$ en la representación de los estados de Fock y llevando a cabo la integral en el plano complejo en coordenadas polares). La no ortogonalidad de los estados coherentes hace que la resolución de la identidad en términos de ellos no sea única. La expresión (1.16) es una de ellas, y puesto que los estados coherentes están etiquetados por un índice continuo en un espacio de Hilbert que tiene una base contable, forman un *conjunto sobrecompleto*. Como consecuencia de ello, cualquier estado coherente puede desarrollarse en términos de los demás:

$$|\alpha\rangle = \int \int \frac{d^2\alpha'}{\pi\hbar} |\alpha'\rangle \langle\alpha'|\alpha\rangle = \int \int \frac{d^2\alpha'}{\pi\hbar} |\alpha'\rangle e^{-\frac{1}{2\hbar}(|\alpha|^2 + |\alpha'|^2) + \frac{1}{\hbar}\alpha\alpha'^*}. \quad (1.18)$$

Escribiendo los operadores a y a^\dagger en términos de los observables canónicamente conjugados \hat{q} y \hat{p} según las ecuaciones de transformación

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{q} + i\hat{p}) \quad ; \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{q} - i\hat{p}) \quad (1.19a)$$

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a^\dagger + a) \quad ; \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a^\dagger - a), \quad (1.19b)$$

puede comprobarse que las varianzas de los operadores \hat{q} y \hat{p} en el estado coherente $|\alpha\rangle$ son iguales:

$$(\Delta\hat{q})_\alpha^2 \equiv \langle\alpha|(\hat{q} - \langle\hat{q}\rangle_\alpha)^2|\alpha\rangle = \langle\hat{q}^2\rangle_\alpha - \langle\hat{q}\rangle_\alpha^2 = \frac{\hbar}{2} \quad (1.20a)$$

$$(\Delta\hat{p})_\alpha^2 \equiv \langle\alpha|(\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle_\alpha)^2|\alpha\rangle = \langle\hat{p}^2\rangle_\alpha - \langle\hat{p}\rangle_\alpha^2 = \frac{\hbar}{2}, \quad (1.20b)$$

donde $\langle\hat{q}\rangle_\alpha$ y $\langle\hat{p}\rangle_\alpha$ denotan los valores medios de los observables \hat{q} y \hat{p} en el estado $|\alpha\rangle$:

$$\langle\hat{q}\rangle_\alpha \equiv \langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle = q \quad (1.21a)$$

$$\langle\hat{p}\rangle_\alpha \equiv \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = p, \quad (1.21b)$$

con q y p definidos por

$$q \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha^* + \alpha) \quad (1.22a)$$

$$p \equiv \frac{i}{\sqrt{2}}(\alpha^* - \alpha). \quad (1.22b)$$

De esta forma, el producto de las desviaciones cuadráticas medias de \hat{q} y \hat{p}

$$\Delta\hat{q}_\alpha \Delta\hat{p}_\alpha = \frac{\hbar}{2} \quad (1.23)$$

toma el valor mínimo permitido por el principio de indeterminación de Heisenberg. Esto permite definir los estados coherentes como *estados de mínima incertidumbre*, de forma que la función de onda asociada con un estado $|\alpha\rangle$ en la representación de coordenadas (así como en la representación de momentos) es un paquete de ondas gaussiano [Coh77], y puede obtenerse a partir del estado fundamental ϕ_0 del oscilador armónico mediante

$$\Psi_\alpha(x) = \phi_0(x - \langle\hat{q}\rangle_\alpha) e^{\frac{i}{\hbar}\langle\hat{p}\rangle_\alpha x} e^{i\theta_\alpha},$$

donde $e^{i\theta_\alpha} = e^{(\alpha^{*2} - \alpha^2)/4} = e^{-\frac{i}{2\hbar}qp}$ es un factor de fase global que puede omitirse. Esta relación indica que la función de ondas del estado coherente $|\alpha\rangle$ puede obtenerse a partir de la función del estado fundamental $|0\rangle$ simplemente trasladando la variable x en una cantidad $\langle\hat{q}\rangle_\alpha$ y multiplicándola por la exponencial oscilante $e^{i\langle\hat{p}\rangle_\alpha x/\hbar}$. Escribiendo explícitamente ϕ_0 obtenemos una función correspondiente a un paquete de ondas gaussiano centrado en $\langle\hat{q}\rangle_\alpha = q$ modulado por una onda plana $e^{i\langle\hat{p}\rangle_\alpha x/\hbar} = e^{ipx/\hbar}$:

$$\Psi(x) = \frac{1}{(2\pi(\Delta\hat{q})_\alpha^2)^{1/4}} e^{-\left(\frac{x - \langle\hat{q}\rangle_\alpha}{2(\Delta\hat{q})_\alpha}\right)^2 + \frac{i}{\hbar}\langle\hat{p}\rangle_\alpha x + i\theta_\alpha} = \frac{1}{(\pi\hbar)^{1/4}} e^{-\frac{1}{2\hbar}(x-q)^2 + \frac{i}{\hbar}px - \frac{i}{2\hbar}qp}. \quad (1.24)$$

La evolución temporal de un estado coherente $|\alpha_0\rangle$ del oscilador armónico $\hat{H} = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)$ viene dada por

$$\begin{aligned} |\alpha(t)\rangle &= e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\alpha_0\rangle = e^{-|\alpha_0|^2/2\hbar} \sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{\hbar^n n!}} e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2} e^{-|\alpha_0|^2/2\hbar} \sum_n \frac{\alpha_0^n e^{-in\omega t}}{\sqrt{\hbar^n n!}} |n\rangle \equiv e^{-i\omega t/2} |\alpha_0 e^{-i\omega t}\rangle, \end{aligned}$$

donde se ha tenido en cuenta la relación (1.3a). Los valores medios de las cuadraturas \hat{q} y \hat{p} en el estado $|\alpha(t)\rangle$ están dados por

$$\langle\hat{q}\rangle_\alpha(t) = \sqrt{2} \operatorname{Re}(\alpha_0 e^{-i\omega t}) = q_0 \cos \omega t + p_0 \sin \omega t \quad (1.25a)$$

$$\langle\hat{p}\rangle_\alpha(t) = \sqrt{2} \operatorname{Im}(\alpha_0 e^{-i\omega t}) = p_0 \cos \omega t - q_0 \sin \omega t. \quad (1.25b)$$

Estos resultados son similares a las ecuaciones de evolución de las variables clásicas asociadas a la posición y al momento del oscilador armónico clásico monodimensional. Por otra parte, las desviaciones

cuadráticas medias de dichos observables son independientes del tiempo y siguen tomando los valores $\Delta\hat{q} = \Delta\hat{p} = \sqrt{\hbar/2}$ dados por (1.20). Esto significa que la anchura del paquete no cambia con el tiempo, y la función de onda

$$\Psi_{\alpha}(x, t) = \frac{1}{(\pi\hbar)^{1/4}} e^{-i\omega t/2} e^{-\left(\frac{x-\langle\hat{q}\rangle_{\alpha}}{2(\Delta\hat{q})}\right)^2 + \frac{i}{\hbar}\langle\hat{p}\rangle_{\alpha}x + i\theta_{\alpha}}$$

mantiene la forma gaussiana a lo largo del tiempo, puesto que

$$|\Psi_{\alpha}(x, t)|^2 = |\phi_0(x - \langle\hat{q}\rangle_{\alpha})|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\langle\hat{q}\rangle_{\alpha}}{\Delta\hat{q}}\right)^2}.$$

Es decir, los estados coherentes son estados cuánticos de incertidumbre mínima que evolucionan siguiendo el movimiento clásico del oscilador armónico. Esta fue la motivación original de Schrödinger para proponer tales estados. En general puede decirse que para un sistema cuyo hamiltoniano sea lineal en los operadores $\{a, a^{\dagger}, \hat{n} = a^{\dagger}a, \hat{f}\}$, si el estado inicial es un estado coherente (incluyendo el caso $\alpha = 0$, que correspondería al estado de vacío $|0\rangle$), entonces el estado a un tiempo t posterior seguirá siendo coherente. Este estado evolucionará siguiendo una trayectoria clásica y, puesto que las desviaciones cuadráticas medias $\Delta\hat{q}$ y $\Delta\hat{p}$ son iguales entre sí y constantes, el paquete de ondas no se deformará a lo largo de dicha evolución. Por este motivo, los estados coherentes suelen recibir el nombre de *estados cuasiclásicos* y proporcionan un marco natural en el que discutir la conexión entre la mecánica cuántica y la clásica.

Cuando $\hbar \rightarrow 0$ (o bien cuando $|\alpha|$ toma un valor muy grande), las amplitudes de oscilación de $\langle\hat{q}\rangle_{\alpha}(t)$ y $\langle\hat{p}\rangle_{\alpha}(t)$, dadas por (1.25), son mucho mayores que $\Delta\hat{q}$ y $\Delta\hat{p}$. Eligiendo un valor de $|\alpha|$ suficientemente grande es posible obtener una dinámica cuántica para la que la posición y el momento del oscilador estén tan bien definidas como se desee. De esta forma, cuando $\hbar \rightarrow 0$ o $|\alpha| \gg 1$, un estado coherente $|\alpha\rangle$ describirá de forma bastante exacta la dinámica de un oscilador armónico macroscópico, para el que la posición y el momento (así como la energía) pueden ser consideradas magnitudes clásicas.

1.2. Estados *squeezed*

Los estados coherentes no son los únicos estados de incertidumbre mínima que existen. De hecho, la condición

$$\Delta\hat{q} \Delta\hat{p} = \frac{\hbar}{2} \quad (1.26)$$

para las cuadraturas \hat{q} y \hat{p} define una familia de estados de incertidumbre mínima a la cual pertenecen los estados coherentes como un caso particular en el que la incertidumbre en ambas cuadraturas es la misma, esto es, $\Delta\hat{q} = \Delta\hat{p} = \sqrt{\hbar/2}$, como se indica en la Fig. (1.1).³

³Las distintas definiciones en las cuadraturas del campo que aparecen en la literatura difieren entre sí en constantes, dando lugar a diferentes expresiones para la condición de incertidumbre mínima. En la siguiente tabla se muestran las definiciones

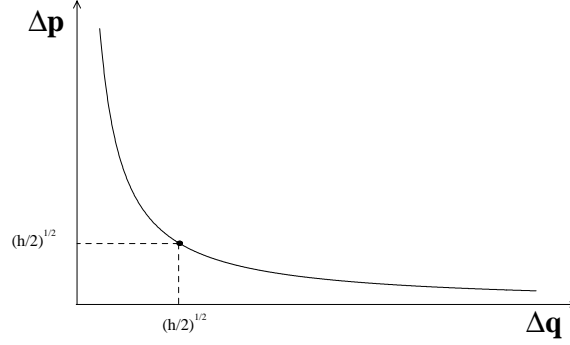


Figura 1.1: Representación de la hipérbola definida por $\Delta\hat{q} \Delta\hat{p} = \hbar/2$. La región a la derecha de la curva corresponde a los estados físicamente realizables. El punto $\Delta\hat{q} = \Delta\hat{p} = \sqrt{\hbar/2}$ corresponde a un estado coherente, mientras que el resto de la curva corresponde a los estados *squeezed*.

Para el resto de estados que cumplen la condición (1.26), la incertidumbre en una de las cuadraturas disminuye a costa del aumento en la otra. Estos estados se denominan *estados squeezed*. Su nombre, introducido por primera vez por Hollenhorst [Hol69] (en inglés “squeeze” significa “deformar”, “exprimir” o “retorcer”, entre otras cosas), se debe a que si se representan en el plano complejo asociado a las cuadraturas \hat{q} y \hat{p} las incertidumbres de un estado coherente [ver Fig. (1.2)], se tendrá un círculo (el *círculo de incertidumbre*) centrado en $\langle a \rangle = \alpha$ y de radio $\Delta\hat{q} = \Delta\hat{p} = \sqrt{\hbar/2}$, mientras que si se hace lo mismo para un estado *squeezed*, este círculo se verá *deformado* en una elipse, debido a que la incertidumbre en una de las cuadraturas es mayor que en la otra, como se verá a continuación.

Los estados *squeezed* pueden ser generados mediante el operador unitario denominado *operador de squeezing*:

$$\hat{S}(\nu, \nu^*) = e^{\frac{1}{2}(\nu a^{\dagger 2} - \nu^* a^2)}, \quad (1.27)$$

introducido por Stoler [Sto70], de forma que un *estado squeezed puro* se define como

$$|\nu\rangle = \hat{S}(\nu, \nu^*)|0\rangle.$$

La acción del operador de *squeezing* sobre los operadores a^\dagger y a puede evaluarse mediante la aplicación

más usuales, así como las incertidumbres para un estado coherente $|\alpha\rangle$.

Cuadraturas		Commutación	Incertidumbre	Heisenberg
$a = a_1 + ia_2$ $a^\dagger = a_1 - ia_2$	$a_1 = \frac{1}{2}(a^\dagger + a)$ $a_2 = \frac{i}{2}(a^\dagger - a)$	$[a_1, a_2] = \frac{i}{2}$	$\Delta a_1 = \Delta a_2 = \frac{1}{2}$	$\Delta a_1 \Delta a_2 = \frac{1}{4}$
$a = \frac{1}{2}(x_1 + ix_2)$ $a^\dagger = \frac{i}{2}(x_1 - ix_2)$	$x_1 = a^\dagger + a$ $x_2 = i(a^\dagger - a)$	$[x_1, x_2] = 2i$	$\Delta x_1 = \Delta x_2 = 1$	$\Delta x_1 \Delta x_2 = 1$
$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip)$ $a^\dagger = \frac{i}{\sqrt{2}}(q - ip)$	$q = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)$ $p = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)$	$[q, p] = i$	$\Delta q = \Delta p = \frac{1}{\sqrt{2}}$	$\Delta q \Delta p = \frac{1}{2}$

directa de la fórmula (1.12), obteniéndose las relaciones

$$\hat{S}^\dagger(v, v^*) a^\dagger \hat{S}(v, v^*) = \cosh \sqrt{vv^*} a^\dagger + v^* \frac{\sinh \sqrt{vv^*}}{\sqrt{vv^*}} a \quad (1.28a)$$

$$\hat{S}^\dagger(v, v^*) a \hat{S}(v, v^*) = v \frac{\sinh \sqrt{vv^*}}{\sqrt{vv^*}} a^\dagger + \cosh \sqrt{vv^*} a. \quad (1.28b)$$

Escribiendo el parámetro de *squeezing* en forma polar, $v = r e^{i\phi}$, estas ecuaciones toman la forma

$$\hat{S}^\dagger(r, \phi) a^\dagger \hat{S}(r, \phi) = \cosh r a^\dagger + e^{-i\phi} \sinh r a \quad (1.29a)$$

$$\hat{S}^\dagger(r, \phi) a \hat{S}(r, \phi) = e^{i\phi} \sinh r a^\dagger + \cosh r a. \quad (1.29b)$$

Puede introducirse una tercera notación definiendo los parámetros

$$s \equiv v \frac{\sinh \sqrt{vv^*}}{\sqrt{vv^*}} = e^{i\phi} \sinh r \quad (1.30a)$$

$$s^* \equiv v^* \frac{\sinh \sqrt{vv^*}}{\sqrt{vv^*}} = e^{-i\phi} \sinh r \quad (1.30b)$$

$$c \equiv \cosh \sqrt{vv^*} = \cosh r = \sqrt{1 + ss^*}, \quad (1.30c)$$

en función de los cuales las ecs. (1.29) se escriben

$$\hat{S}^\dagger(s, s^*) a^\dagger \hat{S}(s, s^*) = c a^\dagger + s^* a \quad (1.31a)$$

$$\hat{S}^\dagger(s, s^*) a \hat{S}(s, s^*) = s a^\dagger + c a. \quad (1.31b)$$

Definiendo unas nuevas cuadraturas (\hat{X}, \hat{Y}) relacionadas con (\hat{q}, \hat{p}) por una rotación en un ángulo $\phi/2$:

$$\hat{X} + i\hat{Y} = (\hat{q} + i\hat{p}) e^{-i\phi/2} = \sqrt{2\hbar} a e^{-i\phi/2}, \quad (1.32)$$

se puede comprobar que

$$\hat{S}^\dagger(r, \phi)(\hat{X} + i\hat{Y})\hat{S}(r, \phi) = \hat{X} e^r + i\hat{Y} e^{-r}. \quad (1.33)$$

Este resultado indica que el operador de *squeezing* atenúa una de las cuadraturas rotadas, al tiempo que amplifica la otra. El grado de atenuación o amplificación viene determinado por $r = |\nu|$, por lo que este parámetro recibe el nombre de *factor de squeezing*.

Los estados *squeezed* más generales, que llamaremos *estados coherente-squeezed* o *estados squeezed generalizados* se generan aplicando al vacío un *squeezing* seguido de un desplazamiento, esto es

$$|\alpha, \nu\rangle = \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(v, v^*) |0\rangle. \quad (1.34)$$

La acción conjunta de los operadores de desplazamiento y de *squeezing* sobre a^\dagger y a vendrá dada por

$$\hat{S}^\dagger(r, \phi) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) a^\dagger \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(r, \phi) = \cosh r a^\dagger + e^{-i\phi} \sinh r a + \frac{\alpha^*}{\sqrt{\hbar}} \quad (1.35a)$$

$$\hat{S}^\dagger(r, \phi) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) a \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(r, \phi) = e^{i\phi} \sinh r a^\dagger + \cosh r a + \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}}. \quad (1.35b)$$

Asimismo, las cuadraturas se transforman como

$$\hat{S}^\dagger \hat{D}^\dagger \hat{q} \hat{D} \hat{S} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} [(\cosh r + e^{i\phi} \sinh r) a^\dagger + (\cosh r + e^{-i\phi} \sinh r) a] + q \quad (1.36a)$$

$$\hat{S}^\dagger \hat{D}^\dagger \hat{p} \hat{D} \hat{S} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} [(\cosh r - e^{i\phi} \sinh r) a^\dagger - (\cosh r - e^{-i\phi} \sinh r) a] + p, \quad (1.36b)$$

donde q y p vienen dados por (1.22). Por otra parte, la transformación de las cuadraturas rotadas \hat{X} y \hat{Y} viene dada por

$$\hat{S}^\dagger(r, \phi) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) \hat{X} \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(r, \phi) = \hat{X} e^r + X \quad (1.37a)$$

$$\hat{S}^\dagger(r, \phi) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) \hat{Y} \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(r, \phi) = \hat{Y} e^{-r} + Y, \quad (1.37b)$$

donde X e Y están definidos por

$$X + iY \equiv (q + ip) e^{-i\phi/2},$$

esto es

$$X \equiv q \cos(\phi/2) + p \sin(\phi/2)$$

$$Y \equiv p \cos(\phi/2) - q \sin(\phi/2).$$

Los valores esperados de las cuadraturas (\hat{q} , \hat{p}) así como del operador número \hat{n} en un estado coherente-*squeezed* $|\alpha, \nu\rangle$ vendrán dados por

$$\langle \hat{q} \rangle_{\alpha, \nu} \equiv \langle \alpha, \nu | \hat{q} | \alpha, \nu \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \langle 0 | \hat{S}^\dagger \hat{D}^\dagger (a^\dagger + a) \hat{D} \hat{S} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha + \alpha^*) = q$$

$$\langle \hat{p} \rangle_{\alpha, \nu} \equiv \langle \alpha, \nu | \hat{p} | \alpha, \nu \rangle = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} \langle 0 | \hat{S}^\dagger \hat{D}^\dagger (a^\dagger - a) \hat{D} \hat{S} | 0 \rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (\alpha^* - \alpha) = p$$

$$\langle \hat{n} \rangle_{\alpha, \nu} \equiv \langle \alpha, \nu | a^\dagger a | \alpha, \nu \rangle = s s^* + \frac{\alpha \alpha^*}{\hbar} = \sinh^2 r + \frac{|\alpha|^2}{\hbar} = \sinh^2 r + \frac{(q^2 + p^2)}{2\hbar}$$

lo que, con algo de álgebra, conduce a las varianzas

$$\begin{aligned} (\Delta \hat{X})_{\alpha, \nu}^2 &\equiv \langle \hat{X}^2 \rangle_{\alpha, \nu} - \langle \hat{X} \rangle_{\alpha, \nu}^2 \\ &= \frac{\hbar}{2} \langle (a^\dagger e^{i\phi/2} + a e^{-i\phi/2})^2 \rangle_{\alpha, \nu} - \frac{\hbar}{2} (\langle a^\dagger e^{i\phi/2} + a e^{-i\phi/2} \rangle_{\alpha, \nu})^2 = \frac{\hbar}{2} e^{2r} \end{aligned} \quad (1.38a)$$

$$\begin{aligned} (\Delta \hat{Y})_{\alpha, \nu}^2 &\equiv \langle \hat{Y}^2 \rangle_{\alpha, \nu} - \langle \hat{Y} \rangle_{\alpha, \nu}^2 \\ &= -\frac{\hbar}{2} \langle (a^\dagger e^{i\phi/2} - a e^{-i\phi/2})^2 \rangle_{\alpha, \nu} + \frac{\hbar}{2} (\langle a^\dagger e^{i\phi/2} - a e^{-i\phi/2} \rangle_{\alpha, \nu})^2 = \frac{\hbar}{2} e^{-2r}. \end{aligned} \quad (1.38b)$$

Se observa por tanto que un estado *squeezed* generalizado tiene incertidumbres distintas para las cuadraturas rotadas \hat{X} e \hat{Y} , de forma que su producto sigue siendo mínimo [ec. (1.23)]:

$$(\Delta \hat{X})_{\alpha, \nu} (\Delta \hat{Y})_{\alpha, \nu} = \frac{\hbar}{2}. \quad (1.39)$$

Tal y como hemos indicado, el círculo de incertidumbre para el estado coherente $|\alpha\rangle$ se transforma en una elipse cuyos ejes principales caen a lo largo de los ejes \hat{X} e \hat{Y} y cuyos radios principales vienen dados por $\Delta\hat{X}$ y $\Delta\hat{Y}$, como se indica en la Fig. (1.2).

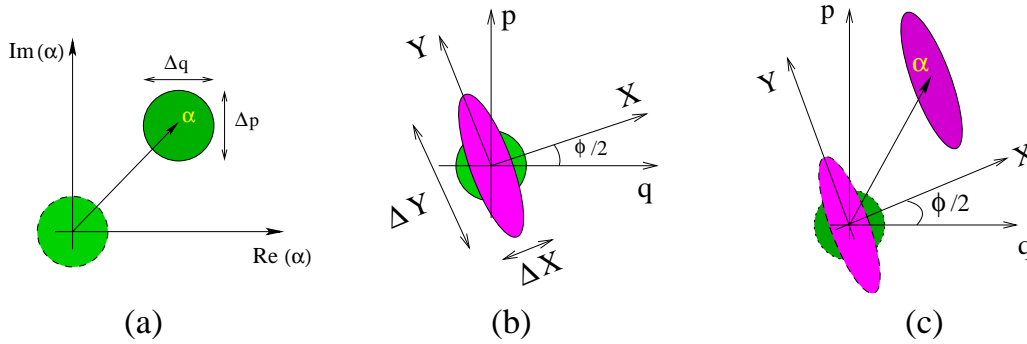


Figura 1.2: (a): Círculo de incertidumbre para un estado coherente, $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)|0\rangle$, obtenido desplazando el círculo de incertidumbre asociado al estado de vacío $|0\rangle$ en una magnitud dada por α . (b): Elipse de incertidumbre para un estado *squeezed* puro, $\hat{S}(v, v^*)|0\rangle$, obtenida deformando el círculo de incertidumbre del estado $|0\rangle$. La rotación de los ejes de la elipse viene dada por la fase ϕ del parámetro de *squeezing*, $v = r e^{i\phi}$, mientras que la magnitud de la deformación viene determinada por el módulo r . (c): Elipse de incertidumbre para un estado coherente-*squeezed* $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)\hat{S}(v, v^*)|0\rangle$.

Los estados *squeezed* fueron introducidos en óptica cuántica por la necesidad de disminuir el ruido producido en los interferómetros utilizados para detectar ondas gravitacionales [Cav81]. Las dos fuentes fundamentales de ruido que determinan la sensibilidad de tales interferómetros son, por una parte, las fluctuaciones en el número de fotones salientes y, por otra, las fluctuaciones en la presión de radiación en los espejos. Las responsables en última instancia de estas indeterminaciones son las fluctuaciones de punto cero (o fluctuaciones de vacío) del campo electromagnético, al superponerse a la luz láser que entra al interferómetro. De esta forma, si se consigue que lo que entre en el interferómetro no sea el estado de vacío, sino un estado *squeezed*, esto es, un estado cuyas fluctuaciones en una cuadratura sean inferiores a las fluctuaciones de punto cero (o a las de cualquier estado coherente), mientras que las fluctuaciones en la otra cuadratura son mayores, se conseguirá disminuir el error en el cómputo del número de fotones a expensas de aumentar el error en la presión de radiación, o viceversa.

Por otra parte, debido a que el ruido cuántico inherente a los haces de luz limita fuertemente la capacidad de transmitir información de los haces ópticos, la utilización de estados *squeezed* supone una forma de reducir este ruido, aumentando la incertidumbre en la cuadratura que no esté involucrada en el proceso de transmisión de la información. En este sentido, el principal campo de aplicación de estos estados está en las comunicaciones ópticas y en los experimentos de “no demolición cuántica” [Cav80, Wal83, Mil83] que han sido diseñados para la detección de ondas gravitacionales.

Finalmente, hemos de mencionar ciertos estados de incertidumbre mínima con fluctuaciones distintas en las dos cuadraturas, que bajo ciertas condiciones son equivalentes a los estados *squeezed*. Son los llamados *estados coherentes de dos fotones* (ECDF), introducidos por Yuen en 1976 [Yue76]. En general, los estados coherentes de dos fotones se diferencian de los estados coherentes en varios aspectos: no sólo son generados por diferentes procesos de fotones, sino que además tienen propiedades estadísticas y propiedades de coherencia distintas. Básicamente, los estados coherentes se generan a partir de procesos estimulados de un solo fotón, mientras que los ECDF se obtienen a partir de procesos estimulados de dos fotones para dos fotones del mismo modo, de ahí su nombre.

Los ECDF se construyen de la siguiente manera: Consideremos el operador definido por

$$\hat{b} \equiv \mu a + \lambda a^\dagger, \quad (1.40)$$

donde μ y λ son un par de c-números tales que

$$|\mu|^2 - |\lambda|^2 = 1. \quad (1.41)$$

A partir de la propiedad (1.41) se deduce que \hat{b} y \hat{b}^\dagger cumplen la siguiente relación de conmutación:

$$[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1.$$

El cambio de variables de (a, a^\dagger) a $(\hat{b}, \hat{b}^\dagger)$ dado por (1.40) es una transformación canónica, puesto que deja invariante la relación de conmutación $[a, a^\dagger] = [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$. Según von Neumann [Von31], una transformación canónica puede representarse mediante una transformación unitaria, esto es

$$\hat{b} = \hat{U} a \hat{U}^\dagger, \quad (1.42)$$

siendo \hat{U} un operador unitario. Esta transformación hace que las propiedades del operador \hat{b} sean muy similares a las del operador a . Los ECDF se definen como los autovalores del operador \hat{b} , esto es

$$\hat{b}|\beta\rangle_g = \hbar^{-1/2}\beta|\beta\rangle_g. \quad (1.43)$$

Hemos seguido la notación de Yuen, en la cual la dependencia del ECDF con los parámetros μ y λ ha sido suprimida en $|\beta\rangle_g$ aunque, de forma similar a los estados coherentes, hemos preferido hacer explícita la dependencia del autovalor con \hbar . Se observa que para $\lambda = 0$ el estado $|\beta\rangle_g$ es un estado coherente ordinario. En lo sucesivo supondremos implícitamente que $\lambda \neq 0$. La ec. (1.42) permite obtener un ECDF a partir de un estado coherente mediante

$$|\beta\rangle_g = \hat{U}|\beta\rangle, \quad (1.44)$$

siendo $|\beta\rangle$ un autoestado de a .⁴ Así pues, las propiedades de los estados $|\beta\rangle_g$ son paralelas a las de los estados coherentes $|\beta\rangle$. Por ejemplo, un estado $|\beta\rangle_g$ puede obtenerse a partir del estado de vacío

$$|\beta\rangle_g = \hat{D}_g(\beta, \beta^*)|0\rangle_g \quad (1.45)$$

mediante un operador desplazamiento dado por

$$\hat{D}_g(\beta, \beta^*) \equiv e^{\hbar^{-1/2}(\beta \hat{b}^\dagger - \beta^* \hat{b})},$$

siendo

$$|0\rangle_g = \hat{U}|0\rangle. \quad (1.46)$$

Los estados coherentes de dos fotones son completos

$$\iint \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} |\beta\rangle_g \langle\beta| = \mathbf{1} \quad (1.47)$$

y su producto escalar viene dado por

$${}_g\langle\beta|\beta'\rangle_g = e^{\frac{\beta^*\beta'}{\hbar} - \frac{|\beta|^2}{2\hbar} - \frac{|\beta'|^2}{2\hbar}}.$$

Para estudiar la relación existente entre los estados coherentes de dos fotones y los estados *squeezed* tratados anteriormente, notemos en primer lugar que el operador \hat{U} definido en (1.42) es un operador de *squeezing* $\hat{S}(r, \phi)$ con

$$\mu = \cosh r \quad (1.48a)$$

$$\lambda = -e^{i\phi} \sinh r, \quad (1.48b)$$

lo que puede verse a partir de la identificación de los coeficientes de a^\dagger y a en las transformaciones

$$\begin{aligned} \hat{b} \equiv \hat{U} a \hat{U}^\dagger &= \lambda a^\dagger + \mu a \\ \hat{S}(r, \phi) a \hat{S}^\dagger(r, \phi) &= -e^{i\phi} \sinh r a^\dagger + \cosh r a. \end{aligned}$$

Asimismo, el estado de vacío (1.46) para un ECDF es un estado *squeezed* puro:

$$|0\rangle_g = \hat{S}(v, v^*)|0\rangle = |v\rangle,$$

⁴Este resultado puede obtenerse fácilmente escribiendo la ec. (1.43) como

$$\hat{U} a \hat{U}^\dagger |\beta\rangle_g = \hbar^{-1/2} \beta |\beta\rangle_g.$$

Operando con \hat{U}^\dagger a la izquierda obtenemos la relación

$$a \hat{U}^\dagger |\beta\rangle_g = \hbar^{-1/2} \beta \hat{U}^\dagger |\beta\rangle_g,$$

que define a $\hat{U}^\dagger |\beta\rangle_g$ como un autoestado del operador a con autovalor $\hbar^{-1/2} \beta$. Identificando $\hat{U}^\dagger |\beta\rangle_g$ con el estado coherente $|\beta\rangle$ (que cumple $a|\beta\rangle = \hbar^{-1/2} \beta |\beta\rangle$) se tiene el resultado (1.44).

con $v = r e^{i\phi}$ dado por (1.48). De esta forma, reescribiendo el operador $\hat{D}_g(\beta, \beta^*)$ en (1.45) en función de a^\dagger y a se tiene

$$\begin{aligned}
|\beta\rangle_g &= \hat{D}_g(\beta, \beta^*)|0\rangle_g = e^{\hbar^{-1/2}\beta\hat{S}a^\dagger\hat{S}^\dagger - \hbar^{-1/2}\beta^*\hat{S}a\hat{S}^\dagger} \hat{S}(r, \phi)|0\rangle \\
&= e^{\hbar^{-1/2}\beta(\cosh ra^\dagger - e^{-i\phi} \sinh ra) - \hbar^{-1/2}\beta^*(-e^{i\phi} \sinh ra^\dagger + \cosh ra)} \hat{S}(r, \phi)|0\rangle \\
&= e^{\hbar^{-1/2}\beta(\mu a^\dagger + \lambda^* a) - \hbar^{-1/2}\beta^*(\lambda a^\dagger + \mu a)} \hat{S}(r, \phi)|0\rangle \\
&= e^{\hbar^{-1/2}(\beta\mu - \beta^*\lambda)a^\dagger - \hbar^{-1/2}(\beta^*\mu - \beta\lambda^*)a} \hat{S}(r, \phi)|0\rangle \\
&\equiv \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(r, \phi)|0\rangle,
\end{aligned} \tag{1.49}$$

donde (r, ϕ) cumplen las condiciones (1.48) y α viene dado por

$$\alpha = \beta\mu - \beta^*\lambda. \tag{1.50}$$

De esta forma, hemos encontrado el estado *squeezed* equivalente para el estado coherente de dos fotones dado. Puesto que (1.50) es una transformación con determinante unidad, la relación de cierre (1.47) indica que los estados *squeezed* generalizados forman una base completa:

$$\iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha, v\rangle\langle\alpha, v| = \mathbf{1}. \tag{1.51}$$

Por otra parte, hemos de tener en cuenta que, según la ec. (1.44), un ECDF viene dado por

$$|\beta\rangle_g = \hat{S}(r, \phi)|\beta\rangle = \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*)|0\rangle, \tag{1.52}$$

esto es, un estado coherente de dos fotones se obtiene desplazando primero el vacío y luego aplicando un *squeezing*. Este es el procedimiento inverso utilizado para definir un estado *squeezed* generalizado. Ambos procedimientos son equivalentes si los parámetros de desplazamiento y *squeezing* están relacionados según las condiciones (1.48) y (1.50), esto es,

$$\alpha = \beta \cosh r + \beta^* e^{i\phi} \sinh r. \tag{1.53}$$

Este resultado puede comprobarse sin más que comparar la transformación de a^\dagger y a bajo los operadores \hat{D} y \hat{S} en uno u otro orden. Así, las transformaciones $\hat{S}^\dagger \hat{D}(a^\dagger, a) \hat{D} \hat{S}$ vienen dadas por (1.35), mientras que para el orden inverso se tiene

$$\begin{aligned}
\hat{D}^\dagger(\beta, \beta^*) \hat{S}^\dagger(r, \phi) a^\dagger \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*) &= \cosh r a^\dagger + e^{-i\phi} \sinh r a + \frac{\beta^* \cosh r + \beta e^{-i\phi} \sinh r}{\sqrt{\hbar}} \\
\hat{D}^\dagger(\beta, \beta^*) \hat{S}^\dagger(r, \phi) a \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*) &= e^{i\phi} \sinh r a^\dagger + \cosh r a + \frac{\beta \cosh r + \beta^* e^{i\phi} \sinh r}{\sqrt{\hbar}}.
\end{aligned}$$

Es evidente que el resultado de ambas transformaciones coincide si se cumple la condición (1.53). Este resultado indica que el desplazamiento total producido al deformar primero el vacío y desplazarlo después (como sucede al generar los estados coherentes-*squeezed*) no es el mismo que el que se produce

en el caso inverso, esto es, desplazando primero el vacío para deformarlo a continuación (como es el caso de los ECDF). En el primer caso, el desplazamiento total viene dado por $\alpha/\sqrt{\hbar}$ y $\alpha^*/\sqrt{\hbar}$, mientras que en el segundo este desplazamiento total depende no sólo de los parámetros del desplazamiento, sino también de los del *squeezing*.

Finalmente, puede comprobarse que los ECDF son estados de incertidumbre mínima. Para ello, debe tenerse en cuenta la transformación de las cuadraturas \hat{q} y \hat{p} , dada por

$$\begin{aligned} \hat{D}^\dagger(\beta, \beta^*) \hat{S}^\dagger(r, \phi) \hat{q} \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} [(\cosh r + e^{i\phi} \sinh r) a^\dagger + (\cosh r + e^{-i\phi} \sinh r) a] \\ &+ \frac{\beta^*(\cosh r + e^{i\phi} \sinh r) + \beta(\cosh r + e^{-i\phi} \sinh r)}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (1.54a)$$

$$\begin{aligned} \hat{D}^\dagger(\beta, \beta^*) \hat{S}^\dagger(r, \phi) \hat{p} \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*) &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} [(\cosh r - e^{i\phi} \sinh r) a^\dagger - (\cosh r - e^{-i\phi} \sinh r) a] \\ &+ \frac{\beta^*(\cosh r - e^{i\phi} \sinh r) - \beta(\cosh r - e^{-i\phi} \sinh r)}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (1.54b)$$

Por otra parte, las cuadraturas rotadas definidas por (1.32) se transforman como

$$\begin{aligned} \hat{D}^\dagger(\beta, \beta^*) \hat{S}^\dagger(r, \phi) \hat{X} \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*) &= e^r \hat{X} + e^{-r} (q_\beta \cos(\phi/2) + p_\beta \sin(\phi/2)) \\ \hat{D}^\dagger(\beta, \beta^*) \hat{S}^\dagger(r, \phi) \hat{Y} \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*) &= e^{-r} \hat{Y} + e^r (p_\beta \cos(\phi/2) - q_\beta \sin(\phi/2)), \end{aligned}$$

donde q_β y p_β son las cuadraturas clásicas asociadas a β , esto es

$$\begin{aligned} q_\beta &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta^* + \beta) \\ p_\beta &= \frac{i}{\sqrt{2}}(\beta^* - \beta). \end{aligned}$$

En un ECDF, se tienen los siguientes valores esperados:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{q} \rangle_g &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \langle 0 | \hat{D}^\dagger(\beta, \beta^*) \hat{S}^\dagger(r, \phi) (a^\dagger + a) \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*) | 0 \rangle \\
&= q_\beta \cosh r + \frac{\sinh r}{\sqrt{2}} (e^{i\phi} \beta^* + e^{-i\phi} \beta) \\
\langle \hat{p} \rangle_g &= i \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \langle 0 | \hat{D}^\dagger(\beta, \beta^*) \hat{S}^\dagger(r, \phi) (a^\dagger - a) \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*) | 0 \rangle \\
&= p_\beta \cosh r - i \frac{\sinh r}{\sqrt{2}} (e^{i\phi} \beta^* - e^{-i\phi} \beta) \\
\langle \hat{n} \rangle_q &= \langle 0 | \hat{D}^\dagger(\beta, \beta^*) \hat{S}^\dagger(r, \phi) a^\dagger a \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*) | 0 \rangle = \sinh^2 r \\
&\quad + \frac{1}{\hbar} [|\beta|^2 (\sinh^2 r + \cosh^2 r) + \beta^2 e^{-i\phi} \sinh r \cosh r + \beta^{*2} e^{i\phi} \sinh r \cosh r] \\
\langle \hat{X} \rangle_g &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \langle 0 | \hat{D}^\dagger(\beta, \beta^*) \hat{S}^\dagger(r, \phi) (e^{i\phi/2} a^\dagger + e^{-i\phi/2} a) \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*) | 0 \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} e^r (e^{i\phi/2} \beta^* + e^{-i\phi/2} \beta) \\
\langle \hat{Y} \rangle_g &= i \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \langle 0 | \hat{D}^\dagger(\beta, \beta^*) \hat{S}^\dagger(r, \phi) (e^{i\phi/2} a^\dagger - e^{-i\phi/2} a) \hat{S}(r, \phi) \hat{D}(\beta, \beta^*) | 0 \rangle \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-r} (e^{i\phi/2} \beta^* - e^{-i\phi/2} \beta).
\end{aligned}$$

Puede comprobarse que el valor de las varianzas de \hat{X} e \hat{Y} en un ECDF coincide con los resultados (1.38), esto es

$$(\Delta \hat{X})_g^2 \equiv \langle \hat{X} \rangle_g^2 - \langle \hat{X}^2 \rangle_g = \frac{\hbar}{2} e^{2r} \quad (1.55a)$$

$$(\Delta \hat{Y})_g^2 \equiv \langle \hat{Y} \rangle_g^2 - \langle \hat{Y}^2 \rangle_g = \frac{\hbar}{2} e^{-2r}, \quad (1.55b)$$

lo que permite incluir a los ECDF en la familia de estados de mínima incertidumbre, al cumplir

$$(\Delta \hat{X})_g (\Delta \hat{Y})_g = \frac{\hbar}{2}.$$

1.3. Estructura algebraica de los estados coherentes

1.3.1. Representación matricial

A pesar de haber sido definidos como los autoestados del operador de aniquilación del oscilador armónico, los estados coherentes no están restringidos únicamente a este sistema. El trabajo de Perelomov [Per72] y Gilmore [Gil72, Gil74a, Gil94b, Gil75] a principios de los años setenta permitió conectar los estados coherentes con el grupo dinámico asociado a cada problema físico. Por ejemplo, cuando se incluyen los operadores de creación, de destrucción, la identidad y el operador número de fotones como generadores del grupo, se sabe que el sistema del oscilador armónico posee el grupo dinámico de

Heisenberg-Weyl H_4 . Zhang *et al* [Zha90] han propuesto un método para construir los estados coherentes basado en una correspondencia con el espacio coset geométrico $H(4)/U(1) \otimes U(1)$.

Las propiedades dinámicas de un sistema cuántico vienen determinadas de forma completa por el hamiltoniano y el espacio de Hilbert de dicho sistema. En óptica cuántica se estudia el hamiltoniano de un sistema en interacción con el campo electromagnético, dado por

$$\hat{H} = \sum_k \hbar\omega_k a_k^\dagger a_k + \sum_\beta \varepsilon \sigma_0^{(\beta)} + \sum_{k,\beta} \gamma_{k\beta} \left(\frac{\sigma_+^{(\beta)}}{\sqrt{N}} a_k + \frac{\sigma_-^{(\beta)}}{\sqrt{N}} a_k^\dagger \right), \quad (1.56)$$

donde $\hbar\omega_k$ es la energía del modo del campo k , y $\gamma_{k\beta}$ son los coeficientes de acoplamiento entre el sistema atómico y el campo electromagnético. Una de las suposiciones cruciales que se ha hecho para construir este hamiltoniano es que cada uno de los N átomos (etiquetado por el índice β) es un sistema de dos niveles y por lo tanto sus variables dinámicas son los operadores usuales de spin $\{\sigma_0^{(\beta)}, \sigma_+^{(\beta)}, \sigma_-^{(\beta)}\}$. Normalmente se considera constante la fuerza de acoplamiento, esto es, $\gamma_{k\beta} = \gamma$. Si se considera el sistema atómico como una fuente clásica (esto es, se tratan los operadores de spin $\sigma^{(\beta)}$ como c-números), el hamiltoniano (1.56) puede reducirse a

$$\begin{aligned} \hat{H}^F &= \sum_k \hbar\omega_k a_k^\dagger a_k + \sum_\beta \langle \varepsilon \sigma_0^{(\beta)} \rangle + \gamma \sum_{k,\beta} \left(\frac{\langle \sigma_+^{(\beta)} \rangle}{\sqrt{N}} a_k + \frac{\langle \sigma_-^{(\beta)} \rangle}{\sqrt{N}} a_k^\dagger \right) \\ &\equiv \sum_k \hbar\omega_k a_k^\dagger a_k + \sum_k \left(\lambda_k(t) a_k^\dagger + \lambda_k^*(t) a_k \right) + \kappa \\ &\equiv \sum_k \hat{H}_k^F + \kappa, \end{aligned} \quad (1.57)$$

donde κ es una constante y

$$\begin{aligned} \hat{H}_k^F &= \hbar\omega_k a_k^\dagger a_k + \lambda_k(t) a_k^\dagger + \lambda_k^*(t) a_k \\ &\equiv \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}. \end{aligned} \quad (1.58)$$

En esta expresión, \hat{H}_0 representa el campo electromagnético libre (o el oscilador armónico libre) y \hat{H}_{int} describe la interacción entre el campo electromagnético y la fuente externa dependiente del tiempo. De esta forma, el sistema óptico puede verse como un sistema de oscilador armónico en un campo externo.

Como se ha dicho, Zhang *et al* [Zha90], partiendo del hamiltoniano semiclásico (1.58) construyen los estados coherentes de una forma muy compacta y elegante, haciendo uso de un *método de teoría de grupos*. En esta sección expondremos únicamente los resultados con utilidad práctica que facilitan el cálculo de valores esperados de productos de operadores, y remitimos a la Ref. [Zha90] para una descripción más detallada de dicho método.

Los procesos denominados “de un fotón” que tienen lugar en la generación experimental de los estados coherentes, están gobernados por un operador hamiltoniano escrito en términos de los operadores del

oscilador armónico a , a^\dagger y $\hat{n} = a^\dagger a$ que, junto al operador identidad \hat{I} , cumplen las siguientes relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [\hat{n}, a^\dagger] &= a^\dagger & ; & \quad [\hat{n}, \hat{I}] = 0 \\ [\hat{n}, a] &= -a & ; & \quad [a^\dagger, \hat{I}] = 0 \\ [a, a^\dagger] &= \hat{I} & ; & \quad [a, \hat{I}] = 0. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Los operadores $\{\hat{n}, a^\dagger, a, \hat{I}\}$ son los generadores del grupo de Lie conocido como grupo de Heisenberg-Weyl H_4 . Las relaciones de conmutación (1.59) determinan la estructura de un álgebra de Lie que denotamos por h_4 [Gil74a].

Asimismo, en la generación de los estados *squeezed* puros a partir de una fuente clásica se inducen procesos “de dos fotones” descritos por un hamiltoniano del tipo

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + \lambda_2(t) a^{\dagger 2} + \lambda_2^*(t) a^2. \quad (1.60)$$

Los operadores $\{\hat{n} + \frac{1}{2}, a^{\dagger 2}, a^2\}$ generan el álgebra de Lie $su(1, 1)$. Si consideramos el caso más general de estados coherentes-*squeezed*, el hamiltoniano de tal proceso contiene términos lineales y cuadráticos en a^\dagger y a , y tiene la forma

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + f_1(t) a^\dagger + f_1^*(t) a + f_2(t) a^{\dagger 2} + f_2^*(t) a^2. \quad (1.61)$$

En esta expresión, la dependencia temporal de las funciones $f_1(t)$ y $f_2(t)$ gobierna la secuencia en la que tienen lugar los procesos de formación del estado coherente y de *squeezing*. Los seis operadores $\{\hat{n} + \frac{1}{2}, a^{\dagger 2}, a^2, a^\dagger, a, \hat{I}\}$, que cumplen las relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [\hat{n}, a^{\dagger 2}] &= 2a^{\dagger 2} & ; & \quad [n, a^2] = -2a^2 \\ [a, a^{\dagger 2}] &= 2a^\dagger & ; & \quad [a^\dagger, a^2] = -2a \\ [a^{\dagger 2}, \hat{I}] &= 0 & ; & \quad [a^2, \hat{I}] = 0 \end{aligned} \quad (1.62)$$

además de las dadas por (1.59), generan el álgebra (no semisimple) h_6 . El álgebra de dos fotones es un subálgebra del álgebra simpléctica $sp(4)$.

Los elementos de matriz de los operadores de h_6 pueden calcularse fácilmente en la base de estados de Fock $|n\rangle$. Sin embargo, los cálculos computacionales pueden simplificarse significativamente si se utiliza una representación matricial fiel⁵ de h_6 que sea menor que la representación de estados de Fock.

⁵Una representación es fiel si el homomorfismo que define dicha representación es además un isomorfismo, esto es, se trata de una correspondencia uno a uno en la que la inversa está bien definida y existe.

En este caso, la representación fiel más pequeña consiste en matrices 4×4 . Esta representación matricial viene dada explícitamente por

$$\begin{aligned} \hat{n} + 1/2 &\rightarrow M_{22} - M_{33} & ; & \hat{I} \rightarrow -2M_{41} \\ a^{\dagger 2} &\rightarrow 2M_{23} & ; & a^{\dagger} \rightarrow M_{21} - M_{43} \\ a^2 &\rightarrow -2M_{32} & ; & a \rightarrow -M_{31} - M_{42}, \end{aligned} \quad (1.63)$$

de forma que

$$\mathbf{M}_{h_6} \left[\eta \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) + \delta \hat{I} + R a^{\dagger 2} + L a^2 + r a^{\dagger} + l a \right] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ r & \eta & 2R & 0 \\ -l & -2L & -\eta & 0 \\ -2\delta & -l & -r & 0 \end{pmatrix} \quad (1.64)$$

Esta representación es útil para llevar a cabo productos de operadores exponenciales, como sucede al integrar ecuaciones del movimiento, pero no tiene una utilidad directa para calcular elementos de matriz en el espacio de Hilbert. La representación matricial de los elementos del álgebra h_6 vienen dadas por:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{h_6} [a] &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & ; & \mathbf{M}_{h_6} [a^{\dagger}] &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{M}_{h_6} [a^2] &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & ; & \mathbf{M}_{h_6} [a^{\dagger 2}] &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{M}_{h_6} \left[\hat{n} + \frac{1}{2} \right] &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & ; & \mathbf{M}_{h_6} [\hat{I}] &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.65)$$

La utilidad de esta representación matricial se pone de manifiesto a la hora de obtener una serie de teoremas de “desenredo” como el teorema BCH. Así, un operador de evolución unitario general $\hat{U}(t)$ puede escribirse de diversas maneras. Una de ellas es como una superposición lineal de los elementos del álgebra de Lie h_6 :

$$\hat{U}(t) = \exp \left[\eta''(t) \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) + R''(t) a^{\dagger 2} + r''(t) a^{\dagger} + L''(t) a^2 + l''(t) a + \delta''(t) \hat{I} \right]. \quad (1.66)$$

En la representación matricial 4×4 , la exponencial de la ec. (1.64) puede calcularse explícitamente,

dando como resultado la matriz

$$\mathbf{M}_{h_6} \left[e^{\eta''(t)(\hat{n} + \frac{1}{2}) + R''(t) a^{\dagger 2} + r''(t) a^{\dagger} + L''(t) a^2 + l''(t) a + \delta''(t) \hat{I}} \right] = \quad (1.67)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{e^N - I}{N} \begin{pmatrix} r'' \\ -l'' \end{pmatrix} & e^N & 0 \\ -2\delta'' + \begin{pmatrix} -l'' & -r'' \end{pmatrix} \frac{e^N - I - N}{N^2} \begin{pmatrix} r'' \\ -l'' \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -l'' & -r'' \end{pmatrix} \frac{e^N - I}{N} & 1 \end{pmatrix},$$

donde

$$N = \begin{pmatrix} \eta'' & 2R'' \\ -2L'' & -\eta'' \end{pmatrix},$$

siendo

$$e^N = I \cosh \theta + N \frac{\sinh \theta}{\theta},$$

$$\theta^2 = \eta''^2 - 4L''R''.$$

Otra manera de escribir el operador de evolución, más útil a la hora de hacer cálculos con estados *squeezed* en comunicaciones ópticas, consiste en escribirlo como producto de tres operadores exponenciales separados, en la forma

$$\hat{U}(t) = \exp(ra^{\dagger} + la) \exp(Ra^{\dagger 2} + La^2) \exp\left(\eta(\hat{n} + \frac{1}{2}) + \delta \hat{I}\right).$$

La representación matricial 4×4 viene dada por

$$\mathbf{M}_{h_6} \left[e^{ra^{\dagger} + la} e^{Ra^{\dagger 2} + La^2} e^{\eta(\hat{n} + \frac{1}{2}) + \delta \hat{I}} \right] = \quad (1.68)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ r & \cosh \theta e^{\eta} & 2R \frac{\sinh \theta}{\theta} e^{-\eta} & 0 \\ -l & -2L \frac{\sinh \theta}{\theta} e^{\eta} & \cosh \theta e^{-\eta} & 0 \\ -2\delta & -le^{\eta} \cosh \theta + 2Lr \frac{\sinh \theta}{\theta} e^{\eta} & -re^{-\eta} \cosh \theta - 2Rl \frac{\sinh \theta}{\theta} e^{-\eta} & 1 \end{pmatrix}.$$

En particular, la representación matricial de los operadores de desplazamiento y *squeezing* vendrá dada por

$$\mathbf{M}_{h_6} [\hat{D}(\alpha, \alpha^*)] \equiv \mathbf{M}_{h_6} \left[e^{\frac{1}{\sqrt{\hbar}}(\alpha a^{\dagger} - \alpha^* a)} \right] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha/\sqrt{\hbar} & 1 & 0 & 0 \\ \alpha^*/\sqrt{\hbar} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \alpha^*/\sqrt{\hbar} & -\alpha/\sqrt{\hbar} & 1 \end{pmatrix} \quad (1.69)$$

$$\mathbf{M}_{h_6} [\hat{S}(v, v^*)] \equiv \mathbf{M}_{h_6} \left[e^{\frac{1}{2}(va^{\dagger 2} - v^* a^2)} \right] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cosh \sqrt{vv^*} & v \frac{\sinh \sqrt{vv^*}}{\sqrt{vv^*}} & 0 \\ 0 & v^* \frac{\sinh \sqrt{vv^*}}{\sqrt{vv^*}} & \cosh \sqrt{vv^*} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cosh r & e^{i\phi} \sinh r & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \sinh r & \cosh r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & s & 0 \\ 0 & s^* & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.70)$$

Una tercera forma de escribir el operador de evolución unitario, y que es particularmente conveniente para los cálculos de dinámica molecular, consiste en el producto de tres operadores exponenciales en ordenación normal, esto es, con todos los operadores de aniquilación situados a la derecha, los de creación a la izquierda y los operadores diagonales en el centro:

$$\hat{U}(t) = \exp\left(R' a^{\dagger 2} + r' a^{\dagger}\right) \exp\left(\eta'(\hat{n} + \frac{1}{2}) + \delta' \hat{I}\right) \exp(L' a^2 + l' a). \quad (1.71)$$

La representación matricial 4×4 también puede obtenerse mediante simple multiplicación matricial, y viene dada por

$$\mathbf{M}_{h_6} \left[e^{R' a^{\dagger 2} + r' a^{\dagger}} e^{\eta'(\hat{n} + \frac{1}{2}) + \delta' \hat{I}} e^{L' a^2 + l' a} \right] = \quad (1.72)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ r' - 2R'l'e^{-\eta'} & e^{\eta'} - 4L'R'e^{-\eta'} & 2R'e^{-\eta'} & 0 \\ -l'e^{-\eta'} & -2L'e^{-\eta'} & e^{-\eta'} & 0 \\ -2\delta' + r'l'e^{-\eta'} & -l' + 2r'L'e^{-\eta'} & -r'e^{-\eta'} & 1 \end{pmatrix}.$$

La utilidad del método de teoría de grupos se pone de manifiesto al poder convertir las ecuaciones de movimiento hamiltonianas en ecuaciones para los parámetros del grupo. Así, las ecuaciones de movimiento para el operador de evolución unitario

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) \quad (1.73)$$

con condiciones iniciales

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}, \quad (1.74)$$

son de hecho ecuaciones de movimiento para un elemento, $\hat{U}(t, t_0)$, del grupo H_6 , ya que el hamiltoniano $\hat{H}(t)$ de la ec. (1.61) es un elemento del álgebra de Lie h_6 . Como consecuencia, estas ecuaciones pueden integrarse dentro del grupo mismo, bien en la representación unitaria que actúa en el espacio de Hilbert, como es el procedimiento habitual en mecánica cuántica, o bien en cualquier otra representación fiel. En este último caso, elegir la representación más pequeña posible, dada por la ec. (1.64), supone una simplificación considerable, ya que las ecuaciones de movimiento son entonces

$$i \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{M}_{h_6} [\hat{U}(t, t_0)] = \mathbf{M}_{h_6} [\hat{H}(t)] \cdot \mathbf{M}_{h_6} [\hat{U}(t, t_0)], \quad (1.75)$$

con la condición inicial

$$\mathbf{M}_{h_6} [\hat{U}(t_0, t_0)] = I_4. \quad (1.76)$$

La integración matricial puede llevarse a cabo numéricamente, y al cabo de un tiempo t , la matriz 4×4 resultante tiene la forma

$$\mathbf{M}_{h_6} [\hat{U}(t, t_0)] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & 0 \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & 0 \\ M_{41} & M_{42} & M_{43} & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.77)$$

El cálculo de elementos de matriz y valores esperados de operadores se facilita mediante el uso de los teoremas de “desenredo”. Éstos pueden utilizarse para construir funciones generatrices para los valores esperados de un operador. Así, el valor esperado de un operador \hat{A} en el estado $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|0\rangle$ puede escribirse como

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle 0 | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0) | 0 \rangle = \left. \frac{\partial}{\partial \gamma} \langle 0 | \hat{U}^\dagger(t, t_0) e^{\gamma \hat{A}} \hat{U}(t, t_0) | 0 \rangle \right|_{\gamma=0}. \quad (1.78)$$

Si bien el elemento de matriz del término de la izquierda depende de la elección de la representación (por ejemplo, el espacio de Fock), el producto de operadores en la parte de la derecha es sin embargo independiente de la representación, y por lo tanto puede llevarse a cabo en cualquier representación fiel, por ejemplo en la dada por (1.72).

$$\begin{array}{ccc} \hat{U}^\dagger(t, t_0) e^{\gamma \hat{A}} \hat{U}(t, t_0) & \rightarrow & \mathbf{M}^{-1} [\hat{U}(t, t_0)] \cdot \mathbf{M} [e^{\gamma \hat{A}}] \cdot \mathbf{M} [\hat{U}(t, t_0)] \\ & \downarrow & \downarrow \\ e^{Ra^{\dagger 2} + ra^\dagger} e^{\eta(\hat{n} + \frac{1}{2}) + \delta \hat{I}} e^{La^2 + la} & \leftarrow & \mathbf{M} [e^{R' a^{\dagger 2} + r' a^\dagger}] \cdot \mathbf{M} [e^{\eta'(\hat{n} + \frac{1}{2}) + \delta' \hat{I}}] \cdot \mathbf{M} [e^{L' a^2 + l' a}] \end{array}$$

El cálculo se lleva a cabo en la dirección de las flechas, y el resultado es una expresión válida en cualquier representación, en particular en el espacio de Fock. En general, si definimos la matriz \mathbf{N} como el resultado del producto matricial

$$\mathbf{M}^{-1} [\hat{U}(t, t_0)] \cdot \mathbf{M} [e^{\gamma \hat{A}}] \cdot \mathbf{M} [\hat{U}(t, t_0)] \equiv \mathbf{N},$$

el valor esperado en la ec. (1.78) vendrá dado por

$$\langle 0 | \hat{U}^\dagger(t, t_0) e^{\gamma \hat{A}} \hat{U}(t, t_0) | 0 \rangle = N_{33}(\gamma)^{-1/2} e^{\frac{1}{2} \left(\frac{N_{31}(\gamma) N_{43}(\gamma)}{N_{33}(\gamma)} - N_{41}(\gamma) \right)}. \quad (1.79)$$

1.3.2. Propiedades geométricas. Desarrollos en el espacio de Hilbert

Las propiedades de los estados coherentes tienen una interpretación dentro del formalismo de teoría de grupos que resulta bastante útil. Con respecto a las propiedades geométricas, es conveniente señalar que la definición $|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha, \alpha^*)|0\rangle$ establece una correspondencia biunívoca entre los estados coherentes $|\alpha\rangle$ y los puntos en el plano complejo α . Esta aplicación es continua, es decir, para cualquier ε dado, existe un δ tal que

$$||\alpha\rangle - |\alpha'\rangle| < \delta \quad \text{si } |\alpha - \alpha'| < \varepsilon. \quad (1.80)$$

Estas distancias están determinadas con respecto a las métricas intrínsecas, esto es, la métrica en la parte izquierda de la ec. (1.80) está determinada a partir del producto interno en el espacio de Hilbert, mientras que la de la parte derecha está determinada a partir de la métrica en el plano complejo.

El espacio en el que actúa el operador $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$ es un espacio complejo con una métrica diagonal, en el que la medida viene dada por $d\mu = d\alpha d\alpha^*$. Este espacio debe tener por tanto una *estructura*

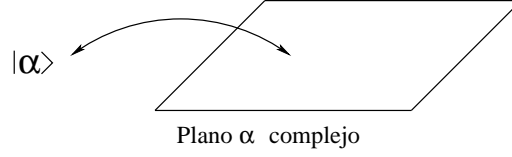


Figura 1.3: Correspondencia entre los estados coherentes $|\alpha\rangle$ y los puntos en el plano complejo α .

simpléctica.⁶ Con el cambio de variables (1.22)

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) \quad (1.81a)$$

$$\alpha^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip), \quad (1.81b)$$

la expresión estándar para la bi-forma es $\omega^2 = dq \wedge dp$, donde el símbolo \wedge denota producto exterior. La estructura simpléctica asociada a los estados coherentes proporciona un espacio de fases para un sistema mecánico hamiltoniano. Esta propiedad tiene consecuencias tan importantes como la conservación del volumen en el espacio de fases (teorema de Liouville).⁷ Es importante notar que la estructura simpléctica viene determinada por la estructura topológica del grupo dinámico asociado a los estados coherentes. Así, los campos vectoriales hamiltonianos en una variedad simpléctica forman un álgebra de Lie.⁸ y la operación en este álgebra es el corchete de Poisson. En el espacio de fases complejo α , el corchete de Poisson de dos funciones u y v definidas en dicho espacio se escribe como

$$\{f, g\} = -i \left(\frac{\partial u}{\partial \alpha} \frac{\partial v}{\partial \alpha^*} - \frac{\partial v}{\partial \alpha} \frac{\partial u}{\partial \alpha^*} \right), \quad (1.82)$$

que en términos de las variables canónicas q y p toma la forma clásica [Gol80]

$$\{f, g\} = \frac{\partial u}{\partial q} \frac{\partial v}{\partial p} - \frac{\partial v}{\partial q} \frac{\partial u}{\partial p}. \quad (1.83)$$

⁶Una estructura simpléctica sobre una variedad diferenciable de dimensión par M^{2n} es una forma diferencial de grado dos (o bi-forma), ω^2 , cerrada y no degenerada sobre M^{2n} , esto es, tal que

$$d\omega^2 = 0 \text{ (forma cerrada)} \quad \text{y} \quad \forall \xi \neq 0 \quad \exists \eta : \omega^2(\xi, \eta) \neq 0 \text{ (forma no degenerada),}$$

con $\xi, \eta \in TM_{\mathbf{x}}$ (donde $TM_{\mathbf{x}}$ es el espacio tangente a M en \mathbf{x}). El par (M^{2n}, ω^2) recibe el nombre de *variedad simpléctica*.

⁷Efectivamente, el flujo fásico de un campo vectorial hamiltoniano (definido como un campo vectorial correspondiente a la diferencial de una función llamada función hamiltoniana) *preserva la estructura simpléctica del espacio de fases* [Arn89]. Dicho de otra forma, la forma ω^2 que define la estructura simpléctica es un invariante integral de un flujo fásico hamiltoniano. Además, puesto que cada una de las formas $(\omega^2)^2 \equiv \omega^2 \wedge \omega^2$, $(\omega^2)^3 \equiv \omega^2 \wedge \omega^2 \wedge \omega^2$, etc. son invariantes integrales del flujo fásico hamiltoniano, si definimos los elementos de volumen en M^{2n} como $(\omega^2)^n$, podemos concluir que *el flujo fásico hamiltoniano preserva el volumen* (teorema de Liouville).

⁸Un álgebra de Lie es un espacio vectorial L , junto a una operación $L \times L \rightarrow L$ bilineal antisimétrica (que denotamos por $[\cdot, \cdot]$) que satisface la identidad de Jacobi: $[[A, B], C] + [[B, C], A] + [[C, A], B] = 0$.

Estas propiedades geométricas y la propiedad de sobrecompletitud (1.16) permiten desarrollar cualquier estado arbitrario $|\Psi\rangle$ en términos de los estados coherentes. El desarrollo del estado $|\Psi\rangle$ en la base completa de los estados de Fock

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n c_n \frac{a^{\dagger n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad (1.84)$$

con $\sum_n |c_n|^2 = 1$, permite definir una función $f(z)$ como

$$f(z) = \sum_n c_n \frac{z^n}{\sqrt{\hbar^n n!}}. \quad (1.85)$$

La condición de normalización sobre los coeficientes c_n hace que esta serie converja para todos los z finitos, y por tanto la función $f(z)$ es analítica en todo el plano z complejo. Proyectando la ec. (1.84) sobre la base de estados coherentes, se tiene

$$\langle \alpha | \Psi \rangle = \sum_n c_n \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{\hbar^n n!}} \langle \alpha | 0 \rangle \equiv e^{-|\alpha|^2/2\hbar} f(\alpha^*),$$

donde se ha tenido en cuenta la expresión (1.3b). Esto permite escribir el desarrollo del vector de estado $|\Psi\rangle$ en la base de estados coherentes como

$$|\Psi\rangle = \iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \langle \alpha | \Psi \rangle \equiv \iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{-|\alpha|^2/2\hbar} f(\alpha^*) |\alpha\rangle. \quad (1.86)$$

Existe por tanto una correspondencia única entre las funciones $f(\alpha^*)$ que desempeñan el papel de amplitudes de desarrollo en (1.86) y los vectores $|\Psi\rangle$ que describen el estado del sistema.

Como ya se ha mencionado, una interesante consecuencia de la no ortogonalidad de los estados coherentes es que éstos no son linealmente independientes entre sí, como pasaría con los miembros de un conjunto ortogonal completo. De esta forma, cualquier estado coherente puede ser expresado linealmente en términos de todos los demás, según se ha indicado en (1.18).

La base de estados coherentes permite desarrollar no sólo cualquier estado del espacio de Hilbert, sino también cualquier operador cuántico en función de ellos. En la base de estados de Fock, un operador genérico \hat{A} puede expresarse en términos de sus elementos de matriz $A_{nm} = \langle n | \hat{A} | m \rangle$ mediante

$$\hat{A} = \sum_{nm} |n\rangle \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m| = \sum_{nm} A_{nm} \frac{1}{\sqrt{n!m!}} a^{\dagger n} |0\rangle \langle 0| a^m. \quad (1.87)$$

Haciendo uso de esta expresión de \hat{A} para calcular el elemento de matriz que conecta los estados coherentes $\langle \alpha |$ y $|\beta\rangle$ se tiene

$$\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle = \sum_{nm} A_{nm} \frac{\alpha^{*n} \beta^m}{\sqrt{\hbar^{(n+m)} n! m!}} \langle \alpha | 0 \rangle \langle 0 | \beta \rangle \equiv \mathcal{A}(\alpha^*, \beta) e^{\frac{-1}{2\hbar}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)}, \quad (1.88)$$

donde la función $\mathcal{A}(\alpha^*, \beta)$ se define como la doble serie

$$\mathcal{A}(\alpha^*, \beta) = \sum_{nm} A_{nm} \frac{\alpha^{*n} \beta^m}{\sqrt{\hbar^{(n+m)} n! m!}}, \quad (1.89)$$

que converge en los planos complejos α^* y β y representa por tanto una *función analítica* de ambas variables. Esta función determina de forma completa el desarrollo del operador \hat{A} en la base de estados coherentes, que puede escribirse como

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \iiint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \langle \alpha|\hat{A}|\beta\rangle \langle \beta| \\ &= \iiint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} e^{\frac{-1}{2\hbar}(|\alpha|^2+|\beta|^2)} |\alpha\rangle \mathcal{A}(\alpha^*, \beta) \langle \beta|.\end{aligned}\quad (1.90)$$

Todas estas expresiones pueden simplificarse adoptando una forma para la normalización de estados coherentes distinta de la convencional. Se introducen así un nuevo tipo de estados coherentes que denotaremos por $|\alpha\rangle$ llamados *estados de Bargmann* [Bar61] o *estados coherentes no normalizados*, definidos por

$$|\alpha\rangle \equiv e^{\frac{|\alpha|^2}{2\hbar}} |\alpha\rangle. \quad (1.91)$$

El producto escalar de estos estados puede obtenerse a partir de la expresión (1.14) para $\langle \alpha|\beta\rangle$ y viene dado por

$$\langle \alpha|\beta\rangle = e^{\frac{1}{\hbar}\alpha^*\beta}. \quad (1.92)$$

Bargmann introduce un elemento de medida dado por

$$d\mu(\alpha) \equiv \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{\frac{-1}{\hbar}|\alpha|^2}, \quad (1.93)$$

de manera que, con estos cambios, todas las gaussianas y los factores $\pi\hbar$ de las expresiones anteriores quedan absorbidos en la notación, simplificándose considerablemente. Así por ejemplo, el desarrollo (1.86) de un vector de estado en la base de estados de Bargmann puede escribirse como

$$|\Psi\rangle = \iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{\frac{-1}{\hbar}|\alpha|^2} f(\alpha^*) |\alpha\rangle \equiv \iint d\mu(\alpha) f(\alpha^*) |\alpha\rangle,$$

mientras que la representación del operador \hat{A} en el espacio de fases, dada por (1.90), toma la forma

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \iiint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} e^{\frac{-1}{\hbar}(|\alpha|^2+|\beta|^2)} |\alpha\rangle \mathcal{A}(\alpha^*, \beta) \langle \beta| \\ &\equiv \iiint d\mu(\alpha) d\mu(\beta) |\alpha\rangle \mathcal{A}(\alpha^*, \beta) \langle \beta|,\end{aligned}$$

con $\mathcal{A}(\alpha^*, \alpha') = \langle \alpha|\hat{A}|\alpha'\rangle$.

En este trabajo se obtendrán expresiones semiclásicas de magnitudes cuánticas en la representación de estados de Bargmann $\{|\alpha\rangle\}$. No obstante, hemos preferido no hacer uso de la medida de Bargmann $d\mu(\alpha)$ dada por (1.93), de manera que mantendremos los términos gaussianos que aparecen en las expresiones integrales.

1.3.3. Distribuciones en el espacio de fases

El conocimiento que tenemos de la condición de un sistema cuántico raras veces es suficientemente explícito en la práctica como para permitir su especificación por un estado cuántico. En su lugar, debemos describirlo en términos de una mezcla estadística de estados expresada mediante un operador densidad $\hat{\rho}(t)$ definido como

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k p_k |\Psi_k(t)\rangle \langle \Psi_k(t)| = \sum_k p_k \hat{\rho}_k(t), \quad (1.94)$$

donde los coeficientes p_k representan las probabilidades de encontrar al sistema en el estado $|\Psi_k(t)\rangle$ y cumplen $\sum_k p_k = 1$. En términos de este operador, el valor medio de un observable \hat{B} en el instante t viene dado por la traza

$$\langle \hat{B} \rangle(t) = \text{Tr} \{ \hat{\rho}(t) \hat{B} \}. \quad (1.95)$$

El operador densidad es un operador positivo, y la conservación de la probabilidad impone la condición

$$\text{Tr} \hat{\rho} = 1. \quad (1.96)$$

Finalmente, la evolución temporal de este operador puede obtenerse a partir de la ecuación de Schrödinger, y viene dada por la llamada *ecuación de von Neumann*, también llamada *ecuación cuántica de Liouville*:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]. \quad (1.97)$$

En mecánica estadística clásica, la evolución temporal de un sistema de muchas partículas puede analizarse estudiando la evolución en el espacio de fases de una función densidad $\rho(p, q; t)$. La interpretación probabilística de esta función permite evaluar el promedio de una variable dinámica $B(p, q)$ mediante la integral

$$\langle B \rangle(t) = \iint dp dq B(p, q) \rho(p, q; t) \quad (1.98)$$

extendida a todo el espacio de fases clásico (p, q) accesible al sistema. La formulación de la mecánica cuántica en el espacio de fases [Bal84, Hil84, Lee95] pretende utilizar un lenguaje parecido al de la mecánica estadística clásica, con lo que se consigue establecer una comparación cuántico-clásica de una manera muy directa. Su principal ventaja radica en el tratamiento de ecuaciones que involucran funciones escalares, y no operadores. El objetivo consiste en encontrar unas funciones $B(p, q)$ y $F(p, q; t)$ asociadas a los operadores \hat{B} y $\hat{\rho}$, respectivamente, de forma que el valor medio (1.95) pueda obtenerse *de forma exacta* mediante una integral análoga a (1.98):

$$\langle \hat{B} \rangle(t) = \text{Tr} \{ \hat{\rho}(\hat{p}, \hat{q}; t) \hat{B}(\hat{p}, \hat{q}) \} = \iint dp dq F(p, q; t) B(p, q). \quad (1.99)$$

La función $B(p, q)$, llamada *símbolo* o *representación* del operador \hat{B} en el espacio de fases (p, q) , se obtiene reemplazando los operadores \hat{p} y \hat{q} en la expresión de \hat{B} por las variables clásicas p y q . Es

evidente que no existe una manera única de definir una *función de distribución* $F(p, q; t)$ en el espacio de fases cuántico, debido a la no conmutatividad de los operadores cuánticos y debido en última instancia al principio de indeterminación de Heisenberg, que establece la imposibilidad de definir una función de probabilidad en un punto (p, q) del espacio de fases.⁹ La elección de una función de distribución u otra no es una simple cuestión de gusto, y dependerá, como veremos, del tipo de problema a estudiar. De hecho, en muchos casos el conseguir o no una descripción adecuada del fenómeno a estudiar depende en gran medida de la función de distribución elegida. Por ejemplo, en óptica cuántica habitualmente es necesario evaluar valores esperados de productos de operadores ordenados de forma normal, por lo cual suele hacerse uso de la función de distribución de Glauber-Sudarshan. Por otro lado, en la descripción en el espacio de fases de procesos de colisión suele utilizarse la función de Wigner. Finalmente, el estudio de la evolución temporal de sistemas cuánticos con análogo clásico caótico puede llevarse a cabo siguiendo la evolución en el espacio de fases de la función de Husimi, cuyo comportamiento es mucho más regular y su estructura mucho más suave que la función de Wigner. En cualquier caso, sea cual sea la función de distribución utilizada, el valor medio (1.99) no dependerá de dicha elección, y deberá coincidir para las distintas elecciones de $B(p, q)$ y de $F(p, q; t)$.

Las funciones de distribución cuánticas $F(p, q; t)$ no pueden considerarse como distribuciones de probabilidad en un sentido estricto, ya que pueden tomar valores negativos (con la excepción, como veremos, de la distribución Q y la de Husimi). Por este motivo se suele referir a ellas en términos de distribuciones de *cuasiprobabilidad*. A pesar de esto, y puesto que la formulación de la mecánica cuántica en el espacio de fases tiene como principal ventaja proporcionar un marco en el que los fenómenos cuánticos puedan interpretarse en términos clásicos y se ponga de manifiesto la correspondencia cuántico-clásica, es conveniente que estas distribuciones de “cuasiprobabilidad” compartan todas las propiedades posibles con las distribuciones de probabilidad clásicas. Algunas de las propiedades que la función de distribución

⁹Por ejemplo, supongamos que deseamos calcular el valor esperado del operador $e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}}$, siendo ξ y η constantes arbitrarias. Según la ec. (1.99), la función de distribución $F(p, q; t)$ debería satisfacer la ecuación

$$\text{Tr} \{ \hat{\rho} e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}} \} = \iint dp dq F(p, q; t) e^{i\xi q+i\eta p}.$$

Si, por otra parte, quisiéramos calcular el valor esperado de otro operador $e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}}$, obtendríamos

$$\text{Tr} \{ \hat{\rho} e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}} \} = \iint dp dq \bar{F}(p, q; t) e^{i\xi q+i\eta p}.$$

Comparando estas dos expresiones vemos que las funciones de distribución F y \bar{F} no pueden ser la misma, ya que, como sabemos, los dos operadores exponenciales no son iguales, estando relacionados por la relación BCH

$$e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}} = e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}}e^{i\hbar\xi\eta/2}.$$

La dificultad radica en que no existe una forma única de asignar un operador cuántico a una función clásica de variables conjugadas dada. En este ejemplo, a pesar de que la función escalar $e^{i\xi q+i\eta p}$ pueda escribirse igualmente como $e^{i\xi q}e^{i\eta p}$, las expresiones correspondientes para los conmutadores, $e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}}$ y $e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}}$ no son equivalentes, debido a que los operadores \hat{q} y \hat{p} no conmutan.

$F(p, q; t)$ debería cumplir con las siguientes:

- (i) Que sea bilineal en Ψ .
- (ii) Que sea real para todos los valores de q , p y t .
- (iii) Que sea no negativa.
- (iv) Que cumpla las distribuciones marginales cuánticas correctas, esto es, que satisfaga las propiedades

$$\int dp F(p, q; t) = \langle q | \hat{p} | q \rangle \quad (1.100)$$

$$\int dq F(p, q; t) = \langle p | \hat{p} | p \rangle, \quad (1.101)$$

o bien, en el caso de un estado puro,

$$\int dp F(p, q; t) = |\Psi(q, t)|^2 \quad (1.102)$$

$$\int dq F(p, q; t) = |\tilde{\Psi}(p, t)|^2, \quad (1.103)$$

donde $\tilde{\Psi}(p, t)$ es la función de onda en el espacio de momentos:

$$\tilde{\Psi}(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dq \Psi(q, t) e^{-ipq/\hbar}. \quad (1.104)$$

Las funciones de distribución más usuales cumplen sólo algunas de estas propiedades. Por ejemplo, las distribuciones Q y de Husimi son positivas, pero no cumplen las distribuciones marginales, mientras que la función de Wigner, cumple la propiedad (iv) pero tiene el inconveniente de tomar valores negativos. Esto hace que no exista una función de distribución que sea estrictamente “mejor” que las demás; por el contrario, como se ha mencionado, cada una de ellas resulta adecuada en la descripción de distinto tipo de fenómenos cuánticos.

La representación R

El desarrollo en el espacio de fases para los operadores dado por (1.90) hace uso de una resolución de la identidad no diagonal, y permite definir la llamada *representación R* del operador densidad. En esta representación, el operador $\hat{\rho}$ se expresa de forma única en términos de una función analítica de dos variables complejas, $\mathcal{R}(\alpha^*, \beta)$, como

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \iiint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \langle \alpha | \hat{\rho} | \beta\rangle \langle \beta| \\ &= \iiint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \mathcal{R}(\alpha^*, \beta) e^{\frac{1}{2\hbar}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} \langle \beta|, \end{aligned} \quad (1.105)$$

donde

$$\mathcal{R}(\alpha^*, \beta) = \langle \alpha | \hat{\rho} | \beta \rangle e^{\frac{1}{2\hbar}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} = \sum_{nm} \rho_{nm} \frac{\alpha^{*n} \beta^m}{\sqrt{\hbar^{(n+m)} n! m!}}. \quad (1.106)$$

La normalización del operador densidad, ec. (1.96), impone la siguiente condición sobre la función $\mathcal{R}(\alpha^*, \beta)$:

$$\begin{aligned} 1 &= \iiint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} \mathcal{R}(\alpha^*, \beta) e^{\frac{-1}{2\hbar}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} \langle \beta | \alpha \rangle \\ &= \iiint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} \mathcal{R}(\alpha^*, \beta) e^{\frac{-1}{\hbar}(|\alpha|^2 + |\beta|^2 - \beta^*\alpha)}. \end{aligned} \quad (1.107)$$

Puesto que $\mathcal{R}(\alpha^*, \beta)$ es una función entera de la variable α^* , según indica el desarrollo (1.106), puede calcularse la integral en el plano complejo α , de forma que la condición de normalización sobre \mathcal{R} se reduce a ¹⁰

$$\iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \mathcal{R}(\alpha^*, \alpha) e^{\frac{-1}{\hbar}|\alpha|^2} = 1. \quad (1.108)$$

La función $\mathcal{R}(\alpha^*, \alpha')$ es analítica en α^* y α' (y por consiguiente no singular) y por definición es no-positiva. La ec. (1.108) muestra que la normalización de esta función incluye un factor de peso gaussiano. Por estas razones, esta función no puede tener una ecuación de tipo Fokker-Planck o cualquier interpretación directa como cuasiprobabilidad.

La representación P

La representación R dada por la ec. (1.105), si bien constituye una expresión muy general para el operador densidad, no es imprescindible para la descripción de los campos de radiación usuales en óptica cuántica. De hecho, una gran mayoría de ellos pueden ser descritos mediante una reducción de la expresión (1.105) a su forma diagonal. La llamada *representación P* o de *Glauber-Sudarshan*, introducida de forma independiente por estos autores [Gla63c, Sud63] ha sido ampliamente utilizada en óptica cuántica, y en ella el operador densidad se escribe como

$$\hat{\rho} = \iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) \langle \alpha|, \quad (1.109)$$

donde $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$ es la *representación P de la matriz densidad* o la función de distribución P del operador densidad.

En esta representación, el promedio estadístico de un operador $\hat{B}(a, a^\dagger)$ con ordenación *normal* o de Wick (esto es, con todos los operadores de creación a^\dagger situados a la izquierda de los operadores de

¹⁰Este resultado puede demostrarse a partir de la relación

$$\int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{(\gamma^*\alpha - |\alpha|^2)/\hbar} \alpha^{*n} = \gamma^{*n},$$

o, en general,

$$\int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{(\gamma^*\alpha - |\alpha|^2)/\hbar} f(\alpha^*) = f(\gamma^*).$$

aniquilación a)

$$\hat{B}(a, a^\dagger) = \sum_{n,m} c_{nm}^N a^{\dagger n} a^m, \quad (1.110)$$

puede obtenerse fácilmente como

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}(a, a^\dagger) \rangle &= \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{B}(a, a^\dagger) \} = \text{Tr} \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) \langle \alpha | \hat{B}(a, a^\dagger) \\ &= \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) \langle \alpha | \hat{B}(a, a^\dagger) | \alpha \rangle \equiv \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) \mathcal{B}_Q(\alpha^*, \alpha), \end{aligned} \quad (1.111)$$

donde

$$\mathcal{B}_Q(\alpha^*, \alpha) \equiv \langle \alpha | \hat{B}(a, a^\dagger) | \alpha \rangle = \sum_{n,m} c_{nm}^N \hbar^{-(n+m)/2} \alpha^{*n} \alpha^m \quad (1.112)$$

es la *función normal asociada al operador* $\hat{B}^N(a, a^\dagger)$, también llamada *símbolo* Q del operador \hat{B} . (La justificación del subíndice Q será dada en el siguiente apartado). Formalmente, la función $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$ puede escribirse como

$$\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} \delta\left(\frac{\alpha^*}{\sqrt{\hbar}} - a^\dagger\right) \delta\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} - a\right) \right\},$$

y puede obtenerse como la transformada de Fourier de la *función característica con ordenación normal* $\chi_N(\eta)$:

$$\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) = \int \int \frac{d^2\eta}{\pi\hbar} e^{(\eta^* \alpha - \alpha^* \eta)/\hbar} \chi_N(\eta), \quad (1.113)$$

donde

$$\chi_N(\eta) = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} e^{\frac{1}{\sqrt{\hbar}} \eta a^\dagger} e^{-\frac{1}{\sqrt{\hbar}} \eta^* a} \right\}.$$

La condición (1.96) proporciona la condición de normalización para la función $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$:

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \text{Tr} \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) \langle \alpha| = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) = 1. \quad (1.114)$$

Tanto Glauber [Gla63c] como Sudarshan [Sud63] mostraron que la representación P existe para una amplia clase de operadores densidad. De hecho, Klauder [Kla65] ha demostrado que dicha representación P existe para cualquier operador densidad $\hat{\rho}$ siempre que se le permita ser una función generalizada suficientemente singular. La ec. (1.111) indica que la función $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$ podría ser interpretada como una distribución de probabilidad para las variables α y α^* , en el sentido de que las medias de productos de operadores con ordenación normal son momentos simples de $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$:

$$\sum_{n,m} c_{nm}^N \langle a^{\dagger n} a^m \rangle = \sum_{n,m} c_{nm}^N \hbar^{-(n+m)/2} \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) \alpha^{*n} \alpha^m.$$

Sin embargo, esta interpretación probabilística no es siempre correcta, ya que los operadores de proyección $|\alpha\rangle \langle \alpha|$ con los que $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$ está asociada no son ortogonales entre sí para distintos valores de α y α^* . Según hemos visto, [ec. (1.15)], dos estados coherentes $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$ son aproximadamente ortogonales

cuando $|\alpha - \beta| \gg 1$, esto es, cuando sus paquetes de onda no se solapan entre sí. En estos rangos de los parámetros α y α^* , la función $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$ varía lentamente y podrá ser interpretada en un sentido aproximado como una densidad de probabilidad. Existen, sin embargo, ciertos estados cuánticos para los que $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$ puede tomar valores negativos o volverse altamente no singular, por ejemplo ciertos estados del campo de radiación. Para estos campos no existe una descripción clásica y $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$ no puede ser interpretada como una distribución de probabilidad clásica.

Se puede demostrar que la representación P para un estado coherente $|\alpha_0\rangle$ viene dada simplemente por un punto en el espacio de fases:

$$\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) = \hbar \delta^{(2)}(\alpha - \alpha_0) \equiv \hbar \delta(\alpha - \alpha_0) \delta(\alpha^* - \alpha_0^*). \quad (1.115)$$

Sin embargo, para un estado de Fock $|n\rangle$ no existe una forma funcional para la función P , y la solución viene dada en términos de derivadas de funciones delta:

$$\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) = \hbar^{n+1} \frac{e^{|\alpha|^2/\hbar}}{n!} \left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*} \right)^n \delta^{(2)}(\alpha) \equiv \hbar^{n+1} \frac{e^{|\alpha|^2/\hbar}}{n!} \frac{\partial^{2n}}{\partial \alpha^n \partial \alpha^{*n}} \delta(\alpha) \delta(\alpha^*). \quad (1.116)$$

Para $n > 0$, está claro que este resultado no es una función definida positiva, de modo que un estado número no tiene una representación P bien definida. En general, cuando la distribución de fotones ρ_{nm} es más estrecha que la distribución de Poisson, como es el caso de los estados de Fock, la función $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$ tiene un mal comportamiento. Este es el precio que debe pagarse por, digamos, forzar la física cuántica a tener un formato clásico, esto es, por utilizar la función $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$ en lugar de $\mathcal{R}(\alpha^*, \alpha')$. Esta expresión formal es un ejemplo del tipo de función generalizada propuesta por Klauder y Sudarshan.¹¹

La representación Q

La *representación Q* [Gla65, Meh65] del operador densidad se define simplemente como sus elementos de matriz diagonales en un estado coherente puro:

$$Q(\alpha^*, \alpha) = \langle \alpha | \hat{\rho} | \alpha \rangle. \quad (1.117)$$

[Es frecuente encontrar un factor $1/\pi$ en otras definiciones de la función de distribución Q , de la misma forma que suele definirse la función P como $\int d^2\alpha/\hbar |\alpha\rangle \mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) \langle \alpha|$, sin el factor π que aparece en (5.76a)]. Esta función puede escribirse como

$$Q(\alpha^*, \alpha) = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} \delta\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} - a\right) \delta\left(\frac{\alpha^*}{\sqrt{\hbar}} - a^\dagger\right) \right\}, \quad (1.118)$$

¹¹En general, operador densidad puede expresarse como una serie infinita del tipo $\hat{\rho} = \sum_{nm} c_{nm} |n\rangle \langle m|$, donde los coeficientes c_{nm} son complejos. Puede obtenerse una expresión formal del operador densidad en función de este tipo de términos utilizando el resultado (1.116). Klauder y Sudarshan demostraron que la expresión resultante converge.

y obtenerse como transformada de Fourier de una *función característica con ordenación antinormal* $\chi_A(\eta)$:

$$Q(\alpha^*, \alpha) = \iint \frac{d^2\eta}{\pi\hbar} e^{(\eta^*\alpha - \alpha^*\eta)/\hbar} \chi_A(\eta), \quad (1.119)$$

con

$$\chi_A(\eta) = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} e^{-\frac{1}{\sqrt{\hbar}}\eta^*a} e^{\frac{1}{\sqrt{\hbar}}\eta a^\dagger} \right\}. \quad (1.120)$$

En esta representación, el promedio estadístico de un operador $\hat{B}(a, a^\dagger)$ con ordenación *antinormal*, esto es, tal que todos los operadores de creación están situados a la derecha de los operadores de destrucción

$$\hat{B}(a, a^\dagger) = \sum_{n,m} c_{nm}^A a^n a^{\dagger m}, \quad (1.121)$$

viene dado por

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}(a, a^\dagger) \rangle &= \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{B}(a, a^\dagger) \} = \text{Tr} \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \mathcal{B}_P(\alpha^*, \alpha) \langle \alpha| \hat{\rho} \\ &= \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \mathcal{B}_P(\alpha^*, \alpha) \langle \alpha| \hat{\rho} |\alpha\rangle = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \mathcal{B}_P(\alpha^*, \alpha) Q(\alpha^*, \alpha), \end{aligned} \quad (1.122)$$

donde $\mathcal{B}_P(\alpha^*, \alpha)$ es la representación P del operador \hat{B} :

$$\hat{B} = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \mathcal{B}_P(\alpha^*, \alpha) \langle \alpha|,$$

también llamada *símbolo P* del operador \hat{B} , dado por

$$\mathcal{B}_P(\alpha^*, \alpha) = \sum_{n,m} c_{nm}^A \hbar^{-(n+m)/2} \alpha^n \alpha^{*m}.$$

De esta forma, comparando las ecs. (1.111) y (1.122), se observa que el valor medio del observable \hat{B} puede ser evaluado en el espacio de fases como una combinación de las representaciones P y Q , haciendo uso de la distribución $\mathcal{P}(\alpha^*, \alpha)$ si escribimos \hat{B} en forma normal, o bien mediante $Q(\alpha^*, \alpha)$ si lo escribimos en forma antinormal:

$$\langle \hat{B} \rangle = \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{B} \} = \iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \mathcal{P}(\alpha^*, \alpha) \mathcal{B}_Q(\alpha^*, \alpha) = \iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} Q(\alpha^*, \alpha) \mathcal{B}_P(\alpha^*, \alpha). \quad (1.123)$$

(Por supuesto, el operador \hat{B} puede escribirse alternativamente en forma normal o antinormal sin más que hacer uso sucesivas veces de la relación de conmutación $[a, a^\dagger] = 1$).

La función Q tiene la ventaja de existir para estados para los que no existe la función P y, a diferencia de ésta (y, como veremos, también de la de Wigner), es siempre positiva. Por supuesto, está normalizada a la unidad

$$\iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} Q(\alpha^*, \alpha) = 1 \quad (1.124)$$

y, además, está acotada por

$$Q(\alpha^*, \alpha) \leq 1. \quad (1.125)$$

En este sentido, su interpretación como densidad de probabilidad es más directa que la de la función P . La función Q para un estado coherente $|\alpha_0\rangle$ viene dada por una gaussiana centrada en α_0 :

$$Q(\alpha^*, \alpha) = |\langle \alpha | \alpha_0 \rangle|^2 = e^{-|\alpha - \alpha_0|^2 / \hbar}. \quad (1.126)$$

Para un estado de Fock $|n\rangle$ se tiene

$$Q(\alpha^*, \alpha) = |\langle \alpha | n \rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n} e^{-|\alpha|^2 / \hbar}}{\hbar^n n!}. \quad (1.127)$$

A diferencia de la función P para un estado de Fock, la función Q se comporta de forma adecuada.

La distribución de Wigner

De la misma manera en que hemos obtenido las distribuciones P y Q como transformadas de Fourier de las funciones características con ordenación normal $\chi_N(\eta)$ y antinormal $\chi_A(\eta)$, respectivamente, podemos definir la *distribución de Wigner*, $\mathcal{W}(\alpha^*, \alpha)$, [Wig32, Wig71] en términos de una función característica con ordenación simétrica, $\chi_S(\eta)$ mediante

$$\mathcal{W}(\alpha^*, \alpha) = \iint \frac{d^2\eta}{\pi\hbar} e^{(\eta^*\alpha - \alpha^*\eta)/\hbar} \chi_S(\eta), \quad (1.128)$$

donde

$$\chi_S(\eta) = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} e^{\frac{1}{\sqrt{\hbar}}(\eta a^\dagger - \eta^* a)} \right\}. \quad (1.129)$$

La función de Wigner puede utilizarse para evaluar valores esperados de operadores $\hat{B}^S(a, a^\dagger)$ ordenados simétricamente:

$$\langle \hat{B}^S(a, a^\dagger) \rangle = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} \hat{B}^S(a, a^\dagger) \right\} = \iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \mathcal{W}(\alpha^*, \alpha) \mathcal{B}_W^S(\alpha^*, \alpha), \quad (1.130)$$

donde $\mathcal{B}_W^S(\alpha^*, \alpha)$ es el llamado *símbolo de Weyl* del operador $\hat{B}^S(a, a^\dagger)$, dado por la inversa de la conocida transformación de Weyl [Wey27]¹². La expresión (1.130), a diferencia de la ec. (1.123), es una expresión

¹²Por “ordenación simétrica” queremos indicar ordenación de acuerdo a la regla de asociación de Weyl. Una de las formas de enunciarla consiste en escribir todas las posibles ordenaciones de los monomios $a^n a^{*m}$ y luego considerar el promedio de todos ellos. Otra manera de definir el llamado *operador de Weyl* \hat{A}_W correspondiente a una función clásica $A(q, p)$ consiste en desarrollar esta función como una integral de Fourier

$$A(q, p) = \iint d\sigma d\tau c(\sigma, \tau) e^{i(\sigma q + \tau p)},$$

de forma que el operador de Weyl asociado viene dado por

$$\hat{A}_W(\hat{q}, \hat{p}) = \iint d\sigma d\tau c(\sigma, \tau) e^{i(\sigma \hat{q} + \tau \hat{p})}.$$

diagonal, en el sentido de que el cálculo de valores esperados de un operador se obtiene dentro de la misma representación, y no como combinación de dos distintas.

Históricamente, la función de Wigner fue la primera distribución de cuasiprobabilidad, introducida por E. P. Wigner en 1932 [Wig32]. La formulación original fue llevada a cabo en el espacio de fases ordinario (p, q) y en ella $\mathcal{W}(p, q; t)$ se define como

$$\mathcal{W}(p, q; t) = \frac{1}{2\pi} \int d\eta e^{-i\eta p} \langle q + \frac{\eta\hbar}{2} | \hat{\rho}(t) | q - \frac{\eta\hbar}{2} \rangle. \quad (1.131)$$

En el caso de un estado puro, $\hat{\rho}(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$ y esta función se escribe como

$$\mathcal{W}(p, q; t) = \frac{1}{2\pi} \int d\eta e^{-i\eta p} \Psi^*(q - \frac{\eta\hbar}{2}, t) \Psi(q + \frac{\eta\hbar}{2}, t) \quad (1.132)$$

o bien, escribiendo $x = \eta\hbar/2$,

$$\mathcal{W}(p, q; t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int dx e^{-2ixp/\hbar} \Psi^*(q - x, t) \Psi(q + x, t). \quad (1.133)$$

La función de Wigner está acotada por

$$|\mathcal{W}(p, q)| \leq \frac{1}{\pi\hbar} \quad (1.134)$$

y cumple las distribuciones marginales correctas:

$$\int dp \mathcal{W}(p, q; t) = \langle q | \hat{\rho}(t) | q \rangle = |\Psi(q, t)|^2 \quad (1.135)$$

$$\int dq \mathcal{W}(p, q; t) = \langle p | \hat{\rho}(t) | p \rangle = |\tilde{\Psi}(p, t)|^2, \quad (1.136)$$

donde las segundas igualdades se cumplen para el caso de un estado puro. Esta última propiedad ha convertido a la función de Wigner en una de las distribuciones más utilizadas en una amplia variedad de problemas físicos, a pesar de tener el inconveniente de no cumplir con el requerimiento de ser una función definida positiva [Lei98].

La función de Wigner para un estado coherente $|\alpha_0\rangle$ viene dada por la gaussiana

$$\mathcal{W}(\alpha, \alpha^*) = \frac{2}{\pi} e^{-\frac{2}{\hbar}|\alpha - \alpha_0|^2}, \quad (1.137)$$

mientras que para un estado número $|n\rangle$ toma la forma

$$\mathcal{W}(\alpha, \alpha^*) = \frac{2}{\pi} (-1)^n e^{-\frac{2}{\hbar}|\alpha|^2} L_n\left(\frac{4}{\hbar}|\alpha|^2\right), \quad (1.138)$$

donde L_n es el polinomio de Laguerre de orden n . Vemos que esta función de Wigner claramente toma valores negativos.

La relación entre $A(q, p)$ y \hat{A}_W , dada por la inversa de la transformación de Weyl, coincide precisamente con la prescripción dada por Wigner:

$$A(q, p) = \int ds e^{ips/\hbar} \langle q - \frac{s}{2} | \hat{A}_W | q + \frac{s}{2} \rangle.$$

En la práctica, el símbolo de Weyl de un operador $\hat{A}(\hat{q}, \hat{p})$ se obtiene escribiendo $\hat{A}(\hat{q}, \hat{p})$ en el orden dado por la regla de asociación de Weyl y reemplazando \hat{q} por q y \hat{p} por p .

Conexión entre las distribuciones P , Q y de Wigner. La función de distribución de Husimi

Como hemos indicado, la utilización de una función de distribución u otra debe conducir a los mismos resultados en el cálculo de valores esperados de operadores cuánticos. Puede demostrarse que la relación existente entre las funciones características con ordenación normal, antinormal y simétrica

$$e^{|\eta|^2/2\hbar} \chi_A(\eta) = \chi_S(\eta) = e^{-|\eta|^2/2\hbar} \chi_N(\eta) \quad (1.139)$$

proporciona las siguientes conexiones entre las funciones de distribución en las representaciones P , Q y de Wigner:

$$Q(\alpha, \alpha^*) = 2 \iint \frac{d^2\alpha'}{\pi\hbar} e^{-\frac{2}{\hbar}|\alpha' - \alpha|^2} \mathcal{W}(\alpha', \alpha'^*) \quad (1.140a)$$

$$\mathcal{W}(\alpha, \alpha^*) = 2 \iint \frac{d^2\alpha'}{\pi\hbar} e^{-\frac{2}{\hbar}|\alpha' - \alpha|^2} \mathcal{P}(\alpha', \alpha'^*) \quad (1.140b)$$

$$Q(\alpha, \alpha^*) = \iint \frac{d^2\alpha'}{\pi\hbar} e^{-\frac{1}{\hbar}|\alpha' - \alpha|^2} \mathcal{P}(\alpha', \alpha'^*). \quad (1.140c)$$

Así, la función Q se obtiene al “suavizar” la función de Wigner con un paquete de ondas gaussiano correspondiente a un estado coherente, y a su vez la función de Wigner se obtiene a partir de la convolución de la función P con un paquete gaussiano. En otras palabras, el proceso de suavizado con un paquete de ondas gaussiano proporciona un puente de transición desde la función P a la de Wigner, y finalmente a la función Q . Puesto que el efecto que tiene este suavizado gaussiano es el de eliminar o por lo menos reducir las fluctuaciones rápidas de una distribución, puede entenderse por qué la función P es singular la mayoría de las veces, mientras que la función Q es de estas distribuciones la que muestra un comportamiento más regular. Sin embargo, es importante resaltar que, a pesar de este suavizado gaussiano, las tres funciones de distribución \mathcal{P} , Q y \mathcal{W} contienen *la misma cantidad de información física relevante*, puesto que son capaces de proporcionar el valor esperado de cualquier operador cuántico arbitrario asociado a una magnitud físicamente observable. Así pues, aparentemente no se produce ninguna pérdida de información físicamente significativa mediante el proceso de suavizado gaussiano.

La ec. (1.140a) permite definir una clase más general de funciones de distribución definidas a partir de un suavizado gaussiano de la función de Wigner, que incluyen a la función Q como un caso especial. Se trata de la *función de Husimi* [Hus40, Raj83], obtenida a partir de la convolución de la función de Wigner con un paquete de ondas gaussiano de mínima incertidumbre, ϕ_{qp} , esto es, tal que $\Delta q \Delta p = \hbar/2$. La ec. (5.76b) permite escribir la función de Husimi como

$$\mathcal{F}_H(\alpha, \alpha^*) = \langle \phi_{qp} | \hat{\rho} | \phi_{qp} \rangle, \quad (1.141)$$

o bien, para el caso de un estado puro:

$$\mathcal{F}_H(\alpha, \alpha^*) = |\langle \phi_{qp} | \Psi \rangle|^2. \quad (1.142)$$

Esta convolución de la función de Wigner con una gaussiana tiene el efecto de eliminar las violentas oscilaciones que muestra $\mathcal{W}(\alpha, \alpha^*)$, dando como resultado una función $\mathcal{H}(\alpha, \alpha^*)$ que no sólo muestra un comportamiento mucho más regular y una estructura más suave que la anterior, sino que tiene la ventaja de tomar siempre valores no negativos [Car76]. Estas propiedades permiten una mejor descripción de la correspondencia entre las dinámicas cuántica y clásica, sobre todo en sistemas cuánticos cuyo análogo clásico es caótico, debido a la complicada estructura del espacio de fases clásico en estos sistemas, con zonas regulares correspondientes al movimiento integrable en los toros KAM rodeadas de un mar caótico en el que órbitas homoclínicas conectan puntos hiperbólicos. Para estos sistemas, la formulación en el espacio de fases constituye una herramienta muy instructiva para la comparación cuántico-clásica, al proporcionar una representación visual de la evolución de las funciones de distribución mediante curvas de nivel. El motivo por el que el uso de funciones de Husimi en el estudio de sistemas dinámicos no lineales se ha extendido tanto en los últimos años [Tak85, Tak86a, Tak86b, Tak89] se debe a que la función de Wigner para estos sistemas muestra patrones muy complicados que se deben a las fuertes oscilaciones que sufre esta función, mientras que la función de Husimi muestra por lo general una estructura mucho más simple, siendo más fácil de interpretar físicamente. El hecho de que no se pierda información en la convolución de la función de Wigner se debe a que este suavizado gaussiano tiene la misma naturaleza que el *coarse-graining* involucrado en los procesos observacionales cuánticos [Oco83, Tak89]. En las observaciones cuánticas no se pueden resolver estructuras a una escala más fina que la permitida por el principio de indeterminación de Heisenberg. Son precisamente estas variaciones tan finas (de orden \hbar) las que se eliminan al suavizar la función de Wigner con un paquete de ondas de mínima incertidumbre. Hemos de hacer hincapié en que la formulación en el espacio de fases de la mecánica cuántica no involucra ninguna aproximación, y los valores esperados de observables cuánticos calculados con cualquiera de las funciones de distribución propuestas son resultados *exactos*.

Finalmente, nótese que las relaciones integrales (1.140) entre las funciones de distribución en el espacio de fases pueden expresarse también en forma diferencial como

$$\mathcal{W}(\alpha, \alpha^*) = e^{-\frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*}} Q(\alpha, \alpha^*) \quad (1.143a)$$

$$\mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) = e^{-\frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*}} \mathcal{W}(\alpha, \alpha^*) \quad (1.143b)$$

$$\mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) = e^{-\hbar \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*}} Q(\alpha, \alpha^*). \quad (1.143c)$$

Otras funciones de distribución

Las funciones de distribución que hemos mostrado son las más relevantes en el contexto de la óptica cuántica, donde los operadores suelen venir dados en términos de los operadores de creación y destrucción del oscilador armónico. Las distribuciones P , Q y de Wigner son adecuadas para el cálculo de valores esperados de operadores $\hat{A}(a, a^\dagger)$ con ordenación normal, antinormal y simétrica, respectivamente, y la

base de estados coherentes es la base más natural en la que llevar a cabo el cálculo de estos valores esperados. (Estos tres tipos de ordenación corresponden a dos ordenaciones extremas (la normal y la antinormal) y una intermedia (la simétrica), aunque en general existe toda una familia de funciones de distribución diferentes para las distintas formas de escribir un mismo operador cuántico). En general, cuando los operadores están escritos en función de los operadores posición \hat{q} y momento \hat{p} , serán conveniente otro tipo de distribuciones, dependiendo de la ordenación de estos operadores. Así, para productos de operadores $\hat{q}^n \hat{p}^m$ con ordenación estándar (esto es, productos en los que todas las potencias del operador \hat{q} preceden a las del operador \hat{p}), es conveniente la *función de distribución con ordenación estándar*, $\mathcal{F}_S(q, p; t)$ [Meh64], dada por

$$\mathcal{F}_S(q, p; t) = \frac{1}{2\pi} \int d\eta \langle q + \eta\hbar | \hat{\rho} | q \rangle e^{-i\eta p}.$$

La *función de distribución con ordenación antiestándar* (también conocida como función de Kirkwood o de Rihaczek) [Kir33, Rih68] en la que los operadores \hat{q} se sitúan a la derecha de los operadores \hat{p} , se define como

$$\mathcal{F}_{AS}(q, p; t) = \frac{1}{2\pi} \int d\eta \langle q | \hat{\rho} | q - \eta\hbar \rangle e^{-i\eta p}.$$

Las distribuciones estándar y antiestándar son complejas conjugadas entre sí:

$$[\mathcal{F}_S(q, p; t)]^* = \mathcal{F}_{AS}(q, p; t)$$

y cumplen las distribuciones marginales correctas, esto es:

$$\begin{aligned} \int dp \mathcal{F}_S(q, p; t) &= \int dp \mathcal{F}_{AS}(q, p; t) = |\Psi(q, t)|^2 \\ \int dq \mathcal{F}_S(q, p; t) &= \int dq \mathcal{F}_{AS}(q, p; t) = |\tilde{\Psi}(p, t)|^2. \end{aligned}$$

Por último, mostraremos una función de distribución no diagonal conocida como *distribución P generalizada*. Esta función, al igual que la representación R , utiliza un desarrollo en operadores de proyección sobre estados coherentes no diagonal, y se define como [Dru80]

$$\hat{\rho} = \int_{\mathcal{D}} d\mu(\alpha, \beta) \frac{|\alpha\rangle\langle\beta^*|}{\langle\beta^*|\alpha\rangle} \mathcal{P}(\alpha, \beta), \quad (1.144)$$

donde la integral se lleva a cabo en un dominio de integración D y $\mu(\alpha, \beta)$ es la medida de integración. La elección de esta medida permite definir diferentes clases de representaciones posibles. El operador de proyección $|\alpha\rangle\langle\beta^*|/\langle\beta^*|\alpha\rangle$ es analítico en α y β . La condición de normalización para $\hat{\rho}$ conduce a una condición de normalización para $\mathcal{P}(\alpha, \beta)$ dada por

$$\int_{\mathcal{D}} d\mu(\alpha, \beta) \mathcal{P}(\alpha, \beta) = 1.$$

De esta forma, $\mathcal{P}(\alpha, \beta)$ es normalizable y puede demostrarse que da lugar a ecuaciones de Fokker-Planck [Wal94]. La definición dada por (1.144) conduce a distintas representaciones dependiendo de la elección de la medida de integración. Así, una posible elección viene dada por

$$d\mu(\alpha, \beta) = \delta^2(\alpha^* - \beta) d^2\alpha d^2\beta,$$

que corresponde a la representación P diagonal de Glauber-Sudarshan definida en (5.76a). Otra elección da lugar a la *representación P compleja*:

$$d\mu(\alpha, \beta) = d\alpha d\beta. \quad (1.145)$$

Aquí α y β son variables complejas que se integran a lo largo de contornos individuales C y C' . Esta representación en particular puede tomar valores complejos, de forma que en ningún sentido puede tener ninguna interpretación física como una distribución de probabilidad. Sin embargo, puede resultar una representación extremadamente útil, dando resultados exactos para muchos problemas y observables físicos. Por último, una tercera elección da lugar a la *representación P positiva*:

$$d\mu(\alpha, \beta) = d^2\alpha d^2\beta. \quad (1.146)$$

Esta representación permite que α y β varíen de forma independiente a lo largo de todo el plano complejo. Se ha demostrado [Dru80] que la función $\mathcal{P}(\alpha, \beta)$ siempre existe para un operador densidad físico y siempre puede elegirse de forma que sea positiva (de ahí el nombre de esta representación). Esto significa que $\mathcal{P}(\alpha, \beta)$ tiene todas las propiedades de una probabilidad genuina.

Para todas las elecciones de la medida $\mu(\alpha, \beta)$, el valor esperado de un operador con ordenación normal $a^\dagger{}^m a^n$ vendrá dado por

$$\langle a^\dagger{}^m a^n \rangle = \int_{\mathcal{D}} d\mu(\alpha, \beta) \beta^m \alpha^n \mathcal{P}(\alpha, \beta). \quad (1.147)$$

1.3.4. \mathcal{D} -álgebra

Una de las aplicaciones más útiles de los estados coherentes consiste en la posibilidad de transformar ecuaciones para operadores en ecuaciones diferenciales para c -números. La actuación de los operadores a y a^\dagger sobre los estados coherentes,

$$a|\alpha\rangle = \hbar^{-1/2}\alpha|\alpha\rangle \quad ; \quad \langle\alpha|a^\dagger = \hbar^{-1/2}\alpha^*\langle\alpha| \quad (1.148a)$$

$$a^\dagger|\alpha\rangle = \hbar^{-1/2}\left(\frac{\alpha^*}{2} + \hbar\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)|\alpha\rangle \quad ; \quad \langle\alpha|a = \hbar^{-1/2}\left(\frac{\alpha}{2} + \hbar\frac{\partial}{\partial\alpha^*}\right)\langle\alpha|, \quad (1.148b)$$

permite definir el llamado \mathcal{D} -álgebra [Gil75], que establece una correspondencia entre observables cuánticos y formas diferenciales, de manera que éstos actúan como operadores diferenciales en el espacio

de los estados coherentes. Así, el \mathcal{D} -álgebra asocia a los operadores a y a^\dagger unos operadores diferenciales lineales de primer orden dados por

$$\mathcal{D}^i(a) = \hbar^{-1/2}\alpha \quad (1.149a)$$

$$\mathcal{D}^i(a^\dagger) = \hbar^{-1/2}\left(\frac{\alpha^*}{2} + \hbar\frac{\partial}{\partial\alpha}\right), \quad (1.149b)$$

de modo que las ecs. (1.148) se escriben

$$\begin{aligned} a|\alpha\rangle = \mathcal{D}^i(a)|\alpha\rangle & \quad ; \quad \langle\alpha|a^\dagger = [\mathcal{D}^i(a)]^* \langle\alpha| \equiv \mathcal{D}^d(a^\dagger)\langle\alpha| \\ a^\dagger|\alpha\rangle = \mathcal{D}^i(a^\dagger)|\alpha\rangle & \quad ; \quad \langle\alpha|a = [\mathcal{D}^i(a^\dagger)]^* \langle\alpha| \equiv \mathcal{D}^d(a)\langle\alpha|. \end{aligned}$$

(Los superíndices d, i denotan simplemente derecha e izquierda, respectivamente). El \mathcal{D} -álgebra de un operador \hat{A} arbitrario se define como

$$\begin{aligned} \hat{A}|\alpha\rangle & \equiv \mathcal{D}^i(\hat{A})|\alpha\rangle \\ \langle\alpha|\hat{A} & \equiv \mathcal{D}^d(\hat{A})\langle\alpha|. \end{aligned}$$

Obviamente, las formas diferenciales $\mathcal{D}^d(\hat{A})$ y $\mathcal{D}^i(\hat{A})$ satisfacen la relación adjunta:

$$\mathcal{D}^d(\hat{A}) = [\mathcal{D}^i(\hat{A})]^*.$$

Puesto que para el producto de dos operadores \hat{A} y \hat{B} se cumple la relación

$$\hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle = \mathcal{D}^i(\hat{A})\mathcal{D}^i(\hat{B})|\alpha\rangle, \quad (1.150)$$

la forma diferencial de un operador arbitrario que esté escrito en términos de los operadores a y a^\dagger podrá obtenerse a partir de la forma diferencial fundamental de dichos operadores, dada por (1.149).

Por otra parte, el proyector de estado coherente $|\alpha\rangle\langle\alpha|$ proporciona una base en términos de la cual puede desarrollarse la mayoría de los operadores. Existe también un \mathcal{D} -álgebra para los proyectores, definida por

$$\hat{A}|\alpha\rangle\langle\alpha| \equiv \mathcal{D}^l(\hat{A})|\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (1.151a)$$

$$|\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{A} \equiv \mathcal{D}^r(\hat{A})|\alpha\rangle\langle\alpha|, \quad (1.151b)$$

tal que

$$\mathcal{D}^r(\hat{A}) = [\mathcal{D}^l(\hat{A})]^*.$$

Asimismo, un teorema similar al (1.150) para los proyectores

$$\hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathcal{D}^l(\hat{A})\mathcal{D}^l(\hat{B})|\alpha\rangle\langle\alpha|$$

permite escribir la forma diferencial de un operador arbitrario a partir de la forma diferencial fundamental de los operadores a y a^\dagger , definida en el caso de proyectores como

$$\mathcal{D}^l(a) = \hbar^{-1/2}\alpha \quad (1.152a)$$

$$\mathcal{D}^l(a^\dagger) = \hbar^{-1/2}\left(\alpha^* + \hbar\frac{\partial}{\partial\alpha}\right), \quad (1.152b)$$

esto es

$$a|\alpha\rangle\langle\alpha| = \hbar^{-1/2}\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (1.153a)$$

$$|\alpha\rangle\langle\alpha|a^\dagger = \hbar^{-1/2}\alpha^*|\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (1.153b)$$

$$a^\dagger|\alpha\rangle\langle\alpha| = \hbar^{-1/2}\left(\alpha^* + \hbar\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)|\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (1.153c)$$

$$|\alpha\rangle\langle\alpha|a = \hbar^{-1/2}\left(\alpha + \hbar\frac{\partial}{\partial\alpha^*}\right)|\alpha\rangle\langle\alpha|. \quad (1.153d)$$

Se puede demostrar que la representación del \mathcal{D} -álgebra preserva las relaciones de conmutación de los respectivos operadores:

$$[\mathcal{D}^i(a), \mathcal{D}^i(a^\dagger)] = 1, \quad [\mathcal{D}^l(a), \mathcal{D}^l(a^\dagger)] = 1, \quad \text{etc.}$$

$$[\mathcal{D}^i(a), \mathcal{D}^d(a^\dagger)] = 0.$$

En general:

$$[\mathcal{D}^i(\hat{A}), \mathcal{D}^i(\hat{B})] = \mathcal{D}^i([\hat{A}, \hat{B}])$$

$$[\mathcal{D}^d(\hat{A}), \mathcal{D}^d(\hat{B})] = -\mathcal{D}^d([\hat{A}, \hat{B}]).$$

Estas formas diferenciales se simplifican para los estados de Bargmann $|\alpha\rangle$ definidos por (1.91), y vienen dadas por

$$a|\alpha\rangle = \hbar^{-1/2}\alpha|\alpha\rangle \quad ; \quad \langle\alpha|a^\dagger = \hbar^{-1/2}\alpha^*\langle\alpha| \quad (1.154a)$$

$$a^\dagger|\alpha\rangle = \hbar^{1/2}\frac{\partial}{\partial\alpha}|\alpha\rangle \quad ; \quad \langle\alpha|a = \hbar^{1/2}\frac{\partial}{\partial\alpha^*}\langle\alpha|. \quad (1.154b)$$

Para el caso de los proyectores, se tiene

$$a|\alpha\rangle\langle\alpha| = \hbar^{-1/2}\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| \quad ; \quad |\alpha\rangle\langle\alpha|a^\dagger = \hbar^{-1/2}\alpha^*|\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (1.155a)$$

$$a^\dagger|\alpha\rangle\langle\alpha| = \hbar^{1/2}\frac{\partial}{\partial\alpha}|\alpha\rangle\langle\alpha| \quad ; \quad |\alpha\rangle\langle\alpha|a = \hbar^{1/2}\frac{\partial}{\partial\alpha^*}|\alpha\rangle\langle\alpha|. \quad (1.155b)$$

La utilidad del \mathcal{D} -álgebra se pone de manifiesto al calcular la evolución del operador densidad en cualquiera de las representaciones mencionadas en el apartado anterior. Así, la ecuación cuántica de Liouville (1.97) determinará la evolución temporal de las funciones \mathcal{P} , \mathcal{Q} y \mathcal{W} según

$$\left\{ \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} \right\}_{\mathcal{P}, \mathcal{Q}, \mathcal{W}} = \frac{1}{i\hbar} \{[\hat{H}, \hat{\rho}]\}_{\mathcal{P}, \mathcal{Q}, \mathcal{W}}, \quad (1.156)$$

donde los subíndices denotan estas tres representaciones. Puesto que el operador \hat{H} viene dado en función de los operadores a y a^\dagger , el conmutador $[\hat{H}, \hat{\rho}]$ presente en esta ecuación indica que hemos de evaluar la transformación de productos del tipo $a\hat{\rho}$, $a^\dagger\hat{\rho}$, $\hat{\rho}a$ y $\hat{\rho}a^\dagger$ en estas representaciones. Es sencillo comprobar que las formas diferenciales asociadas a estos productos en la representación P vienen dadas por:

$$\begin{aligned} a\hat{\rho} &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\alpha \mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) \\ a^\dagger\hat{\rho} &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\left(\alpha^* - \hbar\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)\mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) \\ \hat{\rho}a &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\left(\alpha - \hbar\frac{\partial}{\partial\alpha^*}\right)\mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) \\ \hat{\rho}a^\dagger &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\alpha^* \mathcal{P}(\alpha, \alpha^*), \end{aligned}$$

en la representación Q :

$$\begin{aligned} a\hat{\rho} &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\left(\alpha + \hbar\frac{\partial}{\partial\alpha^*}\right)Q(\alpha, \alpha^*) \\ a^\dagger\hat{\rho} &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\alpha^* Q(\alpha, \alpha^*) \\ \hat{\rho}a &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\alpha Q(\alpha, \alpha^*) \\ \hat{\rho}a^\dagger &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\left(\alpha^* + \hbar\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)Q(\alpha, \alpha^*), \end{aligned}$$

y en la de Wigner:

$$\begin{aligned} a\hat{\rho} &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\left(\alpha + \frac{\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial\alpha^*}\right)\mathcal{W}(\alpha, \alpha^*) \\ a^\dagger\hat{\rho} &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\left(\alpha^* - \frac{\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)\mathcal{W}(\alpha, \alpha^*) \\ \hat{\rho}a &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\left(\alpha - \frac{\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial\alpha^*}\right)\mathcal{W}(\alpha, \alpha^*) \\ \hat{\rho}a^\dagger &\longleftrightarrow \hbar^{-1/2}\left(\alpha^* + \frac{\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)\mathcal{W}(\alpha, \alpha^*). \end{aligned}$$

Capítulo 2

La función de onda en la representación de Bargmann

En el capítulo precedente hemos introducido los estados de Bargmann $\{|\alpha\rangle\}$ como estados coherentes no normalizados. Estos estados proporcionan un formalismo en el que resulta bastante adecuado introducir aproximaciones semiclásicas a la función de onda cuántica. Una de las razones por las que esta formulación es ventajosa se basa en las propiedades geométricas del espacio de los parámetros que etiquetan un estado coherente, puesto que corresponde a una variedad en la que está definida una estructura simpléctica. Esta variedad actúa como un espacio de fases para el sistema, aunque en general su estructura es más complicada que la del espacio de fases usual en sistemas mecánicos. Sin embargo, la principal ventaja que proporciona la representación de Bargmann radica en sus propiedades de *analiticidad* que, como veremos en capítulos posteriores, será lo que permita construir aproximaciones globales y uniformes para la función de onda semiclásica.

La mayoría de los procedimientos semiclásicos involucran desarrollos asintóticos de magnitudes cuánticas en potencias de \hbar , considerado desde este punto de vista como un parámetro perturbativo. De esta forma, el límite semiclásico de la magnitud cuántica en cuestión se obtiene mediante el límite $\hbar \rightarrow 0$. Por supuesto, la constante de Planck es una constante física finita, con dimensiones de acción, de manera que este límite debe ser considerado como un límite *formal*, y ha de entenderse como “situaciones en las que el cociente adimensional entre una magnitud clásica con dimensiones de acción dividido por \hbar es muy grande”.¹

El procedimiento que seguiremos para obtener una aproximación a la función de onda en la representación de Bargmann (tanto en el caso estacionario como en el dependiente del tiempo) parte de una expresión para la función de onda similar al *ansatz* usual en la teoría WKB, $\Psi = A e^{iS/\hbar}$, con la diferencia de que, si bien en la teoría WKB las funciones A y S son funciones reales [ver Apéndice C],

¹El límite clásico de una teoría cuántica no siempre se obtiene a partir de este límite. Los llamados desarrollos $1/N$ permiten obtener el límite clásico de una teoría cuántica cuando un cierto parámetro N , que puede ser la dimensión del espacio, o de la representación del grupo, etc. tiende a infinito.

en el formalismo de estados de Bargmann estas funciones son complejas. De hecho, será el requerimiento de analiticidad de la función de onda obtenida el que imponga las condiciones de cuantización para la energía. Desarrollando A y S en potencias de \hbar y sustituyendo estos desarrollos en la ecuación de Schrödinger (estacionaria o dependiente del tiempo, dependiendo del caso), obtendremos una jerarquía de ecuaciones para los distintos órdenes de \hbar . La aproximación semiclásica consistirá en truncar el desarrollo de Ψ en el orden dominante de \hbar .

Como se ha mencionado en la sección (1.3.3), la no conmutatividad de los operadores cuánticos impide asignar a una función clásica como la función de Hamilton \mathcal{H} un único operador hamiltoniano cuántico \hat{H} . Existen de hecho multitud de operadores cuánticos correspondientes a esta función, si bien las diferencias entre ellos se vuelven despreciables a medida que el parámetro \hbar va haciéndose más pequeño. De todos los operadores hamiltonianos posibles, estamos interesados especialmente en los que presentan los tres tipos de ordenación cuántica siguientes: los casos extremos de ordenación normal (o de Wick) y antinormal, así como un caso intermedio de ordenación simétrica (o de Weyl). Estos diferentes esquemas de cuantización conducirán a distintas expresiones para la aproximación semiclásica a la función de onda. Como consecuencia, el requerimiento de analiticidad de la función de onda obtenida proporcionará una condición de cuantización para la energía que dependerá de la ordenación elegida. En cualquier caso, el formalismo que proponemos proporciona una manera sistemática de obtener aproximaciones semiclásicas con independencia de la ordenación utilizada para los operadores.

Trataremos inicialmente la aproximación a la función de onda en el formalismo estacionario, y a continuación aplicaremos un procedimiento similar para obtener la función de onda dependiente del tiempo, lo que permitirá obtener una aproximación semiclásica para el operador de evolución cuántico.

2.1. La función de onda estacionaria

En la representación de los estados de Bargmann, la función de onda $|\Psi\rangle$ puede escribirse, en general, de forma exacta como

$$\Psi(\alpha^*) \equiv \langle \alpha | \Psi \rangle = A(\alpha^*) e^{\frac{i}{\hbar} S(\alpha^*)}. \quad (2.1)$$

A diferencia de lo que sucede en la teoría WKB, en esta representación la amplitud $A(\alpha^*)$ y la fase $S(\alpha^*)$ son funciones complejas de la variable α^* . Una aproximación semiclásica a $\Psi(\alpha^*)$ involucra un

desarrollo de estas funciones en potencias (pares)² de \hbar :

$$A(\alpha^*) = A^{(0)}(\alpha^*) + \hbar^2 A^{(2)}(\alpha^*) + \hbar^4 A^{(4)}(\alpha^*) + \dots \quad (2.2a)$$

$$S(\alpha^*) = S^{(0)}(\alpha^*) + \hbar^2 S^{(2)}(\alpha^*) + \hbar^4 S^{(4)}(\alpha^*) + \dots \quad (2.2b)$$

La proyección de la ecuación de Schrödinger estacionaria

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (2.3)$$

en la base de estados de Bargmann se escribe

$$\langle \alpha | \hat{H} | \Psi \rangle = E \langle \alpha | \Psi \rangle. \quad (2.4)$$

Consideraremos inicialmente el caso de operadores hamiltonianos con *ordenación de Wick o normal* (esto es, escritos de forma que todos los operadores de aniquilación se sitúan a la derecha de los operadores de creación), que pueden expresarse de forma genérica como el siguiente desarrollo en potencias del parámetro $\hbar^{1/2}$:

$$\hat{H} = \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} a^{\dagger n} a^m, \quad (2.5)$$

con coeficientes $c_{nm} \in \mathbb{R}$, en general. El \mathcal{D} -álgebra asociada a los estados de Bargmann [ec. (1.154)] establece una correspondencia entre los operadores a y a^\dagger y unos operadores diferenciales que permiten escribir la ecuación de Schrödinger (2.4)

$$\sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \langle \alpha | a^{\dagger n} a^m | \Psi \rangle = E \langle \alpha | \Psi \rangle$$

como

$$\sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \hbar^{-n/2} \alpha^{*n} \hbar^{m/2} \frac{d^m}{d\alpha^{*m}} \langle \alpha | \Psi \rangle = E \langle \alpha | \Psi \rangle,$$

esto es

$$\sum_{n,m} c_{nm} \hbar^m \alpha^{*n} \frac{d^m}{d\alpha^{*m}} \Psi(\alpha^*) = E \Psi(\alpha^*).$$

²En general, es suficiente considerar sólo las potencias pares de \hbar para que la función $\Psi(\alpha^*)$ pueda escribirse como un desarrollo completo en todas las potencias de \hbar . En efecto,

$$\begin{aligned} \Psi &= A e^{iS/\hbar} = \left(A^{(0)} + \hbar^2 A^{(2)} + \hbar^4 A^{(4)} + \dots \right) e^{\frac{i}{\hbar} (S^{(0)}(\alpha^*) + \hbar^2 S^{(2)}(\alpha^*) + \hbar^4 S^{(4)}(\alpha^*) + \dots)} \\ &= A^{(0)} e^{iS^{(0)}/\hbar + i\hbar S^{(2)} + i\hbar^3 S^{(4)} + \dots} + \hbar^2 A^{(2)} e^{iS/\hbar} + \dots \\ &= A^{(0)} e^{\frac{i}{\hbar} S^{(0)}} \left(1 + i\hbar S^{(2)} + \frac{(i\hbar)^2}{2!} S^{(2)2} + \dots \right) \left(1 + i\hbar^3 S^{(4)} + \frac{(i\hbar^3)^2}{3!} S^{(4)2} + \dots \right) \dots + \hbar^2 A^{(2)} e^{iS/\hbar} + \dots \\ &= A^{(0)} e^{iS^{(0)}/\hbar} + i\hbar A^{(0)} S^{(2)} e^{iS^{(0)}/\hbar} + O(\hbar^2) \\ &\equiv \Psi^{(0)} + \hbar \Psi^{(1)} + \hbar^2 \Psi^{(2)} + \dots \end{aligned}$$

Escribiendo $\Psi(\alpha^*)$ en la forma dada por la ec. (2.1)

$$\sum_{n,m} c_{nm} \hbar^m \alpha^{*n} \frac{d^m}{d\alpha^{*m}} \left[A(\alpha^*) e^{\frac{i}{\hbar} S(\alpha^*)} \right] = E \left[A(\alpha^*) e^{\frac{i}{\hbar} S(\alpha^*)} \right] \quad (2.6)$$

y sustituyendo los desarrollos en potencias de \hbar para $A(\alpha^*)$ y $S(\alpha^*)$ dados por las ecs. (2.2), obtendremos una jerarquía de ecuaciones al identificar los términos correspondientes a las sucesivas potencias de \hbar .

La identificación de términos correspondientes al orden \hbar^0 en la ec. (2.6) conduce a la igualdad

$$\sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} \left(i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right)^m = E.$$

Esta ecuación puede escribirse en la forma

$$\mathcal{H} \left(\alpha^*, i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right) = E \quad (2.7)$$

definiendo la función clásica

$$\mathcal{H}(\alpha^*, \alpha') \equiv \frac{(\alpha | \hat{H} | \alpha')}{(\alpha | \alpha')} = \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} \alpha'^m \quad (2.8)$$

como la función normal asociada al operador hamiltoniano (2.5) [ver Apéndice A]. (Esta función clásica se corresponde con el símbolo Q del operador $\hat{H}(a^\dagger, a)$; la odenación normal de $\hat{H}(a^\dagger, a)$ hace que $\mathcal{H}_Q(\alpha^*, \alpha') = \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha')$ sea independiente de \hbar). Reconocemos en la expresión (2.7) la *ecuación de Hamilton-Jacobi estacionaria* para la acción $S^{(0)}(\alpha^*)$. Definiendo la variable compleja γ como

$$\gamma \equiv i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*}, \quad (2.9)$$

la ecuación de Hamilton-Jacobi (2.7) toma la forma

$$\sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} \gamma^m = E. \quad (2.10)$$

Esta relación define implícitamente a γ como una función multivaluada de la variable compleja α^* y de la energía E de forma que, invirtiendo algebráicamente la ec. (2.10), la acción $S^{(0)}(\alpha^*)$ puede integrarse como

$$S^{(0)}(\alpha^*) = -i \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha'^*) d\alpha'^*. \quad (2.11)$$

Para que esta acción esté bien definida, deberá ser independiente del camino de integración elegido en el plano complejo que conecte un punto inicial arbitrario con el punto α^* . Las posibles singularidades (bien sean polos, puntos de rama, etc.) que presente la función $\gamma(\alpha^*, E)$ deberán tener una contribución nula a la integral. De esta manera, la función $S^{(0)}(\alpha^*)$ será analítica únicamente para determinados valores de la energía E . Esta restricción determinará las condiciones de cuantización semiclásica para la energía.

Identificando los términos de orden \hbar en la igualdad (2.6) obtenemos

$$\sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} \left\{ m \frac{dA^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \left(i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right)^{m-1} + \frac{m(m-1)}{2} A^{(0)}(\alpha^*) i \frac{d^2 S^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^{*2}} \left(i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right)^{m-2} \right\} = 0.$$

Multiplicando ambos miembros de la ecuación por $2A^{(0)}(\alpha^*)$, definiendo

$$\rho(\alpha^*) \equiv A^{(0)2}(\alpha^*) \quad (2.12)$$

y teniendo en cuenta las ecs. (2.92a) y (2.8), se tiene:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} m \frac{d\rho(\alpha^*)}{d\alpha^*} \gamma^{m-1} + \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} m(m-1) \rho(\alpha^*) \frac{d\gamma}{d\alpha^*} \gamma^{m-2} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \frac{d}{d\alpha^*} [m \gamma^{m-1} \alpha^{*n} \rho(\alpha^*)] - \sum_{n,m} c_{nm} m \gamma^{m-1} n \alpha^{*n-1} \rho(\alpha^*) \\ &= \frac{d}{d\alpha^*} \left[\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma} \Big|_{\alpha^*} \rho(\alpha^*) \right] - \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \alpha^* \partial \gamma} \rho(\alpha^*). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Esta relación tendría la forma de una ecuación de continuidad en régimen estacionario para un fluido con densidad $\rho(\alpha^*)$ si no fuera por el último término de la derecha. Este término, como veremos, no aparece en el caso de que partamos de un hamiltoniano con ordenación simétrica. Escribiendo la función $\rho(\alpha^*)$ como

$$\rho(\alpha^*) \equiv \frac{c}{\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}} e^{i\phi(\alpha^*)},$$

donde $c \in \mathbb{C}$ es una constante arbitraria, y sustituyendo esta expresión en la ec. (2.13) se obtiene una ecuación diferencial para la fase $\phi(\alpha^*)$:

$$\frac{d\phi(\alpha^*)}{d\alpha^*} = -i \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \alpha^* \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}}, \quad (2.14)$$

que al ser integrada permite escribir $\rho(\alpha^*)$ como

$$\rho(\alpha^*) = \frac{c'}{\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}} e^{\int^{\alpha^*} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \alpha^* \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}} d\alpha^*}$$

y por tanto el factor de amplitud $A^{(0)}(\alpha^*)$ como

$$A^{(0)}(\alpha^*) = \frac{c''}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma} \right)^{1/2}} e^{\frac{1}{2} \int^{\alpha^*} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \alpha^* \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}} d\alpha^*}. \quad (2.15)$$

(No es necesario especificar las constantes de integración $c'' \equiv c'^{1/2}$, puesto que afectan únicamente a la normalización de $\Psi(\alpha^*)$, y pueden ser reabsorbidas en una constante genérica \mathcal{N} después de que hayan sido llevadas a cabo todas las aproximaciones deseadas).

Las expresiones para la acción $S^{(0)}(\alpha^*)$ y la amplitud $A^{(0)}(\alpha^*)$ dadas respectivamente por (2.11) y (2.15) conducen a una aproximación para la función de onda en la representación de Bargmann dada por

$$\begin{aligned} \Psi(\alpha^*) &\simeq A^{(0)}(\alpha^*) e^{\frac{i}{\hbar} S^{(0)}(\alpha^*)} \\ &= \frac{\mathcal{N}}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{2} \int^{\alpha^*} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^{*l}, \gamma)}{\partial \alpha^{*l} \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^{*l}, \gamma)}{\partial \gamma}} d\alpha^{*l}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha^{*l}) d\alpha^{*l}}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

siendo \mathcal{N} una cierta constante de normalización.

Puede comprobarse que si se parte de un operador $\hat{H}(a^\dagger, a)$ ordenado de forma *antinormal* (esto es, de forma que todos los operadores de creación a^\dagger se sitúen a la derecha de los operadores de destrucción a) se obtiene como resultado:

$$\begin{aligned} \Psi(\alpha^*) &\simeq A^{(0)}(\alpha^*) e^{\frac{i}{\hbar} S^{(0)}(\alpha^*)} \\ &= \frac{\mathcal{N}}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}\right)^{1/2}} e^{\frac{-1}{2} \int^{\alpha^*} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^{*l}, \gamma)}{\partial \alpha^{*l} \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^{*l}, \gamma)}{\partial \gamma}} d\alpha^{*l}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha^{*l}) d\alpha^{*l}}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Como vemos, este resultado difiere del obtenido para un hamiltoniano en forma normal en el signo de la fase de $A^{(0)}(\alpha^*)$.

Analizaremos en último lugar el caso en que el operador hamiltoniano de partida presente *ordenación de Weyl o simétrica*. Así pues, consideremos que \hat{H} viene dado por una combinación simetrizada de operadores \hat{q} y \hat{p} :

$$\hat{H} = \sum_{n,m} d_{nm} \mathcal{S} \{ \hat{p}^n \hat{q}^m \}, \quad (2.18)$$

donde \mathcal{S} denota ordenación de Weyl. En el Apéndice A se demuestra que un operador escrito de esta forma tiene una *función normal asociada* dada por

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle &= \frac{(\alpha | \hat{H} | \alpha)}{(\alpha | \alpha)} = \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha) + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^* \partial \alpha} + O(\hbar^2) \\ &\equiv \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha) + \frac{\hbar}{2} \mathcal{H}^{(1)}(\alpha^*, \alpha) + O(\hbar^2), \end{aligned} \quad (2.19)$$

donde $\mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha)$ es el hamiltoniano clásico correspondiente al operador \hat{H} :

$$\mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha) = \sum_{n,m} d_{nm} p^n q^m = \sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n} \alpha^m \quad (2.20)$$

y los coeficientes d'_{nm} en (2.20) están relacionados con los d_{nm} en (2.18) a través de los parámetros que definen la transformación $(p, q) \rightarrow (\alpha^*, \alpha)$.³ Como la ec. (2.19) indica, los símbolos asociados a los operadores cuánticos pueden, con toda generalidad, contener “correcciones cuánticas” dependientes de \hbar . Por este motivo denominamos “hamiltoniano clásico” al término de orden cero $\mathcal{H}^{(0)}$. [En el caso particular de que el operador \hat{H} esté ordenado de forma normal, el desarrollo (2.19) se reduce al término de orden más bajo, $\mathcal{H}^{(0)}$, tal como indica la ec. (2.8)]. Este desarrollo permite expresar el operador hamiltoniano \hat{H} de una manera formal como

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \frac{\hbar}{2} \hat{H}^{(1)} + \dots, \quad (2.21)$$

donde los operadores $\hat{H}^{(0)}$ y $\hat{H}^{(1)}$ son tales que

$$\begin{aligned} \frac{(\alpha | \hat{H}^{(0)} | \alpha)}{(\alpha | \alpha)} &= \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha) \\ \frac{(\alpha | \hat{H}^{(1)} | \alpha)}{(\alpha | \alpha)} &= \mathcal{H}^{(1)}(\alpha^*, \alpha) = \frac{\partial^2 \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^* \partial \alpha}. \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta la forma de $\mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha)$, podremos escribir $\mathcal{H}^{(1)}(\alpha^*, \alpha)$ como

$$\frac{\partial^2 \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^* \partial \alpha} = \sum_{n,m} d'_{nm} n m \alpha^{*n-1} \alpha^{m-1}. \quad (2.22)$$

Y haciendo uso del Teorema 2 del Apéndice A, podremos obtener la forma de los operadores $\hat{H}^{(0)}$ y $\hat{H}^{(1)}$ a partir de las expresiones (2.20) y (2.22):

$$\hat{H}^{(0)} = \sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^{\frac{n+m}{2}} a^{\dagger n} a^m \quad (2.23a)$$

$$\hat{H}^{(1)} = \sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^{\frac{n+m}{2}-1} n m a^{\dagger n-1} a^{m-1}, \quad (2.23b)$$

con lo que el operador hamiltoniano (2.21) podrá escribirse como

$$\hat{H} = \sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^{\frac{n+m}{2}} a^{\dagger n} a^m + \frac{1}{2} \sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^{\frac{n+m}{2}} n m a^{\dagger n-1} a^{m-1} + \dots. \quad (2.24)$$

³En general, si las ecuaciones que definen esta transformación son

$$\begin{aligned} p &= a_1 \alpha^* + a_2 \alpha \\ q &= b_1 \alpha^* + b_2 \alpha, \end{aligned}$$

el hamiltoniano clásico en términos de las variables α y α^* podrá escribirse como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha) &= \sum_{n,m} d_{nm} p^n q^m = \sum_{n,m} d_{nm} (a_1 \alpha^* + a_2 \alpha)^n (b_1 \alpha^* + b_2 \alpha)^m \\ &= \sum_{n,m} d_{nm} \left(\sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} a_1^{n-k} \alpha^{*n-k} a_2^k \alpha^k \right) \left(\sum_{l=0}^m \frac{m!}{l!(m-l)!} b_1^{m-l} \alpha^{*m-l} b_2^l \alpha^l \right) \\ &= \sum_{n,m} \sum_{k=0}^n \sum_{l=0}^m d_{nm} \frac{n!m!}{k!l!(n-k)!(m-l)!} a_1^{n-k} a_2^k b_1^{m-l} b_2^l \alpha^{*m+n-k-l} \alpha^{k+l} \\ &\equiv \sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n} \alpha^m. \end{aligned}$$

El procedimiento que estamos siguiendo para obtener la aproximación de $\Psi(\alpha^*)$, en el que mantenemos control de todos los términos que intervienen en cada orden de \hbar , hace que sea suficiente con tener la forma explícita de $\hat{H}^{(0)}$ y $\hat{H}^{(1)}$ en (2.24), puesto que estamos interesados en las dos primeras ecuaciones que se obtienen al sustituir \hat{H} en la ecuación de Schrödinger (2.4) (a saber, las ecuaciones correspondientes a los órdenes \hbar^0 y \hbar^1). Por este motivo no es relevante conocer la forma explícita que tengan los términos de orden superior en el desarrollo (2.24), siendo importante el hecho en sí de poder escribir \hat{H} como una serie en potencias de \hbar . Así pues, escribiendo la ecuación de Schrödinger (2.4) para el hamiltoniano (2.24)

$$(\alpha | \left[\sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^{\frac{n+m}{2}} a^{\dagger n} a^m + \frac{1}{2} \sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^{\frac{n+m}{2}} n m a^{\dagger n-1} a^{m-1} + \dots \right] | \Psi \rangle = E (\alpha | \Psi \rangle$$

puede procederse de la misma manera que para el caso de operadores hamiltonianos escritos en forma normal. El álgebra diferencial asociada a los estados de Bargmann permite escribir esta ecuación como

$$\left[\sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^m \alpha^{*n} \frac{d^m}{d\alpha^{*m}} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^m n m \alpha^{*n-1} \frac{d^{m-1}}{d\alpha^{*m-1}} + \dots \right] \Psi(\alpha^*) = E \Psi(\alpha^*).$$

Finalmente, escribimos la función $\Psi(\alpha^*)$ en la forma (2.1)

$$\begin{aligned} \sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^m \alpha^{*n} \frac{d^m}{d\alpha^{*n}} \left[A(\alpha^*) e^{iS(\alpha^*)/\hbar} \right] + \frac{1}{2} \sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^m n m \alpha^{*n-1} \frac{d^{m-1}}{d\alpha^{*m-1}} \left[A(\alpha^*) e^{iS(\alpha^*)/\hbar} \right] + \dots \\ = E \left[A(\alpha^*) e^{iS(\alpha^*)/\hbar} \right] \end{aligned} \quad (2.25)$$

y sustituimos los desarrollos de $A(\alpha^*)$ y $S(\alpha^*)$ en potencias de \hbar dados por (2.2). Puede verse que los términos de orden \hbar^0 de esta ecuación son los mismos que se tenían en el caso de un hamiltoniano escrito en forma normal:

$$\sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n} \left(i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right)^m = E, \quad (2.26)$$

de forma que se tiene de nuevo la ecuación de Hamilton-Jacobi estacionaria para el hamiltoniano clásico $\mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha)$ definido por (2.20):

$$\mathcal{H}^{(0)} \left(\alpha^*, i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right) = E, \quad (2.27)$$

lo que permite integrar la acción $S^{(0)}(\alpha^*)$ como una expresión análoga a la dada por la ec. (2.11).

La diferencia con el caso anterior aparece al identificar los términos de orden \hbar de la expresión (2.25),

debido al término extra que proviene de $\mathcal{H}^{(1)}(\alpha^*, \alpha)$. Así, a este orden se tiene

$$\sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n} \left\{ m \frac{dA^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \left(i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right)^{m-1} + \frac{m(m-1)}{2} A^{(0)}(\alpha^*) i \frac{d^2 S^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^{*2}} \left(i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right)^{m-2} \right\} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} d'_{nm} n m \alpha^{*n-1} A^{(0)}(\alpha^*) \left(i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right)^{m-1} = 0. \quad (2.28)$$

Multiplicando esta expresión por $2A^{(0)}(\alpha^*)$ y haciendo uso de las definiciones de $\rho(\alpha^*)$ y γ dadas por (2.12) y (2.92a), respectivamente, tendremos

$$\begin{aligned} \sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n} m \frac{d\rho(\alpha^*)}{d\alpha^*} \gamma^{m-1} + \sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n} m(m-1) \rho(\alpha^*) \frac{d\gamma}{d\alpha^*} \gamma^{m-2} + \sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n-1} n m \rho(\alpha^*) \gamma^{m-1} \\ = \sum_{n,m} d'_{nm} \frac{d}{d\alpha^*} [m \gamma^{m-1} \alpha^{*n} \rho(\alpha^*)] = \frac{d}{d\alpha^*} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma} \Big|_{\alpha^*} \rho(\alpha^*) \right] = 0. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Comparando las ecs. (2.13) y (2.29), observamos que para el caso de un hamiltoniano con ordenación simétrica no aparece el término en derivadas segundas de $\mathcal{H}^{(0)}$, obteniéndose directamente una ecuación que tiene la forma de *ecuación de continuidad* en régimen estacionario para un fluido con densidad $\rho(\alpha^*)$. Por supuesto, esta interpretación es puramente formal, puesto que la función $\rho(\alpha^*)$ es una función compleja, al haber sido definida como $A^{(0)2}(\alpha^*)$, y no como $|A^{(0)}(\alpha^*)|^2 = A^{(0)}(\alpha^*)A^{(0)*}(\alpha^*)$, no pudiendo ser interpretada por lo tanto como una densidad de probabilidad. A partir de la ec. (2.29) obtenemos la expresión para $\rho(\alpha^*)$:

$$\rho(\alpha^*) = \frac{c}{\frac{\partial \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}}$$

y de ahí la amplitud $A^{(0)}(\alpha^*)$:

$$A^{(0)}(\alpha^*) = \frac{c'}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma} \right)^{1/2}}, \quad (2.30)$$

con lo que la aproximación para la función de onda toma la forma

$$\Psi(\alpha^*) \simeq A^{(0)}(\alpha^*) e^{\frac{i}{\hbar} S^{(0)}(\alpha^*)} = \frac{\mathcal{N}}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma} \right)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha^{*l}) d\alpha^{*l}}, \quad (2.31)$$

siendo \mathcal{N} una constante de normalización.

Como se ha mencionado anteriormente, de la misma manera que es posible asociar distintos operadores cuánticos a una misma función clásica, la inversa también se cumple: existen distintos símbolos “clásicos” correspondientes a un operador cuántico dado. Puesto que cada símbolo presenta una dependencia distinta con el parámetro perturbativo \hbar , las expresiones obtenidas para la aproximación de $\Psi(\alpha^*)$

son diferentes para cada ordenación cuántica (ecs. (2.16), (2.17) y (2.31) para las ordenaciones normal, antinormal y simétrica, respectivamente). No obstante, puede demostrarse que cualquiera de ellas constituye una aproximación asintótica a la función de onda que es correcta en el límite $\hbar \rightarrow 0$, para lo cual basta tener en cuenta la relación que existe entre los símbolos Q , \mathcal{P} y \mathcal{W} de un operador [ecs. (1.143)], dada por

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_Q(\alpha^*, \gamma) &= e^{\frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^* \partial \gamma}} \mathcal{H}_W(\alpha^*, \gamma) \simeq \left(1 + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^* \partial \gamma} + \dots \right) \mathcal{H}_W(\alpha^*, \gamma) \\ \mathcal{H}_P(\alpha^*, \gamma) &= e^{-\frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^* \partial \gamma}} \mathcal{H}_W(\alpha^*, \gamma) \simeq \left(1 - \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^* \partial \gamma} + \dots \right) \mathcal{H}_W(\alpha^*, \gamma).\end{aligned}$$

De esta forma, es posible obtener una expresión unificada para la aproximación a la función de onda, dada por

$$\Psi(\alpha^*) \simeq \frac{\mathcal{N}}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_x(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma} \right)^{1/2}} e^{\frac{\kappa}{2} \int \alpha^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}_x(\alpha^*, \gamma)}{\partial \alpha^{*l} \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}_x(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}} d\alpha^{*l}} e^{\frac{1}{\hbar} \int \alpha^* \gamma_E(\alpha^*) d\alpha^{*l}}, \quad (2.32)$$

donde el subíndice x denota los posibles símbolos Q , P o W asociados al operador hamiltoniano, y la constante κ es tal que

$$\kappa = \begin{cases} 1, & \text{si } x = Q \\ 0, & \text{si } x = \mathcal{W} \\ -1, & \text{si } x = P \end{cases}. \quad (2.33)$$

La ec. (2.32) es una expresión asintótica para la función de onda válida *para cualquier esquema de ordenación utilizado* al construir el operador hamiltoniano \hat{H} , siempre que el símbolo \mathcal{H}_x utilizado corresponda a la forma Q , P o W , y κ venga dado por (2.33).

La presente formulación pone de manifiesto la utilidad de combinar las técnicas de la teoría WKB con las ventajas del formalismo de estados de Bargmann. La principal ventaja radica en la generalización de los resultados de la WKB al plano complejo, obteniéndose de esta manera aproximaciones para la función de onda que son *uniformes*. La teoría semiclassical WKB está formulada generalmente para hamiltonianos de la forma $\hat{H} = \hat{p}^2/2 + V(\hat{q})$ y proporciona una solución asintótica a la ecuación de Schrödinger estacionaria $\hat{H}\Psi = E\Psi$, válida cuando $\hbar \rightarrow 0$, dada por

$$\Psi(q) \simeq \frac{1}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_W}{\partial p_E} \right)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^q p(q', E) dq'}, \quad (2.34)$$

donde $p_E = p(q, E)$ es una rama de la curva de energía clásica

$$\mathcal{H}_W(q, p) = E.$$

Esta aproximación (cuya analogía formal con ec. (2.31) es debida a que la ordenación de Weyl es similar en las representaciones de Schrödinger y de Bargmann) presenta un grave problema de divergencia en las

cáusticas, y requiere procedimientos extra de ajuste en los puntos de retroceso (las conocidas fórmulas de conexión) [ver Apéndice C]. Este problema desaparece en el formalismo de estados de Bargmann, debido a que la variedad compleja en la que estos estados están definidos actúa como espacio de fases para el sistema, en el que las trayectorias clásicas *no presentan cáusticas* gracias al teorema de Liouville. Esta ausencia de divergencias en las aproximaciones dadas por (2.16) y (2.31) constituye una de las principales ventajas de la formulación de Bargmann, en la que las soluciones WKB son automáticamente globales y uniformes, sin que se requiera ningún mecanismo de ajuste de soluciones. Voros [Vor89] y simultáneamente Kurchan, Leboeuf y Saraceno [Kur89], han hecho uso de estas propiedades para proponer aproximaciones globales a la función de onda en el formalismo de estados coherentes.

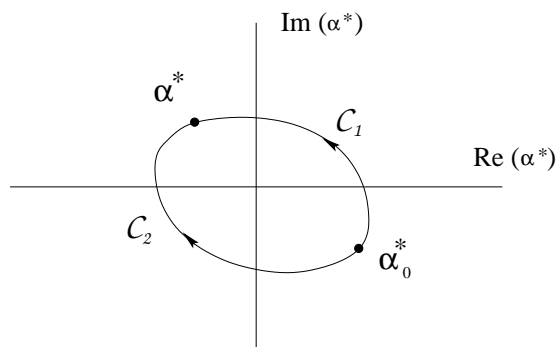


Figura 2.1: Posibles caminos de integración para la determinación de la función $\Psi(\alpha^*)$. La acción en el punto α^* deberá ser independiente del camino elegido para evaluar la acción.

Otra diferencia entre las representaciones de Schrödinger y Bargmann radica en que, en esta última, la selección de autovalores no se obtiene imponiendo a la autofunción la condición de ser de cuadrado integrable (es decir, restringiendo su crecimiento en el infinito), sino imponiendo una *condición de analiticidad*. Así, la aproximación global para un sistema descrito por un hamiltoniano simétrico, dada por (2.31)

$$\Psi(\alpha^*) \simeq \frac{\mathcal{N}}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_W(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma_E}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha^{*t}) d\alpha^{*t}}, \quad (2.35)$$

deberá ser univaluada con independencia del camino de integración elegido para evaluar la acción. Es decir, si la integral de acción en (2.35) se evalúa desde el punto (arbitrario) α_0^* hasta α^* a lo largo de un camino C_1 , la función $\Psi(\alpha^*)$ resultante no deberá diferir de la que se obtiene al evaluar la integral a lo largo del camino C_2 [Fig. (3.2)]. Para que la función $\Psi(\alpha^*)$ permanezca univaluada cuando se efectúa una vuelta a lo largo de la curva cerrada C formada por C_1 y C_2 , es necesario que este contorno encierre las singularidades de la función (en general multivaluada) $\gamma_E(\alpha^*)$. Por otra parte, deben tenerse en cuenta los cambios de signo que puede sufrir el prefactor (dado por una raíz cuadrada) a lo largo de este camino,

de forma que la condición para que la función (2.35) sea analítica vendrá dada por

$$\frac{1}{\hbar} \oint_C \gamma_E(\alpha^*) d\alpha^* - i\nu\pi = 2\pi in, \quad (2.36)$$

con n entero. El parámetro ν (conocido como *winding number* (número de rotación o número de vueltas) de la función $\partial\mathcal{H}/\partial\gamma$) es un parámetro topológico que da cuenta de los cambios de signo que presenta el gradiente $\partial\mathcal{H}/\partial\gamma_E$ a lo largo del circuito C , y depende en cada caso de la geometría del sistema. La condición (2.36) puede escribirse como

$$S \equiv -i \oint_C \gamma_{E_n}(\alpha^*) d\alpha^* = 2\pi\hbar(n + \frac{\nu}{2}), \quad (2.37)$$

y proporciona los autovalores E_n siempre que la integral en (2.37) pueda invertirse. Esta condición corresponde a la condición de cuantización WKB (que generaliza las antiguas reglas de cuantización de Bohr-Sommerfeld) si identificamos el parámetro ν con el índice de Maslov. Este índice es igual al número de veces que $\partial q/\partial p$ es positivo menos el número de veces que es negativo al dar una vuelta a lo largo de una curva cerrada.⁴ Para un hamiltoniano en forma normal, la función de onda (2.16) incluye un término exponencial extra en el prefactor, dado por la fase $\phi(\alpha^*)$, que modifica el término de Maslov en la cuantización de la energía.

La condición de cuantización (2.37) se obtiene para el caso de sistemas ligados tales que las singularidades presentadas por la función $\gamma_E(\alpha^*)$ se limiten a un polo simple o dos puntos de rama, de manera que siempre sea posible construir caminos cerrados que encierren estas singularidades. Para sistemas no ligados que presenten un único punto de rama no es posible definir un camino de integración cerrado que rodee dicho punto, y la función de onda obtenida será una función univaluada para cualquier valor de la energía. En cualquiera de los casos, la función de onda estará definida de forma unívoca en todo el plano complejo de α^* , excepto en los cortes de rama existentes.

Para sistemas en los que $\gamma_E(\alpha^*)$ posea una estructura de singularidades más compleja (por ejemplo, cuatro puntos de rama), es imposible obtener una función de onda que sea univaluada a partir de un único camino de integración. En general, en la expresión (2.35) deberá incluirse una *suma sobre las diferentes ramas físicas* del problema, de manera que la solución vendrá dada por una combinación lineal de soluciones tal que la función de onda resultante sea analítica:

$$\Psi(\alpha^*) \simeq \sum_{\text{ramas}} \frac{\mathcal{N}}{\left(\frac{\partial\mathcal{H}_W(\alpha^*, \gamma)}{\partial\gamma_E}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha^{*'}) d\alpha^{*'}}, \quad (2.38)$$

La elección de todos estos caminos de integración posibles es complicada, y la generalización de (2.35) para sistemas con mayor número de grados de libertad se dificulta considerablemente.

⁴En un sistema de N dimensiones, este índice cuenta el número de puntos de retroceso que presenta la proyección del k -ésimo circuito irreducible Γ_k del toro I_k en el espacio de coordenadas, es decir, el número de lugares en los Γ_k en los que el toro es "normal" al espacio de coordenadas. El índice de Maslov da cuenta asimismo del número de cúspidas atravesadas a lo largo del circuito. [Ver, por ejemplo, [Ber78, Ozo88]].

Un ejemplo: El oscilador armónico unidimensional

El hamiltoniano clásico de una partícula de masa $m = 1$ que ejecuta un movimiento armónico simple de frecuencia ω viene dado por

$$\mathcal{H}_c = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q^2 = \omega\alpha\alpha^*, \quad (2.39)$$

donde las variables (q, p) y (α, α^*) están relacionadas mediante las ecuaciones de transformación

$$\begin{aligned} \alpha &= \sqrt{\frac{\omega}{2}}q + \frac{i}{\sqrt{2\omega}}p \\ \alpha^* &= \sqrt{\frac{\omega}{2}}q - \frac{i}{\sqrt{2\omega}}p. \end{aligned}$$

Existen distintos operadores hamiltonianos cuánticos correspondientes a la función clásica (2.39), dependientes del esquema de ordenación elegido:

$$\hat{H}^N(a^\dagger, a) = \hbar\omega a^\dagger a \quad (2.41a)$$

$$\hat{H}^A(a^\dagger, a) = \hbar\omega aa^\dagger \quad (2.41b)$$

$$\hat{H}^S(a^\dagger, a) = \frac{\hbar\omega}{2}(a^\dagger a + aa^\dagger) = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 \hat{q}^2, \quad (2.41c)$$

donde los superíndices N, A y S denotan ordenación normal, antinormal y simetrizada, respectivamente, y los operadores \hat{q} y \hat{p} se relacionan con los operadores de creación a^\dagger y destrucción a mediante la transformación

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}\hat{q} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega}}\hat{p} \\ a^\dagger &= \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}\hat{q} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega}}\hat{p}. \end{aligned}$$

De la misma manera, cada uno de los tres operadores \hat{H}^N, \hat{H}^A y \hat{H}^S tiene asociados a su vez distintos símbolos definidos en el espacio de fases (q, p) del oscilador armónico (que puede identificarse con el plano complejo de la variable α según la transformación (2.40)). Es sencillo comprobar [ver Apéndice A] que los símbolos Q, \mathcal{P} y \mathcal{W} de cada uno de ellos vienen dados por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_Q^N &= \omega\alpha\alpha^* & \mathcal{H}_Q^A &= \omega\alpha\alpha^* + \hbar\omega & \mathcal{H}_Q^S &= \omega\alpha\alpha^* + \frac{\hbar\omega}{2} \\ \mathcal{H}_P^N &= \omega\alpha\alpha^* - \hbar\omega & \mathcal{H}_P^A &= \omega\alpha\alpha^* & \mathcal{H}_P^S &= \omega\alpha\alpha^* - \frac{\hbar\omega}{2} \\ \mathcal{H}_W^N &= \omega\alpha\alpha^* - \frac{\hbar\omega}{2} & \mathcal{H}_W^A &= \omega\alpha\alpha^* + \frac{\hbar\omega}{2} & \mathcal{H}_W^S &= \omega\alpha\alpha^*. \end{aligned}$$

Por supuesto, todos ellos comparten el mismo límite semiclásico, dado por $\mathcal{H}_c = \omega\alpha\alpha^*$.

Consideremos el operador \hat{H}^S construido según el esquema de cuantización de Weyl-Wigner. La función de onda (2.32) con $\kappa = 0$ y $x = W$ viene dada por

$$\Psi^S(\alpha^*) \simeq \frac{\mathcal{N}}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_W^S(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha'^l) d\alpha'^l} = \frac{\mathcal{N}}{(\omega \alpha^*)^{1/2}} e^{\frac{E}{\hbar \omega} \int^{\alpha^*} \frac{d\alpha'^l}{\alpha'^l}}, \quad (2.42)$$

puesto que la ecuación de Hamilton-Jacobi $\mathcal{H}_W^S(\alpha^*, \gamma) = \omega \alpha \alpha^* = E$, que define la curva de energía, puede ser invertida fácilmente, definiendo $\gamma_E(\alpha^*) = E/(\omega \alpha^*)$ como una función singular de la variable compleja α^* . La integral que aparece en (2.42) se lleva a cabo a lo largo de un camino de integración en el plano complejo α^* , y para que la función $\Psi^S(\alpha^*)$ permanezca univaluada, este contorno debe ser tal que rodee la singularidad existente en el origen $\alpha^* = 0 + i0$. Asimismo deberá tenerse en cuenta el cambio de signo sufrido por la función bivaluada que se encuentra en el denominador, cuando a lo largo del camino de integración se pasa de una a otra de las hojas de Riemann asociadas a la función compleja raíz cuadrada. Así pues, eligiendo como contorno de integración la curva de energía definida por la elipse $\omega \alpha \alpha^* = E$, la función semiclásica (2.42) vendrá dada por

$$\Psi^S(\alpha^*) \sim (\alpha^*)^{-1/2} e^{\frac{E}{\hbar \omega} \ln \alpha^*} \sim (\alpha^*)^{\frac{E}{\hbar \omega} - \frac{1}{2}}.$$

Esta función es analítica únicamente si la potencia de α^* es un número entero, lo que conduce a la condición de cuantización para la energía del oscilador armónico:

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

La correspondiente autofunción tiene la forma

$$\Psi^S(\alpha^*) \sim (\alpha^*)^n, \quad (2.43)$$

que es un resultado *exacto* para la función de ondas del oscilador armónico.⁵ Es decir, la formulación WKB en la representación de Bargmann proporciona no sólo un resultado exacto para las autoenergías del oscilador armónico (como sucede en la teoría WKB tradicional), sino que además conduce a una expresión exacta y *uniforme* de las autofunciones. La elección ($x = W, \kappa = 0$) en este caso se debe exclusivamente a que de esta forma se consigue una simplificación de los cálculos, pero es sencillo comprobar las elecciones ($x = Q, \kappa = 1$) o ($x = P, \kappa = -1$) conducen al mismo resultado.

⁵Efectivamente, la ecuación de Schrödinger $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ en la representación de Bargmann

$$\hbar \omega \left(\alpha^* \frac{\partial}{\partial \alpha^*} + \frac{1}{2} \right) \Psi(\alpha^*) = E \Psi(\alpha^*)$$

proporciona los autovalores $E_n = \hbar \omega(n + 1/2)$ para $\Psi(\alpha^*) = (\alpha^*)^n$.

Para el operador $\hat{H}^N = \hbar\omega a^\dagger a$ con ordenación normal, la elección $x = Q$ y $\kappa = 1$ en (2.32) conduce a la siguiente aproximación para la función de ondas:

$$\begin{aligned}\Psi^N(\alpha^*) &\simeq \frac{\mathcal{N}}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_Q^N(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{2} \int \alpha^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}_Q^N(\alpha^*, \gamma)}{\partial \alpha^{*l} \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}_Q^N(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}} d\alpha^{*l}} e^{\frac{1}{\hbar} \int \alpha^* \gamma_E(\alpha^*) d\alpha^*} \\ &= \frac{\mathcal{N}}{(\omega \alpha^*)^{1/2}} e^{\left(\frac{1}{2} + \frac{E}{\hbar\omega}\right) \int \alpha^* \frac{d\alpha^*}{\alpha^*}},\end{aligned}$$

puesto que $\partial_{\alpha^* \gamma}^2 \mathcal{H}_Q^N(\alpha^*, \gamma) = \omega$. En este caso, la condición de analiticidad conduce a la condición de cuantización

$$E_n^{(N)} = n \hbar\omega.$$

Este mismo resultado se obtiene eligiendo ($x = W, \kappa = 0$) o ($x = P, \kappa = -1$). Análogamente, para el operador $\hat{H}^A = \hbar\omega a a^\dagger$ con ordenación antinormal, eligiendo $x = P$ y $\kappa = -1$ se tiene

$$\begin{aligned}\Psi^A(\alpha^*) &\simeq \frac{\mathcal{N}}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_P^A(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}\right)^{1/2}} e^{-\frac{1}{2} \int \alpha^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}_P^A(\alpha^*, \gamma)}{\partial \alpha^{*l} \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}_P^A(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}} d\alpha^{*l}} e^{\frac{1}{\hbar} \int \alpha^* \gamma_E(\alpha^*) d\alpha^*} \\ &= \frac{\mathcal{N}}{(\omega \alpha^*)^{1/2}} e^{\left(-\frac{1}{2} + \frac{E}{\hbar\omega}\right) \int \alpha^* \frac{d\alpha^*}{\alpha^*}}\end{aligned}$$

y la correspondiente condición para la energía viene dada por

$$E_n^{(A)} = \hbar\omega(n + 1),$$

resultado que se obtiene igualmente para ($x = W, \kappa = 0$) o ($x = Q, \kappa = -1$).

Estos resultados muestran cómo en el caso particular del oscilador armónico, debido a que los símbolos Q, P y W difieren únicamente en constantes, la aproximación semiclassical a la función de onda para un operador hamiltoniano determinado (\hat{H}^N, \hat{H}^A o bien \hat{H}^S) es exactamente la misma sea cual sea el símbolo utilizado. Para un sistema genérico, estas aproximaciones, si bien son asintóticamente equivalentes, diferirán entre sí. Dependiendo del sistema particular, la utilización de una representación u otra proporcionará una descripción más o menos adecuada del tipo de fenómeno a estudiar.

2.2. Formalismo dependiente del tiempo

La obtención de una magnitud cuántica de tanta importancia como es el operador de evolución $\hat{U}(t)$ en términos de ingredientes clásicos ha sido el objetivo de numerosos estudios. El primer intento por incorporar los estados coherentes en la determinación semiclásica del propagador cuántico corresponde a Heller [Hel75, Hel76, Hel77]. Weissman [Wei82], extendiendo el trabajo de Miller [Mil74], simplifica considerablemente los resultados de Heller al explotar las propiedades canónicas de las variables clásicas asociadas a los estados coherentes. Klauder [Kla79, Kla87] obtiene una expresión semiclásica para el propagador haciendo uso de un formalismo de integrales de camino en la representación de estados coherentes. En general, la mayoría de las aportaciones posteriores a los propagadores semiclásicos continúan en esta línea, haciendo uso de una aproximación de fase estacionaria dentro del formalismo de integrales de camino (ver Kuratsuji y Suzuki [Kur80], Xavier y de Aguiar [Xav96] o el detallado trabajo de Baranger *et al* [Bar01]).

En esta sección expondremos una derivación alternativa del propagador, que toma como punto de partida una aproximación WKB de la solución general de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en la representación de estados coherentes. Este método (que ya hemos empleado para obtener una aproximación a la función de onda estacionaria) proporciona de forma inmediata los elementos de matriz del operador de evolución. Tal y como sucedía en el caso estacionario, las expresiones obtenidas son diferentes para las distintas ordenaciones elegidas de los operadores cuánticos.

Estos elementos de matriz de $\hat{U}(t)$ entre estados coherentes definen la forma Q (o representación Q) del propagador. Sin embargo, resulta más útil obtener la llamada representación \mathcal{P} generalizada, al proporcionar una resolución del propagador en estados coherentes. Esta forma \mathcal{P} generalizada, que puede derivarse mediante aproximaciones de fase estacionaria, conduce de manera natural a una representación de valores iniciales (IVR, del inglés Initial Value Representation) del propagador, para la cual únicamente se requieren trayectorias definidas por sus condiciones iniciales. Como veremos, estas expresiones corresponden con los resultados de Solari [Sol86] y de Herman-Kluk [Her84].

2.2.1. La función de onda dependiente del tiempo

Para obtener una aproximación semiclásica a la función de onda dependiente del tiempo en la representación de Bargmann procederemos de manera análoga a como hicimos en el caso estacionario, partiendo del *ansatz* WKB:

$$\Psi(\alpha^*, t) \equiv \langle \alpha | \Psi(t) \rangle = A(\alpha^*, t) e^{\frac{i}{\hbar} S(\alpha^*, t)}. \quad (2.44)$$

La proyección de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (2.45)$$

sobre los estados coherentes $\{|\alpha\rangle\}$ tiene la forma:

$$i\hbar(\alpha|\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle) = (\alpha|\hat{H}|\Psi(t)\rangle). \quad (2.46)$$

Trataremos por simplicidad el caso de operadores hamiltonianos que no dependen explícitamente del tiempo. Comenzaremos por operadores con ordenación normal [ec. (2.5)]:

$$\hat{H} = \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} a^{\dagger n} a^m, \quad (2.47)$$

en cuyo caso la ecuación de Schrödinger (2.46) podrá escribirse como

$$i\hbar(\alpha|\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle) = \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} (\alpha|a^{\dagger n} a^m|\Psi(t)\rangle).$$

El álgebra diferencial asociada a los estados de Bargmann permite escribir esta ecuación como

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\alpha^*, t) = \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^m \alpha^{*n} \frac{\partial^m}{\partial \alpha^{*m}}\Psi(\alpha^*, t).$$

Siguiendo los pasos dados en el caso estacionario, podemos escribir la función $\Psi(\alpha^*, t)$ en la forma dada por (2.44):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \left[A(\alpha^*, t) e^{\frac{i}{\hbar}S(\alpha^*, t)} \right] = \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^m \alpha^{*n} \frac{\partial^m}{\partial \alpha^{*m}} \left[A(\alpha^*, t) e^{\frac{i}{\hbar}S(\alpha^*, t)} \right]. \quad (2.48)$$

La obtención de una aproximación semiclásica para $\Psi(\alpha^*, t)$ pasa por permitir un desarrollo de la amplitud $A(\alpha^*, t)$ y de la fase $S(\alpha^*, t)$ en series de potencias de \hbar

$$A(\alpha^*, t) = A^{(0)}(\alpha^*, t) + \hbar^2 A^{(2)}(\alpha^*, t) + \hbar^4 A^{(4)}(\alpha^*, t) + \dots \quad (2.49a)$$

$$S(\alpha^*, t) = S^{(0)}(\alpha^*, t) + \hbar^2 S^{(2)}(\alpha^*, t) + \hbar^4 S^{(4)}(\alpha^*, t) + \dots, \quad (2.49b)$$

de manera que sustituyendo estos desarrollos en la ec. (2.48) e identificando los términos correspondientes a las mismas potencias de \hbar , se obtiene una jerarquía de ecuaciones para cada orden de \hbar . Igualando los términos de orden \hbar^0 tenemos la expresión

$$-\frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial t} = \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} \left(i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \right)^m,$$

que, haciendo uso de la definición (2.8) para la función clásica $\mathcal{H}(\alpha^*, \alpha')$, podemos escribir como

$$\frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial t} + \mathcal{H} \left(\alpha^*, i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \right) = 0. \quad (2.50)$$

Esta expresión es la *ecuación de Hamilton-Jacobi* para $S^{(0)}(\alpha^*, t)$. En el contexto de la teoría clásica de Hamilton-Jacobi, $S^{(0)}(\alpha^*, t)$ es la llamada *función principal de Hamilton*, y la ecuación en derivadas

parciales (2.50) puede ser integrada haciendo uso del *método de las características*. En este método, la evolución temporal de la función de onda viene descrita por una variable dinámica que denotamos por $\xi_t^* \equiv \xi^*(\tau)$, tal que para $\tau = t$ se cumple $\xi_t^* = \alpha^*$. La derivada total de $S^{(0)}(\alpha^*, t)$ con respecto al tiempo puede escribirse como

$$\begin{aligned} \frac{dS^{(0)}(\alpha^*, t)}{dt} &= \frac{dS^{(0)}(\xi_t^*, t)}{dt} = \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial t} + \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^*} \dot{\xi}_t^* \\ &= -\mathcal{H}\left(\xi_t^*, i \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^*}\right) + \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^*} \dot{\xi}_t^* \\ &\equiv -\mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t) - i\eta_t \dot{\xi}_t^*, \end{aligned} \quad (2.51)$$

donde en la segunda igualdad hemos hecho uso de la ec. (2.50), mientras que en la tercera hemos introducido una nueva variable,

$$\eta_t \equiv i \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^*}, \quad (2.52)$$

como una función bien definida de ξ_t^* y de t . Para poder integrar la ec. (2.51), hemos de conocer cómo varía η_t a lo largo de la dirección $\dot{\xi}_t^*$ (que por ahora es arbitraria). Esta variación vendrá dada por

$$\begin{aligned} \dot{\eta}_t &= i \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^*} \right) = i \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^*} + i \frac{\partial^2 S^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^{*2}} \dot{\xi}_t^* \\ &= -i \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^*} \Big|_{\eta_t} - i \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t} \Big|_{\xi_t^*} \frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_t^*} + i \frac{\partial^2 S^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^{*2}} \dot{\xi}_t^* \\ &= -i \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^*} \Big|_{\eta_t} + \frac{\partial^2 S^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^{*2}} \left(\frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t} \Big|_{\xi_t^*} + i \dot{\xi}_t^* \right), \end{aligned} \quad (2.53)$$

donde hemos tenido en cuenta que $\mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)$ depende también de ξ_t^* a través de η_t . Para que esta evolución sea independiente de $\partial^2 S^{(0)}/\partial \xi_t^{*2}$, podemos *elegir* $\dot{\xi}_t^*$ (que hasta ahora es arbitraria) de tal forma que el término entre paréntesis en (2.53) se anule. De esta forma, la acción $S^{(0)}(\xi_t^*, t)$ podrá ser calculada a lo largo de una trayectoria específica (ξ_t^*, η_t) integrando las ecuaciones diferenciales

$$\dot{\xi}_t^* = i \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t} \Big|_{\xi_t^*} \quad (2.54a)$$

$$\dot{\eta}_t = -i \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^*} \Big|_{\eta_t}, \quad (2.54b)$$

correspondientes a las ecuaciones clásicas de Hamilton para las variables dinámicas (ξ_t^*, η_t) . Estas ecuaciones están sujetas a las condiciones de contorno

$$\eta_{\tau=0} = i \frac{\partial S^{(0)}(\xi_0^*, 0)}{\partial \xi_0^*} = \eta_0(\xi_0^*) \quad (2.55a)$$

$$\xi_{\tau=t}^* = \alpha^*. \quad (2.55b)$$

Así pues, la ecuación (2.51) podrá ser integrada *a lo largo de las características* (ξ_t^*, η_t) , obteniéndose

$$S^{(0)}(\alpha^*, t) = S^{(0)}(\xi_0^*, 0) + \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) - i\eta_\tau \dot{\xi}_\tau^*] d\tau \quad (2.56)$$

$$= S^{(0)}(\xi_0^*, 0) - i\eta_t \alpha^* + i\eta_0 \xi_0^* + \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i\xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau, \quad (2.57)$$

donde el paso de una expresión a otra se lleva a cabo evaluando por partes la integral

$$\int_0^t \eta_\tau \dot{\xi}_\tau^* d\tau = \eta_t \alpha^* - \eta_0 \xi_0^* - \int_0^t \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau d\tau$$

y teniendo en cuenta la condición de contorno (2.55b). El valor inicial de la variable ξ_τ^* determinará el valor inicial de la acción, $S^{(0)}(\xi_0^*, 0)$, y éstas, a su vez, determinarán al valor de η a tiempo $\tau = 0$, según indica la ec. (2.55a). Todos estos valores iniciales dependerán del estado inicial $|\Psi(0)\rangle$ que se elija. Como vemos, el método de las características permite resolver la ecuación en derivadas *parciales* de Hamilton-Jacobi (2.50) para la evolución de la función principal de Hamilton $S^{(0)}(\alpha^*, t)$ integrando un conjunto de ecuaciones diferenciales *ordinarias*, las ecuaciones de Hamilton (2.54), que incrementan la fase inicial $S^{(0)}(\xi_0^*, 0)$ en una integral evaluada a lo largo de una trayectoria en la variedad compleja asociada a la variable α^* , que actúa como espacio de fases para el sistema.

Analicemos a continuación los términos correspondientes al orden \hbar en la ec. (2.48):

$$i \frac{\partial A^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial t} = \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} \left\{ m \frac{\partial A^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \left(i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \right)^{m-1} + \frac{m(m-1)}{2} A^{(0)}(\alpha^*, t) i \frac{\partial^2 S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^{*2}} \left(i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \right)^{m-2} \right\}.$$

Multiplicando ambos miembros de la ecuación por $2A^{(0)}(\alpha^*, t)$, definiendo

$$\rho(\alpha^*, t) \equiv A^{(0)2}(\alpha^*, t) \quad (2.58)$$

y escribiendo $\eta(\alpha^*, t) \equiv i \partial_{\alpha^*} S^{(0)}(\alpha^*, t)$, se tiene:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \rho(\alpha^*, t)}{\partial t} &= \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} m \frac{\partial \rho(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \eta^{m-1} + \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} m(m-1) \rho(\alpha^*, t) \frac{\partial \eta}{\partial \alpha^*} \eta^{m-2} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \frac{\partial}{\partial \alpha^*} [m \eta^{m-1} \alpha^{*n} \rho(\alpha^*, t)] - \sum_{n,m} m \eta^{m-1} n \alpha^{*n-1} \rho(\alpha^*, t) \\ &= \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \left[\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \eta)}{\partial \eta} \Big|_{\alpha^*} \rho(\alpha^*, t) \right] - \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \eta)}{\partial \alpha^* \partial \eta} \rho(\alpha^*, t). \end{aligned}$$

Definiendo un campo de velocidades complejo como

$$v(\alpha^*, t) \equiv i \frac{\partial \mathcal{H}[\alpha^*, \eta = i \partial_{\alpha^*} S^{(0)}(\alpha^*, t)]}{\partial \eta}, \quad (2.59)$$

esta ecuación se escribe finalmente como

$$\frac{\partial \rho(\alpha^*, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \alpha^*} [\rho(\alpha^*, t) v(\alpha^*, t)] = i \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \eta)}{\partial \alpha^* \partial \eta} \rho(\alpha^*, t). \quad (2.60)$$

Esta expresión tendría la forma de una ecuación de continuidad si no fuera por el término en derivadas segundas de $\mathcal{H}(\alpha^*, \eta)$ que aparece en el segundo miembro de la igualdad (y que debe calcularse considerando α^* y η como variables independientes). Podemos definir una nueva función $\tilde{\rho}(\alpha^*, t)$ que absorba dicho término

$$\tilde{\rho}(\alpha^*, t) \equiv \rho(\alpha^*, t) e^{-iF(\alpha^*, t)}, \quad (2.61)$$

con una corrección a la fase $F(\alpha^*, t)$ dada por

$$F(\alpha^*, t) \equiv \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \xi_\tau^* \partial \eta_\tau} d\tau, \quad (2.62)$$

donde la integral se lleva a cabo a lo largo de la trayectoria clásica compleja que satisface las condiciones de contorno (2.55). De esta manera, la ec. (2.60) se escribe como

$$\frac{\partial}{\partial t} [\tilde{\rho}(\alpha^*, t) e^{-iF(\alpha^*, t)}] + \frac{\partial}{\partial \alpha^*} [\tilde{\rho}(\alpha^*, t) e^{-iF(\alpha^*, t)} v(\alpha^*, t)] = i \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \eta)}{\partial \alpha^* \partial \eta} \tilde{\rho}(\alpha^*, t) e^{-iF(\alpha^*, t)},$$

y con algo de álgebra intermedia conduce finalmente el resultado deseado:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}(\alpha^*, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \alpha^*} [\tilde{\rho}(\alpha^*, t) v(\alpha^*, t)] = 0. \quad (2.63)$$

Esta expresión tiene la forma de una *ecuación de continuidad* para un fluido con densidad $\tilde{\rho}(\alpha^*, t)$ y un campo de velocidades complejo dado por (2.59).

Como ya se ha indicado en el caso estacionario, la función $\tilde{\rho}(\alpha^*, t)$, por definición, es una función compleja, no interpretable por tanto como una densidad de probabilidad (ni siquiera la función $\rho(\alpha^*, t)$ es definida positiva, por haber sido definida como el cuadrado de $A^{(0)}(\alpha^*, t)$ y no como $|A^{(0)}(\alpha^*, t)|^2$). No obstante, el hecho de que cumpla una ecuación de continuidad como la ec. (2.63) proporciona una ventaja evidente, y es la posibilidad de conocer $\tilde{\rho}(\alpha^*, t)$ (y por tanto $\rho(\alpha^*, t)$ y, en definitiva, $A^{(0)}(\alpha^*, t)$) en cualquier instante de tiempo a partir de las trayectorias clásicas del sistemas. Efectivamente, la ecuación de continuidad (2.63), al ser una ecuación de conservación

$$\tilde{\rho}(\xi_t^*, t) \delta \xi_t^* = \tilde{\rho}(\xi_0^*, 0) \delta \xi_0^*,$$

permite escribir la densidad a tiempo t en términos de la densidad en el instante inicial $t = 0$ como

$$\tilde{\rho}(\alpha^*, t) = \tilde{\rho}(\xi_t^*, t) = J^{-1} \tilde{\rho}(\xi_0^*, 0) = J^{-1} \rho(\xi_0^*, 0),$$

donde J es el jacobiano

$$J(\alpha^*, t) \equiv \frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*}, \quad (2.64)$$

y donde hemos tenido en cuenta que las funciones $\tilde{\rho}$ y ρ coinciden a $t = 0$ [ecs. (2.61) y (2.62)]. Así pues,

$$A^{(0)2}(\alpha^*, t) e^{-iF(\alpha^*, t)} = J^{-1} A^{(0)2}(\xi_0^*, 0),$$

de donde

$$A^{(0)}(\alpha^*, t) = A^{(0)}(\xi_0^*, 0) J^{-1/2} e^{\frac{i}{2}F(\alpha^*, t)}. \quad (2.65)$$

El valor inicial $A^{(0)}(\xi_0^*, 0)$, al igual que sucede con el de la acción, dependerá del estado inicial $|\Psi(0)\rangle$.

Hemos de indicar que, puesto que la ecuación de continuidad permite obtener una solución para el cuadrado de $A^{(0)}(\alpha^*, t)$, y no para la amplitud misma, la expresión resultante es una función compleja bivaluada (dada por una raíz cuadrada). La determinación tanto de la acción $S^{(0)}(\alpha^*, t)$ como de la amplitud $A^{(0)}(\alpha^*, t)$ se está llevando a cabo a partir de la integración de las características de la ecuación de Hamilton-Jacobi, de manera que los sucesivos cambios de signo de la raíz (esto es, los sucesivos pasos de una a otra de las hojas de la superficie de Riemann asociada a la función bivaluada $\tilde{\rho}^{1/2}(\xi_t^*, t)$) a lo largo de la integración darán lugar a la aparición de una fase de $\pm\pi$ en la expresión final para la amplitud $A^{(0)}(\alpha^*, t)$ y por tanto en la aproximación semiclásica de $\Psi(\alpha^*, t)$. Esta fase, como veremos, será el origen de la aparición de un índice de Maslov en las expresiones semiclásicas de la densidad de estados y de una energía de punto cero en la cuantización de la acción. Por el momento consideraremos que esta fase está incluida en el término jacobiano $J^{-1/2}$ y no la mostraremos explícitamente hasta que no sea necesario.

Los resultados (2.57) y (2.65) permiten escribir la aproximación semiclásica para la función de onda dependiente del tiempo en la representación de estados de Bargmann como:

$$\begin{aligned} \Psi(\alpha^*, t) &\simeq A^{(0)}(\alpha^*, t) e^{\frac{i}{\hbar}S^{(0)}(\alpha^*, t)} \\ &= A^{(0)}(\xi_0^*, 0) J^{-1/2} e^{\frac{i}{2} \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \xi_\tau^* \partial \eta_\tau} d\tau} e^{\frac{i}{\hbar} [S^{(0)}(\xi_0^*, 0) + \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) - i\eta_\tau \dot{\xi}_\tau^*] d\tau} \\ &= \Psi(\xi_0^*, 0) J^{-1/2} e^{\frac{i}{2}F(\alpha^*, t)} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) - i\eta_\tau \dot{\xi}_\tau^*] d\tau}, \end{aligned} \quad (2.66)$$

donde

$$\Psi(\xi_0^*, 0) = A^{(0)}(\xi_0^*, 0) e^{iS^{(0)}(\xi_0^*, 0)/\hbar} \quad (2.67)$$

dependerá del estado inicial considerado, y todos los términos en (2.66) están evaluados a lo largo de la trayectoria clásica compleja que satisface las condiciones de contorno (2.55).

Como se ha indicado anteriormente, la forma de la aproximación semiclásica para $\Psi(\alpha^*, t)$ depende de la ordenación escogida para el operador hamiltoniano. La expresión (2.66) ha sido obtenida para un operador con ordenación normal. El caso de *ordenación de Weyl o simétrica* sufre ligeras variaciones debido, como hemos visto, a las correcciones cuánticas presentes en el símbolo de Weyl \mathcal{H} [ec. (2.19)], que introducen modificaciones en las ecuaciones obtenidas para los siguientes órdenes en \hbar . Así, la

ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (2.46), con $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \frac{\hbar}{2} \hat{H}^{(1)} + \dots$, en este caso toma la forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[A(\alpha^*, t) e^{\frac{i}{\hbar} S(\alpha^*, t)} \right] = \sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^m \alpha^{*n} \frac{\partial^m}{\partial \alpha^{*n}} \left[A(\alpha^*, t) e^{\frac{i}{\hbar} S(\alpha^*, t)} \right] \\ + \frac{1}{2} \sum_{n,m} d'_{nm} \hbar^m n m \alpha^{*n-1} \frac{\partial^{m-1}}{\partial \alpha^{*m-1}} \left[A(\alpha^*, t) e^{\frac{i}{\hbar} S(\alpha^*, t)} \right] + \dots,$$

donde los coeficientes d'_{nm} corresponden al desarrollo de la función $\mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \alpha)$ definida en (2.20).

La identificación de términos del orden \hbar^0 conduce a la misma ecuación obtenida en el caso de hamiltonianos en forma normal, ya que a este orden sólo intervienen contribuciones de $\hat{H}^{(0)}$ [ec. (2.23a)]. Se tiene por tanto la igualdad

$$-\frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial t} = \sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n} \left(i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \right)^m \equiv \mathcal{H}^{(0)} \left(\alpha^*, i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \right),$$

esto es:

$$\frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial t} + \mathcal{H}^{(0)} \left(\alpha^*, i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \right) = 0.$$

Es decir, obtenemos la ecuación de Hamilton-Jacobi para $S^{(0)}(\alpha^*, t)$ en la que interviene la función clásica $\mathcal{H}^{(0)}$, que es el término de orden cero en el desarrollo de la “función normal asociada” al operador \hat{H} . La expresión para la acción viene, pues, dada por (2.56), en la que interviene un hamiltoniano clásico dado por $\mathcal{H}^{(0)}$.

Es en el orden \hbar donde aparecen las contribuciones de $\hat{H}^{(1)}$, puesto que en este caso se tiene la igualdad

$$i \frac{\partial A^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial t} = \sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n} \left\{ m \frac{\partial A^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \left(i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \right)^{m-1} \right. \\ \left. + \frac{m(m-1)}{2} A^{(0)}(\alpha^*, t) i \frac{\partial^2 S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^{*2}} \left(i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \right)^{m-2} \right\} \\ + \frac{1}{2} \sum_{n,m} d'_{nm} n m \alpha^{*n-1} A^{(0)}(\alpha^*, t) \left(i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*)}{\partial \alpha^*} \right)^{m-1}.$$

Como es habitual, multiplicamos esta igualdad por $2A^{(0)}(\alpha^*, t)$ y consideramos las definiciones de

$\rho(\alpha^*, t)$ y de $\eta(\alpha^*, t)$, obteniéndose

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial \rho(\alpha^*, t)}{\partial t} &= \sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n} m \frac{\partial \rho(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \eta^{m-1} + \sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n} m(m-1) \rho(\alpha^*, t) \frac{\partial \eta}{\partial \alpha^*} \eta^{m-2} \\
&+ \sum_{n,m} d'_{nm} \alpha^{*n-1} n m \rho(\alpha^*, t) \eta^{m-1} \\
&= \sum_{n,m} d'_{nm} \frac{\partial}{\partial \alpha^*} [m \eta^{m-1} \alpha^{*n} \rho(\alpha^*, t)] \\
&= \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(0)}(\alpha^*, \eta)}{\partial \eta} \Big|_{\alpha^*} \rho(\alpha^*, t) \right].
\end{aligned}$$

La definición (2.59) conduce finalmente a

$$\frac{\partial \rho(\alpha^*, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \alpha^*} [\rho(\alpha^*, t) v(\alpha^*, t)] = 0. \quad (2.68)$$

En este caso se obtiene directamente una ecuación de continuidad para $\rho(\alpha^*, t)$, y el término en derivadas segundas de $\mathcal{H}^{(0)}$ que aparecía en el caso de un hamiltoniano en forma normal [ec. (2.60)] ha sido cancelado gracias a la contribución de $\mathcal{H}^{(1)}$. De esta forma, los pasos que siguen a la ec. (2.63) conducen a la expresión

$$A^{(0)}(\alpha^*, t) = A^{(0)}(\xi_0^*, 0) J^{-1/2},$$

con J dado por (2.64).

Así pues, en el caso de un operador hamiltoniano con ordenación simétrica la aproximación semiclásica para la función de onda dependiente del tiempo viene dada por

$$\begin{aligned}
\Psi(\alpha^*, t) &\simeq A^{(0)}(\alpha^*, t) e^{\frac{i}{\hbar} S^{(0)}(\alpha^*, t)} \\
&= A^{(0)}(\xi_0^*, 0) J^{-1/2} e^{\frac{i}{\hbar} [S^{(0)}(\xi_0^*, 0) + \int_0^t [-\mathcal{H}^{(0)}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) - i\eta_\tau \dot{\xi}_\tau^*] d\tau]} \\
&= \Psi(\xi_0^*, 0) J^{-1/2} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}^{(0)}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) - i\eta_\tau \dot{\xi}_\tau^*] d\tau} \quad (2.69)
\end{aligned}$$

Al comparar las ecs. (2.66) y (2.69) se observa que la única diferencia entre las aproximaciones para operadores escritos en forma normal o en forma simetrizada radica en la aparición o no, respectivamente, del término $\exp(iF/2)$. Un análisis análogo al que hemos llevado a cabo permite comprobar que para el caso de la ordenación antinormal se obtiene una expresión en la que interviene el término $\exp(-iF/2)$.

La inclusión o no de este término en las aproximaciones semiclásicas al propagador cuántico ha sido objeto de algunas discusiones. Si bien Baranger *et al* [Bar01] reivindican su incorporación a las expresiones semiclásicas que proponen, la aproximación de Solari [Sol86], diez años anterior, ya lo incluía. La razón de que esta fase no aparezca en las aproximaciones de estados coherentes habituales propuestas por Heller [Hel75] y otros [Kay94, Her84] se debe simplemente a que estos autores hacen uso de operadores hamiltonianos con ordenación de Weyl (aunque en ocasiones no se indique explícitamente)

y, como hemos visto, en este caso este término no aparece. A pesar de la aparente arbitrariedad en la aparición o no de $\exp(\pm iF/2)$, el procedimiento sistemático que hemos seguido da cuenta de todos los términos que aparecen en cada orden de \hbar para cada uno de los esquemas de ordenación cuántica utilizados.

Los resultados obtenidos para las distintas ordenaciones pueden condensarse en una expresión compacta escribiendo

$$\Psi(\alpha^*, t) \simeq \Psi(\xi_0^*, 0) J^{-1/2} e^{\frac{i}{2}\kappa F(\alpha^*, t)} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}_\kappa(\xi_\tau^*, \eta_\tau) - i\eta_\tau \dot{\xi}_\tau^*] d\tau}, \quad (2.70)$$

donde κ viene dada por (2.33) y el hamiltoniano clásico \mathcal{H}_κ corresponde a la representación Q , \mathcal{P} o \mathcal{W} del operador \hat{H} considerado. De la ec. (2.70) puede extraerse una doble conclusión: por una parte, pone de manifiesto el hecho de que, para un mismo hamiltoniano clásico, los diferentes esquemas de cuantización conducirán a distintas aproximaciones para $\Psi(\alpha^*, t)$ y, como veremos, a distintas formas del propagador semiclásico. Por otra parte, la expresión (2.70) es válida para cualquier operador hamiltoniano cuántico, con independencia de la ordenación que posea, siempre que se haga uso del símbolo \mathcal{H}_Q , \mathcal{H}_P o \mathcal{H}_W con el valor adecuado de κ prescrito por (2.33).

Consideremos como ejemplo el caso del oscilador armónico monodimensional, con un hamiltoniano escrito en forma simetrizada como

$$\hat{H}^S = \frac{\hbar\omega}{2}(a^\dagger a + aa^\dagger) = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (2.71)$$

y un estado de Fock $|n\rangle$ como estado inicial. En este caso, las trayectorias vienen dadas por las ecuaciones de Hamilton (2.54), que para $\mathcal{H}_W^S(\xi^*, \eta) = \omega\xi^*\eta$ se escriben

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_\tau^* &= i \left. \frac{\partial \mathcal{H}_W^S(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \eta_\tau} \right|_{\xi_\tau^*} = i\omega\xi_\tau^* \\ \dot{\eta}_\tau &= -i \left. \frac{\partial \mathcal{H}_W^S(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \xi_\tau^*} \right|_{\eta_\tau} = -i\omega\eta_\tau \end{aligned}$$

y se integran como

$$\begin{aligned} \xi_\tau^* &= \xi_0^* e^{i\omega\tau} \\ \eta_\tau &= \eta_0 e^{-i\omega\tau}. \end{aligned}$$

Las condiciones iniciales compatibles con las condiciones de contorno (2.55) corresponden a

$$\begin{aligned} \eta_0 &= 0 \\ \xi_0^* &= \alpha^* e^{-i\omega t}. \end{aligned}$$

La función de onda inicial en la representación de Bargmann viene dada por

$$\Psi(\alpha^*, 0) = (\alpha|n\rangle = \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}},$$

de forma que $A^{(0)}(\alpha_0^*, 0) \propto \alpha^{*n}$ y $S^{(0)}(\alpha_0^*, 0) = 0$. Con estos resultados, la aproximación a la función de onda puede escribirse como

$$\Psi(\alpha^*, t) \simeq \Psi(\alpha^*, 0) e^{-i(n+1/2)\omega t} \sim \alpha^{*n} e^{-i(n+1/2)\omega t},$$

expresión que coincide con el resultado exacto.

2.2.2. Elementos de matriz del operador de evolución

La linealidad de la ecuación de Schrödinger (2.45) permite describir la correspondencia entre el estado cuántico inicial definido por el vector de estado $|\Psi(0)\rangle$ y el estado a tiempo t mediante un operador lineal $\hat{U}(t)$ en la forma

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle. \quad (2.72)$$

Este operador, llamado *operador de evolución temporal*, es unitario y satisface asimismo la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) = \hat{H}(t) \hat{U}(t).$$

Esta ecuación, junto a la condición inicial

$$\hat{U}(0) = \hat{I},$$

puede escribirse como la ecuación integral

$$\hat{U}(t) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(t') \hat{U}(t') dt', \quad (2.73)$$

que para el caso de operadores hamiltonianos independientes del tiempo (que es el que nos ocupa) puede resolverse como ⁶

$$\hat{U}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}. \quad (2.74)$$

⁶Si el operador \hat{H} depende del tiempo pero los hamiltonianos a distintos tiempos conmutan entre sí, la solución formal de (2.73) se escribe como

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(t') dt'},$$

mientras que si los \hat{H} 's a distintos tiempos no conmutan, la solución más general viene dada por una serie de Dyson:

$$\hat{U}(t) = \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n),$$

que simbólicamente puede escribirse en términos del operador de ordenación temporal de Dyson, \mathbb{T} , como

$$\hat{U}(t) = \mathbb{T} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(t') dt'} \right], \quad t > 0.$$

La expresión (2.74) para el operador de evolución es independiente de la representación. Sus elementos de matriz tienen una importante interpretación en términos de amplitud de transición. Así proyectando la ec. (2.72) en la representación de posiciones, por ejemplo, se tiene

$$\begin{aligned}\Psi(q, t) &\equiv \langle q | \Psi(t) \rangle = \langle q | \hat{U}(t) | \Psi(0) \rangle = \int dq' \langle q | \hat{U}(t) | q' \rangle \langle q' | \Psi(0) \rangle \\ &\equiv \int dq' K(q, t; q', 0) \Psi(q', 0),\end{aligned}\quad (2.75)$$

donde hemos hecho uso de la relación de cierre $\int dq |q\rangle\langle q| = \hat{I}$. El *kernel* de la ec. (2.75),

$$K(q, t; q', 0) = \langle q | \hat{U}(t) | q' \rangle, \quad (2.76)$$

recibe el nombre de *propagador cuántico*.⁷ De esta manera, la evolución temporal de la función de ondas queda completamente definida si se conoce $K(q, t; q', 0)$ y si $\Psi(q', 0)$ está dada inicialmente, lo que es un reflejo de la naturaleza causal de la mecánica cuántica. El solapamiento $\langle q, t | q', 0 \rangle$ identifica la amplitud de probabilidad de que una partícula preparada en $t = 0$ con un autovalor para la posición dado por q' sea encontrada a un tiempo posterior t en q . De esta forma, puede interpretarse como la *amplitud de transición* de una partícula en un punto espacio-temporal $(q', 0)$ a otro punto espacio-temporal (q, t) .

En la representación de Bargmann, el propagador cuántico viene definido según

$$\Psi(\alpha^*, t) = \iint \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} (\alpha | \hat{U}(t) | \beta) (\beta | \Psi(0)) e^{-\beta\beta^*/\hbar} \equiv \iint \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} K(\alpha^*, t; \beta, 0) \Psi(\beta^*, 0),$$

donde

$$K(\alpha^*, t; \beta, 0) \equiv (\alpha | \hat{U}(t) | \beta) e^{-\beta\beta^*/\hbar}.$$

La aproximación semiclásica a la función de onda en la representación de Bargmann, $\Psi(\alpha^*, t) = (\alpha | \Psi(t))$, permite obtener una aproximación semiclásica a este propagador cuántico. Efectivamente, como hemos indicado, las expresiones (2.66) y (2.69) dependen del estado inicial $|\Psi(0)\rangle$ a partir del cual evoluciona la función de onda. El caso particular en el que el estado inicial es un estado de Bargmann, $|\Psi(0)\rangle = |\beta\rangle$, es especialmente interesante, puesto que estas expresiones proporcionarán una aproximación a los elementos de matriz del operador de evolución entre dos estados coherentes:

$$(\alpha | \Psi(t)) = (\alpha | \hat{U}(t) | \Psi(0)) = (\alpha | \hat{U}(t) | \beta) \equiv \Psi(\alpha^*, \beta, t) = \Psi(\xi_r^*, \eta_0, t),$$

⁷Estrictamente, el *propagador retardado* se define como

$$K(q, t; q', 0) = \langle q | \hat{U}(t) | q' \rangle \Theta(t),$$

donde $\Theta(t)$ es la función de Heaviside ($\Theta(t) = 1$ si $t > 0$, y $\Theta(t) = 0$ si $t < 0$). Nótese sin embargo que la ec. (2.75) se cumple incluso para $t < 0$, en cuyo caso puede introducirse un *propagador avanzado* que sería distinto de cero sólo para $t < 0$. De la misma manera, es posible definir unos operadores de evolución *hacia adelante* o *hacia atrás* mediante $\hat{U}^\pm(t) = \pm\Theta(\pm t)\hat{U}(t)$.

donde hemos mostrado la dependencia de la función de onda con la condición inicial β . En este caso los valores iniciales de la amplitud y la fase pueden obtenerse teniendo en cuenta que para $t = 0$ se tiene

$$\begin{aligned}\Psi(\alpha^*, \beta, 0) &\equiv A^{(0)}(\alpha^*, \beta, 0) e^{iS^{(0)}(\alpha^*, \beta, 0)/\hbar} \\ &= (\alpha|\Psi(0)) = (\alpha|\beta) = e^{\alpha^*\beta/\hbar},\end{aligned}$$

de donde

$$\begin{aligned}A^{(0)}(\alpha^*, \beta, 0) &= 1 \\ S^{(0)}(\alpha^*, \beta, 0) &= -i\alpha^*\beta.\end{aligned}$$

La condición de contorno (2.55a) permite identificar

$$\eta_0 = i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, \beta, 0)}{\partial \alpha^*} = \beta. \quad (2.77)$$

Es decir, al fijar el estado inicial como un estado coherente $|\beta\rangle$ se determina asimismo el valor que toma la variable compleja η en $t = 0$, que en este caso particular será independiente del valor de ξ_0^* . (Nótese sin embargo que este estado inicial no proporciona ninguna información acerca del valor inicial de la variable ξ_t^* , es decir, ξ_0^* permanece aún indeterminada). Así pues, el propagador en la representación de Bargmann puede aproximarse por

$$(\alpha|\hat{U}(t)|\beta) \simeq \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*}\right)^{-1/2} e^{\frac{i}{2}\kappa \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}_t(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^* \partial \eta_t} d\tau} e^{\frac{1}{\hbar} \eta_t \alpha^* + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}_t(\xi_t^*, \eta_t) + i\xi_t^* \dot{\eta}_t] d\tau} \quad (2.78)$$

$$= \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*}\right)^{-1/2} e^{\frac{i}{2}\kappa \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}_t(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^* \partial \eta_t} d\tau} e^{\frac{1}{\hbar} \beta \xi_0^* + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}_t(\xi_t^*, \eta_t) - i\eta_t \dot{\xi}_t^*] d\tau}, \quad (2.79)$$

donde κ cumple (2.33).

Como vemos, la obtención del elemento de matriz $(\alpha|\hat{U}(t)|\beta)$ conlleva la integración de dos variables complejas *independientes*, ξ_t^* y η_t , de las que tenemos información parcial en los instantes inicial y final; esto es, en $\tau = 0$ conocemos el valor de la variable η_0 (dado por β), pero el valor de ξ_0^* está indeterminado (y es distinto de β^*), mientras que en el instante final $\tau = t$ lo que conocemos es el valor de ξ_t^* (dado por α^*), pero no el valor de η_t (que en general será distinto de $(\alpha^*)^*$).

Encontrar las trayectorias complejas que cumplan este tipo de condiciones de contorno *mixtas* a dos tiempos generalmente no es sencillo.⁸ Por este motivo ha habido intentos de transformar este problema mixto a dos tiempos en un problema de valores iniciales, en el que se conozca el valor de *ambas* variables a tiempo inicial, puesto que en este caso la trayectoria clásica que contribuye está unívocamente

⁸De hecho, dificultad se incrementa a medida que aumenta el número de dimensiones del problema, ya que en el caso de que la dinámica clásica subyacente sea caótica el número de trayectorias que contribuyen al llamado “problema de la búsqueda de raíces” puede ser extremadamente grande (aparte del hecho de que el método de búsqueda tendría que enfrentarse a la alta inestabilidad de las trayectorias respecto a pequeñas variaciones en las condiciones iniciales).

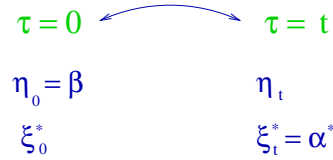


Figura 2.2: Condiciones de contorno de la trayectoria compleja requerida para evaluar el elemento de matriz $\langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta \rangle$.

determinada. Este método (conocido como IVR, del inglés Initial Value Representation) ha sido utilizado tanto en el formalismo de estados coherentes (Klauder [Kla87], Herman y Kluk [Her84], Kay [Kay94], Grossmann [Gro98]) como en la representación de coordenadas (Campolieti y Brumer [Cam98], Miller [Mil70, Mil74], Levit y Smilansky [Lev77]). Una revisión y clasificación de las aproximaciones semiclásicas basadas en paquetes de onda gaussianos, derivadas de un formalismo de integrales de camino en estados coherentes (expresadas tanto en forma de problemas con condiciones de contorno mixtas o como representaciones de valores iniciales) puede encontrarse en [Gro99].

Se han obtenido expresiones para el elemento de matriz del operador de evolución análogas a (2.79) desde un formalismo de integrales de camino de Feynman para el cálculo del propagador [Kur80]. En este formalismo, el propagador $\langle \alpha | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \beta \rangle$ se evalúa subdividiendo el intervalo temporal $(0, t)$ en N intervalos de longitud $\varepsilon = t/N$ e insertando $N - 1$ veces la relación de cierre para los estados coherentes entre dos intervalos adyacentes. El paso al continuo a través de los límites $N \rightarrow \infty$, $\varepsilon \rightarrow 0$ debe llevarse a cabo con especial cuidado, considerando las expresiones continuas adecuadas que finalmente darán lugar al término $\exp(iF/2)$ en el elemento de matriz del propagador. Baranger *et al* [Bar01], así como Castro Neto y Caldeira [Cas90] y Klauder [Kla86, Kla87], aluden a las condiciones de contorno mixtas para introducir, quizás de una manera que pudiera parecer artificial, los términos necesarios para obtener un resultado correcto. Schulman [Sch81], por el contrario, no da cuenta del término $\exp(iF/2)$, aunque intuye que su aparición está relacionada con el problema de ordenación de los operadores cuánticos. El motivo de que la introducción de estos términos extra pueda resultar *ad hoc* al evaluar el elemento de matriz $\langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta \rangle$ tiene que ver con la normalización de los estados coherentes, debido a los términos gaussianos que provienen del solapamiento $\langle \alpha | \beta \rangle = \exp(-(|\alpha|^2 + |\beta|^2)/(2\hbar) + \alpha^* \beta / \hbar)$. En la representación de Bargmann (estados coherentes no normalizados) los cálculos se simplifican considerablemente, y las gaussianas que los relacionan con los estados coherentes $[|\alpha\rangle = \exp(-|\alpha|^2/2\hbar)|\alpha\rangle]$ pueden añadirse *después* de haber obtenido el elemento de matriz $\langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta \rangle$. En este sentido, el método de Solari [Sol86], basado en estados de Bargmann, proporciona un resultado más directo que los anteriores. Es importante señalar que en todos los métodos semiclásicos propuestos para obtener el elemento de matriz del operador de evolución entre dos estados coherentes, tanto en el formalismo de integrales de camino

como en la generalización de la teoría WKB en la representación de Bargmann, las aproximaciones se llevan a cabo evaluando las integrales involucradas mediante la aproximación de fase estacionaria. En este sentido, el algoritmo que hemos propuesto tiene la ventaja no sólo de simplificar de manera considerable los cálculos, sino de proporcionar una expresión para el propagador de una manera directa, sin pasar por la aproximación de fase estacionaria. Hasta donde sabemos, esta forma de proceder no ha sido empleada anteriormente.

2.2.3. Aproximación semiclásica al operador de evolución

Los elementos de matriz del operador de evolución dados por (2.78) definen la *representación Q del operador de evolución*:

$$\mathcal{U}_Q(\alpha^*, \beta, t) = \frac{(\alpha | \hat{U}(t) | \beta)}{(\alpha | \beta)}.$$

En la presente sección obtendremos una expresión integral para el operador $\hat{U}(t)$ asumiendo una *representación P generalizada* para éste, dada por

$$\hat{U}(t) = \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \mathcal{U}_P(\delta_t, \alpha^*, t) |\delta_t\rangle \langle \alpha|, \quad (2.80)$$

donde δ_t está relacionada con α y α^* a través de una aplicación dependiente del tiempo.

Como sabemos, la no-ortogonalidad de los estados coherentes es responsable de que éstos formen una base que es sobrecompleta. La forma \mathcal{P} para el operador identidad tiene la forma

$$\hat{I} = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \langle \alpha| = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \langle \alpha| e^{-\alpha\alpha^*/\hbar}. \quad (2.81)$$

Insertando esta relación de cierre a cada lado del operador de evolución, éste puede escribirse como

$$\hat{U}(t) = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{-\alpha\alpha^*/\hbar} \int \int \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} e^{-\beta\beta^*/\hbar} |\alpha\rangle \langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta\rangle \langle \beta|. \quad (2.82)$$

Estas integrales están definidas en un espacio complejo en el que existe una estructura simpléctica, y la bi-forma que la define constituye una medida $d^2\alpha$ que es real y viene dada por $d^2\alpha \equiv d(\text{Re } \alpha) d(\text{Im } \alpha)$ (en este párrafo, lo que digamos para las variables α , α^* deberá aplicarse igualmente a las variables β , β^*). Una de las ventajas más interesantes que presenta la representación de Bargmann consiste en la posibilidad de poder extender estas integrales a una variedad compleja con una métrica diagonal definida por $d\mu = d\alpha d\alpha^*$ en la que las variables α y α^* en general son *independientes*, es decir, no están relacionadas por conjugación compleja. (No obstante, en cualquier momento tenemos la libertad de elegir las variables α y α^* de forma que *sí* sean complejas conjugadas entre sí, esto es, $(\alpha^*)^* = \alpha$). De esta forma, la ec. (2.82) puede escribirse como

$$\hat{U}(t) = \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \int_{\Gamma_{\beta, \beta^*}} \frac{d\beta d\beta^*}{2\pi\hbar i} |\alpha\rangle \langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta\rangle \langle \beta| e^{-\alpha\alpha^*/\hbar - \beta\beta^*/\hbar}, \quad (2.83)$$

donde los caminos de integración $\Gamma_{\alpha, \alpha^*}$, son curvas parametrizadas por las variables reales del espacio de fases q y p . En estas superficies, las variables α y α^* son complejas conjugadas entre sí. En el caso de que el integrando de (2.83) sea una función holomorfa (analítica) de las variables α y α^* , estos contornos podrán deformarse dependiendo de las condiciones de convergencia del *kernel* de (2.83) para valores asintóticamente grandes de $|\operatorname{Re} \alpha|$ y $|\operatorname{Re} \alpha^*|$.⁹

La aproximación semiclásica obtenida para $(\alpha|\hat{U}(t)|\beta)$ cumple el requerimiento de analiticidad exigido para poder llevar a cabo esta deformación. Como se ha indicado, la evaluación de este elemento de matriz requiere resolver un problema con condiciones de contorno mixtas a dos tiempos. Para poner de manifiesto el hecho de que la variable β hace referencia al estado inicial y α^* al final, es conveniente

⁹Por ejemplo, el solapamiento entre dos estados de Bargmann puede obtenerse insertando la relación de cierre según

$$(\beta|\gamma) = (\beta|\int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} |\alpha\rangle\langle\alpha| e^{-\alpha\alpha^*/\hbar} |\gamma\rangle) = \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} e^{\beta^*\alpha/\hbar} e^{-\alpha\alpha^*/\hbar} e^{\alpha^*\gamma/\hbar}.$$

Puesto que el integrando es una función analítica, puede llevarse a cabo una deformación de los contornos $\Gamma_{\alpha, \alpha^*}$. Escribiendo la variable α en la forma $\alpha = \gamma + \rho e^{i\theta}$, podemos elegir para la otra variable α^* un camino de integración Γ_{α^*} definido por $\alpha^* = r e^{-i\theta}$, con $0 \leq r \leq \infty$ y la misma fase θ que α . La integración a lo largo de este camino da lugar a la función $\hbar e^{\beta^*\alpha/\hbar}/(\alpha - \gamma)$, que tiene un polo en $\alpha = \gamma$. De esta manera, la integral en α restante, dada por

$$(\beta|\gamma) = \int_{\Gamma_{\alpha}} \frac{d\alpha}{2\pi i} \frac{e^{\beta^*\alpha/\hbar}}{\alpha - \gamma},$$

deberá llevarse a cabo a lo largo de un camino Γ_{α} que encierre esta singularidad. Eligiendo este camino como el círculo de radio ρ y centro en $\alpha = \gamma$ se llega al resultado correcto:

$$(\beta|\gamma) = \operatorname{Res}\{\alpha = \gamma\} = \lim_{\alpha \rightarrow \gamma} (\alpha - \gamma) \frac{e^{\beta^*\alpha/\hbar}}{\alpha - \gamma} = e^{\beta^*\gamma/\hbar},$$

donde *Res* denota el residuo del polo $\alpha = \gamma$. Otra elección posible de los caminos $\Gamma_{\alpha, \alpha^*}$ viene dada por

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) + \chi$$

$$\alpha^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip) + \zeta^*,$$

donde q y p son parámetros reales, y χ y ζ^* dos constantes complejas. Puesto que en este caso los caminos son independientes de β y γ , en realidad lo que se tiene es una resolución de la identidad diferente:

$$\hat{I} = \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} e^{-(\alpha^* + \zeta^*)(\alpha + \chi)/\hbar} |\alpha + \chi\rangle\langle\alpha + \zeta|.$$

De hecho, la elección $\alpha = q$ y $\alpha^* = -ip$ conduce a otra forma interesante de resolución de la identidad:

$$\hat{I} = \int \frac{dq dp}{2\pi\hbar} e^{ipq/\hbar} |q\rangle\langle ip|.$$

De esta manera, una expresión generalizada para la resolución de la identidad, más general que la dada por (2.81), tendrá la forma

$$\hat{I} = \int_{\Gamma_{\eta, \xi^*}} \frac{d\eta d\xi^*}{2\pi\hbar i} e^{-\xi^*\eta/\hbar} |\eta\rangle\langle\xi|, \quad (2.84)$$

que será válida para determinada elección de los caminos Γ_{η, ξ^*} , siendo η y ξ^* dos variables complejas independientes.

realizar un cambio en la notación, escribiendo el núcleo de la ec. (2.83) como

$$(\alpha|\hat{U}(t)|\beta) \simeq A^{(0)}(\alpha^*, \beta, t) e^{\frac{i}{\hbar}S^{(0)}(\alpha^*, \beta, t)} = A^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t) e^{\frac{i}{\hbar}S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)}, \quad (2.85)$$

con $A^{(0)}$ y $S^{(0)}$ dados por (2.65) y (2.56), respectivamente, con lo que el operador de evolución (2.83) se escribe

$$\hat{U}(t) = \int \frac{d\alpha d\xi_t^*}{2\pi\hbar i} \int \frac{d\eta_0 d\beta^*}{2\pi\hbar i} |\alpha\rangle A^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t) e^{\frac{i}{\hbar}S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)} \langle\beta| e^{-\alpha\xi_t^*/\hbar - \eta_0\beta^*/\hbar}. \quad (2.86)$$

La mayoría de las expresiones semiclásicas propuestas para el operador de evolución involucran aproximaciones a integrales con un *kernel* del tipo $e^{iS[q_t]/\hbar}$ mediante procedimientos conocidos como método de fase estacionaria o de *steepest-descent* (máxima pendiente de descenso) [Ble75]. Estas aproximaciones son válidas en el límite semiclásico $\hbar \rightarrow 0$, en el cual la función exponencial presenta fuertes oscilaciones y las contribuciones a la integral pueden reducirse a las de los puntos q_t^s en los que la fase es estacionaria, esto es, $\partial_q S[q_t^s] = 0$. En este caso aplicaremos este método para obtener una aproximación a las integrales en ξ_t^* y η_0 que intervienen en (2.86), por lo que escribimos esta integral como

$$\hat{U}(t) = \int_{\Gamma_{\alpha, \beta^*}} \frac{d\alpha d\beta^*}{2\pi\hbar i} \int_{\Gamma_{\xi_t^*, \eta_0}} \frac{d\xi_t^* d\eta_0}{2\pi\hbar i} |\alpha\rangle A^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t) e^{\frac{i}{\hbar}\phi(\xi_t^*, \eta_0, t)} \langle\beta|, \quad (2.87)$$

con

$$\phi(\xi_t^*, \eta_0, t) = S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t) + i\alpha\xi_t^* + i\eta_0\beta^*, \quad (2.88)$$

donde la notación para $\phi(\xi_t^*, \eta_0, t)$ indica que las variables α y β^* se consideran fijas al realizar la integral. Estrictamente hablando, ninguno de los nombres anteriores es del todo correcto en nuestro caso, puesto que la función ϕ , al ser compleja, no es una “fase” en sentido estricto. Por otra parte, el término *steepest-descent* hace referencia a una interpretación geométrica para el caso de una única variable compleja. El término más adecuado es el de método de *saddle-point* o punto de silla. En cualquier caso, haremos uso de una generalización del método de fase estacionaria a integrales de variable compleja, desarrollando hasta segundo orden la fase $\phi(\xi_t^*, \eta_0, t)$ en torno a los puntos estacionarios, definidos por $\partial_{\xi_t^*}\phi = \partial_{\eta_0}\phi = 0$, y evaluando las integrales gaussianas de forma exacta [ver Apéndice (B)]. Debe tenerse en cuenta que al evaluar la integral por este método, la variedad $\Gamma_{\xi_t^*, \eta_0}$ debe deformarse de forma que incluya los puntos estacionarios del exponente. Como último apunte hemos de hacer notar que la exponencial $e^{iF(\alpha^*, t)/2}$ que aparece en el prefactor $A^{(0)}$ no ha sido incluida en la fase ϕ que hemos de hacer estacionaria puesto que se trata de un término clásico que no depende de \hbar y por tanto no produce oscilaciones en el límite $\hbar \rightarrow 0$.

El cálculo de las derivadas de ϕ con respecto a ξ_t^* y η_0 involucra la evaluación de las derivadas de la acción $S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)$ con respecto a estas variables. A continuación abriremos un paréntesis para obtener estas derivadas. Las condiciones de contorno mixtas para la evaluación de $(\alpha|\hat{U}(t)|\beta)$ permiten definir como variables independientes las dos variables que están fijas en los extremos, esto es, $\eta_0 = \beta$ y $\xi_t^* = \alpha^*$, además del tiempo t , mientras que β^* y α deben entenderse como funciones de estas tres variables. De

esta manera, variaciones infinitesimales $\delta\eta_0$, $\delta\xi_t^*$ y δt en cada una de estas variables independientes inducirán variaciones $\delta\beta^*$ y $\delta\alpha$ en las variables β^* y α , así como variaciones en la propia trayectoria. La correspondiente variación en la acción $S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)$, dada por (2.56), será:

$$\begin{aligned} \delta S^{(0)} &= -i\xi_0^* \delta\eta_0 - i\eta_0 \delta\xi_0^* + \int_0^{t+\delta t} \left[-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \xi_\tau^*} \delta\xi_\tau^* - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \eta_\tau} \delta\eta_\tau - i\dot{\xi}_\tau^* \delta\eta_\tau - i\eta_\tau \delta\dot{\xi}_\tau^* \right] d\tau \\ &+ \left[-\mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t) - i\eta_t \dot{\xi}_t^* \right] \delta t. \end{aligned} \quad (2.89)$$

Evaluando por partes la integral

$$\int_0^{t+\delta t} \eta_\tau \delta\dot{\xi}_\tau^* d\tau = \eta \delta\xi^*|_0^{t+\delta t} - \int_0^{t+\delta t} \dot{\eta}_\tau \delta\xi_\tau^* d\tau$$

se observa que el límite inferior de la integral en τ no cambia, mientras que para evaluar el límite superior debe tenerse en cuenta que la variación en ξ^* se debe no sólo a la propia variación de esta variable, sino a la variación inducida por el cambio de t a $t + \delta t$, con lo que

$$\int_0^{t+\delta t} \eta_\tau \delta\dot{\xi}_\tau^* d\tau = \eta_t (\delta\xi_t^* - \dot{\xi}_t^* \delta t) - \eta_0 \delta\xi_0^* - \int_0^{t+\delta t} \dot{\eta}_\tau \delta\xi_\tau^* d\tau.$$

De esta forma, la variación inducida en la acción, ec. (2.89), vendrá dada por

$$\begin{aligned} \delta S^{(0)} &= -\int_0^{t+\delta t} \left[\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \xi_\tau^*} - i\dot{\eta}_\tau \right) \delta\xi_\tau^* + \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \eta_\tau} + i\dot{\xi}_\tau^* \right) \delta\eta_\tau \right] d\tau \\ &- i\xi_0^* \delta\eta_0 - i\eta_t \delta\xi_t^* - \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t) \delta t. \end{aligned} \quad (2.90)$$

La primera línea de la ec. (2.90) indica que aquellas trayectorias para las que se satisfacen las ecuaciones de Hamilton

$$\begin{aligned} \eta_\tau &= -i \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \xi_\tau^*} \\ \dot{\xi}_\tau^* &= i \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \eta_\tau} \end{aligned}$$

tienen una acción $S^{(0)}$ estacionaria cuando las variables independientes ξ_t^* , η_0 y t se mantienen fijas. Para estas trayectorias podemos obtener las derivadas de $S^{(0)}$ respecto a dichas variables teniendo en cuenta la relación

$$\begin{aligned} \delta S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t) &= \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)}{\partial \xi_t^*} \Bigg|_{\eta_0, t} \delta\xi_t^* + \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)}{\partial \eta_0} \Bigg|_{\xi_t^*, t} \delta\eta_0 \\ &+ \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)}{\partial t} \Bigg|_{\xi_t^*, \eta_0} \delta t. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Identificando términos en (2.90) y (2.91), obtenemos finalmente las derivadas deseadas:¹⁰

$$\eta_t = i \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)}{\partial \xi_t^*} \quad (2.92a)$$

$$\xi_0^* = i \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)}{\partial \eta_0} \quad (2.92b)$$

$$-\mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t) = \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)}{\partial t}. \quad (2.92c)$$

La última de estas igualdades corresponde a la ecuación de Hamilton-Jacobi (2.50).

Una vez obtenidas las derivadas de la acción, podemos cerrar el paréntesis abierto y obtener los valores (ξ_t^{*s}, η_0^s) que hacen que la fase de la integral en ξ_t^* y η_0 en (2.87) sea estacionaria. Estos valores son tales que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(\xi_t^{*s}, \eta_0^s, t)}{\partial \xi_t^*} &= \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)}{\partial \xi_t^*} + i\alpha = -i\eta_t + i\alpha = 0 \\ \frac{\partial \phi(\xi_t^{*s}, \eta_0^s, t)}{\partial \eta_0} &= \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)}{\partial \eta_0} + i\beta^* = -i\xi_0^* + i\beta^* = 0, \end{aligned}$$

esto es:

$$\eta_t = \alpha \quad (2.93a)$$

$$\xi_0^* = \beta^*. \quad (2.93b)$$

Como sabemos, la evaluación del elemento de matriz $\langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta \rangle$ requiere determinar la trayectoria compleja $\{\xi_\tau^*, \eta_\tau; 0 \leq \tau \leq t\}$ que cumple las condiciones de contorno

$$\begin{aligned} \xi_t^* &= \alpha^* \\ \eta_0 &= \beta. \end{aligned}$$

Cuando se integra sobre todos los posibles valores de η_0 y ξ_t^* , el método de *saddle point* selecciona únicamente aquellas trayectorias tales que $\eta_t = \alpha$ y $\xi_0^* = \beta^*$. (Recordemos que esta integral ha sido calculada manteniendo fijos los valores de α y β^*).

¹⁰Existe otra manera de obtener estas derivadas, que consiste en escribir la aproximación para el elemento de matriz de $\hat{U}(t)$ como $\langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta \rangle = \langle \Psi(-t) | \beta \rangle \equiv \Psi^*(\alpha^*, \beta, -t)$, es decir, considerando la evolución *hacia atrás* en el tiempo del estado final $|\alpha\rangle$ y su solapamiento con el estado inicial $|\beta\rangle$. El procedimiento a seguir sería el mismo que el descrito en la sección (2.2.1), proyectando la ecuación compleja conjugada a la de Schrödinger, $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi(t) | = \langle \Psi(t) | \hat{H}^\dagger = \langle \Psi(t) | \hat{H}$, sobre los estados de Bargmann

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi(t) | \beta \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{H} | \beta \rangle,$$

escribiendo $\Psi^*(\beta, -t)$ como $A(\beta, -t) \exp(iS(\beta, -t)/\hbar)$, y desarrollando A y S en potencias de \hbar . La ecuación obtenida para el orden \hbar^0 corresponde a una ecuación de Hamilton-Jacobi de la forma

$$\frac{\partial S^{(0)}(\beta, t)}{\partial t} + \mathcal{H}\left(i \frac{\partial S^{(0)}(\beta, t)}{\partial \beta}, \beta\right) = 0$$

que permite definir la variable α^* como $\alpha^* \equiv i \partial S / \partial \beta$ [ec. (2.92b)].

En la aproximación de la integral (2.87) por el método de fase estacionaria interviene el determinante de la matriz de derivadas segundas de la fase $\phi(\xi_t^*, \eta_0, t)$. Estas derivadas se reducen a las derivadas segundas de la acción $S^{(0)}$ que, como veremos, pueden escribirse en términos de los elementos de la matriz de estabilidad del sistema. Teniendo en cuenta que vamos a efectuar sucesivos cambios de variables hasta obtener el resultado final, es conveniente mostrar explícitamente las integrales gaussianas que hemos de evaluar. Así, la expresión (2.87) puede aproximarse por

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &\simeq \int_{\Gamma_{\eta_t, \xi_0^*}} \frac{d\eta_t d\xi_0^*}{2\pi\hbar i} | \eta_t \rangle A^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t) e^{\frac{i}{\hbar} \phi(\xi_t^*, \eta_0; t)} (\xi_0 | \\ &\times \int_{\Gamma_{\xi_t^*, \eta_0}} \frac{d\xi_t^* d\eta_0}{2\pi\hbar i} e^{\frac{i}{2\hbar} \left[\left. \frac{\partial^2 \phi(\xi_t^*, \eta_0; t)}{\partial \xi_t^{*2}} \right|_s \xi_t^{*2} + \left. \frac{\partial^2 \phi(\xi_t^*, \eta_0; t)}{\partial \eta_0^2} \right|_s \eta_0^2 + 2 \left. \frac{\partial^2 \phi(\xi_t^*, \eta_0; t)}{\partial \xi_t^* \partial \eta_0} \right|_s \xi_t^* \eta_0 \right]}. \end{aligned} \quad (2.94)$$

En la integral gaussiana de (2.94) efectuaremos un primer cambio de variables: $\xi_t^* \rightarrow \xi_0^*$. Las derivadas segundas de la fase que aparecen en el exponente se reducen a las derivadas segundas de $S^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)$. Con el cambio de variables mencionado, se tiene:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial S^{(0)}}{\partial \xi_0^*} \right|_{\eta_0} &= \frac{\partial S^{(0)}}{\partial \xi_t^*} \frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*} = -i \eta_t M_{22} \\ \left. \frac{\partial S^{(0)}}{\partial \eta_0} \right|_{\xi_0^*} &= \frac{\partial S^{(0)}}{\partial \eta_0} + \frac{\partial S^{(0)}}{\partial \xi_t^*} \frac{\partial \xi_t^*}{\partial \eta_0} = -i \xi_0^* - i \eta_t M_{21}, \end{aligned}$$

mientras que las derivadas segundas tendrán la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \xi_0^{*2}} &= -i \frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_0^*} M_{22} = -i M_{12} M_{22} \\ \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \eta_0 \partial \xi_0^*} &= -i \frac{\partial \eta_t}{\partial \eta_0} M_{22} = -i M_{11} M_{22} \\ \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \xi_0^* \partial \eta_0} &= -i \frac{\partial \xi_0^*}{\partial \xi_0^*} - i \frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_0^*} M_{21} = -i (1 + M_{12} M_{21}) = -i M_{11} M_{22} \\ \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \eta_0^2} &= -i \frac{\partial \eta_t}{\partial \eta_0} M_{21} = -i M_{11} M_{21}. \end{aligned}$$

En estas relaciones, M_{ij} denotan los elementos de la matriz de estabilidad generalizada, \mathbf{M} , que relaciona pequeños desplazamientos de la trayectoria clásica compleja en torno al punto inicial a tiempo $\tau = 0$ con los desplazamientos a tiempo $\tau = t$:

$$\begin{pmatrix} \delta \eta_t \\ \delta \xi_t^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial \eta_t}{\partial \eta_0} \right|_{\xi_0^*} & \left. \frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_0^*} \right|_{\eta_0} \\ \left. \frac{\partial \xi_t^*}{\partial \eta_0} \right|_{\xi_0^*} & \left. \frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*} \right|_{\eta_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \eta_0 \\ \delta \xi_0^* \end{pmatrix} \equiv \mathbf{M} \begin{pmatrix} \delta \eta_0 \\ \delta \xi_0^* \end{pmatrix}. \quad (2.95)$$

Esta matriz es simpléctica y por tanto su determinante es la unidad:¹¹

$$\det \mathbf{M} = M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} = 1. \quad (2.96)$$

En estas condiciones, la integral gaussiana que aparece en (2.94) viene dada por

$$\int_{\Gamma_{\xi_0^*, \eta_0}} \frac{d\xi_0^* d\eta_0}{2\pi\hbar i} \left| \frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*} \right| e^{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \xi_0^{*2}} \xi_0^{*2} + \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \eta_0^2} \eta_0^2 + 2 \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \xi_0^* \partial \eta_0} \xi_0^* \eta_0 \right]} = M_{22} (\det \mathbf{D})^{-1/2},$$

donde el término M_{22} corresponde al jacobiano de la transformación $\xi_t^* \rightarrow \xi_0^*$ y la matriz \mathbf{D} está dada por

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \xi_0^{*2}} & \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \xi_0^* \partial \eta_0} \\ \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \eta_0 \partial \xi_0^*} & \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \eta_0^2} \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} M_{12}M_{22} & M_{11}M_{22} \\ M_{11}M_{22} & M_{11}M_{21} \end{pmatrix},$$

cuyo determinante vale

$$\det \mathbf{D} = -M_{11}M_{22} (M_{21}M_{12} - M_{11}M_{22}) = M_{11}M_{22},$$

según la propiedad (2.96). Con estos resultados, la integral (2.94) se escribe:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &\simeq \int_{\Gamma_{\eta_t, \xi_0^*}} \frac{d\eta_t d\xi_0^*}{2\pi\hbar i} \left(\frac{M_{22}}{M_{11}} \right)^{1/2} A^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t) e^{\frac{i}{\hbar} \phi(\xi_t^*, \eta_0, t)} |\eta_t\rangle \langle \xi_0| \\ &\simeq \int_{\Gamma_{\eta_t, \xi_0^*}} \frac{d\eta_t d\xi_0^*}{2\pi\hbar i} (M_{11})^{-1/2} e^{\frac{i}{2} \kappa \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \xi_\tau^* \partial \eta_\tau} d\tau} e^{\frac{-1}{\hbar} \eta_0 \xi_0^* + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau} |\eta_t\rangle \langle \xi_0| \end{aligned} \quad (2.97)$$

Un último cambio de variables $\eta_t \rightarrow \eta_0$ (con el consiguiente término de jacobiano $\partial \eta_t / \partial \eta_0 \equiv M_{11}$) conduce a la expresión final para el operador de evolución semiclásico:

$$\hat{U}(t) \simeq \int_{\Gamma_{\eta_0, \xi_0^*}} \frac{d\eta_0 d\xi_0^*}{2\pi\hbar i} \left(\frac{\partial \eta_t}{\partial \eta_0} \right)^{1/2} e^{\frac{i}{2} \kappa \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \xi_\tau^* \partial \eta_\tau} d\tau} e^{\frac{-1}{\hbar} \eta_0 \xi_0^* + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau} |\eta_t\rangle \langle \xi_0|, \quad (2.98)$$

donde los valores de ξ_0^* y de η_0 proporcionan la condición de contorno a un mismo tiempo para la trayectoria genérica compleja.

Como caso particular, podemos elegir Γ_{η_0, ξ_0^*} como la variedad del espacio de fases en la que $\xi_0^* = \alpha^*$ es la compleja conjugada de $\eta_0 = \alpha$, y las trayectorias son reales. En este caso, $\hat{U}(t)$ tiene la forma de representación \mathcal{P} generalizada dada por la ec. (2.80), es decir

$$\hat{U}(t) = \iint \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \mathcal{U}_P(\alpha_t, \alpha^*, t) |\alpha_t\rangle \langle \alpha|, \quad (2.99)$$

con un *kernel* dado por

$$\mathcal{U}_P(\alpha_t, \alpha_0, t) = \left(\frac{\partial \alpha_t}{\partial \alpha_0} \right)^{1/2} e^{\frac{i}{2} \kappa \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_\tau^*, \alpha_\tau)}{\partial \alpha_\tau^* \partial \alpha_\tau} d\tau} e^{\frac{-1}{\hbar} \alpha_0 \alpha_0^* + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\alpha_\tau^*, \alpha_\tau) + i \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau] d\tau}. \quad (2.100)$$

¹¹Esta propiedad es un reflejo de la propiedad de preservación de área que cumple un flujo hamiltoniano, consecuencia directa del teorema de Liouville.

Solari [Sol86] ha obtenido este resultado para hamiltonianos con ordenación normal haciendo uso de una aproximación diferente. Los elementos de matriz entre estados $|q\rangle$ del operador (2.99) para el caso de un hamiltoniano con ordenación simétrica conduce a la representación semiclásica de Herman-Kluk del propagador [Her84].

Esta forma \mathcal{P} del operador de evolución proporciona una representación de valores iniciales (IVR) para el propagador, en la que las trayectorias que intervienen quedan determinadas por condiciones dadas únicamente en el instante inicial. Deformando convenientemente la variedad de integración, estas trayectorias pueden hacerse complejas, de forma que en lugar de la ec. (2.99), se tendría una representación IVR más general, dada por (2.98), en la que η_0 y ξ_0^* son variables complejas independientes.

Existe una clase diferente de representación IVR semiclásica, propuesta por Heller, basada en una aproximación a la función de onda dada por un paquete de onda gaussiano. En la *Frozen Gaussian Approximation* [Hel81] (FGA, o aproximación de gaussiana “congelada”), la función de onda se aproxima por una superposición de paquetes gaussianos, cada uno de los cuales está centrado en una trayectoria clásica y tiene una fase dada por la integral de acción clásica a lo largo de dicha trayectoria, evolucionando en el tiempo sin distorsionar su forma. (El propagador de Herman-Kluk [Her84] entra dentro de esta categoría de aproximaciones FGA). En la *Thawed Gaussian Approximation* [Hel75, Hel76] (TGA o aproximación de gaussiana “derretida”), se aproxima el paquete de ondas por una única gaussiana. Truncando el desarrollo del potencial en torno al centro instantáneo del paquete a orden cuadrático, se encuentra que el paquete evoluciona manteniendo la forma gaussiana (puesto que a cada instante de tiempo el paquete siente un potencial armónico), si bien cambia de anchura y adquiere una fase igual a la integral de acción a lo largo del camino clásico. En la *Generalized Gaussian Wave Packet Dynamics* (GGWPD) [Hub88] se efectúa una extensión de la dinámica de paquetes de onda gaussianos a un espacio de fases complejo, y se obtienen los elementos de matriz del propagador en una “representación mixta”: $\langle q|\hat{U}(t)|g\rangle$, donde $|g\rangle$ es un estado gaussiano.

Es posible derivar estas aproximaciones a partir del formalismo WKB en la representación de Bargmann que hemos desarrollado. Sin embargo, pospondremos esta demostración hasta el Capítulo 5. En este capítulo obtendremos una aproximación a la función de onda mediante un método variacional que, en el límite semiclásico, reproduce la aproximación (2.78) para el propagador en estados coherentes. En ese contexto resulta más intuitivo derivar los resultados de Heller y, como consecuencia, mostrar la equivalencia de ambos tipos de aproximación.

Conviene indicar que este procedimiento de “complexificación de las variables de posición y momento” ha sido utilizado anteriormente en diversas aproximaciones semiclásicas al propagador (Klauder [Kla79], Kuratsuji y Mizobuchi [Kur81a, Kur81b], así como Blaizot y Orland [Bla81]). Sin embargo, esta extensión a variable compleja resulta mucho más natural en el formalismo de estados de Bargmann, debido a su naturaleza compleja intrínseca. En el Capítulo 4 se pondrán de manifiesto las ventajas de esta

estructura compleja mediante el uso de trayectorias complejas en la descripción de fenómenos puramente cuánticos como el *tunneling*.

Capítulo 3

Aproximaciones uniformes

3.1. Aproximación uniforme a la función de onda independiente del tiempo

Los problemas de divergencia en las cústicas que presenta la aproximación WKB constituyen un importante inconveniente para su uso en aplicaciones prácticas [Mil53]. Así, en los puntos que separan las regiones clásicamente permitidas y clásicamente prohibidas, la aproximación “explota”, y las expresiones para la función de onda se vuelven incorrectas. Aunque en principio es posible remediar este problema ajustando de forma suave distintas expresiones semiclásicas que son válidas localmente en distintas regiones del espacio (tal y como propone Maslov [Mas81, Del86]), esto requiere estar pasando de una a otra representación mixta de coordenadas y momentos.

Es altamente deseable por tanto obtener una expresión semiclásica para la función de onda que sea globalmente uniforme, esto es, que sea válida para todos los puntos del espacio y que sea uniformemente exacta en el límite clásico. Se han propuesto diversas aproximaciones para la función de onda independiente del tiempo dentro del formalismo de estados coherentes [Hel81, Her84, Lit85, McD85, Kla86, Lit86a, Lit86b, Kur89, Vor89].

En este capítulo derivaremos la aproximación semiclásica uniforme para la función de ondas propuesta por Zor y Kay [Zor96] haciendo uso de transformaciones unitarias, así como de la aproximación a la función de onda en la representación de Bargmann descrita en el capítulo anterior. Esta expresión uniforme viene dada por

$$\Psi(x) = \mathcal{N} \int dt C_t e^{\left[-\frac{\lambda_t}{\hbar} (x - q_t)^2 + \frac{i}{\hbar} p_t (x - q_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau \right]}, \quad (3.1)$$

donde p_t y q_t son el momento y la coordenada en el tiempo t para la trayectoria clásica correspondiente al estado cuántico $|\Psi\rangle$. El factor preexponencial está definido por

$$C_t = (\dot{p}_t - 2i\lambda_t \dot{q}_t)^{1/2}, \quad (3.2)$$

en el que la fase de la raíz cuadrada se ha elegido de tal manera que C_t sea una función continua de t . La integración temporal se realiza a lo largo de un periodo del movimiento $(0, T)$ si el sistema es ligado, y se extiende hasta infinito si no lo es. En el caso más sencillo, λ es una constante arbitraria, finita y positiva; para un caso más general, puede elegirse como una función arbitraria de t compleja, analítica, que satisfaga $\text{Re } \lambda > 0$ y $|\lambda| < \infty$. Para un sistema ligado, adicionalmente se ha de cumplir que λ sea una función periódica con periodo T . Finalmente, \mathcal{N} es una constante de normalización.

Esta aproximación cumple las siguientes propiedades:

(i) Eligiendo adecuadamente el parámetro λ , es una representación *exacta* de $\Psi(x)$ para sistemas cuyos hamiltonianos sean funciones como máximo cuadráticas de los momentos y las coordenadas.

(ii) Se reduce a la expresión original WKB cuando la integral se aproxima por el método de fase estacionaria.

(iii) Se reduce asimismo a la expresión WKB en el límite $\lambda \rightarrow \infty$.

(iv) En el límite $\lambda \rightarrow 0$ corresponde a la transformada de Fourier de la función de onda WKB en la representación de momentos.

Es importante señalar que las funciones de onda obtenidas en los casos límite $\lambda \rightarrow 0$ y $\lambda \rightarrow \infty$ no son aproximaciones uniformes. Para el caso $\lambda \rightarrow \infty$, la función de onda obtenida deja de ser válida en las cústicas, donde \dot{x}_t se anula. En el límite $\lambda \rightarrow 0$, esta pérdida de validez es más global, debido a las singularidades que la función de onda en la representación de momentos presenta donde \dot{p}_t es cero.

Para valores intermedios de λ , la aproximación permanece válida en todos los puntos, y puede ser utilizada para cualquier valor de x (incluso en regiones clásicamente prohibidas, a pesar de estar construida en términos de trayectorias (q_t, p_t) clásicas). El procedimiento de Maslov para producir un resultado globalmente uniforme consistiría en multiplicar las funciones de onda originales por funciones de ajuste, que lo que hacen esencialmente es eliminar las singularidades, aplicar las expresiones modificadas para los casos $\lambda = 0$ y $\lambda = \infty$ en sus respectivas regiones de validez, y unir los resultados de forma suave. La expresión (3.1), sin embargo, evita la introducción de estas funciones de ajuste, tener que estar cambiando de representaciones y ajustando las funciones de onda: al ser una expresión que interpola las representaciones de coordenadas y momentos, evita el problema de las cústicas que, como se ha indicado, por lo general limita la validez de estas representaciones.

A continuación procederemos a obtener el resultado (3.1) para la función de onda en la representación de coordenadas haciendo uso de la aproximación semiclásica para la función de onda en la representación de Bargmann desarrollada en el capítulo anterior. Para ello introducimos una transformación unitaria \hat{T} , definiendo una función Ψ' tal que $|\Psi\rangle = \hat{T}|\Psi'\rangle$, de forma que

$$\Psi(x) \equiv \langle x|\Psi\rangle \equiv \langle x|\hat{T}|\Psi'\rangle = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \langle x|\hat{T}|\alpha\rangle \langle \alpha|\Psi'\rangle e^{-\alpha\alpha^*/\hbar}, \quad (3.3)$$

donde hemos insertado la relación de cierre para los estados de Bargmann. Comenzaremos por repro-

ducir el resultado (3.1) para un valor de λ independiente del tiempo, lo que puede conseguirse mediante un operador \hat{T} correspondiente a un *squeezing*. (Los casos extremos $\lambda \rightarrow 0$ y $\lambda \rightarrow \infty$ serán tratados posteriormente mediante un procedimiento análogo, pero haciendo uso de operadores no unitarios, que denotaremos por \hat{T}_0 y \hat{T}_∞ , respectivamente). Para ello es conveniente definir una función $\Phi_\alpha(x)$ dada por

$$\Phi_\alpha(x) \equiv \langle x | \hat{T} | \alpha \rangle,$$

correspondiente a la representación en coordenadas del “estado de Bargmann generalizado” $\hat{T}|\alpha\rangle$ (que denotamos así por analogía con un estado coherente generalizado $\hat{S}|\alpha\rangle = \hat{S}\hat{D}|0\rangle$). Definiendo $\Psi'(\alpha^*) \equiv \langle \alpha | \Psi' \rangle$ como la representación en estados de Bargmann del estado $|\Psi'\rangle$, la expresión (3.3) puede escribirse como

$$\Psi(x) = \iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \Phi_\alpha(x) \Psi'(\alpha^*) e^{-\alpha\alpha^*/\hbar}. \quad (3.4)$$

Como sabemos, estas integrales pueden extenderse a una variedad (una variedad bidimensional en un espacio tetradimensional complejo) en la que α y α^* son variables complejas *independientes* haciendo uso de una resolución de la identidad más general dada por (2.84). De esta forma, la aproximación (3.4) puede escribirse como

$$\Psi(x) = \int_{\Gamma_{\alpha,\alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \Phi_\alpha(x) \Psi'(\alpha^*) e^{-\alpha\alpha^*/\hbar},$$

donde la variedad Γ_{α,α^*} puede parametrizarse por variables reales, según se indicó en la sección (2.2.3).

Calculemos en primer lugar la función $\Phi_\alpha(x)$. Por definición de los estados coherentes no normalizados $|\alpha\rangle$, esta función puede escribirse en términos del operador (no unitario)

$$\hat{d}_\alpha \equiv e^{\hbar^{-1/2}\alpha a^\dagger},$$

de forma que

$$|\alpha\rangle = \hat{d}_\alpha |0\rangle,$$

con lo que la función $\Phi_\alpha(x)$ vendrá dada por

$$\Phi_\alpha(x) \equiv \langle x | \hat{T} | \alpha \rangle = \langle x | \hat{T} \hat{d}_\alpha | 0 \rangle. \quad (3.5)$$

Para obtener esta función es necesario saber cómo quedan transformados los operadores de creación y destrucción, a^\dagger y a , bajo la acción de \hat{d}_α y \hat{T} . El operador \hat{d}_α actúa de la siguiente manera:

$$\hat{d}_\alpha^{-1} a^\dagger \hat{d}_\alpha = a^\dagger \quad ; \quad \hat{d}_\alpha a^\dagger \hat{d}_\alpha^{-1} = a^\dagger \quad (3.6a)$$

$$\hat{d}_\alpha^{-1} a \hat{d}_\alpha = a + \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \quad ; \quad \hat{d}_\alpha a \hat{d}_\alpha^{-1} = a - \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}}. \quad (3.6b)$$

Por otra parte, la actuación del operador de squeezing

$$\hat{T}(v, v^*) = e^{\frac{1}{2}(v a^{\dagger 2} - v^* a^2)} \quad (3.7)$$

(que por ser unitario cumple $\hat{T}^{-1} = \hat{T}^\dagger$) sobre a y a^\dagger viene dada por las ecs. (1.31):

$$\hat{T}^\dagger a^\dagger \hat{T} = c a^\dagger + s^* a \quad ; \quad \hat{T} a^\dagger \hat{T}^\dagger = c a^\dagger - s^* a \quad (3.8a)$$

$$\hat{T}^\dagger a \hat{T} = s a^\dagger + c a \quad ; \quad \hat{T} a \hat{T}^\dagger = -s a^\dagger + c a, \quad (3.8b)$$

donde los parámetros s , s^* y c se relacionan con los parámetros de *squeezing* originales v y v^* mediante las relaciones (1.30). Dado que estamos trabajando en la representación de coordenadas, es conveniente escribir los operadores a y a^\dagger en función de los operadores de cuadratura \hat{q} y \hat{p} definidos en (1.19), puesto que en esta representación su actuación viene dada por

$$\langle x|\hat{q}|\Psi\rangle = x \langle x|\Psi\rangle \quad (3.9a)$$

$$\langle x|\hat{p}|\Psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\Psi\rangle. \quad (3.9b)$$

De esta forma, las ecuaciones de transformación (3.8) se escriben:

$$\hat{T} a \hat{T}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} [(c-s)\hat{q} + i(c+s)\hat{p}] \equiv c_q \hat{q} + c_p \hat{p} \quad (3.10a)$$

$$\hat{T} a^\dagger \hat{T}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} [(c-s^*)\hat{q} - i(c+s^*)\hat{p}] \equiv c_q^* \hat{q} + c_p^* \hat{p}. \quad (3.10b)$$

Es posible obtener una ecuación diferencial para $\Phi_\alpha(x)$ teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x|a|0\rangle = \langle x|\hat{T} \hat{d}_\alpha a|0\rangle = \langle x|\hat{T} \hat{d}_\alpha a \hat{d}_\alpha^{-1} \hat{T}^\dagger \hat{T} \hat{d}_\alpha|0\rangle \\ &= \langle x|\hat{T} a \hat{T}^\dagger \hat{T} \hat{d}_\alpha|0\rangle - \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \langle x|\hat{T} \hat{T}^\dagger \hat{T} \hat{d}_\alpha|0\rangle \\ &= c_q \langle x|\hat{q} \hat{T} \hat{d}_\alpha|0\rangle + c_p \langle x|\hat{p} \hat{T} \hat{d}_\alpha|0\rangle - \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \Phi_\alpha(x) \\ &= \left[c_q x - i\hbar c_p \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right] \Phi_\alpha(x), \end{aligned}$$

donde hemos hecho uso de las ecs. (3.6), (3.10) y (3.9). Integrando esta ecuación se tiene

$$\Phi_\alpha(x) = \mathcal{N}_\alpha e^{-\frac{i}{\hbar c_p} \int (c_q x - \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}}) dx} = \mathcal{N}_\alpha e^{-\frac{ic_q}{2\hbar c_p} x^2 + \frac{i}{\hbar \sqrt{\hbar} c_p} \alpha x}, \quad (3.11)$$

donde \mathcal{N}_α es una constante de integración dependiente de α . Esta constante puede obtenerse derivando $\Phi_\alpha(x)$ con respecto a α . A partir de la definición (3.5) se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_\alpha(x)}{\partial \alpha} &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \langle x|\hat{T} e^{\alpha a^\dagger / \sqrt{\hbar}}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \langle x|\hat{T} a^\dagger e^{\alpha a^\dagger / \sqrt{\hbar}}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \langle x|\hat{T} a^\dagger \hat{T}^\dagger \hat{T} \hat{d}_\alpha|0\rangle \\ &= \frac{c_q^*}{\sqrt{\hbar}} \langle x|\hat{q} \hat{T} \hat{d}_\alpha|0\rangle + \frac{c_p^*}{\sqrt{\hbar}} \langle x|\hat{p} \hat{T} \hat{d}_\alpha|0\rangle \\ &= \left[\frac{c_q^*}{\sqrt{\hbar}} x - i\sqrt{\hbar} c_p^* \frac{\partial}{\partial x} \right] \Phi_\alpha(x), \end{aligned}$$

y sustituyendo el resultado (3.11):

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Phi_\alpha(x)}{\partial \alpha} &= \left[\frac{c_q^*}{\sqrt{\hbar}} x - i\sqrt{\hbar} c_p^* \frac{\partial}{\partial x} \right] \mathcal{N}_\alpha e^{-\frac{ic_q}{2\hbar c_p} x^2 + \frac{i}{\hbar \sqrt{\hbar} c_p} \alpha x} \\ &= \left[\frac{1}{\sqrt{\hbar}} \left(c_q^* - \frac{c_q c_p^*}{c_p} \right) x + \frac{c_p^* \alpha}{\hbar c_p} \right] \Phi_\alpha(x).\end{aligned}$$

Integrando esta ecuación para el caso particular $x = 0$ obtenemos

$$\Phi_\alpha(x=0) = \mathcal{N}' e^{c_p^* \alpha^2 / (2\hbar c_p)} = \mathcal{N}_\alpha,$$

según la ec. (3.11). La constante \mathcal{N}' queda determinada por el valor que toma $\Phi_\alpha(x)$ cuando α y x son cero, que puede ser arbitrariamente elegido como 1:

$$\mathcal{N}' = \Phi_{\alpha=0}(x=0) = 1.$$

Obtenemos finalmente la siguiente expresión para $\Phi_\alpha(x)$:

$$\Phi_\alpha(x) = e^{\frac{c_p^*}{2\hbar c_p} \alpha^2 - \frac{ic_q}{2\hbar c_p} x^2 + \frac{i}{\hbar \sqrt{\hbar} c_p} \alpha x}, \quad (3.12)$$

donde las constantes c_k, c_k^* ($k = q, p$) están definidas en las ecuaciones de transformación (3.10).¹

Una vez obtenida la función $\Phi_\alpha(x)$, resta obtener la forma de $\Psi'(\alpha^*) \equiv \langle \alpha | \Psi' \rangle$ que interviene en la integral (3.4). Debe tenerse en cuenta que $|\Psi'\rangle$ no es autofunción del hamiltoniano original \hat{H} , sino de este hamiltoniano transformado por \hat{T} . Esto puede verse directamente escribiendo la ecuación de Schrödinger $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$, esto es, $\hat{H}\hat{T}|\Psi'\rangle = E\hat{T}|\Psi'\rangle$ y operando con el operador \hat{T}^\dagger a la izquierda:

$$\hat{T}^\dagger \hat{H} \hat{T} |\Psi'\rangle = E \hat{T}^\dagger \hat{T} |\Psi'\rangle,$$

es decir,

$$\hat{H}' |\Psi'\rangle = E |\Psi'\rangle.$$

¹Puede comprobarse que en el caso en que la transformación \hat{T} sea una transformación de *squeezing* definida según $a = (\hat{q} + i\hat{p})/\sqrt{2\hbar}$, la ec. (3.12) corresponde al paquete de ondas asociado a un estado coherente generalizado. Efectivamente, definiendo $\Phi'_\alpha(x)$ como

$$\Phi'_\alpha(x) \equiv \langle x | \hat{S} | \alpha \rangle = \langle x | \hat{S} | \alpha \rangle e^{-\alpha \alpha^* / (2\hbar)} = \Phi_\alpha(x) e^{-\alpha \alpha^* / (2\hbar)},$$

sustituyendo $c_q = 1/\sqrt{2\hbar}$ y $c_p = i/\sqrt{2\hbar}$ en la expresión (3.12) para $\Phi_\alpha(x)$ se tiene

$$\Phi'_\alpha(x) = e^{-\frac{\alpha^2}{2\hbar} - \frac{x^2}{2\hbar} + \frac{\sqrt{2}}{\hbar} \alpha x - \frac{\alpha \alpha^*}{2\hbar}},$$

que con el cambio de variables $\alpha = (q + ip)/\sqrt{2}$ se escribe

$$\Phi'_\alpha(x) = e^{-\frac{1}{2\hbar}(q-x)^2 + \frac{i}{\hbar} px - \frac{i}{2\hbar} pq}.$$

Este es el resultado obtenido en (1.24) para la función de ondas de un estado coherente en la representación de coordenadas.

Esta ecuación define a $|\Psi'\rangle$ como autoestado del operador $\hat{H}' \equiv \hat{T}^\dagger \hat{H} \hat{T}$ con el mismo autovalor E que $|\Psi\rangle$. Considerando el caso de operadores hamiltonianos escritos como combinación simetrizada de operadores \hat{q} y \hat{p} , la aproximación a la función $\Psi'(\alpha^*)$ vendrá dada por (2.32), con la elección $\kappa = 0$ y $x = W$:

$$\Psi'(\alpha^*) \equiv (\alpha|\Psi') \sim \frac{1}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma_E}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha'^l) d\alpha'^l}, \quad (3.13)$$

donde \mathcal{H}_W^l corresponde al símbolo de Weyl asociado al operador transformado $\hat{H}' \equiv \hat{T}^\dagger \hat{H} \hat{T}$ y la variable $\gamma_E(\alpha^*)$ se obtiene invirtiendo la ecuación clásica de Hamilton-Jacobi estacionaria, $\mathcal{H}_W^l(\alpha^*, \gamma = i\partial_{\alpha^*} S^{(0)}(\alpha^*)) = E$. Es importante indicar que la dependencia de la expresión (3.13) con la transformación de *squeezing* \hat{T} está dada en las variables α^* y γ , como veremos posteriormente.

De esta manera, la aproximación (3.4) para la función de ondas en la representación de coordenadas se escribe en la forma

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \Phi_\alpha(x) \Psi'(\alpha^*) e^{-\alpha\alpha^*/\hbar} \\ &\sim \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \Phi_\alpha(x) \frac{1}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma_E}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha'^l) d\alpha'^l - \frac{1}{\hbar} \alpha\alpha^*}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

con $\Phi_\alpha(x)$ dada por (3.12). El siguiente paso para obtener una aproximación de $\Psi(x)$ consiste en evaluar la integral en α^* por el método de fase estacionaria (o *saddle point*). Para ello escribimos dicha integral como

$$I(\alpha) \equiv \int \frac{d\alpha^*}{\sqrt{2\pi\hbar i}} \frac{1}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma_E}\right)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \phi(\alpha^*)},$$

donde

$$\phi(\alpha^*) \equiv -i \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha'^l) d\alpha'^l + i\alpha\alpha^*.$$

Esta integral se evalúa manteniendo constante el valor de α , de forma que la variedad $\Gamma_{\alpha, \alpha^*}$ en la que se lleva a cabo la integral (3.14) deberá deformarse para que, para cada valor de α elegido, el camino de integración pase por los puntos de fase estacionaria, que denotaremos por α_s^* . Estos puntos vienen definidos por la condición

$$\left. \frac{\partial \phi(\alpha^*)}{\partial \alpha^*} \right|_{\alpha^* = \alpha_s^*} = -i\gamma_E(\alpha_s^*) + i\alpha = 0,$$

esto es

$$\gamma_E(\alpha_s^*) = \alpha.$$

Es decir, los únicos valores de α^* que contribuyen a la integral son aquéllos para los que $\gamma_E(\alpha^*)$ coincide con α (que ha sido mantenida fija en la evaluación de la integral). La derivada segunda de la fase para la condición estacionaria vendrá dada por

$$\frac{\partial^2 \phi(\alpha_s^*)}{\partial \alpha^{*2}} = -i \frac{\partial \gamma_E(\alpha_s^*)}{\partial \alpha^*} = -i \frac{\partial \alpha}{\partial \alpha^*} = \frac{\partial \alpha}{\partial \alpha^*} e^{-i\pi/2},$$

donde esta derivada se evalúa a energía E constante. Aplicando la fórmula (B.11) para la aproximación de *saddle point* a la integral $I(\alpha)$ se tiene

$$I(\alpha) \simeq \frac{1}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\alpha_s^*, \alpha)}{\partial \alpha}\right)^{1/2}} \frac{1}{\left(\frac{\partial \alpha}{\partial \alpha^*}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha_s^*(\alpha)} \alpha(\alpha^{*'}) d\alpha^{*'} - \frac{1}{\hbar} \alpha \alpha_s^*} e^{i\pi/4}.$$

De esta forma, ignorando las fases y constantes que no dependen de α , la función de onda (3.14) se escribe

$$\Psi(x) \sim \int_{\Gamma_\alpha} d\alpha \frac{\Phi_\alpha(x)}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\alpha_s^*, \alpha)}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial \alpha^*}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha_s^*(\alpha)} \alpha(\alpha^{*'}) d\alpha^{*'} - \frac{1}{\hbar} \alpha \alpha_s^*}. \quad (3.15)$$

Es importante tener en cuenta que tras la aproximación de la integral en α^* por el método de fase estacionaria, el integrando de la ec. (3.15) ya no es necesariamente una función analítica de la variable α , y por lo general presentará singularidades (ya sea en forma de polos, puntos de rama, etc.). Precisamente estas singularidades ayudan a evaluar la integral, puesto que el camino de integración Γ_α deberá elegirse de manera que dichas singularidades no se crucen.² Esto hace que, en general, la elección de este camino de integración sea bastante complicada, puesto que para ello debe tenerse información de todos los detalles de la estructura analítica de la función a integrar.

Este problema se simplifica considerablemente si se elige como camino de integración *la trayectoria clásica* a energía E , que para el caso de sistemas ligados es una órbita cerrada en el espacio de fases. Esta elección garantiza que las singularidades del problema sean rodeadas, y de hecho son estas singularidades las que proporcionan una contribución no nula a la integral (3.15). Por otra parte, a lo largo de este camino de integración particular las variables α y α^* son complejas conjugadas entre sí. Esta trayectoria clásica en el espacio α puede parametrizarse por una variable t , de forma que la integral $\int_{\Gamma_{cl}} d\alpha f(\alpha)$ puede escribirse, para el caso de sistemas ligados, como $\int_0^T dt \frac{d\alpha}{dt} f(\alpha_t) = \int_0^T dt \dot{\alpha}_t f(\alpha_t)$, donde T es el periodo de la órbita clásica, y para sistemas no ligados, como $\int_{-\infty}^{+\infty} dt \dot{\alpha}_t f(\alpha_t)$. De esta manera, hemos introducido la dinámica temporal en el problema estacionario, y las variables α y α^* (ahora variables dinámicas) evolucionan acorde a las ecuaciones clásicas de Hamilton

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_t &= -i \frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^*} \\ \dot{\alpha}_t^* &= i \frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t}. \end{aligned}$$

Diferenciando la ecuación de Hamilton-Jacobi $\mathcal{H}_W^l(\alpha^*, \alpha) = E = \mathcal{H}_W^l(\alpha_t^*, \alpha_t)$ con respecto a α_t^* y teniendo en cuenta que en la ec. (3.15) α es considerada función de α^* , se tiene

$$\frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^*} + \frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t} \frac{\partial \alpha_t}{\partial \alpha_t^*} = 0,$$

²Como se sabe, un corolario del teorema de Cauchy establece que si una función compleja $f(z)$ es analítica dentro de una región limitada por un contorno cerrado C , entonces la integral $\int_{z_1}^{z_2} f(z) dz$, a lo largo de cualquier contorno dentro de C depende sólo de z_1 y z_2 . Como consecuencia de este corolario, es posible deformar un contorno sin que cambie el valor de la integral, siempre que el contorno no cruce ninguna singularidad del integrando durante la deformación.

de donde

$$\frac{\partial \alpha_t}{\partial \alpha_t^*} = \frac{-\frac{\partial \mathcal{H}_W^t(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^*}}{\frac{\partial \mathcal{H}_W^t(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t}} = \frac{\dot{\alpha}_t}{\dot{\alpha}_t^*}.$$

La integral (3.15) podrá escribirse por tanto como

$$\Psi(x) \sim \int dt (\dot{\alpha}_t)^{1/2} \Phi_{\alpha_t}(x) e^{-\frac{1}{\hbar} \alpha_t \alpha_t^* + \frac{1}{\hbar} \int_0^t \alpha_\tau \dot{\alpha}_\tau^* d\tau}, \quad (3.16)$$

donde la integral se extiende en general a lo largo de una trayectoria clásica. En el caso de sistemas ligados, la trayectoria es cerrada y la integral (3.16) debe extenderse de 0 a T , mientras que para sistemas no ligados el dominio de integración viene dado por el intervalo $(-\infty, +\infty)$. Esta expresión es válida para cualquier operador \hat{T} utilizado (incluso, como veremos, para operadores que no sean unitarios). La dependencia con esta transformación se encuentra no sólo en la función $\Phi_\alpha(x) \equiv \langle x | \hat{T} | \alpha \rangle$, sino en las variables (α_t, α_t^*) puesto que, como se ha indicado, $\Psi'(\alpha^*)$ corresponde a la representación en estados de Bargmann de un autoestado del hamiltoniano transformado por \hat{T} , esto es, \hat{H}' .

Para el caso que nos ocupa, en el que \hat{T} es un operador unitario de *squeezing*, las ecuaciones de transformación (3.10) inducen el siguiente cambio de variables:

$$\alpha_t = \sqrt{\hbar} (c_q q_t + c_p p_t) \quad (3.17a)$$

$$\alpha_t^* = \sqrt{\hbar} (c_q^* q_t + c_p^* p_t). \quad (3.17b)$$

Sustituyendo la expresión que hemos obtenido para $\Phi_\alpha(x)$ [ec. (3.12)], se tiene

$$\Psi(x) \sim \int dt (\dot{\alpha}_t)^{1/2} e^{\frac{c_p^*}{2\hbar c_p} \alpha_t^2 - \frac{icq}{2\hbar c_p} x^2 + \frac{i}{\hbar \sqrt{\hbar} c_p} \alpha_t x - \frac{1}{\hbar} \alpha_t \alpha_t^* + \frac{1}{\hbar} \int_0^t \alpha_\tau \dot{\alpha}_\tau^* d\tau}, \quad (3.18)$$

que junto con el cambio de variables (3.17) y un poco de álgebra intermedia conduce a

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\sim \int dt (c_q \dot{q}_t + c_p \dot{p}_t)^{1/2} e^{\left(\frac{c_p^* c_q}{2c_p} - \frac{|c_q|^2}{2}\right) q_t^2 + \left(\frac{c_p c_q^*}{2} - \frac{|c_p|^2}{2}\right) p_t^2} \\ &\times e^{\left[(c_q c_p^* - c_q^* c_p) q_t p_t - \frac{icq}{2\hbar c_p} x^2 + \frac{icq}{\hbar c_p} q_t x + \frac{i}{\hbar} p_t x + (c_p c_q^* - c_q c_p^*) \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau\right]}. \end{aligned}$$

A partir de las definiciones en (3.10)

$$\begin{aligned} c_q &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(c-s) & , & & c_q^* &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(c-s^*) \\ c_p &= \frac{i}{\sqrt{2\hbar}}(c+s) & , & & c_p^* &= \frac{-i}{\sqrt{2\hbar}}(c+s^*) \end{aligned}$$

puede comprobarse que $c_p c_q^* - c_q c_p^* = (c^2 - ss^*)i/\hbar = i/\hbar$, con lo que

$$\Psi(x) \sim \int dt \left(\dot{p}_t + \frac{c_q}{c_p} \dot{q}_t \right)^{1/2} e^{\frac{-icq}{2\hbar c_p} (x - q_t)^2 + \frac{i}{\hbar} p_t (x - q_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau}.$$

Definiendo el parámetro

$$\lambda \equiv \frac{ic_q}{2c_p},$$

podemos escribir finalmente la aproximación para la función de onda estacionaria en la representación de coordenadas en la forma

$$\Psi(x) \simeq \mathcal{N} \int_{\mathcal{D}} dt (\dot{p}_t - 2i\lambda \dot{q}_t)^{1/2} e^{[-\frac{\lambda}{\hbar}(x-q_t)^2 + \frac{i}{\hbar} p_t(x-q_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau]}, \quad (3.20)$$

donde $\mathcal{D} = [0, T]$ para sistemas ligados y $(-\infty, +\infty)$ para sistemas no ligados. Hemos obtenido así la expresión de Zor y Kay (3.1) para un valor de λ independiente del tiempo. Este parámetro depende de la transformación de *squeezing* utilizada:

$$\lambda = \frac{c-s}{2(c+s)} = \frac{1 - i \sinh(2r) \sin(\phi)}{2[\cosh(2r) + \sinh(2r) \cos(\phi)]}, \quad (3.21)$$

(donde hemos escrito $s = \sinh r e^{i\phi}$ y $c = \cosh r$) y cumple los requisitos impuestos:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \lambda &= \frac{1}{2[\cosh(2r) + \sinh(2r) \cos(\phi)]} > 0 \\ |\lambda| &= \frac{\sqrt{1 + \sinh^2(2r) \sin^2(\phi)}}{2[\cosh(2r) + \sinh(2r) \cos(\phi)]} < \infty. \end{aligned}$$

Conviene hacer algunos comentarios acerca de la metodología seguida para obtener la aproximación uniforme (3.20). Al haber hecho uso de una resolución generalizada de la identidad en estados de Bargmann, la función de onda $\Psi(x)$ queda expresada como una doble integración en las variables independientes α^* y α . Como se verá en la próxima sección, si esta doble integración se aproxima mediante el método de *saddle point*, se obtiene la expresión WKB para $\Psi(x)$, que *no* es uniforme. Sin embargo, es posible conseguir una aproximación que sea globalmente uniforme aproximando *una* de las integrales (por ejemplo, la de α^*) y evaluando la integral restante (en α) en principio de forma exacta. Realmente esta última integral no ha sido calculada aún. De hecho, la principal ventaja de este método consiste en sustituir la integración compleja en la variable α (con la complicación intrínseca en cuanto a elección de caminos de integración adecuados) por una integración a lo largo de un periodo de la órbita (real) clásica. Por otra parte, los cálculos se llevan a cabo en una variedad compleja en la que α y α^* son variables complejas independientes y es al final, cuando se elige como camino de integración la trayectoria clásica, cuando se regresa de nuevo al espacio de fases clásico, en el que α y α^* son complejas conjugadas entre sí.

Un ejemplo: el oscilador armónico Como se ha indicado, para una elección adecuada del parámetro λ la fórmula de Kay constituye una representación *exacta* de $\Psi(x)$ para sistemas cuyos hamiltonianos sean funciones como máximo cuadráticas de las coordenadas y los momentos. A continuación demostraremos

que para el caso del oscilador armónico esta elección corresponde a la transformación unitaria de *squeezing* \hat{T} dada por la definición de los operadores \hat{q} y \hat{p} del oscilador armónico, esto es:

$$\begin{aligned}\hat{T} a \hat{T}^\dagger &= c_q \hat{q} + c_p \hat{p} = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \hat{q} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega}} \hat{p} \\ \hat{T} a^\dagger \hat{T}^\dagger &= c_q^* \hat{q} + c_p^* \hat{p} = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \hat{q} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega}} \hat{p}.\end{aligned}$$

Para esta transformación se tiene $c_q = c_q^* = \sqrt{\omega/2\hbar}$ y $c_p = -c_p^* = i/\sqrt{2\hbar\omega}$, lo que corresponde a una elección del parámetro λ dada por $\lambda = ic_q/(2c_p) = \omega/2$.

Como se ha visto, la función $\Psi(x)$ viene dada por

$$\Psi(x) = \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \Phi_\alpha(x) \Psi'(\alpha^*) e^{-\alpha\alpha^*/\hbar}. \quad (3.22)$$

En esta expresión $\Psi'(\alpha^*)$ corresponde a la autofunción del hamiltoniano $\hat{H} = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)$ transformado por \hat{T} , esto es, $\hat{H}' \equiv \hat{T} \hat{H} \hat{T}^\dagger = \hat{p}^2/2 + \omega^2 \hat{q}^2/2$. En el Capítulo 2 hemos obtenido la expresión para dicha función, dada por (2.43):

$$\Psi'(\alpha^*) \equiv (\alpha|\Psi') \sim (\alpha^*)^n,$$

con lo que la ec. (3.22) viene dada por

$$\Psi(x) \sim \frac{1}{2\pi\hbar i} \int_{\Gamma_\alpha} d\alpha \Phi_\alpha(x) I(\alpha), \quad (3.23)$$

donde

$$I(\alpha) \equiv \int_{\Gamma_{\alpha^*(\alpha)}} d\alpha^* (\alpha^*)^n e^{-\alpha\alpha^*/\hbar}. \quad (3.24)$$

Evaluemos en primer lugar esta integral de forma exacta. Eligiendo el camino de integración $\Gamma_{\alpha^*(\alpha)}$ de forma que $\alpha^* = r e^{i\theta(\alpha)}$, con $0 \leq r \leq \infty$ y $\theta(\alpha) = -\arg(\alpha)$ se tiene

$$I(\alpha) = (-\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n} \int_{\Gamma_{\alpha^*(\alpha)}} d\alpha^* e^{-\alpha\alpha^*/\hbar} = (-\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n} \frac{\hbar}{\alpha} = \left(\frac{\hbar}{\alpha}\right)^{n+1} n!, \quad (3.25)$$

donde el término en el infinito se anula debido a la elección del camino Γ_{α^*} . Teniendo en cuenta que para esta transformación la función $\Phi_\alpha(x)$ dada por (3.12) tiene la forma

$$\Phi_\alpha(x) \equiv \langle x|\hat{T}|\alpha\rangle = e^{\frac{-1}{2\hbar}\alpha^2 - \frac{\omega}{2\hbar}x^2 + \frac{\sqrt{2\omega}}{\hbar}\alpha x}, \quad (3.26)$$

la ec. (3.23) se escribe

$$\Psi(x) \sim \frac{\hbar^n n!}{2\pi i} e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} \int_{\Gamma_\alpha} d\alpha e^{\frac{-1}{2\hbar}\alpha^2 + \frac{\sqrt{2\omega}}{\hbar}\alpha x} \frac{1}{\alpha^{n+1}}. \quad (3.27)$$

El contorno de integración Γ_α debe elegirse de forma que rodee el polo de orden $n+1$ existente en el origen $\alpha = 0 + i0$. Con el cambio de variables $\alpha = \zeta\sqrt{2\hbar}$, la integral en (3.27) viene dada por

$$\begin{aligned}\oint d\alpha e^{\frac{-1}{2\hbar}\alpha^2 + \frac{\sqrt{2\omega}}{\hbar}\alpha x} \frac{1}{\alpha^{n+1}} &= \frac{1}{(2\hbar)^{n/2}} \oint d\zeta e^{-\zeta^2 + 2\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}\zeta x} \frac{1}{\zeta^{n+1}} = \frac{2\pi i}{(2\hbar)^{n/2}} \text{Res}(\zeta = 0) \\ &= \frac{2\pi i}{(2\hbar)^{n/2}} \lim_{\zeta \rightarrow 0} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \zeta^n} \left[e^{-\zeta^2 + 2\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}\zeta x} \right] = \frac{2\pi i}{(2\hbar)^{n/2}} \frac{1}{n!} H_n \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} x \right),\end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta que $\exp(-\zeta^2 + 2\zeta z)$ es una función generatriz para $H_n(z)$, el polinomio de Hermite de grado n . Sustituyendo este resultado en (3.27), se obtiene finalmente la siguiente expresión uniforme para la función $\Psi(x)$:

$$\Psi(x) \sim e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}x\right). \quad (3.28)$$

Esta función coincide, salvo una constante de normalización, con la expresión exacta para las autofunciones del oscilador armónico.

Es interesante ver el resultado que se obtiene cuando la integral (3.24) no se evalúa de forma exacta, sino mediante la aproximación de *saddle point*. Escribiendo esta integral como

$$I(\alpha) = \int d\alpha^* e^{n \ln \alpha^* - \alpha \alpha^* / \hbar} \equiv \int d\alpha^* e^{\frac{1}{\hbar} \phi(\alpha^*)},$$

con

$$\phi(\alpha^*) \equiv n\hbar \ln \alpha^* - \alpha \alpha^*,$$

el valor de α^* estacionario tal que $\partial_{\alpha^*} \phi(\alpha_s^*) = 0$, con $\phi(\alpha_s^*) \equiv n\hbar \ln \alpha_s^* - \alpha \alpha_s^*$ viene dado por $\alpha_s^* = n\hbar/\alpha$. Teniendo en cuenta que la derivada segunda de ϕ para este valor de α^* es

$$\frac{\partial^2 \phi(\alpha_s^*)}{\partial \alpha^{*2}} = -\frac{n\hbar}{\alpha_s^{*2}} = -\frac{\alpha^2}{n\hbar},$$

aplicando la fórmula de fase estacionaria (B.9) se llega al resultado:

$$I(\alpha) \simeq \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n} \left(\frac{\hbar}{\alpha}\right)^{n+1}.$$

Esta expresión conduce al resultado exacto (3.25) en el límite asintótico $n \rightarrow \infty$ en el que es aplicable la fórmula de Stirling para $n!$, esto es, en el límite semiclásico.

El mismo resultado debe obtenerse al hacer uso de la ec. (3.16) para $\Psi(x)$:

$$\Psi(x) \sim \int_0^T dt (\dot{\alpha}_t)^{1/2} \Phi_{\alpha_t}(x) e^{\frac{-1}{\hbar} \alpha_t \alpha_t^* + \frac{1}{\hbar} \int_0^t \alpha_\tau \dot{\alpha}_\tau^* d\tau}, \quad (3.29)$$

donde las trayectorias clásicas están descritas por

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_t &= -i \frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^*} = -i\omega \alpha_t \\ \dot{\alpha}_t^* &= i \frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha} = i\omega \alpha_t^*, \end{aligned}$$

con $\mathcal{H}_W^l(\alpha^*, \alpha) = \omega \alpha \alpha^*$, esto es:

$$\begin{aligned} \alpha_t &= \alpha_0 e^{-i\omega t} \\ \alpha_t^* &= \alpha_0 e^{i\omega t}. \end{aligned}$$

Con $\Phi_{\alpha_0}(x)$ dada por (3.26), la ec. (3.29) se escribe:

$$\Psi(x) \sim (-i\omega\alpha_0)^{1/2} e^{\frac{-1}{\hbar}\alpha_0\alpha_0^*} e^{\frac{-\omega}{2\hbar}x^2} \int_0^T dt e^{i\omega\left(\frac{-1}{2} + \frac{\alpha_0\alpha_0^*}{\hbar}\right)t + \frac{\sqrt{2\omega}}{\hbar}\alpha_0 x e^{-i\omega t} - \frac{\alpha_0^2}{2\hbar} e^{-2i\omega t}}. \quad (3.30)$$

La condición de analiticidad de $\Psi'(\alpha^*)$ corresponde a la condición de cuantización $E_n = \hbar\omega(n + 1/2) = \omega\alpha_0\alpha_0^*$, por lo que la integral en (3.30) viene dada por

$$\int_0^T dt e^{i\omega t + \frac{\sqrt{2\omega}}{\hbar}\alpha_0 x e^{-i\omega t} - \frac{\alpha_0^2}{2\hbar} e^{-2i\omega t}}.$$

El cambio de variables $e^{i\omega t} = z^{-n}$ hace que esta integral se escriba:

$$\frac{i}{\omega} \oint dz \frac{1}{z^{n+1}} e^{\frac{-\alpha_0^2}{2\hbar} z^2 + \frac{\sqrt{2\omega}}{\hbar}\alpha_0 x z},$$

mientras que un segundo cambio de variables $z = \zeta\sqrt{2\hbar}/\alpha_0$ conduce a

$$\frac{i}{\omega} \left(\frac{\alpha_0}{\sqrt{2\hbar}}\right)^n \oint d\zeta \frac{1}{\zeta^{n+1}} e^{-\zeta^2 + 2\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}x\zeta} = \frac{-2\pi}{\omega n!} \left(\frac{\alpha_0}{\sqrt{2\hbar}}\right)^n H_n\left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}x\right).$$

Sustituyendo este resultado en (3.30) e incluyendo todas las constantes en una constante de normalización genérica \mathcal{N} , se tiene

$$\Psi(x) = \mathcal{N} e^{\frac{-\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}x\right). \quad (3.31)$$

Estos resultados indican que para la elección particular $\lambda = \omega/2$, la aproximación uniforme propuesta reproduce (salvo constantes de normalización) el resultado *exacto* para la función de onda del oscilador armónico.

3.1.1. Los casos límite $\lambda \rightarrow 0$ y $\lambda \rightarrow \infty$: Transformaciones no unitarias

Como se ha mencionado, la aproximación (3.1) deja de ser uniforme en los casos límite $\lambda \rightarrow 0$ y $\lambda \rightarrow \infty$. En la presente formulación, el valor de λ depende de los parámetros (r, ϕ) de la transformación unitaria \hat{T} utilizada. Estamos interesados por tanto en saber a qué condiciones asintóticas de estos parámetros corresponden los valores extremos $\lambda \rightarrow 0$ y $\lambda \rightarrow \infty$. Es sencillo comprobar que el primer límite corresponde a unos parámetros de *squeezing* dados por $r \rightarrow \infty$ y $\phi = 0$, mientras que el segundo viene dado por un *squeezing* tal que $r \rightarrow \infty$ y $\phi = \pi$.³

³Demostración: Según la definición $\lambda \equiv ic_q/(2c_p)$, el caso límite $\lambda \rightarrow 0$ corresponde a una transformación de *squeezing* tal que $c_q \rightarrow 0$, esto es, $\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(c-s) \rightarrow 0$, o bien $\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\cosh r - e^{i\phi} \sinh r) \rightarrow 0$, es decir $\frac{1}{2\sqrt{2\hbar}}(e^r + e^{-r} - e^{i\phi}(e^r - e^{-r})) \rightarrow 0$. Para $\phi = 0$ se tiene $\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}e^{-r} \rightarrow 0$, de donde $r \rightarrow +\infty$. (El valor $\phi = \pi$ puede descartarse, ya que correspondería a $e^r \rightarrow 0$, es decir, $r \rightarrow -\infty$. Esta condición es incompatible con la definición de r como módulo del parámetro de *squeezing* v y, por tanto, como magnitud positiva. Puede comprobarse que otras elecciones de la fase ϕ conducen asimismo a valores de r no definidos. Así por ejemplo, para $\phi = \pi/2$ se tiene $\frac{1}{2\sqrt{2\hbar}}(e^r + e^{-r} - i(e^r - e^{-r})) \rightarrow 0$, y no existe ningún valor de r positivo que cumpla simultáneamente las condiciones $(e^r + e^{-r}) \rightarrow 0$ y $(e^r - e^{-r}) \rightarrow 0$.) Por otra parte, $c_p \equiv \frac{i}{2\sqrt{2\hbar}}(c+s) = \frac{i}{2\sqrt{2\hbar}}(e^r + e^{-r} + e^{i\phi}(e^r - e^{-r}))$ para $\phi = 0$

Estos resultados extremos pueden obtenerse también mediante un procedimiento similar al que hemos desarrollado, pero en el que se hace uso de operadores \hat{T} *no unitarios*. Estas transformaciones no unitarias *no* podrán obtenerse como casos límite de transformaciones que sí lo son, como es la transformación de *squeezing*.

Caso $\lambda \rightarrow 0$

El procedimiento para obtener la función de onda $\Psi(x)$ en el límite $\lambda \rightarrow 0$ es análogo al caso genérico en el que λ es una constante finita positiva, salvo el hecho de que en este caso haremos uso de una transformación que no será unitaria. ¿Cómo elegir este operador? Pretendemos encontrar una transformación \hat{T}_0 no unitaria que cambie \hat{q} por a^\dagger y \hat{p} por a (salvo constantes), de manera que un operador hamiltoniano de la forma $\hat{H} = \hat{p}^2/2 + V(\hat{q})$ quede transformado como $\hat{H}' = (k_1 a)^2/2 + V(k_2 a^\dagger)$, con $k_i \in \mathbb{C}$. La forma de las ecuaciones de transformación que definen las cuadraturas (1.19) da una idea de cómo debemos elegir la manera en que \hat{T}_0 actúa. Denotando por \hat{b} y \hat{b}^\dagger los operadores a y a^\dagger , respectivamente, transformados por \hat{T}_0

$$\begin{aligned}\hat{b}^\dagger &\equiv \hat{T}_0^{-1} a^\dagger \hat{T}_0 \\ \hat{b} &\equiv \hat{T}_0^{-1} a \hat{T}_0,\end{aligned}$$

definimos la transformación como

$$\begin{aligned}c_1 a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{b}^\dagger + \hat{b}) \\ c_2 a &= \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{b}^\dagger - \hat{b}),\end{aligned}$$

donde c_1 y c_2 son constantes complejas a determinar. Invertiendo estas ecuaciones obtenemos

$$\hat{b}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 a^\dagger - ic_2 a) \quad (3.32a)$$

$$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 a^\dagger + ic_2 a), \quad (3.32b)$$

esto es

$$\begin{pmatrix} \hat{b}^\dagger \\ \hat{b} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} c_1 & -ic_2 \\ c_1 & ic_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^\dagger \\ a \end{pmatrix} \equiv \mathbf{M}^0 \begin{pmatrix} a^\dagger \\ a \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

Una transformación de la forma (3.33) sólo puede conseguirse con un operador que sea cuadrático en a y a^\dagger , esto es, que tenga la forma

$$\hat{T}(\varepsilon, \varepsilon') = e^{(\varepsilon a^{\dagger 2} + \varepsilon' a^2)}, \quad (3.34)$$

toma el valor $\frac{i}{\sqrt{2\hbar}}e^r$ que, para $r \rightarrow +\infty$, tiende a $+i\infty$. Vemos pues que el caso $\lambda \rightarrow 0$ corresponde a la elección $r \rightarrow +\infty$ y $\phi = 0$.

El caso $\lambda \rightarrow \infty$ se analiza de forma similar. Para este límite se tiene que $c_p \rightarrow 0$, es decir, $\frac{i}{2\sqrt{2\hbar}}(e^r + e^{-r} + e^{i\phi}(e^r - e^{-r})) \rightarrow 0$. En este caso la elección de ϕ compatible con un valor positivo de r es $\phi = \pi$, lo que conduce al límite $\frac{i}{\sqrt{2\hbar}}e^{-r} \rightarrow 0$, que se cumple para $r \rightarrow +\infty$. El coeficiente c_q , para $\phi = \pi$ y $r \rightarrow +\infty$, tiende a infinito, y por tanto el límite $\lambda \rightarrow \infty$ corresponde a la elección $r \rightarrow +\infty$ y $\phi = \pi$.

donde las variables ε y ε' en principio no son complejas conjugadas entre sí, puesto que este operador \hat{T} no necesariamente es unitario. Las propiedades de la matriz de transformación \mathbf{M} para un operador genérico \hat{T} de este tipo, definida por

$$\hat{T}^{-1} \begin{pmatrix} a^\dagger \\ a \end{pmatrix} \hat{T} = \begin{pmatrix} \cosh \theta & -2\varepsilon' \frac{\sinh \theta}{\theta} \\ 2\varepsilon \frac{\sinh \theta}{\theta} & \cosh \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^\dagger \\ a \end{pmatrix} \equiv \mathbf{M} \begin{pmatrix} a^\dagger \\ a \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

(donde $\theta^2 = -4\varepsilon\varepsilon'$) permitirán determinar las constantes $c_{1,2}$ definidas en (3.32). Puede comprobarse fácilmente que la matriz \mathbf{M} es una matriz simpléctica (esto es, cumple $\tilde{\mathbf{M}}\mathbf{M} = \mathbf{A}$, donde $\tilde{\mathbf{M}}$ denota la matriz traspuesta de \mathbf{M} , y \mathbf{A} es la matriz antisimétrica $\mathbf{A} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$) y por tanto su determinante es la unidad. Además, sus elementos diagonales son iguales entre sí. Imponiendo estas propiedades a la matriz \mathbf{M}^0 dada por (3.33), podrán determinarse los valores de c_1 y c_2 . Así, las condiciones $\det \mathbf{M}^0 = 1$ y $M_{11}^0 = M_{22}^0$ imponen, respectivamente, las igualdades $ic_1c_2 = 1$ y $c_1 = ic_2$. La elección arbitraria de $c_1 = 1$ impone para el coeficiente c_2 el valor $c_2 = -i$. La transformación \hat{T}_0 que hemos definido actúa por tanto de la siguiente manera:

$$\hat{T}_0^{-1} a^\dagger \hat{T}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \quad (3.36a)$$

$$\hat{T}_0^{-1} a \hat{T}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a). \quad (3.36b)$$

En función de las cuadraturas \hat{q} y \hat{p} definidas por (1.19), estas ecuaciones de transformación se escriben en la forma

$$\hat{T}_0^{-1} a^\dagger \hat{T}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \equiv \frac{-i}{\sqrt{\hbar}} \hat{p} \quad (3.37a)$$

$$\hat{T}_0^{-1} a \hat{T}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \equiv \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \hat{q}. \quad (3.37b)$$

La representación matricial de estos operadores en el álgebra h_6 permite obtener la transformación en orden inverso:

$$\hat{T}_0 a^\dagger \hat{T}_0^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \equiv \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \hat{q} \quad (3.38a)$$

$$\hat{T}_0 a \hat{T}_0^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-a^\dagger + a) \equiv \frac{i}{\sqrt{\hbar}} \hat{p}. \quad (3.38b)$$

Asimismo, puede verse cómo se transforman las cuadraturas \hat{q} y \hat{p} bajo \hat{T}_0 :

$$\hat{q}' \equiv \hat{T}_0^{-1} \hat{q} \hat{T}_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) + \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \right] = \sqrt{\hbar} a^\dagger \quad (3.39a)$$

$$\hat{p}' \equiv \hat{T}_0^{-1} \hat{p} \hat{T}_0 = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) - \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \right] = -i\sqrt{\hbar} a. \quad (3.39b)$$

De esta forma, tal como se pretendía, hemos conseguido una transformación que cambia (salvo constantes) \hat{q} por a^\dagger y \hat{p} por a (a diferencia del operador de *squeezing*, que transforma tanto \hat{q} como \hat{p} en una combinación de a y a^\dagger). Más adelante se pondrá de manifiesto la utilidad de esta transformación.

Por último, la forma explícita del operador \hat{T}_0 puede determinarse identificando la matriz \mathbf{M}^0 de la transformación (3.33) con la matriz \mathbf{M} genérica (3.35):

$$\begin{pmatrix} \cosh \theta & -2\varepsilon' \frac{\sinh \theta}{\theta} \\ 2\varepsilon \frac{\sinh \theta}{\theta} & \cosh \theta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.40)$$

lo que conduce a

$$\begin{aligned} \cosh \theta &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -2\varepsilon' \frac{\sinh \theta}{\theta} &= \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ 2\varepsilon \frac{\sinh \theta}{\theta} &= \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

A partir de las dos últimas igualdades se tiene $\varepsilon = \varepsilon'$, con lo que $\theta \equiv \sqrt{-4\varepsilon\varepsilon'} = 2i\varepsilon$. La relación entre las funciones hiperbólicas y las trigonométricas permite escribir las igualdades anteriores como

$$\begin{aligned} \cosh(2i\varepsilon) &= \cos(2\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 2\varepsilon \frac{\sinh(2i\varepsilon)}{2i\varepsilon} &= \frac{i \sin(2\varepsilon)}{i} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \end{aligned}$$

de donde $2\varepsilon = \pi/4$, esto es, $\varepsilon = \pi/8$. El operador \hat{T}_0 tiene, pues, la forma:

$$\hat{T}_0 = e^{\frac{\pi}{8}(a^{\dagger 2} + a^2)}. \quad (3.41)$$

Este operador es claramente no unitario, puesto que $\hat{T}_0^{-1} = e^{-\frac{\pi}{8}(a^{\dagger 2} + a^2)} \neq \hat{T}_0^\dagger$.

Una vez definida la transformación simpléctica no unitaria \hat{T}_0 , podemos proceder aplicando el método desarrollado anteriormente:

$$\Psi(x) = \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \langle x | \hat{T}_0 | \alpha \rangle \langle \alpha | \Psi' \rangle e^{-\alpha\alpha^*/\hbar} \equiv \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \Phi_\alpha(x) \Psi'(\alpha^*) e^{-\alpha\alpha^*/\hbar}, \quad (3.42)$$

donde ahora $\Phi_\alpha(x) \equiv \langle x | \hat{T}_0 | \alpha \rangle = \langle x | \hat{T}_0 \hat{d}_\alpha | 0 \rangle$ y $\Psi'(\alpha^*) \equiv \langle \alpha | \Psi' \rangle$, siendo $|\Psi'\rangle$ autoestado del hamiltoniano transformado por \hat{T}_0 , esto es, $\hat{H}' = \hat{T}_0^{-1} \hat{H} \hat{T}_0$.

Comenzaremos aplicando la misma técnica del apartado anterior para calcular $\Phi_\alpha(x)$. Así, haciendo

uso de las ecs. (3.38), (3.6) y (3.9b) podemos escribir

$$\begin{aligned}
0 &= \langle x|a|0\rangle = \langle x|\hat{T}_0 \hat{d}_\alpha a|0\rangle = \langle x|\hat{T}_0 \hat{d}_\alpha a \hat{d}_\alpha^{-1} \hat{T}_0^{-1} \hat{T}_0 \hat{d}_\alpha|0\rangle \\
&= \langle x|\hat{T}_0 a \hat{T}_0^{-1} \hat{T}_0 \hat{d}_\alpha|0\rangle - \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \langle x|\hat{T}_0 \hat{T}_0^{-1} \hat{T}_0 \hat{d}_\alpha|0\rangle \\
&= \frac{i}{\sqrt{\hbar}} \langle x|\hat{p} \hat{T}_0 \hat{d}_\alpha|0\rangle - \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \Phi_\alpha(x) \\
&= \left[\sqrt{\hbar} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right] \Phi_\alpha(x).
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Integrando esta ecuación obtenemos

$$\Phi_\alpha(x) = \mathcal{N}_\alpha e^{\frac{\alpha x}{\hbar}}, \tag{3.44}$$

donde \mathcal{N}_α es una constante de integración que puede obtenerse derivando $\Phi_\alpha(x)$ con respecto a α :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Phi_\alpha(x)}{\partial \alpha} &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \langle x|\hat{T}_0 e^{\alpha a^\dagger / \sqrt{\hbar}}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \langle x|\hat{T}_0 a^\dagger e^{\alpha a^\dagger / \sqrt{\hbar}}|0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \langle x|\hat{T}_0 a^\dagger \hat{T}_0^{-1} \hat{T}_0 \hat{d}_\alpha|0\rangle = \frac{1}{\hbar} \langle x|\hat{q} \hat{T}_0 \hat{d}_\alpha|0\rangle = \frac{x}{\hbar} \Phi_\alpha(x).
\end{aligned} \tag{3.45}$$

En el caso particular de $x = 0$ se tiene $\partial_\alpha \Phi_\alpha(x = 0) = 0$, es decir, $\Phi_\alpha(x = 0) = \text{const} = \mathcal{N}_\alpha$, según (3.44). Puesto que $\Phi_\alpha(x = 0)$ es constante para variaciones de α , podemos elegir dicha constante como el valor que toma en particular para $\alpha = 0$, que arbitrariamente tomamos como $\Phi_{\alpha=0}(x = 0) = 1$. Tenemos, pues, la siguiente expresión para $\Phi_\alpha(x)$:

$$\Phi_\alpha(x) = e^{\frac{\alpha x}{\hbar}}. \tag{3.46}$$

Introduciendo este resultado en la ec. (3.42) obtenemos una expresión para $\Psi(x)$ como una doble integral en α y en α^* . De nuevo, la integral en α^* puede evaluarse de forma aproximada mediante el método de *saddle point*. La integral en α restante puede evaluarse eligiendo como camino de integración la trayectoria clásica. Al parametrizar esta integral por un tiempo t , quedará reducida, para el caso particular de sistemas ligados, a una integral extendida a lo largo de un periodo T de la órbita. (Para el caso de sistemas no ligados la integral se extiende hasta infinito). Este resultado conduce a la expresión (3.16) que, como hemos mencionado, es válida para cualquier transformación \hat{T} , puesto que la dependencia con ésta se encuentra tanto en la función $\Phi_\alpha(x)$ como en las variables α_t, α_t^* . En este caso, las ecuaciones de transformación de a y a^\dagger bajo \hat{T}_0 (3.38) hacen que el cambio de variables adecuado sea el siguiente:

$$\alpha_t = i p_t \tag{3.47a}$$

$$\alpha_t^* = q_t, \tag{3.47b}$$

con lo que la ec. (3.16) se escribe

$$\begin{aligned}
 \Psi(x) &\sim \int dt (\dot{\alpha}_t)^{1/2} \Phi_{\alpha_t}(x) e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha_t \alpha_t^* + \frac{i}{\hbar} \int_0^t \alpha_\tau \dot{\alpha}_\tau^* d\tau} \\
 &\sim \int dt (\dot{\alpha}_t)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} \alpha_t (x - \alpha_t^*) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t \alpha_\tau \dot{\alpha}_\tau^* d\tau} \\
 &\simeq \mathcal{N} \int dt (\dot{p}_t)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} p_t (x - q_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau},
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

donde hemos ido absorbiendo las fases y constantes en una constante genérica \mathcal{N} .

El resultado (3.48) corresponde a la expresión de Zor y Kay (3.1) para un valor de $\lambda = 0$. La pérdida de uniformidad de esta aproximación se pone de manifiesto al calcular la función de ondas en la representación de momentos. Para el caso particular de un sistema ligado, transformando Fourier $\Psi(x)$ se tiene:

$$\begin{aligned}
 \bar{\Psi}(p) &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} px} \Psi(x) \\
 &\sim \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} px} \int_0^T dt (\dot{p}_t)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} p_t (x - q_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau} \\
 &= \int_0^T dt \delta(p - p_t) (\dot{p}_t)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} p_t q_t + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau} \\
 &= \int_0^T dt \delta(p - p_t) (\dot{p}_t)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 q_0 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t q_\tau \dot{p}_\tau d\tau} \\
 &= e^{\frac{i}{\hbar} p_0 q_0} \int \frac{dt}{dp_t} dp_t \delta(p - p_t) (\dot{p}_t)^{1/2} e^{-\frac{i}{\hbar} \int^{p_t} q(p') dp'} \\
 &\sim \frac{1}{\sqrt{\dot{p}}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{p_m}^p q_{<}(p') dp'} + \frac{1}{\sqrt{-\dot{p}}} e^{\frac{i}{\hbar} \int q(p') dp'} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{p_m}^p q_{>}(p') dp'} \\
 &\sim \frac{1}{\sqrt{\dot{p}}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{p_m}^p q_{<}(p') dp'} + \frac{e^{-i\pi/2}}{\sqrt{\dot{p}}} e^{\frac{i}{\hbar} \int q(p') dp'} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{p_m}^p q_{>}(p') dp'}, \\
 &\sim \mathcal{N} \left[\frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{\dot{p}}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{p_m}^p q_{<}(p') dp'} + \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{\dot{p}}} e^{\frac{i}{\hbar} \int q(p') dp'} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{p_m}^p q_{>}(p') dp'} \right],
 \end{aligned}$$

donde $q_{<}(p)$ y $q_{>}(p)$ corresponden a las ramas “menor” y “mayor” de $q(p)$, respectivamente, y hemos elegido p_0 como p_m , el valor mínimo del momento, para el que $\dot{p} = 0$ [ver Fig. (3.1)]. La condición de analiticidad para la función $\Psi'(\alpha^*)$ impone la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld para la acción $\oint q(p) dp = 2\pi\hbar(n + 1/2)$ [ec. (2.37)], de donde

$$\bar{\Psi}(p) \sim \mathcal{N} \left[\frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{\dot{p}}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{p_m}^p q_{<}(p') dp'} - \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{\dot{p}}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{p_m}^p q_{>}(p') dp'} \right]. \tag{3.49}$$

Únicamente en el caso de que el hamiltoniano presente simetría par respecto a x , se cumplirá que $q_{>}(p) = -q_{<}(p)$, y la ec. (3.49) tendrá la forma

$$\bar{\Psi}(p) \sim \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{\dot{p}}} \sin \left[\frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar} \int_{p_m}^p q_{<}(p') dp' \right]. \tag{3.50}$$

La ec. (3.49) corresponde a la expresión WKB de la función de ondas en la representación de momentos, y muestra la divergencia de $\bar{\Psi}(p)$ en los puntos en los que \dot{p} es cero.

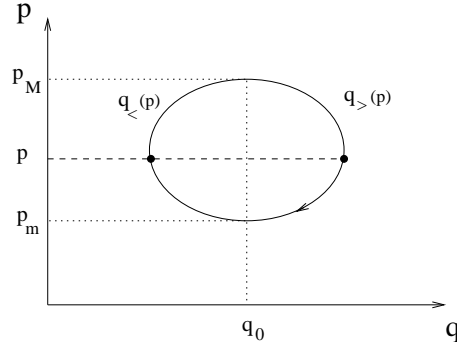


Figura 3.1: Trayectoria en el espacio de fases para un sistema ligado. A lo largo de un periodo del movimiento, para un valor de p dado existen dos valores de q correspondientes. La integral desde p_m hasta p puede hacerse a lo largo de las dos ramas $q_<(p)$ o $q_>(p)$ a lo largo de las cuales \dot{p} es mayor o menor que cero, respectivamente.

Este resultado pone de manifiesto una de las principales ventajas de la presente formulación en términos de operadores no unitarios: el cambio de variables (3.47) constituye una *manera natural de llevar a cabo la complexificación de las variables de posición y momento* que normalmente se efectúa para obtener las fórmulas de conexión de la teoría WKB (ver Apéndice C). En el procedimiento para obtener $\Psi(x)$ a través del presente método se hace uso de la aproximación semiclásica para $\Psi'(\alpha^*)$. Las condiciones de analiticidad impuestas sobre esta función hacen que en la expresión WKB para $\bar{\Psi}(p)$ dada por (3.49) se obtengan directamente los coeficientes correspondientes a las distintas ramas de la función $q(p)$, sin tener que apelar a las fórmulas de conexión.

A pesar de las singularidades mostradas por $\bar{\Psi}(p)$, la función de ondas en la representación de posiciones puede normalizarse:

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi(x) \Psi^*(x) \\
&= |\mathcal{N}|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_0^T \int_0^T dt dt' (\dot{p}_t \dot{p}_{t'})^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}x(p_{t'} - p_t)} e^{\frac{i}{\hbar}(p_{t'} q_{t'} - p_t q_t)} \\
&\quad \times e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} p_\tau \dot{q}_\tau d\tau - \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau} \\
&= |\mathcal{N}|^2 2\pi\hbar \int_0^T \int_0^T dt dt' \delta(p_{t'} - p_t) (\dot{p}_t \dot{p}_{t'})^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}[(p_{t'} q_{t'} - p_t q_t) + \int_0^{t'} p_\tau \dot{q}_\tau d\tau - \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau]} \\
&= |\mathcal{N}|^2 2\pi\hbar \int_0^T \int_0^T dt dt' \frac{\delta(t' - t)}{\dot{p}_t} (\dot{p}_t \dot{p}_{t'})^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}[(p_{t'} q_{t'} - p_t q_t) + \int_0^{t'} p_\tau \dot{q}_\tau d\tau - \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau]} \\
&= |\mathcal{N}|^2 2\pi\hbar \int_0^T dt (\dot{p}_t)^{-1/2} (\dot{p}_t)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}[(p_t q_t - p_t q_t) + \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau - \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau]} \\
&= |\mathcal{N}|^2 2\pi\hbar T.
\end{aligned}$$

De esta forma, la condición $|\Psi(x)|^2 = 1$ permite escribir la constante de normalización \mathcal{N} como una función del periodo clásico T :

$$|\mathcal{N}|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar T}.$$

Otra de las ventajas que presenta el uso del operador no unitario \hat{T}_0 se pone de manifiesto en la transformación de hamiltonianos expresados en la forma $\hat{H} = K(\hat{p}) + V(\hat{q})$, puesto que en estos casos el término cinético viene dado como máximo por una potencia cuadrática de \hat{p} . De esta forma, puesto que \hat{T}_0 transforma \hat{q} en a^\dagger y \hat{p} en a , salvo constantes, un hamiltoniano dado por

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

quedará transformado bajo \hat{T}_0 como

$$\hat{H}' \equiv \hat{T}_0^{-1} \hat{H} \hat{T}_0 = \frac{(-i\sqrt{\hbar}a)^2}{2} + V(\sqrt{\hbar}a^\dagger) = \frac{-\hbar}{2}a^2 + V(\sqrt{\hbar}a^\dagger), \quad (3.51)$$

y la correspondiente función clásica en la representación de estados coherentes vendrá dada por

$$\mathcal{H}'(\alpha^*, \alpha) \equiv \frac{(\alpha|\hat{H}'|\alpha)}{(\alpha|\alpha)} = \frac{-\alpha^2}{2} + V(\alpha^*). \quad (3.52)$$

La ventaja de este tipo de transformación simpléctica radica en que la ecuación de Hamilton-Jacobi $\mathcal{H}'(\alpha^*, \gamma = i\partial_{\alpha^*} S^{(0)}(\alpha^*)) = E$ para este problema

$$\frac{-\gamma^2}{2} + V(\alpha^*) = E$$

permite escribir γ en términos de α^* simplemente como una raíz cuadrada:

$$\gamma_E(\alpha^*) = i\sqrt{2[E - V(\alpha^*)]} \equiv i p_{\alpha^*}, \quad (3.53)$$

donde hemos definido $p_{\alpha^*} \equiv \sqrt{2[E - V(\alpha^*)]}$. En la ec. (3.53) se ha elegido para $\gamma(\alpha^*)$ una de las ramas de la raíz cuadrada, que será la que haga que $\Psi'(\alpha^*)$ satisfaga las condiciones físicas adecuadas (esto es, decaimiento asintótico de la función de onda en la región clásicamente inaccesible). Esta función no está definida en el corte de rama, y vendrá dada por

$$\begin{aligned} \Psi'(\alpha^*) &\sim \frac{1}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}'_W(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma_E}\right)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha'^*) d\alpha'^*} \sim \frac{1}{[2(E - V(\alpha^*))]^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^{\alpha^*} [2(E - V(\alpha^*))]^{1/2} d\alpha'^*} \\ &\sim \frac{1}{\sqrt{p_{\alpha^*}}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^{\alpha^*} p_{\alpha'^*} d\alpha'^*}, \end{aligned} \quad (3.54)$$

donde hemos prescindido de fases y constantes. Sustituyendo este resultado, así como la expresión (3.46) para $\Phi_\alpha(x)$ en la ec. (3.42) se tiene

$$\Psi(x) \sim \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \frac{1}{\sqrt{p_{\alpha^*}}} e^{\frac{i}{\hbar} \alpha(x - \alpha^*) + \frac{i}{\hbar} \int^{\alpha^*} p_{\alpha'^*} d\alpha'^*}. \quad (3.55)$$

A continuación demostraremos que la aproximación WKB para la función de onda puede recuperarse si se evalúa esta *doble* integral, en α^* y en α , por el método de fase estacionaria. Escribiendo esta integral como

$$\Psi(x) \simeq \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \frac{1}{\sqrt{p_{\alpha^*}}} e^{\frac{i}{\hbar}\phi(\alpha, \alpha^*)}, \quad (3.56)$$

con

$$\phi(\alpha, \alpha^*) \equiv -i\alpha(x - \alpha^*) + \int^{\alpha^*} p_{\alpha^{*l}} d\alpha^{*l}.$$

Las condiciones de fase estacionaria

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi(\alpha, \alpha^*)}{\partial\alpha} &= -i(x - \alpha^*) = 0 \\ \frac{\partial\phi(\alpha, \alpha^*)}{\partial\alpha^*} &= i\alpha + p_{\alpha^*} = 0 \end{aligned}$$

establecen como valores críticos de α y α^* (que denotamos por α_s y α_s^*) los valores

$$\alpha_s^* = x \quad (3.57a)$$

$$\alpha_s = ip_{\alpha_s^*} = ip_x. \quad (3.57b)$$

Por otra parte, la matriz de derivadas segundas, evaluadas en la condición de fase estacionaria, viene dada por

$$\mathbf{D}_{\alpha\alpha^*} \equiv \begin{pmatrix} \phi_{\alpha\alpha}|_s & \phi_{\alpha\alpha^*}|_s \\ \phi_{\alpha^*\alpha}|_s & \phi_{\alpha^*\alpha^*}|_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & \frac{-1}{p_{\alpha^*}} \frac{dV(\alpha^*)}{d\alpha^*} \Big|_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & \frac{-1}{p_x} \frac{dV(x)}{dx} \end{pmatrix},$$

y su determinante es igual a la unidad. La condición (3.57a) indica que x está situado en el corte de rama, y por tanto la integral (3.56) vendrá dada por la combinación

$$\Psi(x) \sim \frac{1}{\sqrt{p_x}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^x p_{x'} dx'} + \frac{1}{\sqrt{-p_x}} e^{\frac{i}{\hbar} \oint p_x dx - \frac{i}{\hbar} \int^x p_{x'} dx'}, \quad (3.58)$$

donde $p_x \equiv \sqrt{2[E - V(x)]}$. Teniendo en cuenta la condición de cuantización $\oint p_x dx = 2\pi\hbar(n + 1/2)$, se tiene

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\sim \frac{1}{\sqrt{p_x}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^x p_{x'} dx'} - \frac{e^{-i\pi/2}}{\sqrt{p_x}} e^{\frac{-i}{\hbar} \int^x p_{x'} dx'} \\ &\sim \mathcal{N} \left[\frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{p_x}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^x p_{x'} dx'} - \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{p_x}} e^{\frac{-i}{\hbar} \int^x p_{x'} dx'} \right] \\ &\sim \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{p_x}} \sin \left[\frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar} \int^x p_{x'} dx' \right]. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Reconocemos en esta expresión la aproximación WKB para la función de ondas. Por supuesto, el mismo resultado se obtiene aproximando la integral temporal en (3.48) por el método de fase estacionaria, puesto que éste es independiente del orden en que se lleven a cabo las integrales. A continuación ilustraremos el método que hemos desarrollado con algunos ejemplos sencillos.

El potencial lineal Como ejemplo de un sistema no ligado, consideremos el caso simple en que el potencial venga dado por la función lineal $V(\hat{q}) = \hat{q}/2$. Al transformar $\hat{H} = (\hat{p}^2 + \hat{q})/2$ con el operador \hat{T}_0 , el hamiltoniano $\hat{H}' = (-\hbar a^2 + \sqrt{\hbar} a^\dagger)/2$ tiene como función clásica asociada $\mathcal{H}' = (-\alpha^2 + \alpha^*)/2$. En este caso la ec. (3.55) tiene la forma

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\sim \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \frac{1}{\sqrt{P\alpha^*}} e^{\frac{1}{\hbar}\alpha(x-\alpha^*) + \frac{i}{\hbar} \int^{\alpha^*} p_{\alpha^*} d\alpha^*} \\ &\sim \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \frac{1}{(2E - \alpha^*)^{1/4}} e^{\frac{1}{\hbar}[\alpha(x-\alpha^*) + i \int^{\alpha^*} \sqrt{2E - \alpha^*} d\alpha^*]}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Puesto que este potencial escala con la energía puede elegirse $E = 0$ y considerar que la acción en el punto inicial en el que se evalúa la integral $\int^{\alpha^*} p_{\alpha^*} d\alpha^*$ es cero, de forma que

$$\Psi(x) \sim \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \frac{1}{\alpha^{*1/4}} e^{\frac{1}{\hbar}[\alpha(x-\alpha^*) - \frac{2}{3}\alpha^{*3/2}]}. \quad (3.61)$$

(Recordemos que estamos interesados únicamente en la dependencia funcional con α y α^* del integrando, y todas las fases o constantes que aparezcan en el desarrollo se incluirán en una constante de normalización final).

En primer lugar obtendremos una expresión uniforme para la función de onda aproximando la integral en α^* por fase estacionaria y evaluando la integral en α de forma exacta. Para ello escribimos la ec. (3.61) como

$$\Psi_{unif}(x) \sim \int \frac{d\alpha}{\sqrt{2\pi\hbar i}} e^{\frac{\alpha x}{\hbar}} I(\alpha), \quad (3.62)$$

donde

$$I(\alpha) = \int \frac{d\alpha^*}{\sqrt{2\pi\hbar i}} \frac{1}{\alpha^{*1/4}} e^{\frac{i}{\hbar}\phi(\alpha^*)},$$

con

$$\phi(\alpha^*) \equiv i\alpha\alpha^* + i\frac{2}{3}\alpha^{*3/2}.$$

La condición de fase estacionaria

$$\frac{\partial\phi(\alpha^*)}{\partial\alpha^*} = i\alpha + i\alpha^{*1/2} = 0$$

proporciona como valor crítico $\alpha_s^{*1/2} = -\alpha$. La derivada segunda de $\phi(\alpha^*)$ evaluada en α_s^*

$$\frac{\partial^2\phi(\alpha_s^*)}{\partial\alpha^{*2}} = \frac{i}{2}\alpha_s^{*-1/2} = \frac{-i}{2\alpha} \equiv \left| \frac{\partial^2\phi(\alpha_s^*)}{\partial\alpha^{*2}} \right| e^{i\delta}$$

conduce a una aproximación de la integral $I(\alpha)$ dada por

$$I(\alpha) \simeq \frac{1}{\left(\left| \frac{\partial^2\phi(\alpha_s^*)}{\partial\alpha^{*2}} \right| \right)^{1/2}} \frac{1}{\alpha_s^{*1/4}} e^{\frac{i}{\hbar}\phi(\alpha_s^*) - i\delta/2} \sim e^{-\frac{1}{3\hbar}\alpha^3}.$$

Sustituyendo este resultado en (3.62) se tiene

$$\Psi_{unif}(x) \sim \int_{\Gamma} d\alpha e^{\frac{1}{\hbar}(\alpha x - \frac{\alpha^3}{3})}. \quad (3.63)$$

Esta integral puede evaluarse de forma exacta teniendo en cuenta la definición de la integral de Airy

$$Ai(x) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{ixy + \frac{i}{3}y^3},$$

según la cual

$$\int e^{iaxy + iby^3} dy = \int e^{iax(3b)^{-1/3}s + i\frac{s^3}{3}} \frac{ds}{(3b)^{1/3}} = 2\pi(3b)^{-1/3} Ai\left(\frac{a}{(3b)^{1/3}}x\right)$$

para $a, b \in \mathbb{R}$. Con el cambio de variables $\alpha = ip$, la ec. (3.63) puede escribirse finalmente como

$$\Psi_{unif}(x) \sim \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{\frac{1}{\hbar}(ipx + i\frac{p^3}{3})} = \mathcal{N} Ai(\hbar^{-2/3}x).$$

El camino de integración Γ elegido en (3.63) corresponde por tanto al camino a lo largo del eje imaginario del plano α . Se comprueba así que para la elección particular de $\lambda = 0$ esta aproximación proporciona la solución *exacta* para la función de onda en el potencial lineal.

El mismo resultado se obtiene haciendo uso de la expresión uniforme (3.48), en la que la función de onda se evalúa haciendo uso de información puramente clásica. Así, las trayectorias correspondientes al hamiltoniano clásico $\mathcal{H}_W(p, q) = (p^2 + q)/2$, obtenidas a partir de las ecuaciones clásicas de Hamilton

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial \mathcal{H}_W(p, q)}{\partial p} = p \\ \dot{p} &= -\frac{\partial \mathcal{H}_W(p, q)}{\partial q} = -\frac{1}{2}, \end{aligned}$$

vienen dadas por

$$\begin{aligned} q_t &= q_0 + p_0 t - \frac{t^2}{4} \\ p_t &= p_0 - \frac{t}{2}. \end{aligned}$$

Eligiendo $q_0 = p_0 = 0$ y sustituyendo en (3.48) se tiene

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\sim \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{-it}{2\hbar}(x + \frac{t^2}{4}) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t (\frac{-\tau}{2})^2 d\tau} \\ &\sim \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{-it}{2\hbar}xt - \frac{i}{24\hbar}t^3} \\ &\sim Ai\left(\hbar^{-2/3}x\right), \end{aligned}$$

donde, por tratarse de un sistema no ligado, la integral en el tiempo se extiende hasta infinito.

Según se ha indicado, la aproximación de la *doble* integral (3.61) por fase estacionaria conduce a la expresión WKB para la función de ondas, con las correspondientes *fórmulas de conexión*. En efecto, los puntos críticos α_s, α_s^* de la integral

$$\Psi(x) \sim \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \frac{1}{\alpha^{*1/4}} e^{\frac{i}{\hbar}\phi(\alpha, \alpha^*)},$$

donde $\phi(\alpha, \alpha^*) \equiv -i\alpha x + i\alpha\alpha^* + i\frac{2}{3}\alpha^{*3/2}$, corresponden a aquellos valores de α y α^* que cumplen $\partial_\alpha\phi(\alpha_s, \alpha_s^*) = \partial_{\alpha^*}\phi(\alpha_s, \alpha_s^*) = 0$, es decir

$$\alpha_s^* = x \quad (3.64a)$$

$$\alpha_s^{*1/2} = -\alpha_s. \quad (3.64b)$$

La matriz de derivadas segundas viene dada por

$$\mathbf{D}_{\alpha\alpha^*} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & \frac{i}{2\alpha_s} \end{pmatrix}$$

y su determinante es la unidad. La fórmula de *saddle point* conduce a la siguiente aproximación a la función de onda como suma sobre las soluciones estacionarias:

$$\Psi(x) \sim \sum_s \frac{1}{\alpha_s^{*1/4}} e^{\frac{1}{\hbar}(\alpha_s x - \alpha_s \alpha_s^* - \frac{2}{3}\alpha_s^{*3/2})}. \quad (3.65)$$

Supongamos en primer lugar que $x < 0$. Teniendo en cuenta que x es real, la condición (3.64b) hace que $\alpha_s^* \equiv r e^{i\theta} = r e^{\pm i\pi} = -r = x$. Para $\theta = \pi$, según (3.64b) se tiene $\alpha_s = -ir^{1/2}$, mientras que para $\theta = -\pi$ se tiene $\alpha_s = ir^{1/2}$. Sustituyendo en (3.65) obtenemos

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\sim \left[\frac{1}{r^{1/4} e^{i\pi/4}} e^{\frac{1}{\hbar}(-\frac{2}{3}r^{3/2} e^{i3\pi/2})} + \frac{1}{r^{1/4} e^{-i\pi/4}} e^{\frac{1}{\hbar}(-\frac{2}{3}r^{3/2} e^{-i3\pi/2})} \right] \\ &\sim \frac{1}{r^{1/4}} \left[e^{i(\frac{2}{3\hbar}r^{3/2} - \frac{\pi}{4})} + e^{-i(\frac{2}{3\hbar}r^{3/2} - \frac{\pi}{4})} \right], \\ &\sim \frac{2}{r^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3\hbar}r^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned} \quad (3.66)$$

Para valores positivos de x se cumple $\alpha_s^* = x = r$, de donde $\alpha_s = -r^{1/2}$. La función de onda en esta región vendrá dada por

$$\Psi(x) \sim \frac{1}{r^{1/4}} e^{\frac{-2}{3\hbar}r^{3/2}}. \quad (3.67)$$

Los resultados (3.66) y (3.67) conducen a la siguiente fórmula de conexión:

$$\Psi_{WKB}(x) \sim \begin{cases} \frac{2}{|x|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3\hbar}|x|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) & , \quad x = -|x| < 0 \\ \frac{1}{x^{1/4}} e^{\frac{-2}{3\hbar}x^{3/2}} & , \quad x > 0. \end{cases}$$

El oscilador armónico Para un potencial armónico $V(\hat{q}) = \hat{q}^2/2$, el hamiltoniano $\hat{H} = (\hat{p}^2 + \hat{q}^2)/2$ se transforma bajo \hat{T}_0 como $\hat{H}' = \hbar(-a^2 + a'^2)/2$, con una función clásica asociada dada por $\mathcal{H}' = (-\alpha^2 + \alpha'^2)/2$. La función de onda en la representación de Bargmann viene dada, según (3.54), por

$$\begin{aligned}\Psi'(\alpha^*) &\sim \frac{1}{(2E - \alpha'^2)^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^{\alpha^*} (2E - \alpha'^2)^{1/2} d\alpha'^*} \\ &\sim \frac{1}{(2E - \alpha'^2)^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\alpha'^2}{2} (2E - \alpha'^2)^{1/2} - iE \ln(i\alpha^* + (2E - \alpha'^2)^{1/2}) \right]}.\end{aligned}\quad (3.68)$$

A continuación analizaremos las condiciones bajo las que la función (3.68) es analítica, lo que determinará las condiciones de cuantización de la energía. Este estudio conlleva un análisis de las funciones multivaluadas

$$\begin{aligned}f_1(z) &= (2E - z^2)^{1/2} \\ f_2(z) &= (2E - z^2)^{1/4} \\ f_3(z) &= e^{\gamma \ln(g(z))}, \quad \gamma \in \mathbb{C}.\end{aligned}$$

La superficie de Riemann asociada a la función $f_1(z)$ tiene dos hojas, y el corte de rama puede elegirse como la línea que une los dos puntos de rama $z_{\pm} = \pm\sqrt{2E}$, tal como se indica en la Fig. (3.2), de forma que la función permanecerá univaluada a lo largo de un camino que rodee ambos puntos, sin cruzar el corte de rama.⁴ Los puntos de rama de la función $f_2(z)$ son los mismos que los de $f_1(z)$, pero en este caso es necesario dar *dos* vueltas a lo largo de un camino que rodee a $z_{\pm} = \pm\sqrt{2E}$ para no cambiar de rama, ya que la superficie de Riemann correspondiente a esta función tiene 4 hojas.⁵ Por otra parte, la función logarítmica $f(z) = \ln(z - z_b)$ tiene un punto de rama en $z = z_b$ y la superficie de Riemann asociada tiene infinitas ramas, de manera que sucesivas vueltas alrededor de este punto irán produciendo cambios de rama sin que se llegue nunca al valor original de la función.⁶ Para que la función $f_3(z)$ sea analítica, la constante γ ha de ser un número entero, $\gamma = n \in \mathbb{N}$, de forma que $f_3(z) = e^{n \ln(g(z))} = g(z)^n$.⁷ (Nótese que la condición de analiticidad la imponemos a la función exponencial en $f_3(z)$, y no a la

⁴Nótese que una vuelta alrededor de cada punto de rama *sí* produce un cambio de rama de la función. Así, si escribimos $f_1(z) = (2E - z^2)^{1/2} = (\sqrt{2E} - z)^{1/2}(\sqrt{2E} + z)^{1/2}$, nombrando $\sqrt{2E} - z \equiv r_1 e^{i\theta_1}$ y $\sqrt{2E} + z \equiv r_2 e^{i\theta_2}$ tendremos $f_1(z) = (r_1 r_2)^{1/2} e^{i(\theta_1 + \theta_2)/2}$. Si partimos del punto $z = z_0$, al dar una vuelta (en sentido positivo) alrededor de $z_1 = \sqrt{2E}$, la función cambia de signo: $f_1^{(1)}(z_0) = (r_1 r_2)^{1/2} e^{i((\theta_1 + 2\pi) + \theta_2)/2} = -(r_1 r_2)^{1/2} e^{i(\theta_1 + \theta_2)/2} = -f(z_0)$. Una vuelta alrededor de $z_2 = -\sqrt{2E}$ producirá el mismo efecto, mientras que una vuelta alrededor de *ambos* puntos de rama dejará a la función invariante: $f_1^{(1)'}(z_0) = (r_1 r_2)^{1/2} e^{i(\theta_1 + 2\pi)/2} e^{i(\theta_2 + 2\pi)/2} = (r_1 r_2)^{1/2} e^{i\theta_1/2} e^{i\theta_2/2} = f(z_0)$, sin que tenga lugar ningún salto de rama.

⁵En este caso, si $f_2(z_0) = (r_1 r_2)^{1/4} e^{i(\theta_1 + \theta_2)/4}$, al dar una vuelta en torno a $z = \sqrt{2E}$ y $z = -\sqrt{2E}$ obtenemos $f_2^{(1)}(z_0) = (r_1 r_2)^{1/4} e^{i(\theta_1 + 2\pi)/4} e^{i(\theta_2 + 2\pi)/4} = -(r_1 r_2)^{1/4} e^{i(\theta_1 + \theta_2)/4} = -f_2(z_0)$, mientras que al dar dos vueltas volvemos al valor inicial de la función: $f_2^{(2)}(z_0) = (r_1 r_2)^{1/4} e^{i(\theta_1 + 4\pi)/4} e^{i(\theta_2 + 4\pi)/4} = f_2(z_0)$.

⁶Escribiendo $z - z_b = r e^{i\theta}$, la función $f(z) = \ln(z - z_b)$ se escribe $f(z) = \ln r + i\theta$. Partiendo del valor $f(z_0) = \ln r_0 + i\theta_0$, las sucesivas vueltas en torno a z_b darán los valores $f^{(1)}(z_0) = \ln r_0 + i(\theta_0 + 2\pi)$, $f^{(2)}(z_0) = \ln r_0 + i(\theta_0 + 4\pi)$, etc... sin que se obtenga de nuevo el valor $f(z_0)$.

⁷De hecho, la "función potencia" se define como $z^\alpha = e^{\alpha \ln z}$, de forma que, cuando α es racional ($\alpha = p/q$, con p y q enteros y $q \neq 0$) esta función coincide con $\sqrt[q]{z^p}$ (para $q > 0$) o con $(\sqrt[q]{z^p})^{-1}$ (para $q < 0$) y tiene q ramas. Para α irracional, la función potencia es infinitamente multivaluada.

función logarítmica, que bajo ninguna condición podrá ser univaluada).

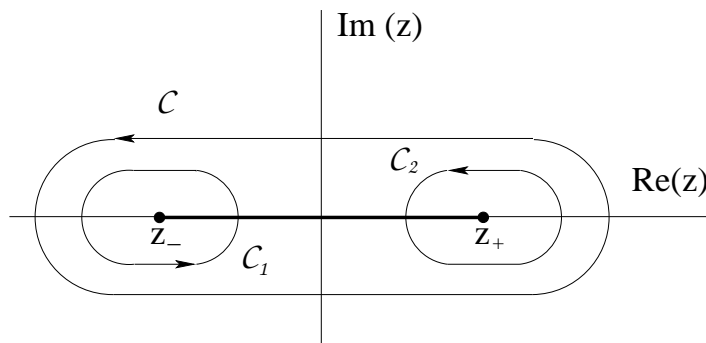


Figura 3.2: Puntos de rama $z_{\pm} = \pm\sqrt{2E}$ asociados a las funciones $f_1(z) = (2E - z^2)^{1/2}$ y $f_2(z) = (2E - z^2)^{1/4}$. El corte de rama elegido se indica en negrita. Una vuelta a lo largo de los caminos C_1 o C_2 produce un cambio de rama en ambas funciones. Una vuelta a lo largo del camino C deja invariante la función $f_1(z)$, mientras que es necesario dar dos vueltas a lo largo de C para que $f_2(z)$ permanezca univaluada.

Estamos interesados en saber bajo qué condiciones la función compleja

$$\Psi(z) = \frac{1}{(2E - z^2)^{1/4}} e^{\frac{i}{2\hbar} z(2E - z^2)^{1/2} + \frac{E}{\hbar} \ln[iz + (2E - z^2)^{1/2}]}$$

permanece unívoca al dar una vuelta alrededor de los puntos $z = \pm\sqrt{2E}$. Escribiendo $\sqrt{2E} - z \equiv r_1 e^{i\theta_1}$ y $\sqrt{2E} + z \equiv r_2 e^{i\theta_2}$, si inicialmente la función vale

$$\begin{aligned} \Psi(z_0) &= \frac{1}{(r_1 r_2)^{1/4}} e^{i \frac{\theta_1 + \theta_2}{4}} e^{\frac{i}{2\hbar} (\sqrt{2E} - r_1 e^{i\theta_1})(r_1 r_2)^{1/2}} e^{i \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}} \\ &\times e^{\frac{E}{\hbar} \ln \left(i(\sqrt{2E} - r_1 e^{i\theta_1}) + (r_1 r_2)^{1/2} e^{i \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}} \right)} \\ &\equiv \frac{1}{(r_1 r_2)^{1/4}} e^{i \frac{\theta_1 + \theta_2}{4}} e^{\frac{i}{2\hbar} (\sqrt{2E} - r_1 e^{i\theta_1})(r_1 r_2)^{1/2}} e^{i \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}} + \frac{E}{\hbar} \ln(R e^{i\theta}), \end{aligned}$$

al dar una vuelta alrededor de $z = \pm\sqrt{2E}$ a lo largo del contorno C mostrado en la Fig. (3.2) esta función tomará el valor

$$\begin{aligned} \Psi^{(1)}(z_0) &= \frac{1}{(r_1 r_2)^{1/4}} e^{i \frac{\theta_1 + 2\pi + \theta_2 + 2\pi}{4}} e^{\frac{i}{2\hbar} (\sqrt{2E} - r_1 e^{i(\theta_1 + 2\pi)})(r_1 r_2)^{1/2}} e^{i \frac{\theta_1 + 2\pi + \theta_2 + 2\pi}{2}} + \frac{E}{\hbar} \ln(R e^{i(\theta + 2\pi)}) \\ &\equiv \Psi(z_0) e^{-i\pi + \frac{E}{\hbar} 2\pi i}. \end{aligned}$$

⁸ Para que la función $\Psi(x)$ sea holomorfa, el valor de $\Psi^{(1)}(z_0)$ deberá coincidir con $\Psi(z_0)$, debiendo satisfacerse por tanto la condición

$$e^{-i\pi + \frac{E}{\hbar} 2\pi i} = e^{i2n\pi}.$$

⁸Nótese que el argumento del logaritmo, cuando θ_1 y θ_2 cambian a $\theta_1 + 2\pi$ y $\theta_2 + 2\pi$ permanece invariante: $i(\sqrt{2E} - r_1 e^{i(\theta_1 + 2\pi)}) + (r_1 r_2)^{1/2} e^{i \frac{\theta_1 + 2\pi + \theta_2 + 2\pi}{2}} = i(\sqrt{2E} - r_1 e^{i\theta_1}) + (r_1 r_2)^{1/2} e^{i \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}} \equiv R e^{i\theta}$. A esto hay que añadir el cambio de fase de 2π que sufre el logaritmo al dar una vuelta alrededor de $\pm\sqrt{2E}$.

De esta manera se obtiene la condición de cuantización (exacta)

$$E_n = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

para la energía del oscilador armónico a partir de una condición de analiticidad impuesta a la función de onda $\Psi'(\alpha^*)$. Esta función está definida en todo el plano complejo de α^* , excepto en el corte de rama.

En la determinación de $\Psi'(\alpha^*)$ interviene la integral de acción $\int_{\alpha_0^*}^{\alpha^*} d\alpha' (2E - \alpha'^2)^{1/2}$, evaluada a lo largo de un camino de integración desde un punto arbitrario α_0^* . El problema de la elección de este camino se reduce en definitiva al problema de la elección del signo de la raíz cuadrada. En otras palabras, debe elegirse una de las hojas de la superficie de Riemann correspondiente a la función $(2E - \alpha'^2)^{1/2}$ y permanecer en ella a lo largo del camino de integración, de forma que dicha función continúe siendo univaluada, sin cruzar el corte de rama (que hemos definido de forma arbitraria como la línea que une los dos puntos de rama $\pm\sqrt{2E}$). La elección de los cortes de rama de una función multivaluada no es única,⁹ y esta elección determina el tipo de solución que se obtiene. La solución aceptable físicamente debe satisfacer unas condiciones de contorno adecuadas, y decaer en las regiones clásicamente prohibidas. Puede comprobarse que el signo de la raíz compatible con estas condiciones de contorno es el positivo.

La función de ondas en representación de coordenadas vendrá dada por

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \Phi_{\alpha}(x) \Psi'(\alpha^*) e^{-\alpha\alpha^*/\hbar} \\ &\sim \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \frac{1}{(2E - \alpha'^2)^{1/4}} e^{\frac{1}{\hbar} \left[\alpha(x - \alpha^*) + i \int_{\alpha_0^*}^{\alpha^*} (2E - \alpha'^2)^{1/2} d\alpha' \right]}. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Como se ha visto, la aproximación de esta doble integral por el método de *saddle point* conduce a la expresión WKB de la función de ondas:

$$\begin{aligned} \Psi_n^{WKB}(x) &= \frac{\mathcal{N}}{(2E_n - x^2)^{1/4}} \sin \left[\frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar} \int^x \sqrt{2E_n - x'^2} dx' \right] \\ &= \frac{\mathcal{N}}{[(2n+1)\hbar - x^2]^{1/4}} \sin \left[\frac{\pi}{4} + \frac{x}{2\hbar} \sqrt{(2n+1)\hbar - x^2} - i \left(n + \frac{1}{2} \right) \ln \left(ix + \sqrt{(2n+1)\hbar - x^2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Cuando se efectúa esta aproximación de la integral, los contornos de integración $\Gamma_{\alpha, \alpha^*}$ se deforman, pero no de cualquier manera, puesto que la condición de fase estacionaria (3.57), que para el oscilador armónico viene dada por $\alpha = i\sqrt{2E - \alpha'^2}$, impone una relación entre ambas deformaciones. Esto es, la elección de un contorno para la integral en α^* (por ejemplo, el que se muestra en la Fig. (3.2)) determina de forma unívoca el camino de integración que ha de elegirse para α (éste tendrá que rodear los puntos de rama existentes en $\alpha = \pm i\sqrt{2E}$).

⁹Dado que las líneas de rama siempre unen los puntos de rama, que siempre aparecen en pares, y teniendo en cuenta que para la función $(2E - \alpha'^2)^{1/2}$, $\alpha^* \rightarrow \infty$ y $\alpha^* \rightarrow -\infty$ son también puntos de rama, podrían haberse elegido igualmente como cortes de rama las líneas que unen $\pm\sqrt{2E}$ con $\pm\infty$, respectivamente.

Este ejemplo pone de manifiesto la diferencia mostrada por las funciones $\Psi'(\alpha^*)$ según se haga uso de una transformación unitaria \hat{T} o no unitaria \hat{T}_0 . En el primer caso, según hemos visto, la expresión obtenida para la función de onda es uniforme. (En particular, la elección de un operador \hat{T} tal que $\lambda = \omega/2$ proporciona un resultado exacto (salvo constantes de normalización) para las autofunciones del oscilador armónico). Por el contrario, para la transformación no unitaria \hat{T}_0 correspondiente a $\lambda = 0$ la expresión que se obtiene para $\Psi(x)$ muestra divergencias en los puntos en que $p_x = 0$.

Esta diferencia se aprecia en el tipo de caminos de integración que deben elegirse para evaluar la función $\Psi'(\alpha^*)$. Mientras que para la transformación unitaria con $\lambda = \omega/2$ estos caminos deben rodear una singularidad en forma de polo simple en el origen, hemos visto que para la transformación no unitaria con $\lambda = 0$ la estructura de singularidades se complica, apareciendo cortes de rama que debe evitarse cruzar a lo largo del camino de integración.

Las ecuaciones clásicas de movimiento para el hamiltoniano $\mathcal{H}' = (-\alpha^2 + \alpha^{*2})/2$ vienen dadas por

$$\begin{aligned}\dot{\alpha} &= -i \frac{\partial \mathcal{H}'(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^*} = -i \alpha^* \\ \dot{\alpha}^* &= i \frac{\partial \mathcal{H}'(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha} = -i \alpha,\end{aligned}$$

que para el cambio de variables $\alpha = ip$, $\alpha^* = q$ corresponden a las ecuaciones de Hamilton

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -\frac{\partial \mathcal{H}'(q, p)}{\partial p} = -q \\ \dot{q} &= \frac{\partial \mathcal{H}'(q, p)}{\partial q} = p,\end{aligned}$$

con $\mathcal{H}'(q, p) = (p^2 + q^2)/2$. La fórmula de Kay en la representación de momentos viene dada por la ec. (3.50):

$$\bar{\Psi}(p) \sim \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar} \int_{p_m}^p q_{<}(p') dp' \right],$$

donde $q_{<}(p)$ corresponde a la rama de la función $q = q(p, E)$ en la que \dot{p} es positiva, esto es, la rama $q = -\sqrt{2E - p^2}$ [ver Fig. (3.3)]. La expresión WKB en la representación de momentos tiene pues la forma

$$\begin{aligned}\bar{\Psi}(p) &\sim \frac{\mathcal{N}}{(2E - p^2)^{1/4}} \sin \left[\frac{\pi}{4} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\sqrt{2E}}^p \sqrt{2E - p'^2} dp' \right] \\ &\sim \frac{\mathcal{N}}{(2E - p^2)^{1/4}} \sin \left[\frac{\pi}{4} - \frac{p}{2\hbar} \sqrt{2E - p^2} - \frac{E}{\hbar} \sin^{-1} \frac{p}{\sqrt{2E}} - \frac{E\pi}{2\hbar} \right],\end{aligned}$$

que muestra divergencias en los puntos $p = \pm\sqrt{2E}$.

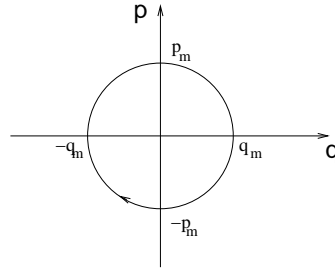


Figura 3.3: Trayectoria en el espacio de fases para el oscilador armónico definida por $q^2 + p^2 = 2E$. La rama $q_<(p) = -\sqrt{2E - p^2}$ corresponde a la semicircunferencia izquierda, y en la figura $q_m = p_m = \sqrt{2E}$.

Caso $\lambda \rightarrow \infty$

Por último, analizaremos el otro caso extremo de la aproximación (3.1), correspondiente al límite en el que el parámetro λ tiende a infinito. De manera análoga al caso $\lambda \rightarrow 0$, haremos uso de una transformación simpléctica no unitaria, con la diferencia de que la actuación de este operador será precisamente la contraria al caso anterior, esto es, definiremos un operador \hat{T}_∞ que, salvo constantes, transformará \hat{q} por a y \hat{p} por a^\dagger . Definiendo los operadores \hat{b} y \hat{b}^\dagger como

$$\begin{aligned}\hat{b}^\dagger &\equiv \hat{T}_\infty^{-1} a^\dagger \hat{T}_\infty \\ \hat{b} &\equiv \hat{T}_\infty^{-1} a \hat{T}_\infty,\end{aligned}$$

se trata de encontrar las constantes c_1, c_2 tales que

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{b}^\dagger + \hat{b}) &= c_1 a \\ \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{b}^\dagger - \hat{b}) &= c_2 a^\dagger.\end{aligned}$$

Invirtiéndolo estas ecuaciones se tiene:

$$\begin{aligned}\hat{b}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 a - ic_2 a^\dagger) \\ \hat{b} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 a + ic_2 a^\dagger),\end{aligned}$$

es decir,

$$\hat{T}_\infty^{-1} \begin{pmatrix} a^\dagger \\ a \end{pmatrix} \hat{T}_\infty \equiv \begin{pmatrix} \hat{b}^\dagger \\ \hat{b} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -ic_2 & c_1 \\ ic_2 & c_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^\dagger \\ a \end{pmatrix} \equiv \mathbf{M}^\infty \begin{pmatrix} a^\dagger \\ a \end{pmatrix}.$$

Por los mismos argumentos que se aplican al caso $\lambda \rightarrow 0$, la matriz \mathbf{M}^∞ cumple las propiedades

$$\det \mathbf{M}^\infty = 1$$

$$M_{11}^\infty = M_{22}^\infty,$$

de donde

$$\begin{aligned} c_1 c_2 &= i \\ c_1 &= -i c_2. \end{aligned}$$

Eligiendo $c_1 = 1$ se tiene $c_2 = i$. La definición de los operadores \hat{q} y \hat{p} permite escribir la acción del operador \hat{T}_∞ como

$$\hat{T}_\infty^{-1} a^\dagger \hat{T}_\infty = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \equiv \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \hat{q} \quad (3.70a)$$

$$\hat{T}_\infty^{-1} a \hat{T}_\infty = \frac{-1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \equiv \frac{i}{\sqrt{\hbar}} \hat{p}, \quad (3.70b)$$

o bien, actuando en orden inverso:

$$\hat{T}_\infty a^\dagger \hat{T}_\infty^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \equiv \frac{-i}{\sqrt{\hbar}} \hat{p} \quad (3.71a)$$

$$\hat{T}_\infty a \hat{T}_\infty^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \equiv \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \hat{q}. \quad (3.71b)$$

Asimismo, la transformación de los operadores de cuadratura \hat{q} y \hat{p} viene dada por

$$\hat{q}' \equiv \hat{T}_\infty^{-1} \hat{q} \hat{T}_\infty = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) - \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \right] = \sqrt{\hbar} a \quad (3.72a)$$

$$\hat{p}' \equiv \hat{T}_\infty^{-1} \hat{p} \hat{T}_\infty = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) + \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \right] = i\sqrt{\hbar} a^\dagger. \quad (3.72b)$$

La comparación de las ecs. (3.39) y (3.72) muestra que las actuaciones de los operadores \hat{T}_0 y \hat{T}_∞ son opuestas: mientras que el primero transformaba \hat{q} en a^\dagger y \hat{p} en a , este último hace precisamente lo contrario.

Siguiendo en mismo procedimiento que para \hat{T}_0 , puede obtenerse la forma explícita del operador \hat{T}_∞ teniendo en cuenta que corresponde a un operador con la forma genérica $\hat{T} = e^{\varepsilon a^{\dagger 2} + \varepsilon' a^2}$. Identificando las matrices de transformación asociadas a cada uno de estos operadores

$$\begin{pmatrix} \cosh \theta & -2\varepsilon' \frac{\sinh \theta}{\theta} \\ 2\varepsilon \frac{\sinh \theta}{\theta} & \cosh \theta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

y comparando esta igualdad con la ec. (3.40) podemos observar que los operadores \hat{T}_0 y \hat{T}_∞ difieren en el

signo del exponente:¹⁰

$$\hat{T}_\infty = e^{\frac{-\pi}{8}(a'^2+a^2)}. \quad (3.73)$$

(Hemos de hacer notar que, por tratarse de operadores que no son unitarios, estas transformaciones no tienen la interpretación geométrica que tiene un operador de *squeezing*. Es decir, \hat{T}_0 y \hat{T}_∞ no corresponden a rotaciones que difieren en un ángulo $\pm\pi$, puesto que su efecto no es el de producir una deformación finita del círculo de incertidumbre, como sucede con el operador unitario de *squeezing*. Más adelante discutiremos acerca de la utilidad y posible interpretación de estos operadores no unitarios).

El límite $\lambda \rightarrow \infty$ de la función de onda (3.1) en la representación de momentos se obtiene a partir de la transformada de Fourier:

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{-i}{\hbar}px} \Psi(x) \\ &= \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{-i}{\hbar}px} \int_0^T dt (\dot{p}_t - 2i\lambda_t \dot{q}_t)^{1/2} e^{\frac{-\lambda_t}{\hbar}(x-q_t)^2 + \frac{i}{\hbar}p_t(x-q_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau} \\ &\equiv \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^T dt (\dot{p}_t - 2i\lambda_t \dot{q}_t)^{1/2} e^{\frac{-i}{\hbar}p_t q_t + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau} I(t), \end{aligned} \quad (3.74)$$

donde la integral $I(t)$ está dada por

$$I(t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{-\lambda_t}{\hbar}(x-q_t)^2 + \frac{i}{\hbar}x(p_t-p)} = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{\lambda_t}} e^{-\frac{(p_t-p)^2}{4\hbar\lambda_t} + \frac{i}{\hbar}q_t(p_t-p)}.$$

La función (3.74) se escribe entonces

$$\bar{\Psi}(p) = \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{2}} \int_0^T dt \left(\frac{\dot{p}_t}{\lambda_t} - 2i\dot{q}_t \right)^{1/2} e^{-\frac{(p_t-p)^2}{4\hbar\lambda_t} - \frac{i}{\hbar}q_t p + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau},$$

y su valor asintótico en el límite $\lambda_t \rightarrow \infty$ es:

$$\bar{\Psi}(p) \sim \int_0^T dt (\dot{q}_t)^{1/2} e^{\frac{-i}{\hbar}q_t p + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau}. \quad (3.75)$$

Podemos obtener este resultado aplicando el mismo método que hemos seguido en casos anteriores, pero esta vez en la representación de momentos. Así, la función de onda $\bar{\Psi}(p)$ podrá escribirse como

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}(p) &= \langle p | \Psi \rangle = \langle p | \hat{T}_\infty | \Psi' \rangle = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \langle p | \hat{T}_\infty | \alpha \rangle \langle \alpha | \Psi' \rangle e^{-\alpha\alpha^*/\hbar} \\ &\equiv \int_{\Gamma_{\alpha,\alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \bar{\Phi}_\alpha(p) \Psi'(\alpha^*) e^{-\alpha\alpha^*/\hbar}. \end{aligned} \quad (3.76)$$

¹⁰La matriz de transformación para un operador $\hat{T} = e^{\varepsilon a'^2 + \varepsilon' a^2}$ viene dada por

$$\begin{pmatrix} \cosh \theta & -2\varepsilon' \frac{\sinh \theta}{\theta} \\ 2\varepsilon \frac{\sinh \theta}{\theta} & \cosh \theta \end{pmatrix},$$

con $\theta^2 = -4\varepsilon\varepsilon'$. Escribiendo $\varepsilon = -\gamma$ y $\varepsilon' = -\gamma'$, puede verse que la matriz de transformación asociada al operador $\hat{T}' = e^{-(\gamma a'^2 + \gamma' a^2)}$ será

$$\begin{pmatrix} \cosh \theta & 2\gamma' \frac{\sinh \theta}{\theta} \\ -2\gamma \frac{\sinh \theta}{\theta} & \cosh \theta \end{pmatrix},$$

con $\theta^2 = -4\varepsilon\varepsilon' = -4\gamma\gamma'$.

La función $\bar{\Phi}_\alpha(p) \equiv \langle p|\hat{T}_\infty|\alpha\rangle$ se obtiene de la manera habitual, teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned} 0 &= \langle p|a|0\rangle = \langle p|\hat{T}_\infty \hat{d}_\alpha a|0\rangle = \langle p|\hat{T}_\infty \hat{d}_\alpha a \hat{d}_\alpha^{-1} \hat{T}_\infty^{-1} \hat{T}_\infty \hat{d}_\alpha|0\rangle \\ &= \langle p|\hat{T}_\infty a \hat{T}_\infty^{-1} \hat{T}_\infty \hat{d}_\alpha|0\rangle - \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \langle p|\hat{T}_\infty \hat{d}_\alpha \hat{d}_\alpha^{-1} \hat{T}_\infty^{-1} \hat{T}_\infty \hat{d}_\alpha|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \langle p|\hat{q} \hat{T}_\infty \hat{d}_\alpha|0\rangle - \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \langle p|\hat{T}_\infty \hat{d}_\alpha|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial p} - \alpha \right] \bar{\Phi}_\alpha(p), \end{aligned}$$

donde en la segunda línea hemos hecho uso de la ec. (3.6), en la tercera la ec. (3.71) y en la última hemos tenido en cuenta que la actuación del operador \hat{q} en la representación de momentos viene dada por $i\hbar \partial_p$. Integrando esta ecuación diferencial obtenemos

$$\bar{\Phi}_\alpha(p) = \mathcal{N}_\alpha e^{\frac{-i}{\hbar}\alpha p}, \quad (3.77)$$

siendo \mathcal{N}_α una constante de integración, en general dependiente de α . Como hemos hecho en casos anteriores, esta constante puede ser determinada derivando $\bar{\Phi}_\alpha(p)$ con respecto a α :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Phi}_\alpha(p)}{\partial \alpha} &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \langle p|\hat{T}_\infty e^{\alpha a^\dagger / \sqrt{\hbar}}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \langle p|\hat{T}_\infty a^\dagger e^{\alpha a^\dagger / \sqrt{\hbar}}|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \langle p|\hat{T}_\infty a^\dagger \hat{T}_\infty^{-1} \hat{T}_\infty \hat{d}_\alpha|0\rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle p|\hat{p} \hat{T}_\infty \hat{d}_\alpha|0\rangle \\ &= \frac{-i}{\hbar} p \bar{\Phi}_\alpha(p). \end{aligned}$$

Sustituyendo en esta ecuación la expresión (3.77) para $\bar{\Phi}_\alpha(p)$ se tiene

$$\frac{\partial \mathcal{N}_\alpha}{\partial \alpha} = 0,$$

de donde \mathcal{N}_α es una constante independiente de α que podemos tomar como $\mathcal{N}_\alpha = 1$. La función $\bar{\Phi}_\alpha(p)$ viene dada por tanto por

$$\bar{\Phi}_\alpha(p) = e^{\frac{-i}{\hbar}\alpha p}. \quad (3.78)$$

(En la representación de coordenadas, la función correspondiente es singular, como puede verse transformando Fourier (3.78):

$$\Phi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar}px} \bar{\Phi}_\alpha(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar}p(x-\alpha)} \stackrel{?}{=} \sqrt{2\pi\hbar} \delta(x-\alpha). \quad (3.79)$$

La expresión obtenida para $\Phi_\alpha(x)$ no sólo debe ser interpretada en términos de distribución, sino que existen dificultades para interpretar esta función delta, que daría una contribución no nula para valores de α en el eje real, anulándose en el resto del plano complejo).

La función $\Psi'(\alpha) \equiv (\alpha|\Psi')$ corresponde a la autofunción $|\Psi'\rangle$ del hamiltoniano transformado $\hat{H}' \equiv \hat{T}_\infty^{-1} \hat{H} \hat{T}_\infty$ en la representación de Bargmann. Para un hamiltoniano de la forma $\hat{H} = \hat{p}^2/2 + V(\hat{q})$, las ecuaciones de transformación (3.72) hacen que \hat{H}' venga dado por

$$\hat{H}' = \frac{(i\sqrt{\hbar} a^\dagger)^2}{2} + V(\sqrt{\hbar} a) = \frac{-\hbar}{2} a^{\dagger 2} + V(\sqrt{\hbar} a).$$

La ecuación de Hamilton-Jacobi $\mathcal{H}'(\alpha^*, \gamma = i\partial_{\alpha^*} S^{(0)}(\alpha^*)) = E$ se escribe en este caso

$$\frac{-\alpha^{*2}}{2} + V(\gamma) = E$$

y, a diferencia del caso anterior, no es posible obtener una expresión explícita para $\gamma_E(\alpha^*)$. En cualquier caso, la expresión genérica para $\Psi'(\alpha)$ vendrá dada por la ec. (3.13), con lo que la ec. (3.76) se escribe

$$\bar{\Psi}(p) \sim \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \bar{\Phi}_\alpha(p) \frac{1}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}'(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma_E}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha^{*'}) d\alpha^{*'} - \frac{1}{\hbar} \alpha \alpha^*}.$$

Esta expresión es completamente análoga a la ec. (3.14), y pueden darse los mismos pasos que condujeron a la ec. (3.16), a saber: aproximación de la integral en α^* por el método de fase estacionaria, elección de la trayectoria clásica como camino de integración para la integral en α restante, y parametrización de dicha integral por el tiempo t . De esta forma, llegamos a una expresión análoga a la ec. (3.16):

$$\bar{\Psi}(p) = \mathcal{N} \int_0^T dt (\dot{\alpha}_t)^{1/2} \bar{\Phi}_\alpha(p) e^{-\frac{1}{\hbar} \alpha_t \alpha_t^* + \frac{1}{\hbar} \int_0^t \alpha_\tau \dot{\alpha}_\tau^* d\tau}$$

que, para $\bar{\Phi}_\alpha(p)$ dada por (3.78) se escribe

$$\bar{\Psi}(p) = \mathcal{N} \int_0^T dt (\dot{\alpha}_t)^{1/2} e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha_t p - \frac{1}{\hbar} \alpha_t \alpha_t^* + \frac{1}{\hbar} \int_0^t \alpha_\tau \dot{\alpha}_\tau^* d\tau}. \quad (3.80)$$

El cambio de variables $(\alpha_t, \alpha_t^*) \rightarrow (q_t, p_t)$ está determinado por las ecuaciones de transformación (3.72):

$$\begin{aligned} \alpha_t &= q_t \\ \alpha_t^* &= -i p_t, \end{aligned}$$

con lo que la ec. (3.80) se escribe

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}(p) &\sim \int_0^T dt (\dot{q}_t)^{1/2} e^{-\frac{i}{\hbar} q_t p + \frac{1}{\hbar} q_t p_t - \frac{1}{\hbar} \int_0^t q_\tau \dot{p}_\tau d\tau} \\ &\sim e^{\frac{i}{\hbar} q_0 p_0} \int_0^T dt (\dot{q}_t)^{1/2} e^{-\frac{i}{\hbar} q_t p + \frac{1}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau}, \end{aligned} \quad (3.81)$$

donde hemos evaluado la integral por partes

$$\int_0^t q_\tau \dot{p}_\tau d\tau = q_t p_t - q_0 p_0 - \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau.$$

La ec. (3.81) coincide con la expresión asintótica (3.75), con lo que hemos conseguido obtener el límite $\lambda \rightarrow \infty$ de la expresión uniforme (3.1) mediante el uso de la transformación simpléctica no unitaria \hat{T}_∞ . Es sencillo comprobar que este límite recupera de nuevo el resultado WKB para la función de onda.

Transformaciones no unitarias

El procedimiento que hemos mostrado permite obtener una aproximación uniforme para la función de ondas mediante el uso de operadores unitarios. Como se ha visto, la expresión resultante viene dada en términos de un parámetro λ dependiente de la transformación de *squeezing* utilizada. Existen dos valores extremos de esta constante (a saber, $\lambda \rightarrow 0$ y $\lambda \rightarrow \infty$) para los que la expresión resultante deja de ser uniforme, y se corresponden con valores límite del parámetro de *squeezing* ($r \rightarrow \infty$ y $\phi = 0$ o $\phi = \pi$, respectivamente).

Ahora bien, hemos visto que estos casos límite pueden obtenerse también haciendo uso de operadores \hat{T}_0 y \hat{T}_∞ que no son unitarios. Es evidente que estos operadores *no* podrán obtenerse como límites del operador unitario de *squeezing* \hat{T} . Esto es sencillo de comprobar teniendo en cuenta cómo actúan dichos operadores sobre a y a^\dagger :

$$\begin{aligned} \hat{T} a^\dagger \hat{T}^\dagger &= c_q^* \hat{q} + c_p^* \hat{p} & ; & & \hat{T}_0 a^\dagger \hat{T}_0^{-1} &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \hat{q} & ; & & \hat{T}_\infty a^\dagger \hat{T}_\infty^{-1} &= \frac{-i}{\sqrt{\hbar}} \hat{p} \\ \hat{T} a \hat{T}^\dagger &= c_q \hat{q} + c_p \hat{p} & ; & & \hat{T}_0 a \hat{T}_0^{-1} &= \frac{i}{\sqrt{\hbar}} \hat{p} & ; & & \hat{T}_\infty a \hat{T}_\infty^{-1} &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \hat{q}. \end{aligned}$$

Para encontrar los valores extremos del operador \hat{T} tales que su efecto sobre, por ejemplo, a sea el mismo que el de \hat{T}_0 , hemos de determinar los valores de r y ϕ tales que $c_q \rightarrow 0$ y $c_p \rightarrow \frac{i}{\sqrt{\hbar}}$. Según las definiciones (3.19), esto corresponde a

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\cosh r - e^{i\phi} \sinh r) &\rightarrow 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2\hbar}}(\cosh r + e^{i\phi} \sinh r) &\rightarrow \frac{i}{\sqrt{\hbar}}. \end{aligned}$$

A partir de la primera condición obtenemos

$$e^{i\phi} \rightarrow \frac{\cosh r}{\sinh r},$$

y, sustituyendo en la segunda, se tiene

$$\frac{i}{\sqrt{2\hbar}} 2 \cosh r \rightarrow \frac{i}{\sqrt{\hbar}},$$

es decir, $\cosh r \rightarrow 1/\sqrt{2} = 0,707 < 1$. No existe ningún valor de r que cumpla esta condición. Es sencillo demostrar que se obtiene el mismo resultado si se pretende que el efecto del operador \hat{T} sobre a sea el mismo que el de \hat{T}_∞ .¹¹ Este resultado es bastante lógico si se tiene en cuenta que no debe existir ningún valor del parámetro de una transformación unitaria para el cual esa transformación deje de ser unitaria.

¹¹Comparando de nuevo el efecto de ambos operadores sobre a , vemos que tendría que cumplirse que $c_q \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\hbar}}$ y $c_p \rightarrow 0$, es decir:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\cosh r - e^{i\phi} \sinh r) &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \\ \frac{i}{\sqrt{2\hbar}}(\cosh r + e^{i\phi} \sinh r) &\rightarrow 0, \end{aligned}$$

Por otra parte, hemos de hacer notar que en este método hemos trabajado con estados $|\Psi'\rangle$ definidos como $|\Psi'\rangle = \hat{T}|\Psi\rangle$. En el caso general, cuando \hat{T} es unitario, la ecuación de valores propios $\hat{H}'|\Psi'\rangle = E|\Psi'\rangle$ define a $|\Psi'\rangle$ como un autoestado de $\hat{H}' \equiv \hat{T}^\dagger \hat{H} \hat{T}$ con el mismo autovalor E que la función original $|\Psi\rangle$. Sin embargo, para el caso de los operadores no unitarios $\hat{T}_{0,\infty}$ el hamiltoniano transformado $\hat{T}_{0,\infty}^{-1} \hat{H} \hat{T}_{0,\infty}$ no es hermítico, y $|\Psi'\rangle$ debe ser definida como *autofunción a la derecha* del operador \hat{H}' .

El hecho de que las funciones $|\Psi'\rangle$ no sean funciones de cuadrado integrable y no pertenezcan por tanto al espacio de Hilbert no les resta utilidad. Esto mismo sucede con los estados de cuadratura $|q\rangle$ y $|p\rangle$, que aun siendo estados cuya norma es infinita, proporcionan una base adecuada en la que representar las funciones de onda.

Así pues, el formalismo que hemos seguido permite obtener los casos extremos $\lambda \rightarrow 0$ y $\lambda \rightarrow \infty$ a través de dos procedimientos distintos: uno *desde dentro* del espacio de Hilbert, haciendo uso de un operador unitario de *squeezing* \hat{T} y considerando los valores límites del parámetro que define la transformación; y otro *desde fuera* del espacio de Hilbert, mediante transformaciones simplécticas no unitarias. En el primer caso, cabe preguntarse qué sentido tiene considerar una transformación de *squeezing* con $r \rightarrow \infty$. Al aplicar una transformación de *squeezing* a un estado coherente, se modifica la incertidumbre en p o en q , de forma tal que se siga cumpliendo la relación de indeterminación mínima $\Delta q \Delta p = \hbar/2$. Un caso extremo en que el parámetro del *squeezing* tiende a infinito correspondería a una deformación infinita del paquete de ondas en una de las cuadraturas, esto es, se tendría máxima certidumbre en una de ellas a costa de no tener ninguna información acerca de la otra. En este sentido, los estados $|q\rangle$ y $|p\rangle$ corresponden a estos casos extremos.

lo que conduce a las condiciones

$$e^{i\phi} \rightarrow \frac{-\cosh r}{\sinh r}$$

$$\cosh r \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} = 0,707 < 1.$$

3.2. Aproximación uniforme a las autofunciones. Condiciones de cuantización

Las autofunciones de un hamiltoniano \hat{H} independiente del tiempo pueden obtenerse a partir de la dinámica de un estado inicial no estacionario arbitrario $|\Psi(0)\rangle$ mediante transformación Fourier del estado $|\Psi(t)\rangle$. En la representación de posiciones, esta relación viene dada por

$$\varphi(x, E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt/\hbar} \Psi(x, t) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\tau}^{\tau} dt e^{iEt/\hbar} \Psi(x, t), \quad (3.82)$$

donde $\varphi(x, E)$ es una función que contiene singularidades a las autoenergías del hamiltoniano, y tiene la forma ¹² $\sum_n c_n \varphi_n(x) \delta(E - E_n)$.

De esta manera, es posible conseguir una aproximación a los autoestados de \hat{H} con independencia del método semiclásico utilizado para propagar $|\Psi(0)\rangle$, simplemente extrayéndolo de la dinámica mediante transformación Fourier. (Por simplicidad, consideraremos el caso en que no existen degeneraciones).

A continuación describiremos un procedimiento que permitirá obtener al mismo tiempo las autofunciones y las condiciones de cuantización para la energía de un sistema cuántico a partir de información puramente clásica, mediante la evolución temporal de una única trayectoria clásica.

Para obtener la función de onda $\Psi(x, t)$ seguiremos el método desarrollado en la sección anterior, haciendo uso de un operador unitario \hat{T} dado por (3.7) tal que $|\Psi(t)\rangle = \hat{T}|\Psi'(t)\rangle$, de forma que

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &\equiv \langle x|\Psi(t)\rangle \equiv \langle x|\hat{T}|\Psi'(t)\rangle = \iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \langle x|\hat{T}|\alpha\rangle \langle \alpha|\Psi'(t)\rangle e^{-\alpha\alpha^*/\hbar} \\ &\equiv \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \Phi_\alpha(x) \Psi'(\alpha^*, t) e^{-\alpha\alpha^*/\hbar}, \end{aligned} \quad (3.83)$$

donde $\Phi_\alpha(x) \equiv \langle x|\hat{T}|\alpha\rangle$ ha sido obtenida en el caso estacionario y viene dada por (3.12). La función $\Psi'(\alpha^*, t) \equiv \langle \alpha|\Psi'(t)\rangle$ corresponde a la proyección en estados de Bargmann de la función $|\Psi'(t)\rangle$, solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para el hamiltoniano transformado $\hat{H}' \equiv \hat{T}^{-1}\hat{H}\hat{T}$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi'(t)\rangle = \hat{H}' |\Psi'(t)\rangle. \quad (3.84)$$

¹²Así, en la base de estados de Fock, por ejemplo, se tiene

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \langle x|\Psi(t)\rangle = \langle x|\hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle = \langle x|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Psi(0)\rangle \\ &= \sum_n \langle x|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|n\rangle \langle n|\Psi(0)\rangle \equiv \sum_n c_n \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \end{aligned}$$

con $c_n \equiv \langle n|\Psi(0)\rangle$ y $\varphi_n(x) \equiv \langle x|n\rangle$, de donde

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\tau}^{\tau} dt e^{iEt/\hbar} \Psi(x, t) &= \sum_n c_n \varphi_n(x) \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\tau}^{\tau} dt e^{i(E-E_n)t/\hbar} = \sum_n c_n \varphi_n(x) \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{2 \sin[(E-E_n)\tau]}{E-E_n} \\ &\sim \sum_n c_n \varphi_n(x) \delta(E-E_n). \end{aligned}$$

(Nótese que la dependencia temporal se encuentra exclusivamente en la función de onda $|\Psi'(t)\rangle$, esto es, estamos considerando que los parámetros que definen el *squeezing* no dependen del tiempo).¹³ Haremos uso de la aproximación semiclásica para $\Psi'(\alpha^*, t)$ desarrollada en el capítulo anterior para un operador hamiltoniano escrito como una combinación simetrizada de operadores \hat{q} y \hat{p} . Tomaremos como estado inicial $|\Psi(0)\rangle$ un estado de Bargmann $|\beta\rangle$. De esta forma, especificando la dependencia con este estado inicial, la función $\Psi'(\alpha^*, \beta, t)$ vendrá dada por el elemento de matriz (2.78):

$$\begin{aligned}\Psi'(\alpha^*, \beta, t) &= \Psi'(\xi_t^*, \eta_0, t) = (\alpha|\hat{U}'(t)|\beta) \simeq A'^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t) e^{\frac{i}{\hbar}S'^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)} \\ &\simeq \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*}\right)^{-1/2} e^{\frac{i}{\hbar}\eta_t \alpha^* + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}_W'(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i\xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau},\end{aligned}\quad (3.85)$$

donde hemos elegido $\kappa = 0$ en la ec. (2.78) por tratarse de un hamiltoniano con ordenación simétrica, y ξ_t^* , η_t son dos variables complejas independientes sujetas a las condiciones de contorno $\xi_t^* = \alpha^*$, $\eta_0 = \beta$. \mathcal{H}_W' es el término de orden cero de la función normal asociada al operador \hat{H}' , y hemos denotado por $\hat{U}'(t)$ el operador de evolución correspondiente al hamiltoniano transformado \hat{H}' . La función (3.83) vendrá dada por tanto por

$$\Psi(x, t) \simeq \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \Phi_\alpha(x) A'^{(0)}(\alpha^*, \beta, t) e^{\frac{i}{\hbar}S'^{(0)}(\alpha^*, \beta, t)} e^{-\alpha\alpha^*/\hbar}, \quad (3.86)$$

y transformando Fourier esta expresión se tiene la función $\varphi(x, E)$ definida en (3.82):

$$\begin{aligned}\varphi(x, E) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\tau}^{\tau} dt e^{iEt/\hbar} \Psi(x, t) \\ &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\tau}^{\tau} dt e^{iEt/\hbar} \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \Phi_\alpha(x) A'^{(0)}(\alpha^*, \beta, t) e^{\frac{i}{\hbar}S'^{(0)}(\alpha^*, \beta, t)} e^{-\alpha\alpha^*/\hbar}.\end{aligned}\quad (3.87)$$

El siguiente paso en la aproximación consiste en evaluar las integrales en t y en α^* mediante el método de fase estacionaria, por lo que escribimos (3.87) como

$$\varphi(x, E) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\tau}^{\tau} dt \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \Phi_\alpha(x) A'^{(0)}(\alpha^*, t) e^{\frac{i}{\hbar}\phi(\alpha^*, t)}, \quad (3.88)$$

¹³La ecuación de Schrödinger para $|\Psi(t)\rangle$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

se escribe

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\hat{T} |\Psi'(t)\rangle] = \hat{H} \hat{T} |\Psi'(t)\rangle,$$

de forma que es necesario considerar que \hat{T} no depende del tiempo para poder escribir

$$i\hbar \hat{T} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi'(t)\rangle = \hat{H} \hat{T} |\Psi'(t)\rangle$$

y por tanto

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi'(t)\rangle = \hat{T}^\dagger \hat{H} \hat{T} |\Psi'(t)\rangle \equiv \hat{H}' |\Psi'(t)\rangle.$$

con

$$\phi(\alpha^*, t) \equiv E t + S^{(0)}(\alpha^*, t) + i \alpha \alpha^*. \quad (3.89)$$

Los valores estacionarios de t y α^* , que denotaremos por t_s y α_s^* , respectivamente, se obtienen a partir de las condiciones

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(\alpha^*, t)}{\partial t} &= E + \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial t} = E - \mathcal{H}_W^l \left(\alpha^*, i \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} \right) = E - \mathcal{H}_W^l(\alpha^*, \eta_t) = 0 \\ \frac{\partial \phi(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} &= \frac{\partial S^{(0)}(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^*} + i \alpha = -i \eta_t + i \alpha = 0, \end{aligned}$$

donde hemos hecho uso de la definición (2.52) para η_t y de la ecuación de Hamilton-Jacobi dependiente del tiempo (2.50). Estas condiciones son, por tanto:

$$\mathcal{H}_W^l(\alpha_s^*, \eta_{t_s}) = E \quad (3.90a)$$

$$\eta_{t_s} = \alpha. \quad (3.90b)$$

Si el estado de Bargmann inicial $|\beta\rangle$ se elige de forma que $\mathcal{H}_W^l(\beta^*, \beta) = E$, donde β^* es la compleja

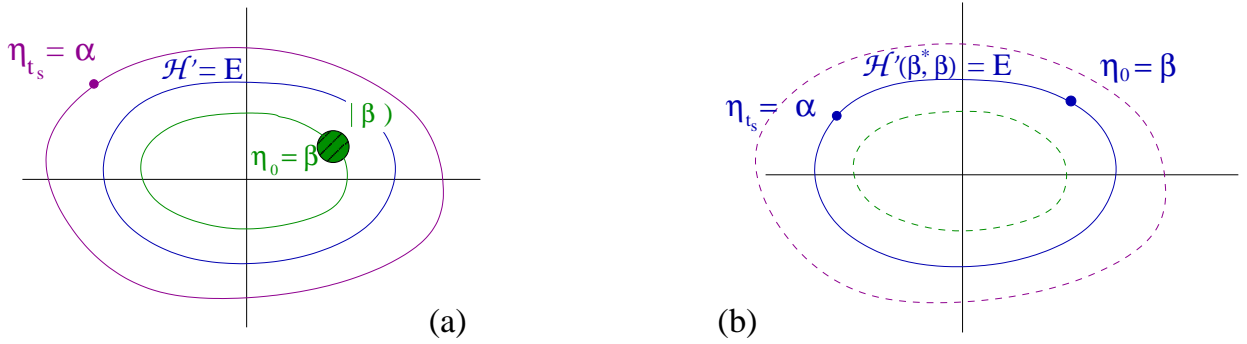


Figura 3.4: (a): Curvas de energía reales en el plano complejo η . En general, la trayectoria que conecta $\eta_0 = \beta$ con $\eta_{t_s} = \alpha$ será una trayectoria compleja con energía E . (b): Elección del estado de Bargmann inicial $|\beta\rangle$ y del punto α sobre la superficie de energía real $\mathcal{H}_W^l(\beta^*, \beta) = E$.

conjugada de $\eta_0 = \beta$, entonces es posible determinar $\xi_0^* = \beta^*$ como una función bien definida de β y de la energía E . Las condiciones iniciales (η_0, ξ_0^*) quedan entonces completamente especificadas, y el valor de t estacionario corresponderá al tiempo t_s que tarda en evolucionar el punto $\eta_0 = \beta$ al punto $\eta_{t_s} = \alpha$ a lo largo de una trayectoria. Esta trayectoria en general será compleja, puesto que la variable α en general no tiene por qué estar situada sobre la superficie de energía (real) definida por $\mathcal{H}_W^l(\beta^*, \beta) = E$. [Fig. (3.4-a)] La conservación de la energía a lo largo de esta trayectoria viene dada, según (3.90), por

$$\mathcal{H}_W^l(\alpha_s^*, \alpha) = E = \mathcal{H}_W^l(\xi_0^* = \beta^*, \eta_0 = \beta). \quad (3.91)$$

El valor estacionario α_s^* quedará determinado por la propia dinámica de esta trayectoria compleja, que llevará el valor de ξ_0^* a $\xi_{t_s}^* = \alpha_s^*$.

El problema se simplifica si se elige α de forma que esta trayectoria sea la trayectoria *real* (clásica) a energía E . [Fig. (3.4-b)] Si esta órbita tiene un periodo T , en general se tendrán distintos tiempos estacionarios correspondientes a las sucesivas vueltas que vayan dándose a lo largo de la trayectoria y que vuelvan a conectar $\eta_0 = \beta$ con $\eta_{t_s} = \alpha$, dados por $t_s + nT$, con $n \in \mathbb{N}$. Puesto que la aproximación de fase estacionaria involucra una suma sobre todas las condiciones estacionarias, la integral (3.88) podrá aproximarse por

$$\begin{aligned} \varphi(x, E) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\tau}^{\tau} dt \int_{\Gamma_{\alpha, \alpha^*}} \frac{d\alpha d\alpha^*}{2\pi\hbar i} \Phi_{\alpha}(x) A'^{(0)}(\alpha^*, t) e^{\frac{i}{\hbar}\phi(\alpha^*, t)} \\ &\simeq \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N \int_{\Gamma_{cl}} \frac{d\alpha}{\sqrt{2\pi\hbar i}} \Phi_{\alpha}(x) A'^{(0)}(\alpha_s^*, t_s + nT) e^{\frac{i}{\hbar}\phi(\alpha_s^*, t_s + nT)} (\det \mathbf{D})^{-1/2}, \end{aligned} \quad (3.92)$$

donde Γ_{cl} corresponde a la trayectoria clásica a energía E . (Es importante indicar que estamos considerando el caso de sistemas con una estructura sencilla, con un único punto de equilibrio (por ejemplo un oscilador armónico), en los que la inversión de la ecuación $\mathcal{H}'_W(\xi_0^*, \beta) = E$ permite obtener ξ_0^* en términos de β y E como una función compleja univaluada. Para otro tipo de sistemas con una estructura más complicada (por ejemplo un potencial de doble pozo), habría que incluir una suma sobre las distintas ramas de la función multivaluada $\xi_0^* = \xi_0^*(\beta, E)$, y la solución vendría dada como una combinación lineal de las distintas soluciones correspondientes a las diferentes elecciones de trayectorias (complejas) que lleven $\eta_0 = \beta$ hasta $\eta_{t_s} = \alpha$).

Dado que el último paso en la obtención de $\varphi(x, E)$ consistirá en parametrizar la integral en α por el tiempo t_s , en la evaluación tanto de \mathbf{D} como de ϕ en (3.92) expresaremos las variables α_t y α_t^* como funciones dependientes de t . La matriz de derivadas segundas en (3.92) viene dada por

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \phi(\alpha^*, t)}{\partial t^2} & \frac{\partial^2 \phi(\alpha^*, t)}{\partial t \partial \alpha^*} \\ \frac{\partial^2 \phi(\alpha^*, t)}{\partial t \partial \alpha^*} & \frac{\partial^2 \phi(\alpha^*, t)}{\partial \alpha^{*2}} \end{pmatrix}_s = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S'^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial t^2} & \frac{\partial^2 S'^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial t \partial \xi_t^*} \\ \frac{\partial^2 S'^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial t \partial \xi_t^*} & \frac{\partial^2 S'^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^{*2}} \end{pmatrix}_s,$$

donde el subíndice s denota evaluación en la condición de fase estacionaria. La evaluación del determinante de esta matriz requiere algo de álgebra. Así, por una parte se tiene

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 S'^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial t^2} \right|_{\xi_t^*} &= \left. \frac{\partial}{\partial t} \left[-\mathcal{H}'_W \left(\xi_t^*, i \frac{\partial S'^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^*} \right) \right] \right|_{\xi_t^*} = - \frac{\partial \mathcal{H}'_W(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t} \frac{\partial \eta_t}{\partial t} \\ &= - \xi_t^* \frac{\partial^2 S'^{(0)}(\xi_t^*, t)}{\partial t \partial \xi_t^*}, \end{aligned}$$

donde en la primera igualdad hemos hecho uso de la ecuación de Hamilton-Jacobi dependiente del tiempo (2.50), mientras que en la última hemos tenido en cuenta la ecuación de evolución para ξ_t^* [ec. (2.54a)].

El determinante de la matriz \mathbf{D} vendrá dado por

$$\det \mathbf{D} = -\dot{\xi}_t^* \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial t \partial \xi_t^*} \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \xi_t^{*2}} - \left(\frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial t \partial \xi_t^*} \right)^2 = -\frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial t \partial \xi_t^*} \left[\dot{\xi}_t^* \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \xi_t^{*2}} + \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial t \partial \xi_t^*} \right]. \quad (3.93)$$

Por otra parte, la derivada cruzada de $S^{(0)}$ con respecto a ξ_t^* y a t puede escribirse como

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial t \partial \xi_t^*} &= \frac{\partial}{\partial \xi_t^*} \left[-\mathcal{H}_W^l \left(\xi_t^*, i \frac{\partial S^{(0)}}{\partial \xi_t^*} \right) \right] = -\frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^*} - \frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t} \frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_t^*} \\ &= -i\dot{\eta}_t - \dot{\xi}_t^* \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \xi_t^{*2}}, \end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta la ecuación de Hamilton para η_t [ec. (2.54b)]. Sustituyendo este resultado en la expresión entre corchetes que aparece en la ec. (3.93), tenemos

$$\det \mathbf{D} = \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial t \partial \xi_t^*} i\dot{\eta}_t.$$

Esta derivada segunda de $S^{(0)}$ puede expresarse en términos de los elementos de la matriz de estabilidad \mathbf{M} dada por (2.95) si tenemos en cuenta que la energía se conserva a lo largo de la trayectoria, esto es, $\mathcal{H}_W^l(\xi_t^*, \eta_t) = \mathcal{H}_W^l(\xi_0^*, \eta_0)$. De esta forma,

$$\frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial t \partial \xi_t^*} = \frac{\partial}{\partial \xi_t^*} \left[-\mathcal{H}_W^l(\xi_0^*, \eta_0) \right] = -\frac{\partial \mathcal{H}_W^l(\xi_0^*, \eta_0)}{\partial \xi_0^*} \frac{\partial \xi_0^*}{\partial \xi_t^*} = -i\dot{\eta}_0 M_{22}^{-1}$$

y el determinante de \mathbf{D} se escribe finalmente como

$$\det \mathbf{D} = (\dot{\eta}_0 \dot{\eta}_t M_{22}^{-1})_s = \dot{\alpha}_0 \dot{\alpha}_{t_s+nT} M_{22}^{-1} = \dot{\alpha}_0 \dot{\alpha}_{t_s} M_{22}^{-1}. \quad (3.94)$$

Por otra parte, la fase ϕ que aparece en (3.92), teniendo en cuenta las ecs. (3.85) y (3.89), así como las condiciones de fases estacionaria (3.90), viene dada por

$$\begin{aligned} \phi(\xi_s^*, t_s + nT) &= E(t_s + nT) - i \alpha_{t_s+nT} \alpha_{t_s+nT}^* \\ &+ \int_0^{t_s+nT} [-\mathcal{H}_W^l(\alpha_\tau^*, \alpha_\tau) + i \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau] d\tau + i \alpha_{t_s+nT} \alpha_{t_s+nT}^* \\ &= i \int_0^{t_s+nT} \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau d\tau. \end{aligned}$$

Con estos resultados, la expresión (3.92) se escribe

$$\begin{aligned} \varphi(x, E) &\sim \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N \int_{\Gamma_{cl}} d\alpha_{t_s} \Phi_{\alpha_{t_s}}(x) A^{(0)}(\alpha_s^*, t_s + nT) e^{\frac{i}{\hbar} \phi(\alpha_s^*, t_s + nT)} (\det \mathbf{D})^{-1/2} \\ &\sim \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N \int_{\Gamma_{cl}} d\alpha_{t_s} \Phi_{\alpha_{t_s}}(x) \left(\frac{\partial \alpha_{t_s+nT}^*}{\partial \alpha_0^*} \right)^{-1/2} (\dot{\alpha}_0 \dot{\alpha}_{t_s} M_{22}^{-1})^{-1/2} e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^{t_s+nT} \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau d\tau}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

Como se ha indicado anteriormente, existe una ambigüedad en la elección del signo de la raíz cuadrada que aparece en el prefactor $A^{(0)}(\alpha^*, t)$ que no hemos mostrado explícitamente. Es el valor absoluto de este término el que se simplifica con el elemento M_{22} proveniente del determinante de \mathbf{D} , restando un término $e^{-in\pi} = (-1)^n$ que da cuenta del signo de $A^{(0)}$. Ir sumando sobre los sucesivos valores de n , esto es, ir dando vueltas a lo largo de la trayectoria clásica, corresponde a ir pasando alternativamente de una a otra de las hojas de la superficie de Riemann asociada a la función bivaluada $(\partial\alpha_t^*/\partial\alpha_0^*)^{-1/2}$. Esto hace que la ec. (3.95) se escriba como

$$\varphi(x, E) \sim \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\Gamma_{cl}} d\alpha_{t_s} \Phi_{\alpha_{t_s}}(x) \frac{1}{\sqrt{\dot{\alpha}_0 \dot{\alpha}_{t_s}}} \sum_{n=-N}^N e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^{t_s+nT} \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau d\tau} e^{-in\pi}. \quad (3.96)$$

Teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned} \sum_{n=-N}^N e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^{t_s+nT} \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau d\tau} &= e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^{t_s} \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau d\tau} \sum_{n=-N}^N e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^T \alpha_{\tau+t_s}^* \dot{\alpha}_{\tau+t_s} d\tau} \\ &= e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^{t_s} \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau d\tau} \sum_{n=-N}^N e^{\frac{-n}{\hbar} \int_0^T \alpha_{\tau+t_s}^* \dot{\alpha}_{\tau+t_s} d\tau}, \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso de la condición de periodicidad ¹⁴

$$\alpha_t^* = \alpha_{t+T}^* = \alpha_{t+2T}^* = \dots = \alpha_{t+nT}^* \quad (3.97a)$$

$$\dot{\alpha}_t = \dot{\alpha}_{t+T} = \dot{\alpha}_{t+2T} = \dots = \dot{\alpha}_{t+nT}, \quad (3.97b)$$

la ec. (3.96) se escribe

$$\varphi(x, E) \sim \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\Gamma_{cl}} d\alpha_{t_s} \left[\Phi_{\alpha_{t_s}}(x) \frac{1}{\sqrt{\dot{\alpha}_0 \dot{\alpha}_{t_s}}} e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^{t_s} \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau d\tau} \sum_{n=-N}^N e^{\frac{-n}{\hbar} \int_0^T \alpha_{\tau+t_s}^* \dot{\alpha}_{\tau+t_s} d\tau} e^{-in\pi} \right]. \quad (3.98)$$

Puesto que la acción calculada a un periodo T de la trayectoria no depende del punto inicial α elegido para evaluarla, por tratarse de una trayectoria cerrada en el espacio de fases (como indican las condiciones de periodicidad (3.97)), la suma en n de (3.98) puede salir fuera de la integral en α , teniéndose finalmente:

$$\begin{aligned} \varphi(x, E) &\sim \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N e^{\frac{-n}{\hbar} \int_0^T \alpha_{\tau+t_s}^* \dot{\alpha}_{\tau+t_s} d\tau} e^{-in\pi} \int_{\Gamma_{cl}} d\alpha_{t_s} \Phi_{\alpha_{t_s}}(x) \frac{1}{\sqrt{\dot{\alpha}_0 \dot{\alpha}_{t_s}}} e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^{t_s} \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau d\tau} \\ &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N e^{\frac{-n}{\hbar} \int_0^T \alpha_{\tau+t_s}^* \dot{\alpha}_{\tau+t_s} d\tau} e^{-in\pi} I(x). \end{aligned} \quad (3.99)$$

¹⁴Efectivamente, para una función f genérica se tiene

$$\begin{aligned} \int_0^{nT} f(t+t_s) dt &= \int_0^T f(t+t_s) dt + \int_T^{2T} f(t+t_s) dt + \int_{2T}^{3T} f(t+t_s) dt + \dots + \int_{(n-1)T}^{nT} f(t+t_s) dt \\ &= \int_0^T [f(t+t_s) + f(t+T+t_s) + f(t+2T+t_s) + \dots + f(t+(n-1)T+t_s)] dt \\ &= n \int_0^T f(t+t_s) dt, \end{aligned}$$

siempre que se cumpla la condición de periodicidad

$$f(\tau) = f(\tau+T) = \dots = f(\tau+nT).$$

Como ya se ha indicado, la integral $I(x)$ en la variable α , evaluada a lo largo de la trayectoria clásica Γ_{cl} , puede ser parametrizada por el tiempo t_s :

$$\begin{aligned} I(x) &\equiv \int_{\Gamma_{cl}} d\alpha_{t_s} \Phi_{\alpha_{t_s}}(x) \frac{1}{\sqrt{\dot{\alpha}_0 \dot{\alpha}_{t_s}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_s} \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau d\tau} \\ &= \int_0^T dt_s \frac{d\alpha_{t_s}}{dt_s} \Phi_{\alpha_{t_s}}(x) \frac{1}{\sqrt{\dot{\alpha}_0 \dot{\alpha}_{t_s}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_s} \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau d\tau}. \end{aligned}$$

Renombrando t_s como t y sustituyendo la expresión para la función $\Phi_\alpha(x) \equiv \langle x | \hat{T} | \alpha \rangle$ dada por (3.12), se tiene

$$\begin{aligned} I(x) &= \int_0^T dt \sqrt{\frac{\dot{\alpha}_t}{\dot{\alpha}_0}} e^{\frac{c_p^*}{2\hbar c_p} \alpha_t^2 - \frac{icq}{2\hbar c_p} x^2 + \frac{i}{\hbar \sqrt{\hbar c_p}} \alpha_t x} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau d\tau} \\ &= \frac{e^{\frac{1}{\hbar} \alpha_0 \alpha_0^*}}{\sqrt{\dot{\alpha}_0}} \int_0^T dt (\dot{\alpha}_t)^{1/2} e^{\frac{c_p^*}{2\hbar c_p} \alpha_t^2 - \frac{icq}{2\hbar c_p} x^2 + \frac{i}{\hbar \sqrt{\hbar c_p}} \alpha_t x - \frac{1}{\hbar} \alpha_t \alpha_t^* + \frac{1}{\hbar} \int_0^t \alpha_\tau \dot{\alpha}_\tau^* d\tau}, \end{aligned} \quad (3.100)$$

donde se ha evaluado por partes la integral que aparece en el exponente. Esta es la expresión que aparece en la aproximación uniforme para la función de onda estacionaria [ec. (3.18)]. El cambio de variables $(\alpha_t, \alpha_t^*) \rightarrow (q_t, p_t)$ para la transformación de *squeezing* dado por (3.17):

$$\alpha_t = \sqrt{\hbar} (c_q q_t + c_p p_t) \quad (3.101a)$$

$$\alpha_t^* = \sqrt{\hbar} (c_q^* q_t + c_p^* p_t) \quad (3.101b)$$

y los cálculos intermedios que siguen a la ec. (3.18) conducen al resultado

$$I(x) \sim \int_0^T dt \left(\dot{p}_t + \frac{c_q}{c_p} \dot{q}_t \right)^{1/2} e^{-\frac{icq}{2\hbar c_p} (x-q_t)^2 + \frac{i}{\hbar} (x-q_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau},$$

salvo constantes. Definiendo el parámetro λ como $c_q/c_p \equiv -2i\lambda$, obtenemos el resultado (3.20) para la función de onda estacionaria:

$$I(x) \sim \int_0^T dt (\dot{p}_t - 2i\lambda \dot{q}_t)^{1/2} e^{-\frac{\lambda}{\hbar} (x-q_t)^2 + \frac{i}{\hbar} (x-q_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau}.$$

Sustituyendo este resultado en (3.99), obtenemos finalmente la siguiente expresión para la transformada de Fourier de $\Psi(x, t)$:

$$\begin{aligned} \varphi(x, E) &\sim \mathcal{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N e^{-\frac{in}{\hbar} \int_0^T \alpha_{\tau+t_s}^* \dot{\alpha}_{\tau+t_s} d\tau} e^{in\pi} \\ &\times \int_0^T dt (\dot{p}_t - 2i\lambda \dot{q}_t)^{1/2} e^{-\frac{\lambda}{\hbar} (x-q_t)^2 + \frac{i}{\hbar} (x-q_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau} \\ &\equiv \mathcal{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N f(n) \int_0^T dt (\dot{p}_t - 2i\lambda \dot{q}_t)^{1/2} e^{-\frac{\lambda}{\hbar} (x-q_t)^2 + \frac{i}{\hbar} (x-q_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau}. \end{aligned} \quad (3.102)$$

Analicemos el límite de la serie que aparece en esta expresión. Como se ha mencionado, la acción evaluada en un periodo T de la trayectoria no depende del punto inicial elegido para calcularla, de forma que la integral que interviene en el exponente de la función que hemos denotado como $f(n)$, esto es,

$$\int_0^T \alpha_{\tau+t}^* \dot{\alpha}_{\tau+t} d\tau = \int_t^{t+T} \alpha_{\tau}^* \dot{\alpha}_{\tau} d\tau, \quad (3.103)$$

mantiene su valor independientemente del de t_s . Con el cambio de variables (3.101) podemos escribir

$$\begin{aligned} \frac{-1}{\hbar} \int_t^{t+T} \alpha_{\tau}^* \dot{\alpha}_{\tau} d\tau &= \frac{-|c_q|^2}{2} (q_{t+T}^2 - q_t^2) - \frac{|c_p|^2}{2} (p_{t+T}^2 - p_t^2) \\ &- c_q^* c_p (q_{t+T} p_{t+T} - q_t p_t) - (c_q c_p^* - c_q^* c_p) \int_t^{t+T} p_{\tau} \dot{q}_{\tau} d\tau. \end{aligned} \quad (3.104)$$

Las condiciones de periodicidad (3.97) para α_t y α_t^* se traducen en unas condiciones similares para q_t y p_t que hacen que los tres primeros términos de la derecha en la ec. (3.104) se anulen. Teniendo en cuenta, además, la relación $c_q c_p^* - c_q^* c_p = -i/\hbar$, la integral anterior puede escribirse como

$$\frac{-1}{\hbar} \int_t^{t+T} \alpha_{\tau}^* \dot{\alpha}_{\tau} d\tau = \frac{i}{\hbar} \int_t^{t+T} p_{\tau} \dot{q}_{\tau} d\tau \equiv \frac{i}{\hbar} S_T,$$

donde $S_T \equiv \int_{t_0}^{t_0+T} p_{\tau} \dot{q}_{\tau} d\tau \equiv \oint p dq$ es la acción a lo largo de una trayectoria cerrada de periodo T . De esta manera, la función $f(n)$ definida en (3.102) puede escribirse como

$$f(n) \equiv e^{\frac{-n}{\hbar} \int_0^T \alpha_{\tau+t}^* \dot{\alpha}_{\tau+t} d\tau} e^{-in\pi} = e^{in\left(\frac{S_T}{\hbar} - \pi\right)}$$

y por tanto

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N f(n) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N e^{in\left(\frac{S_T}{\hbar} - \pi\right)} = 1 + 2 \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \operatorname{Re} e^{in\left(\frac{S_T}{\hbar} - \pi\right)} \\ &= \operatorname{Re} \left[1 + 2 \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{e^{i\left(\frac{S_T}{\hbar} - \pi\right)} - e^{i(N+1)\left(\frac{S_T}{\hbar} - \pi\right)}}{1 - e^{i\left(\frac{S_T}{\hbar} - \pi\right)}} \right] = \operatorname{Re} \left[\frac{i \sin\left(\frac{S_T}{\hbar} - \pi\right)}{1 - \cos\left(\frac{S_T}{\hbar} - \pi\right)} \right]. \end{aligned} \quad (3.105)$$

Esta función vale cero, excepto para aquellos valores de la energía tales que la acción de la órbita de periodo T a dicha energía sea tal que $S_T/\hbar - \pi = 2m\pi$, para m entero. Es decir, al ir dando sucesivas vueltas a lo largo de la trayectoria clásica se van produciendo interferencias constructivas y destructivas, de forma que únicamente para aquellos valores de la acción que cumplan la *condición de cuantización*

$$S_T = 2\pi\hbar \left(m + \frac{1}{2} \right) \quad (3.106)$$

se tiene un resultado distinto de cero en la aproximación a la autofunción. La suma de la serie (3.105) puede escribirse formalmente haciendo uso de la fórmula de Poisson ¹⁵

$$\sum_{j=-\infty}^{+\infty} \delta(t-j) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{i2\pi kt} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} 2 \cos(2\pi kt), \quad (3.107)$$

¹⁵Debe tenerse en cuenta que el término en el infinito en (3.105) se anula debido a que en la transformada de Fourier (3.82)

es decir:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta \left[\frac{S_T}{2\pi\hbar} - \frac{1}{2} - m \right].$$

Esta expresión puede escribirse como una suma de deltas en energías teniendo en cuenta la relación $(\partial S_T(E))(\partial E) = T(E)$, y la identidad $\delta(x - x_0) = |f'(x)| \delta[f(x)]$, donde x_0 es el único cero de la función $f(x_0) = 0$ en el intervalo considerado, de modo que

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \frac{2\pi\hbar}{T(E)} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(E - E_m), \quad (3.108)$$

con E_m definidos por

$$S_T(E_m) = 2\pi\hbar \left(m + \frac{1}{2} \right).$$

Con estos resultados, la expresión final que determina las autofunciones $\phi_m(x)$ del hamiltoniano \hat{H} viene dada por

$$\begin{aligned} \phi(x, E) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m(E, \beta) \delta(E - E_m) \phi_m(x) \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m(E, \beta) \delta(E - E_m) \int_0^{T(E)} dt (\dot{p}_t - 2i\lambda\dot{q}_t)^{1/2} e^{-\frac{i}{\hbar}(x-q_t)^2 + \frac{i}{\hbar}(x-q_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t p_\tau \dot{q}_\tau d\tau}, \end{aligned}$$

donde los coeficientes complejos $c_m(E, \beta)$ dependerán de la energía elegida E a través del periodo T [ec. (3.108)] y del estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |\beta\rangle$ [ec. (3.100)].

De esta forma, es posible obtener una aproximación a las autofunciones $\phi_m(x)$ de un hamiltoniano simplemente eligiendo un paquete coherente a una energía determinada e integrando la trayectoria clásica correspondiente hasta el periodo de una órbita a esa energía. Este formalismo dependiente del tiempo ha permitido determinar mediante un mismo procedimiento tanto las autofunciones como las condiciones de cuantización.

debe incluirse un parámetro imaginario ϵ , que eventualmente tenderá a cero, y que asegure la convergencia de la integral, esto es:

$$\Psi(x, E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\tau}^{\tau} dt e^{i(E+i\epsilon)t/\hbar} \Psi(x, t).$$

De esta manera es posible asegurar que integrales como

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E-E_n)t/\hbar} = 2\pi\hbar \delta(E - E_n)$$

estén bien definidas.

Capítulo 4

Aproximación semiclásica a la densidad de estados

El conjunto de autovalores $\{E_n\}$ del operador hermítico \hat{H} puede representarse mediante la función *densidad de estados*:

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n).$$

Esta función está codificada en el llamado *operador resolvente* $\hat{G}(z)$, escrito en términos de la variable compleja z y del operador \hat{H} en la forma

$$\hat{G}(z) \equiv (z - \hat{H})^{-1} \equiv \frac{1}{z - \hat{H}}.$$

El *operador de Green*, $\hat{g}(E)$, definido como la transformada de Laplace del operador de evolución cuántico $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$,

$$\begin{aligned} \hat{g}(E) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{iEt/\hbar - \varepsilon t/\hbar} \hat{U}(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{i(E+i\varepsilon - \hat{H})t/\hbar} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E + i\varepsilon - \hat{H}}, \end{aligned}$$

(donde hemos introducido una pequeña constante $\varepsilon > 0$ para asegurar la existencia de la integral) se relaciona con el operador resolvente mediante el límite ¹

$$\hat{g}(E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \hat{G}(E + i\varepsilon).$$

La traza del operador de Green viene dada por

$$g(E) \equiv \text{Tr } \hat{g}(E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \sum_n \frac{1}{E + i\varepsilon - E_n}. \quad (4.1)$$

¹En general, se definen los operadores de Green “hacia adelante” o “hacia atrás”, $\hat{g}_\pm(E)$, según se calculen las transformadas de Laplace de los operadores de evolución “hacia adelante” o “hacia atrás”, $\hat{U}_\pm(t) = \pm\Theta(t)\hat{U}(t)$, donde $\Theta(t)$ es la función de Heaviside. Hemos elegido el operador de Green correspondiente a la propagación hacia adelante en el tiempo, esto es, $\hat{g}_+(E)$.

Se trata de una traza *formal*, ya que por lo general esta suma es divergente. La expresión (4.1) indica que las autoenergías aparecen como polos de la función $g(E)$. Teniendo en cuenta la identidad

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \left\{ \frac{1}{x} \right\} \mp i\pi\delta(x),$$

donde \mathcal{P} denota la parte principal de Cauchy, puede obtenerse una relación entre la densidad de estados y el operador de Green, esto es, una relación entre la densidad de estados y el operador resolvente:

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n) = \frac{-1}{\pi} \text{Im Tr } \hat{g}(E) = \frac{-1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \text{Im Tr } \hat{G}(E + i\varepsilon). \quad (4.2)$$

Es en este sentido por lo que decimos que el operador resolvente codifica la densidad de estados. Una aproximación semiclásica a la traza de $\hat{g}(E)$ proporcionará una aproximación al espectro de autoenergías del sistema cuántico en cuestión.

En este capítulo obtendremos una aproximación semiclásica para esta traza expresada en términos de las órbitas periódicas del sistema clásico (fórmula de Gutzwiller), haciendo uso de la aproximación semiclásica al propagador basada en trayectorias complejas. Veremos cómo en sistemas cuyo potencial presente más de un mínimo (como el doble pozo) el uso de trayectorias complejas es esencial para dar cuenta de los efectos de *tunneling*.

En la representación de estados coherentes, la traza del operador de Green puede obtenerse como la transformada de Laplace de la traza del operador de evolución:

$$\text{Tr } \hat{g}(E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{iEt/\hbar} \text{Tr } \hat{U}(t)$$

En esta representación, la traza puede expresarse como

$$\text{Tr } \hat{U}(t) = \int_{\Gamma_{\alpha^*, \beta}} \frac{d\alpha^* d\beta}{2\pi\hbar i} (\alpha | \hat{U}(t) | \beta) e^{-\alpha^* \beta / \hbar}, \quad (4.3)$$

donde hemos llevado a cabo la extensión habitual de las integrales haciendo uso de la resolución generalizada de la identidad (2.84). La obtención de una expresión semiclásica para la densidad de estados pasa por aplicar una serie de aproximaciones en la evaluación de la traza del operador de Green. El procedimiento a seguir será muy similar al llevado a cabo en el capítulo anterior para la obtención de las autofunciones $\varphi_n(x)$. En primer lugar, haremos uso de la aproximación semiclásica para la amplitud de transición $(\alpha | \hat{U}(t) | \beta)$ dada por (2.78):

$$\begin{aligned} (\alpha | \hat{U}(t) | \beta) &\sim A^{(0)}(\alpha^*, \beta, t) e^{iS^{(0)}(\alpha^*, \beta, t)/\hbar} = A^{(0)}(\xi_r^*, \eta_0, t) e^{iS^{(0)}(\xi_r^*, \eta_0, t)/\hbar} \\ &= \left(\frac{\partial \xi_r^*}{\partial \xi_0^*} \right)^{-1/2} e^{\frac{1}{\hbar} \eta_r \alpha^* + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i\xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

donde para simplificar los cálculos hemos considerado un sistema descrito por un operador \hat{H} con ordenación simétrica ($\kappa = 0$ en (2.78) y \mathcal{H} correspondiente al símbolo de Weyl del operador \hat{H}). Las

trayectorias complejas $\{\xi_\tau^*, \eta_\tau; 0 \leq \tau \leq t\}$ requeridas para evaluar el elemento de matriz (4.4) son solución de las ecuaciones de Hamilton clásicas para $\mathcal{H}(\xi^*, \eta)$ y cumplen las condiciones de contorno a dos tiempos

$$\begin{aligned}\xi_t^* &= \alpha^* \\ \eta_0 &= \beta.\end{aligned}$$

Así pues, una primera aproximación a la traza de $\hat{g}(E)$ vendrá dada por:

$$\text{Tr } \hat{g}(E) \simeq \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{iEt/\hbar} \int_{\Gamma_{\xi_t^*, \eta_0}} \frac{d\eta_0 d\xi_t^*}{2\pi\hbar i} A^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t) e^{iS^{(0)}(\xi_t^*, \eta_0, t)/\hbar} e^{-\eta_0 \xi_t^*/\hbar}. \quad (4.5)$$

Una aproximación ulterior consiste en evaluar las integrales en t y en ξ_t^* por el método de fase estacionaria. Los puntos de fase estacionaria vienen dados por aquellos valores de t y ξ_t^* (que denotamos por t_s y ξ_s^* , respectivamente) para los que se anulan las derivadas primeras de la fase

$$\phi(\xi_t^*, t) \equiv Et + S^{(0)}(\xi_t^*, t; \eta_0) + i\eta_0 \xi_t^*, \quad (4.6)$$

es decir

$$\begin{aligned}\frac{\partial \phi(\xi_t^*, t)}{\partial t} &= E + \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, t; \eta_0)}{\partial t} = E - \mathcal{H}\left(\xi_t^*, i \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, t; \eta_0)}{\partial \xi_t^*}\right) = 0 \\ \frac{\partial \phi(\xi_t^*, t)}{\partial \xi_t^*} &= \frac{\partial S^{(0)}(\xi_t^*, t; \eta_0)}{\partial \xi_t^*} + i\eta_0 = -i\eta_t + i\eta_0 = 0,\end{aligned}$$

donde $\eta_t \equiv i\partial_{\xi_t^*} S^{(0)}(\xi_t^*, t)$. Estas condiciones son por lo tanto

$$E = \mathcal{H}(\xi_s^*, \eta_{t_s}) \quad (4.7a)$$

$$\eta_{t_s} = \eta_0 = \beta. \quad (4.7b)$$

La condición (4.7b) indica que las órbitas que intervienen en la evaluación de la integral en ξ_t^* de (4.5) son *órbitas periódicas*.² Por otra parte, la energía se conserva a lo largo de la trayectoria en cualquier instante de tiempo. En particular, para $t = t_s$ se tiene, según (4.7a):

$$\mathcal{H}(\xi_{t_s}^*, \eta_{t_s}) = E = \mathcal{H}(\xi_{t_s}^*, \eta_0) = \mathcal{H}(\xi_0^*, \eta_0),$$

de donde puede concluirse que

$$\xi_{t_s}^* = \xi_0^*. \quad (4.7c)$$

²Nótese que en el caso de que las trayectorias sean reales, para que una órbita sea periódica es necesario que se cumpla no sólo que $q_t = q_0$ (condición para órbitas cerradas), sino además $p_t = p_0$. Para el caso de trayectorias complejas, la condición $\eta_t = \eta_0$ es suficiente para que la órbita sea periódica.

Esta condición proporciona el valor estacionario del tiempo, t_s , identificándolo con el periodo de la órbita periódica. Las condiciones (4.7b) y (4.7c) indican que el método de fase estacionaria selecciona como trayectorias que contribuyen a las integrales en ξ_t^* y en t en (4.5) las *órbitas periódicas del sistema que existen a energía E*. Es importante indicar que para que la dinámica compleja descrita sea físicamente admisible, es necesario que tanto en el instante inicial como en el instante t_s la trayectoria se encuentre en la misma rama de la función multivaluada $\xi^* = \xi^*(\beta, E)$. La elección de dicha rama se lleva a cabo de acuerdo a consideraciones físicas, de forma que se satisfagan las condiciones de contorno adecuadas.

Para aplicar la fórmula de fase estacionaria a la integral (4.5) es necesario evaluar el determinante de la matriz \mathbf{D} de derivadas segundas de la fase $\phi(\xi_t^*, t)$. En (3.94) se obtuvo una expresión para este determinante a partir del cálculo de las derivadas segundas de la acción. Este mismo resultado puede obtenerse aplicando una metodología diferente, interpretando el determinante

$$\det \mathbf{D} = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S^{(0)}(\xi_t^*, t; \eta_0)}{\partial \xi_t^{*2}} & \frac{\partial^2 S^{(0)}(\xi_t^*, t; \eta_0)}{\partial \xi_t^* \partial t} \\ \frac{\partial^2 S^{(0)}(\xi_t^*, t; \eta_0)}{\partial t \partial \xi_t^*} & \frac{\partial^2 S^{(0)}(\xi_t^*, t; \eta_0)}{\partial t^2} \end{pmatrix} = i \det \begin{pmatrix} \frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_t^*} & \frac{\partial \eta_t}{\partial t} \\ \frac{\partial E}{\partial \xi_t^*} & \frac{\partial E}{\partial t} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

como el correspondiente al jacobiano de la transformación canónica $(\eta_t, E) \rightarrow (\xi_t^*, t)$, manteniendo constante η_0 , que denotamos como

$$\det \mathbf{D} \equiv i \det \left(\frac{\partial(\eta_t, E; \eta_0)}{\partial(\xi_t^*, t; \eta_0)} \right).$$

En la fórmula de fase estacionaria interviene, además del término $(\det \mathbf{D})^{-1/2}$ procedente de la evaluación de la integral gaussiana, un término $\left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*}\right)^{-1/2}$ procedente del factor de amplitud $A^{(0)}(\xi_t^*, t; \eta_0)$. El producto de ambos términos puede expresarse en función de los jacobianos de transformaciones sucesivas:

$$\begin{aligned} \det \mathbf{D} \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*} \right) &\equiv i \det \left(\frac{\partial(\eta_t, E; \eta_0)}{\partial(\xi_t^*, t; \eta_0)} \right) \det \left(\frac{\partial(\xi_t^*, t; \eta_0)}{\partial(\xi_0^*, t; \eta_0)} \right) = i \det \left(\frac{\partial(\eta_t, E; \eta_0)}{\partial(\xi_0^*, t; \eta_0)} \right) \\ &= i \det \left(\frac{\partial(E; \eta_t, \eta_0)}{\partial(t; \eta_t, \eta_0)} \right) \det \left(\frac{\partial(\eta_t, t; \eta_0)}{\partial(\xi_0^*, t; \eta_0)} \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Teniendo en cuenta que una variación infinitesimal de la variable ξ_0^* induce un cambio en la energía dado por

$$\delta E = \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_0^*, \eta_0)}{\partial \xi_0^*} \delta \xi_0^* = i \dot{\eta}_0 \delta \xi_0^*, \quad (4.10)$$

la igualdad

$$\delta \eta_t = \frac{\partial \eta_t}{\partial t} \delta t + \frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_0^*} \delta \xi_0^* = 0$$

establece una relación de proporcionalidad entre $\delta \xi_0^*$ y δt , de forma que la variación (4.10) puede escribirse como

$$\delta E = i \dot{\eta}_0 \frac{-\dot{\eta}_t}{\frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_0^*}} \delta t,$$

de donde

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -i \frac{\dot{\eta}_0 \dot{\eta}_t}{\frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_0^*}}.$$

El producto (4.9) podrá escribirse por tanto como:

$$\det \mathbf{D} \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*} \right) = \det(\dot{\eta}_0 \dot{\eta}_t) \det \left(\frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_0^*} \right)^{-1} \det \left(\frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_0^*} \right) = \dot{\eta}_0 \dot{\eta}_t. \quad (4.11)$$

Este resultado es general, y por supuesto coincide con el obtenido en (3.94). No obstante, la utilidad de este procedimiento para obtener el producto (4.9) mediante un producto de los jacobianos de sucesivas transformaciones canónicas se pone de manifiesto en el tratamiento analítico de sistemas multidimensionales, puesto que en ese caso puede hacerse uso de las reglas de multiplicación de los determinantes jacobianos para obtener un resultado similar a (4.11).

En la integral (4.5) interviene el inverso de la raíz cuadrada del producto (4.11):

$$(\det \mathbf{D})^{-1/2} \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*} \right)^{-1/2} = (\dot{\eta}_0 \dot{\eta}_t)^{-1/2}. \quad (4.12)$$

Este producto es una magnitud compleja, y es importante dar cuenta no sólo de su módulo, sino de la *fase acumulada a lo largo de la órbita periódica*. A partir de (4.8) es sencillo comprobar que inicialmente este producto viene dado por

$$(\det \mathbf{D}_{(t=0)})^{-1/2} \left(\frac{\partial \xi_0^*}{\partial \xi_0^*} \right)^{-1/2} = \det^{-1/2} \begin{pmatrix} 0 & -i\dot{\eta}_0 \\ -i\dot{\eta}_0 & 0 \end{pmatrix} = (\dot{\eta}_0)^{-1}, \quad (4.13)$$

con lo que al cabo del tiempo estacionario t_s se tendrá

$$(\det \mathbf{D}_{(t=t_s)})^{-1/2} \left(\frac{\partial \xi_{t_s}^*}{\partial \xi_0^*} \right)^{-1/2} = (\dot{\eta}_0)^{-1} e^{-i(2v\pi)/2}, \quad (4.14)$$

con v entero.

Por último, la fase ϕ dada por (4.6) evaluada en la condición de fase estacionaria viene dada por

$$\begin{aligned} \phi(\xi_{t_s}^*, t_s) &= E t_s + S^{(0)}(\xi_{t_s}^*, t_s; \eta_0) + i\eta_0 \xi_{t_s}^* \\ &= E t_s - i\xi_{t_s}^* \eta_{t_s} + \int_0^{t_s} [-\mathcal{H}(\xi_\tau, \eta_\tau) + i\xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau + i\eta_0 \xi_{t_s}^* \\ &= i \int_0^{t_s} \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau d\tau, \end{aligned}$$

donde se han tenido en cuenta las condiciones (4.7a) y (4.7b). La integral (4.5) puede por tanto aproximarse como:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{g}(E) &\simeq \frac{1}{i\hbar} \sum_s \int_\Gamma d\eta_0 A^{(0)}(\xi_s^*, t_s; \eta_0) e^{i\phi(\xi_s^*, t_s)/\hbar} (\det \mathbf{D})^{-1/2} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \sum_s \int_\Gamma d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0} e^{-i\pi v_s} e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^{t_s} \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau d\tau}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Esta suma se extiende sobre las soluciones estacionarias del problema, es decir, es una *suma sobre todas las órbitas periódicas del sistema*. El parámetro entero ν_s corresponde al índice de Maslov de la órbita periódica (que en general da cuenta del número de cústicas atravesadas a lo largo de la órbita). Como se ha dicho anteriormente, es importante tener en cuenta que tras la aproximación de las integrales en ξ_t^* y t de (4.5) por el método de fase estacionaria, el integrando de la integral en η_0 restante no necesariamente es una función analítica de la variable compleja η_0 . El camino de integración Γ en (4.15) deberá elegirse por lo tanto de forma que las singularidades del integrando queden incluidas dentro de él.

La elección de estos caminos de integración no está determinada únicamente por consideraciones geométricas, sino también físicas, puesto que dicha elección debe ser capaz de extraer la mayor cantidad de información posible relevante del problema. De esta manera, dependiendo del sistema que se considere, esta deformación podrá llevarse a cabo de forma que las trayectorias que intervengan estén localizadas en regiones accesibles clásicamente (trayectorias reales), o bien se incluyan, mediante continuación analítica, trayectorias complejas en las zonas clásicamente prohibidas, permitiendo la descripción de fenómenos puramente cuánticos como el *tunneling*.

Existe una contribución a la traza del operador de Green procedente de los tiempos infinitesimalmente cortos. Dado que $t = 0$ es una de las soluciones estacionarias y coincide con uno de los límites de integración de la integral temporal en la transformada de Laplace, su contribución deberá ser evaluada de forma separada. El origen del problema de las llamadas *órbitas de longitud cero* para sistemas de más de una dimensión radica en el hecho de que las soluciones a tiempo $t = 0$ no son aisladas, y su inclusión origina divergencias en la parte real de la traza del operador de Green. En general, la contribución de estas órbitas da lugar a una descomposición de la traza de $\hat{g}(E)$ en dos términos,

$$\text{Tr } \hat{g}(E) = \text{Tr } \hat{g}_0(E) + \text{Tr } \hat{g}_{osc}(E), \quad (4.16)$$

el primero procedente de la contribución de órbitas de longitud infinitesimalmente corta y el segundo proveniente de la contribución de órbitas más largas. Esta separación para la traza del operador de Green conduce a su vez a una descomposición similar de la densidad de estados,

$$\rho(E) = \rho_0(E) + \rho_{osc}(E) = \bar{\rho}(E) + \rho_{osc}(E),$$

donde $\bar{\rho}(E)$ es el valor medio de la densidad de estados y $\rho_{osc}(E)$ da cuenta de las fluctuaciones en torno a la densidad de estados media.

Al final de este capítulo mostraremos la forma general de esta contribución de órbitas de longitud cero en el formalismo de estados de Bargmann a partir de una expresión general para el propagador semiclásico a tiempos infinitesimalmente cortos.

Densidad de estados semiclásica para un potencial de pozo simple Trataremos inicialmente el caso más simple de un sistema con un único punto de equilibrio descrito por un potencial de pozo simple

como el que se muestra en la Fig. (4.1), en el que a cada energía existe una única órbita periódica con periodo real $T(E)$. Este sistema simple constituye un ejemplo ilustrativo en el que se obtienen las

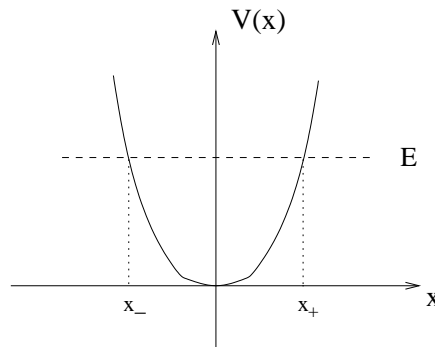


Figura 4.1: Ejemplo de potencial sencillo para el que existe una única órbita periódica a una energía E dada, y dos puntos de retroceso, x_{\pm} .

condiciones de cuantización WKB. Puesto que cualquier repetición de una órbita periódica es asimismo una órbita periódica, el tiempo estacionario en la ec. (4.15) será un múltiplo entero del periodo, esto es, $t_s = mT(E)$. La contribución de $t = 0$ corresponde al valor $m = 0$, y será evaluada de forma separada. El factor $e^{-i\pi\nu_s} = (-1)^{\nu_s}$ que aparece en esta integral da cuenta del cambio de signo que sufre el factor de amplitud $A^{(0)}$ cada vez que se completa una vuelta (se pasa de una hoja a otra en la superficie de Riemann asociada a la función bivaluada raíz cuadrada). La contribución oscilatoria a la traza de $\hat{g}(E)$ vendrá dada, según (4.15) por:

$$\text{Tr } \hat{g}_{osc}(E) \simeq \frac{1}{i\hbar} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-im\pi} \int_{\Gamma} d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0} e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^{mT(E)} \xi_t^* \dot{\eta}_t dt}$$

En la exponencial que aparece en esta integral interviene la acción de la órbita periódica, definida por

$$\frac{-1}{\hbar} \int_0^{T(E)} \xi_t^* \dot{\eta}_t dt \equiv \frac{i}{\hbar} S_T(E).$$

Dado que el valor de esta acción no depende del punto inicial elegido para calcularla, este término puede salir de la integral en η_0 , de forma que podemos escribir finalmente

$$\text{Tr } \hat{g}_{osc}(E) \simeq \frac{1}{i\hbar} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-im\pi} e^{\frac{i}{\hbar} m S_T(E)} \int_{\Gamma} d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0}. \quad (4.17)$$

El contorno de integración Γ_{α} puede deformarse de manera que pase por los puntos de fase estacionaria, es decir, *elegimos las trayectorias periódicas como caminos de integración*. Esta integral en η_0 puede ser parametrizada por el tiempo (real) t , de forma que la integral se reduce finalmente al periodo (real) de la órbita:

$$\int_{\Gamma} d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0} = \int_0^{T(E)} \frac{d\eta_0}{dt} dt \frac{1}{\dot{\eta}_0} = T(E).$$

La ec. (4.17) se escribirá por tanto como

$$\text{Tr } \hat{g}_{osc}(E) \simeq \frac{T(E)}{i\hbar} \sum_{m=1}^{\infty} e^{im\left(-\pi + \frac{S_T(E)}{\hbar}\right)}. \quad (4.18)$$

La contribución de $t = 0$ a la integral que se ha evaluado por fase estacionaria viene dada por 1/2 del término que correspondería a $m = 0$ en la suma (4.18):

$$\text{Tr } \hat{g}_0(E) \simeq \frac{T(E)}{2i\hbar}.$$

Así pues, la expresión final para la traza del operador de Green corresponde a la *fórmula de la traza de Gutzwiller* para el caso monodimensional [Gut67, Gut69, Gut71]:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{g}(E) &= \text{Tr } \hat{g}_0(E) + \text{Tr } \hat{g}_{osc}(E) \\ &\simeq \frac{T(E)}{2i\hbar} + \frac{T(E)}{i\hbar} \sum_{m=1}^{\infty} e^{im\left(-\pi + \frac{S_T(E)}{\hbar}\right)}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Multiplicando la parte imaginaria de esta expresión por $-1/\pi$ se obtiene, según indica la ec. (4.2), la siguiente expresión para la densidad de estados:

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \rho_0(E) + \rho_{osc}(E) \\ &\simeq \frac{T(E)}{2\pi\hbar} + \frac{T(E)}{\pi\hbar} \sum_{m=1}^{\infty} \cos \left[m \left(-\pi + \frac{S_T(E)}{\hbar} \right) \right]. \end{aligned}$$

Haciendo uso de la fórmula de Poisson (3.107) esta expresión puede escribirse en la forma

$$\rho(E) \simeq \frac{T(E)}{2\pi\hbar} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta \left[\frac{S_T(E)}{2\pi\hbar} - \frac{1}{2} - n \right], \quad (4.20)$$

y teniendo en cuenta la relación

$$\frac{\partial S_T(E)}{\partial E} = T(E)$$

se obtiene finalmente la expresión genérica para la densidad de estados:

$$\rho(E) \simeq \sum_n \delta(E - E_n), \quad (4.21)$$

donde las autoenergías E_n son los ceros de los argumentos de las funciones delta en (4.20), esto es:

$$\frac{S_T(E_n)}{2\pi\hbar} = n + \frac{1}{2}.$$

De esta forma, el tratamiento basado en trayectorias reales para el caso de un pozo simple de potencial conduce a las condiciones de cuantización WKB para la acción:

$$S_T(E_n) = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Densidad de estados semiclásica para el potencial de doble pozo Hemos mostrado el caso más sencillo de un potencial con un único mínimo, para el cual la densidad de estados viene dada por la contribución de sucesivas repeticiones a lo largo de una única órbita periódica con periodo real situada en el pozo de potencial. Para sistemas no tan simples cuyos potenciales presenten varios mínimos, un tratamiento basado únicamente en trayectorias reales sólo consideraría las órbitas periódicas situadas en las regiones clásicamente accesibles, y la aproximación semiclásica obtenida no podría dar cuenta del fenómeno de paso a través de barreras de potencial mediante *tunneling*. Este tipo de fenómenos puramente cuánticos pueden ser descritos mediante un procedimiento de continuación analítica a una dinámica compleja. Una de las principales ventajas que proporciona la formulación de estados coherentes se basa precisamente en su naturaleza compleja intrínseca, gracias a la cual esta extensión de la dinámica real a una dinámica compleja se produce de manera natural.

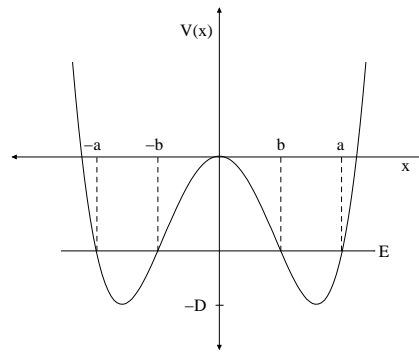


Figura 4.2: Potencial $V(x) = -x^2/4 + x^4/(64D)$. Los puntos de retroceso clásicos corresponden a $x = \pm a$ y $\pm b$. Se ha elegido $E = 0$ justo en la energía de la barrera de potencial.

Consideremos un sistema con un potencial simétrico con dos mínimos descrito por un operador hamiltoniano convenientemente escalado en la forma

$$\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(\hat{q}) = \frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{\hat{q}^2}{4} + \frac{\hat{q}^4}{64D}, \quad (4.22)$$

donde el parámetro adimensional D da cuenta aproximadamente del número de dobletes existentes para energías inferiores a la energía de la barrera de potencial. Mediante el cambio de variables habitual $\hat{q} = \sqrt{\hbar/2}(a^\dagger + a)$, $\hat{p} = i\sqrt{\hbar/2}(a^\dagger - a)$ (correspondiente a la transformación de \hat{H} bajo un operador de *squeezing* unitario), este operador se escribe en términos de a y a^\dagger como

$$\begin{aligned} \hat{H}(a^\dagger, a) &= \frac{\hbar^2}{256D} a^{\dagger 4} + \frac{\hbar^2}{64D} a^{\dagger 3} a + \frac{3\hbar^2}{128D} a^{\dagger 2} a^2 + \frac{\hbar^2}{64D} a^\dagger a^3 + \frac{\hbar^2}{256D} a^4 \\ &+ \left(\frac{-3\hbar}{8} + \frac{3\hbar^2}{128D} \right) a^{\dagger 2} + \left(\frac{\hbar}{4} + \frac{3\hbar^2}{64D} \right) a^\dagger a + \left(\frac{-3\hbar}{8} + \frac{3\hbar^2}{128D} \right) a^2 + \frac{\hbar}{8} + \frac{3\hbar^2}{256D}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

La función clásica asociada a este operador proporciona unas ecuaciones de movimiento cuyas soluciones muestran una estructura analítica bastante complicada. Una forma de simplificar el problema consiste en aplicar al operador \hat{H} una transformación no unitaria \hat{T}_∞ como la introducida en (3.72) que transforma \hat{q} en $\sqrt{\hbar}a$ y \hat{p} en $i\sqrt{\hbar}a^\dagger$:

$$\hat{H}'(a^\dagger, a) \equiv \hat{T}_\infty^{-1} \hat{H} \hat{T}_\infty = \frac{-\hbar}{2} a^{\dagger 2} + V(\sqrt{\hbar}a) = \frac{-\hbar}{2} a^{\dagger 2} - \frac{\hbar}{4} a^2 + \frac{\hbar^2}{64D} a^4. \quad (4.24)$$

Este operador, bastante más sencillo que (4.23), tiene asociado un hamiltoniano clásico dado por

$$\mathcal{H}'(\xi^*, \eta) \equiv \frac{(\xi|\hat{H}'|\eta)}{(\xi|\eta)} = \frac{-\xi^{*2}}{2} + V(\eta) = \frac{-\xi^{*2}}{2} - \frac{\eta^2}{4} + \frac{\eta^4}{64D}.$$

La evolución clásica de las variables complejas η y ξ^* está gobernada por las ecuaciones de Hamilton:

$$\dot{\eta}_\tau = -i \frac{\partial \mathcal{H}'(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \xi_\tau^*} = i \xi_\tau^* \quad (4.25a)$$

$$\dot{\xi}_\tau^* = i \frac{\partial \mathcal{H}'(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \eta_\tau} = i \left(\frac{-\eta_\tau}{2} + \frac{\eta_\tau^3}{16D} \right) \quad (4.25b)$$

El punto de partida para la obtención de la aproximación semiclásica a la densidad de estados del doble pozo es la expresión para la traza del operador de Green dada por la ec. (4.15):

$$\text{Tr } \hat{g}(E) \simeq \frac{1}{i\hbar} \sum_s \int_\Gamma d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0} e^{-i\pi\nu_s} e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^{t_s} \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau d\tau}. \quad (4.26)$$

Como se ha dicho anteriormente, es necesario analizar con precaución la estructura analítica del integrando para poder llevar a cabo la deformación del camino de integración Γ en el plano complejo. A partir de la conservación de la energía a lo largo de la trayectoria clásica

$$E = \frac{-\xi^{*2}}{2} - \frac{\eta^2}{4} + \frac{\eta^4}{64D}$$

ξ^* puede expresarse como una función de la variable η en la forma

$$\xi^*(\eta) = \pm \sqrt{\frac{\eta^4 - 16D\eta^2 - 64DE}{32D}}, \quad (4.27)$$

lo que permite escribir la acción en la ec. (4.26) como

$$\frac{-1}{\hbar} \int_0^{t_s} \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau d\tau = \frac{-1}{\hbar} \int_\gamma \xi^* d\eta = \mp \frac{1}{\hbar} \int_\gamma d\eta \sqrt{\frac{\eta^4 - 16D\eta^2 - 64DE}{32D}} \equiv \frac{i}{\hbar} S_{o.p.}, \quad (4.28)$$

donde el signo \mp corresponde a una elección \pm en (4.27), y el contorno de integración γ se extiende a lo largo de una órbita periódica. Esta función debe permanecer univaluada a lo largo del camino de integración. La elección de una u otra rama de la función (4.27) viene determinada por el criterio físico de que la traza del operador de Green debe decaer exponencialmente en las regiones clásicamente prohibidas. Esta elección determinará el sentido de los contornos de integración, como veremos a continuación.

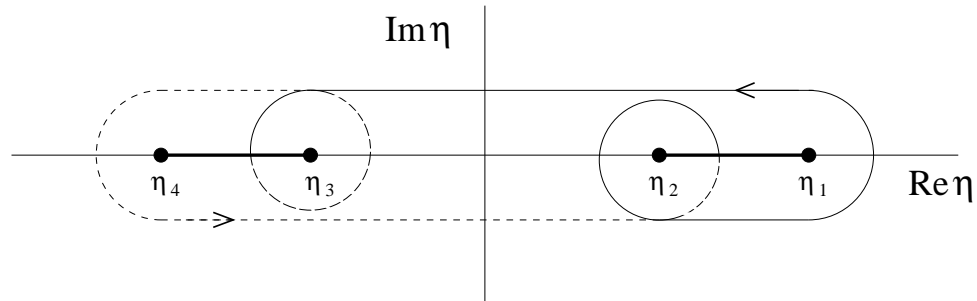


Figura 4.3: Contorno de integración elegido para $-D < E < 0$. Se muestran los puntos de rama η_i ($i = 1, 4$), así como los cortes de rama en línea negra. El trazo continuo o discontinuo corresponde al paso de una a otra hoja de la superficie de Riemann asociada a la función compleja (4.27).

Eligiendo $E = 0$ justo en la parte superior de la barrera de potencial [fig. (4.2)], la estructura de singularidades de la función (4.27) será diferente para energías positivas o negativas.

Comenzaremos estudiando los estados situados por debajo de la barrera de potencial, con energías $-D < E < 0$. En este caso, la función (4.27) presenta cuatro puntos de rama situados en el eje real, dados por

$$\begin{aligned} \eta_1 &= \sqrt{8D(1 + \sqrt{1 + E/D})} & ; & & \eta_2 &= \sqrt{8D(1 - \sqrt{1 + E/D})} \\ \eta_3 &= -\sqrt{8D(1 - \sqrt{1 + E/D})} & ; & & \eta_4 &= -\sqrt{8D(1 + \sqrt{1 + E/D})}. \end{aligned}$$

La deformación del contorno de integración Γ deberá llevarse a cabo rodeando estas singularidades y atendiendo a los siguientes criterios físicos: Por una parte, como se ha indicado, la traza de $\hat{g}(E)$ debe decaer en las regiones clásicamente prohibidas, lo que significa que en estas regiones las acciones de las órbitas periódicas, dadas por (4.28) deben ser imaginarias y estar definidas en el semiplano superior de la acción. Por otra parte, integrando la ecuación de movimiento para η_t , dada por (4.25a), se tiene la siguiente expresión para el tiempo:

$$\int dt = -i \int \frac{d\eta}{\xi^*(\eta)} = \mp i \int_{\gamma} d\eta \sqrt{\frac{32D}{\eta^4 - 16D\eta^2 - 64DE}} \equiv t_R - it_I, \quad (4.29)$$

donde el signo \mp corresponde a una elección \pm en (4.27). El criterio consiste en imponer la condición de que, a lo largo del camino de integración, la función (4.29) debe ser tal que su parte real t_R sea positiva y monótonamente creciente en las regiones clásicamente accesibles, permaneciendo t_I constante³, mientras que t_I debe ser positiva y monótonamente creciente en las regiones clásicamente prohibidas, permaneciendo constante t_R .

³Puede suceder que la parte imaginaria aumente al ir por una de las hojas de la superficie de Riemann y decrezca al regresar por la otra, de manera que después de un ciclo haya permanecido constante de forma neta.

Por otra parte, la elección de la rama física de la función (4.27) de acuerdo con los criterios expuestos determinará el sentido en el que se lleva a cabo la integración. Debe tenerse en cuenta que cada vez que se rodea una de las singularidades debe añadirse un factor de fase cuyo signo depende del sentido de integración. En la Fig. (4.3) se muestra el camino de integración fundamental utilizado en la evaluación de la integral (4.28), en el que, partiendo de, por ejemplo, el pozo 1, la trayectoria pasa una vez por la barrera, llega al pozo 2, rebota en el punto de retroceso, atraviesa de nuevo la barrera y regresa al pozo de partida, completando un ciclo. A lo largo de este recorrido es necesario ir pasando de una a otra hoja de la superficie de Riemann asociada a la función (4.27) para que se cumplan los criterios impuestos sobre la acción (4.28) y el tiempo (4.29) en cada una de las regiones, y la función $\xi^*(\eta)$ permanezca univaluada.

En la traza del operador de Green dada por (4.26) interviene una suma sobre todas las órbitas periódicas. Deben considerarse todos los contornos de integración posibles que no sean equivalentes, esto es, que no puedan deformarse de forma continua entre sí sin que se pase por una de las singularidades del integrando. Puesto que estas singularidades se encuentran en el eje real, estos caminos podrán elegirse de forma que estén sobre el eje real, excepto en un entorno infinitesimal de los puntos de rama.

Así pues, la integral en η que aparece en (4.26) podrá evaluarse descomponiendo la integral en η en una suma de integrales extendidas a tres regiones Γ_1 , Γ_2 y Γ_b correspondientes a las trayectorias periódicas que tienen su inicio y su fin en cada uno de los dos pozos y en la barrera, respectivamente. Denotando por S_1 y S_2 las acciones (reales) de las órbitas periódicas a energía E en cada uno de los pozos, y por iS_b la acción (imaginaria) de una oscilación de ida y vuelta bajo la barrera de potencial, la traza del operador de Green $\hat{g}(E)$ puede escribirse suma sobre todas las trayectorias que comienzan en cualquiera de estas tres regiones, conteniendo todas las combinaciones posibles de ciclos en cada región:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{g}_{osc}(E) \simeq & \frac{1}{i\hbar} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \left[\sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l (-e^{-S_b/\hbar}) \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \right]^n \int_{\Gamma_b} d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0} \right. \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^n \sum_{j=0}^{\infty} \left[(-e^{-S_b/\hbar}) \sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \right]^j \int_{\Gamma_1} d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0} \\ & \left. + \sum_{n=1}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^n \sum_{j=0}^{\infty} \left[(-e^{-S_b/\hbar}) \sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \right]^j \int_{\Gamma_2} d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0} \right\}. \quad (4.30) \end{aligned}$$

El primero de los términos de (4.30) incluye las trayectorias que comienzan y terminan bajo la barrera de potencial, mientras que los dos últimos contabilizan las órbitas que tienen su inicio y final en cada uno de los dos pozos. [En el Apéndice 2 al final de este capítulo se muestra cómo se obtiene la ec. (4.30)]. Como se ha hecho anteriormente, las integrales en (4.30) pueden ser parametrizadas por el tiempo. Denotando por T_1 y T_2 los periodos (reales) de las órbitas a energía E en cada uno de los pozos, y por $-iT_b$ el periodo

de la órbita bajo la barrera, la ec. (4.30) se escribe

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{g}_{osc}(E) \simeq & \frac{1}{i\hbar} \left\{ -iT_b \sum_{n=1}^{\infty} \left[\sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l (-e^{-S_b/\hbar}) \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \right]^n \right. \\ & + T_1 \sum_{n=1}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^n \sum_{j=0}^{\infty} \left[(-e^{-S_b/\hbar}) \sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \right]^j \\ & \left. + T_2 \sum_{n=1}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^n \sum_{j=0}^{\infty} \left[(-e^{-S_b/\hbar}) \sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \right]^j \right\}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Conviene indicar que muchas de las trayectorias que intervienen en la suma (4.31) son topológicamente equivalentes, pero se contabilizan de forma distinta, ya que cada órbita irá multiplicada por un factor temporal diferente (T_1 , T_2 o $-iT_b$) dependiendo de la región en que se considere que tiene su inicio. Por otra parte, es importante indicar que, si bien los contornos de integración dependen de la elección que se haga de los cortes de rama (que por supuesto no es única, puesto que podrían elegirse como la línea a que une η_3 y η_2 en la Fig. (4.3) y las líneas que unen η_1 y η_4 con $+\infty$ y $-\infty$, respectivamente), sin embargo el resultado (4.31) es independiente de cómo hayan sido elegidos dichos cortes.

Efectuando las sumas de las series que aparecen en (4.31) se tiene

$$\text{Tr } \hat{g}_{osc}(E) \simeq \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{-T_1 e^{iS_1/\hbar} - T_2 e^{iS_2/\hbar} - (T_1 + T_2) e^{i(S_1+S_2)/\hbar} + iT_b e^{-S_b/\hbar}}{(1 + e^{iS_1/\hbar})(1 + e^{iS_2/\hbar}) + e^{-S_b/\hbar}} \right].$$

Este es el resultado correspondiente a la parte oscilatoria de la traza del operador de Green (las sumas principales se extienden desde $n = 1$ hasta infinito, es decir, se da al menos una vuelta en cada uno de los pozos). De nuevo, la contribución de las órbitas de longitud cero se obtiene fácilmente como la mitad de los términos correspondientes a $n = 0$, esto es:

$$\text{Tr } \hat{g}_0(E) = \frac{T_1 + T_2 - iT_b}{2i\hbar}.$$

La expresión completa para la traza de $\hat{g}(E)$ será por tanto

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{g}(E) &= \text{Tr } \hat{g}_0(E) + \text{Tr } \hat{g}_{osc}(E) \\ &\simeq \frac{T_1 + T_2 - iT_b}{2i\hbar} \\ &+ \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{-T_1 e^{iS_1/\hbar} - T_2 e^{iS_2/\hbar} - (T_1 + T_2) e^{i(S_1+S_2)/\hbar} + iT_b e^{-S_b/\hbar}}{(1 + e^{iS_1/\hbar})(1 + e^{iS_2/\hbar}) + e^{-S_b/\hbar}} \right]. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Según indica la ec. (4.1), las autoenergías del sistema deben obtenerse como polos de la traza del operador de Green, con residuos igual a la unidad. Teniendo en cuenta las relaciones

$$\frac{\partial S_i}{\partial E} = T_i, \quad (i = 1, 2) \quad ; \quad \frac{\partial S_b}{\partial E} = -T_b, \quad (4.33)$$

la parte oscilatoria de la traza (que es la que presenta polos a las autoenergías E_n , puesto que el término de órbitas de longitud cero no proporciona ninguna información acerca de la posición de los picos en la densidad de estados) puede escribirse como una derivada logarítmica en la forma

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{g}_{osc}(E) &\simeq \frac{\partial}{\partial E} \left[\frac{(1 + e^{iS_1/\hbar})(1 + e^{iS_2/\hbar}) + e^{-S_b/\hbar}}{(1 + e^{iS_1/\hbar})(1 + e^{iS_2/\hbar}) + e^{-S_b/\hbar}} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial E} \ln \left[(1 + e^{iS_1/\hbar})(1 + e^{iS_2/\hbar}) + e^{-S_b/\hbar} \right]. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Esta relación indica que los polos de expresión (4.32) son, aproximadamente, las autoenergías del sistema, y sus residuos son aproximadamente iguales a la unidad.⁴

Una forma alternativa de obtener la expresión (4.34) para la traza consiste en asignar un *código simbólico* a las órbitas periódicas que comienzan y terminan en cada una de las tres regiones correspondientes a los dos pozos y la barrera. Con un alfabeto \mathcal{A} formado exclusivamente por dos símbolos, $\mathcal{A} = \{1, 2\}$, es posible identificar de forma única cada una de las trayectorias que intervienen en la suma (4.31) mediante una secuencia específica de estos símbolos. Por ejemplo, la órbita fundamental mostrada en la Fig. (4.3), correspondiente a una trayectoria que parte del pozo 1, atraviesa la barrera, pasa al pozo 2, rebota en el punto de retroceso, atraviesa de nuevo la barrera, entra al pozo 1, rebota en el punto de retroceso y regresa al punto inicial, viene determinada por la secuencia 12211. Esta dinámica simbólica puede codificarse de forma compacta en el grafo de Markov representado en la Fig. (4.4). Cualquier itinerario generado por la dinámica simbólica, con independencia de su longitud, corresponde a un camino en este grafo. Las transiciones permitidas vienen dadas por la *matriz de conectividad* [Eck93]:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} -e^{iS_1/\hbar} & i e^{-S_b/(2\hbar)} \\ i e^{-S_b/(2\hbar)} & -e^{iS_2/\hbar} \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

El grafo representado en (4.4) presenta dos nodos y cuatro enlaces, cada uno de los cuales está asociado a los elementos de la matriz de conectividad. La traza (4.34) puede escribirse en términos de la matriz (4.35) en la forma

$$\text{Tr } \hat{g}_{osc}(E) = \frac{\partial}{\partial E} \ln \zeta = \frac{\partial}{\partial E} \ln [\det(\mathbf{I} - \mathbf{T})], \quad (4.36)$$

⁴Efectivamente, si la función

$$\text{Tr } \hat{g}(E) = \frac{\partial f(E)}{f(E)} = \frac{\partial}{\partial E} \ln[f(E)]$$

tiene un polo en $E = E_n$, desarrollando $f(E)$ en torno al mismo

$$f(E) = f(E_n) + \left. \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right|_{E=E_n} (E - E_n) + \dots$$

podemos escribir

$$\text{Tr } \hat{g}(E) \simeq \frac{\partial f(E)}{\partial f(E)} \Big|_{E=E_n} \simeq \frac{1}{E - E_n},$$

puesto que $f(E_n) = 0$. Truncando, pues, el desarrollo de $f(E)$ en torno al polo hasta orden lineal en E , el residuo del polo E_n es aproximadamente la unidad.

donde ζ es una función zeta dinámica que presenta polos en las posiciones de los autovalores de \hat{H} .

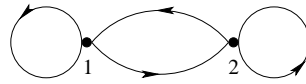


Figura 4.4: Grafo de Markov con 2 nodos y 4 enlaces correspondiente a la matriz de conectividad (4.35).

Para entender el contenido físico del resultado (4.34), resulta instructivo examinarlo en un caso específico, como es el doble pozo *simétrico*. Puesto que en este caso se tiene $T_1 = T_2 \equiv T$, así como $S_1 = S_2 \equiv S$, la ec. (4.32) se reduce a

$$\text{Tr } \hat{g}(E) \simeq \frac{2T - iT_b}{2i\hbar} + \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{-2Te^{iS/\hbar} - 2Te^{i2S/\hbar} + iT_b e^{-S_b/\hbar}}{(1 + e^{iS/\hbar})^2 + e^{-S_b/\hbar}} \right]. \quad (4.37)$$

Las integrales para el cálculo de los periodos y las acciones que intervienen en esta traza son analíticas, y vienen dadas por [Gra94]

$$\begin{aligned} S &= \frac{2}{\sqrt{32D}} \int_b^a dx \sqrt{(a^2 - x^2)(x^2 - b^2)} = \frac{2}{\sqrt{32D}} \frac{a}{3} [(a^2 + b^2)E(\eta) - 2b^2K(\eta)] \\ S_b &= \frac{4}{\sqrt{32D}} \int_0^b dx \sqrt{(a^2 - x^2)(b^2 - x^2)} = \frac{4}{\sqrt{32D}} \frac{a}{3} [(a^2 + b^2)E(\xi) - (a^2 - b^2)K(\xi)] \\ T &= 2\sqrt{32D} \int_b^a \frac{dx}{\sqrt{(a^2 - x^2)(x^2 - b^2)}} = 2\sqrt{32D} \frac{1}{a} K(\eta) \\ T_b &= 4\sqrt{32D} \int_0^b \frac{dx}{\sqrt{(a^2 - x^2)(b^2 - x^2)}} = 4\sqrt{32D} \frac{1}{a} K(\xi), \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} a^2 &= 8D \left(1 + \sqrt{1 + E/D} \right) \\ b^2 &= 8D \left(1 - \sqrt{1 + E/D} \right) \\ \eta &= \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a} \\ \xi &= \frac{b}{a} \end{aligned}$$

y donde $K(\lambda)$ y $E(\lambda)$ son las integrales elípticas completas de primer y segundo tipo, respectivamente, definidas como

$$\begin{aligned} K(\lambda) &= \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - \lambda^2 \sin^2 \theta}} \\ E(\lambda) &= \int_0^{\pi/2} d\theta \sqrt{1 - \lambda^2 \sin^2 \theta}. \end{aligned}$$

En la Fig. (4.5) se muestra la densidad de estados semiclásica para el potencial de doble pozo con $D = 4$. Se comparan los resultados con los que se obtienen al diagonalizar \hat{H} en una base de osciladores armónicos.

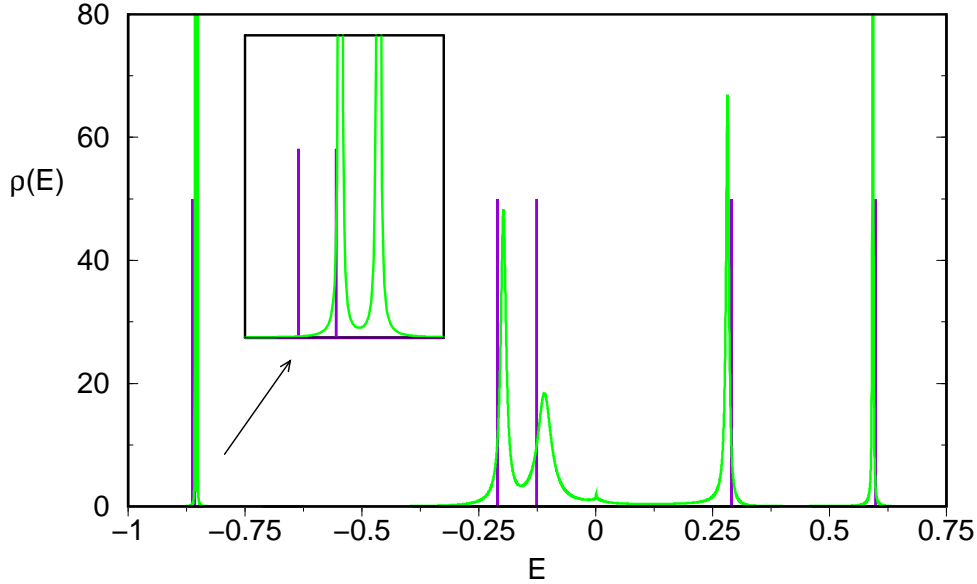


Figura 4.5: Comparación de resultados para la densidad de estados semiclásica y cuántica (espectro de barras) en el potencial $V(x) = -x^2/4 + x^4/(64D)$.

Un aproximación adicional permite obtener el desdoblamiento de niveles cuasidegenerados predicho por la teoría WKB. Para ello puede procederse de forma perturbativa considerando como orden cero el caso en que la barrera de potencial es muy alta y el problema se reduce al estudio de la degeneración en dos pozos simples. Para ello introducimos un parámetro perturbativo, ε , que eventualmente igualaremos a la unidad, de forma que la condición para un polo [ver ec. (4.37)] puede escribirse como

$$\left[1 + e^{iS(E_n)/\hbar}\right]^2 = -\varepsilon^2 e^{-S_b(E_n)/\hbar},$$

esto es

$$1 + e^{iS(E_n)/\hbar} = \pm i\varepsilon e^{-S_b(E_n)/2\hbar}. \quad (4.38)$$

Desarrollando la autoenergía en potencias de ε ,

$$E_n = E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (4.39)$$

puede desarrollarse la acción en torno al orden más bajo, $E_n^{(0)}$, como

$$\begin{aligned} S(E_n) &= S(E_n^{(0)}) + \left. \frac{\partial S}{\partial E_n} \right|_{E_n^{(0)}} (E_n - E_n^{(0)}) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 S}{\partial E_n^2} \right|_{E_n^{(0)}} (E_n - E_n^{(0)})^2 + \dots \\ &\simeq S(E_n^{(0)}) + T \left(\varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial T}{\partial E_n} \varepsilon^2 E_n^{(1)2} + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_b(E_n) &= S_b(E_n^{(0)}) + \left. \frac{\partial S_b}{\partial E_n} \right|_{E_n^{(0)}} (E_n - E_n^{(0)}) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 S_b}{\partial E_n^2} \right|_{E_n^{(0)}} (E_n - E_n^{(0)})^2 + \dots \\
&\simeq S_b(E_n^{(0)}) - T_b \left(\varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)} \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial T_b}{\partial E_n} \varepsilon^2 E_n^{(1)2} + \dots,
\end{aligned}$$

donde hemos conservado únicamente los términos hasta el orden ε^2 . Sustituyendo estos desarrollos en la ec. (4.38) se tiene

$$\begin{aligned}
&1 + e^{\frac{i}{\hbar} S(E_n^{(0)})} e^{\frac{i}{\hbar} T(\varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)})} e^{\frac{i}{2\hbar} \frac{\partial T}{\partial E_n} \varepsilon^2 E_n^{(1)2}} \\
&\simeq \pm i \varepsilon e^{\frac{-1}{\hbar} S_b(E_n^{(0)})} e^{\frac{T_b}{2\hbar} (\varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)})} e^{\frac{1}{4\hbar} \frac{\partial T_b}{\partial E} \varepsilon^2 E_n^{(1)2}},
\end{aligned}$$

esto es

$$\begin{aligned}
&1 + e^{\frac{i}{\hbar} S(E_n^{(0)})} \left(1 + \frac{i}{\hbar} T(\varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)}) - \frac{T^2}{2\hbar^2} \varepsilon^2 E_n^{(1)2} \right) \left(1 + \frac{i}{2\hbar} \frac{\partial T}{\partial E_n} \varepsilon^2 E_n^{(1)2} \right) \\
&\simeq \pm i \varepsilon e^{\frac{-1}{\hbar} S_b(E_n^{(0)})} \left(1 + \frac{T_b}{2\hbar} (\varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)}) + \frac{T_b^2}{8\hbar^2} \varepsilon^2 E_n^{(1)2} \right) \left(1 + \frac{1}{4\hbar} \frac{\partial T_b}{\partial E} \varepsilon^2 E_n^{(1)2} \right). \quad (4.40)
\end{aligned}$$

Las sucesivas correcciones a las autoenergías pueden obtenerse identificando los coeficientes correspondientes a las mismas potencias de ε en la ec. (4.40). De esta forma, igualando los términos correspondientes al orden ε^0 tenemos

$$1 + e^{\frac{i}{\hbar} S(E_n^{(0)})} = 0, \quad (4.41)$$

de donde obtenemos la condición que ha de satisfacer la aproximación de orden cero:

$$S(E_n^{(0)}) = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.42)$$

Así pues, la aproximación más baja, que consiste en considerar dos pozos simples degenerados, proporciona las condiciones de cuantización de Bohr-Sommerfeld, y el estado de energía más baja en esta aproximación adquiere la energía de punto cero adecuada.

Identificando los términos correspondientes al siguiente orden en ε obtenemos la igualdad

$$1 + e^{\frac{i}{\hbar} S(E_n^{(0)})} \left(1 + \frac{i}{\hbar} T E_n^{(1)} \right) = \pm i e^{\frac{-1}{\hbar} S_b(E_n^{(0)})},$$

que, teniendo en cuenta la condición (4.41), permite despejar $E_n^{(1)}$ como

$$E_n^{(1)} = \pm \frac{\hbar}{T} e^{-S_b(E_n^{(0)})/2\hbar}, \quad (4.43)$$

obteniéndose de esta forma la expresión WKB para el *splitting* de los niveles:

$$E_n \simeq E_n^{(0)} \pm \frac{\hbar}{T} e^{-S_b(E_n^{(0)})/2\hbar},$$

donde hemos tomado $\varepsilon = 1$ en la ec. (4.39).

Para estimar la validez de esta aproximación, es necesario ir a un orden superior en el desarrollo de ε y obtener una estimación del término $E_n^{(2)}$. Identificando pues los términos de orden ε^2 en la ec. (4.40) y teniendo en cuenta la condición (4.41) obtenemos la igualdad

$$-\frac{i}{2\hbar} \frac{\partial T}{\partial E} E_n^{(1)2} - \frac{i}{\hbar} T E_n^{(2)} + \frac{T^2}{2\hbar^2} E_n^{(1)2} = \pm \frac{i}{2\hbar} T_b E_n^{(1)} e^{-S_b(E_n^{(0)})/2\hbar}. \quad (4.44)$$

Esta expresión indica que $E_n^{(2)}$ debe ser una magnitud compleja. Identificando entonces las partes real e imaginaria en esta igualdad se tiene

$$E_n^{(2)} = -\frac{\hbar}{2T^2} \left(\frac{\hbar}{T} \frac{\partial T}{\partial E} - T_b \right) e^{-S_b(E_n^{(0)})/\hbar} - i \frac{\hbar}{2T} e^{-S_b(E_n^{(0)})/\hbar}. \quad (4.45)$$

Estos resultados muestran que la aproximación semiclásica proporciona un espectro continuo, puesto que la expresión dada por (4.37) no puede presentar polos para valores reales de la energía.⁵ Esta es una limitación de la aproximación semiclásica, que desplaza los polos de la función de Green, apartándolos del eje real. La corrección de segundo orden (4.45) es la misma para los dos niveles desdoblados. Además, la parte imaginaria de $E_n^{(2)}$ (que da cuenta de la anchura de la “resonancia” y cuya negatividad garantiza el decaimiento temporal de la misma) permite una resolución adecuada del *splitting*, teniendo en cuenta que $\text{Im } E_n^{(2)} \sim \exp\left(-S_b(E_n^{(0)})/\hbar\right)$ frente a $E_n^{(1)} \sim \exp\left(-S_b(E_n^{(0)})/(2\hbar)\right)$. En la tabla (4.1) se comparan los resultados obtenidos mediante esta aproximación perturbativa, $E_n \simeq E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$ con los autovalores (reales) cuánticos. Estos resultados reflejan el hecho de que la aproximación perturbativa llevada a cabo es válida para $S_b \gg \hbar$, es decir, no es una buena aproximación para los dobletes que están próximos a la barrera de potencial.

El uso de trayectorias complejas para describir el fenómeno de *tunneling* a través de una barrera de potencial ha sido ampliamente utilizado en física. Como es sabido, en las regiones clásicamente prohibidas las ecuaciones de movimiento clásicas pueden extenderse mediante *continuación analítica* a tiempos imaginarios, y el problema es dinámicamente equivalente al estudio del potencial invertido.⁶

⁵Efectivamente, la condición para un polo, dada por

$$1 + e^{iS/\hbar} = i e^{-S_b/\hbar} \quad (4.46)$$

indica que la circunferencia centrada en 1 con radio unidad representada por $1 + e^{iS/\hbar}$ sólo puede intersectar al punto $e^{-S_b/\hbar}$ en el eje imaginario cuando este último término es cero, esto es, cuando se desprecia el efecto de la barrera de potencial.

⁶Efectivamente, los cambios de variable

$$\begin{aligned} t &\rightarrow -it' \\ p &\rightarrow -ip' \\ q &\rightarrow q' \end{aligned}$$

en las ecuaciones clásicas de movimiento de un sistema hamiltoniano con $H = p^2/2 + V(q)$,

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = p \quad ; \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{dV(q)}{dq},$$

Cuántico	Semiclásico Perturbativo	Error absoluto
-3.5081111	$-3,50607012 - i3,07980891 \times 10^{-17}$	-0.00204098
-3.50811109	$-3,50607012 - i3,07980891 \times 10^{-17}$	-0.00204097
-2.55935453	$-2,55677181 - i1,55507276 \times 10^{-12}$	-0.00258272
-2.55935315	$-2,55677046 - i1,55507276 \times 10^{-12}$	-0.00258269
-1.67109818	$-1,6676916 - i1,24780681 \times 10^{-08}$	-0.00340658
-1.67098132	$-1,66757508 - i1,24780681 \times 10^{-08}$	-0.00340624
-0.863037287	$-0,857459295 - i2,58906331 \times 10^{-05}$	-0.005577992
-0.858090445	$-0,852437506 - i2,58906331 \times 10^{-05}$	-0.005652939
-0.210912181	$-0,197516725 - i0,011489924$	-0.013395456
-0.126060107	$-0,103867603 - i0,011489924$	-0.022192504
0.290398316	$0,291298465 - i0,00553330199$	-0.000900149
0.597963855	$0,592894188 - i0,000304156498$	0.005069667
0.995546017	$0,99241686 - i1,17432691 \times 10^{-05}$	0.003129157
1.41452763	$1,41227437 - i3,55691616 \times 10^{-07}$	0.00225326
1.86389423	$1,86208854 - i8,94072024 \times 10^{-09}$	0.00180569
2.33769048	$2,33627901 - i1,9251569 \times 10^{-10}$	0.00141147
2.83418802	$2,83293774 - i3,64317198 \times 10^{-12}$	0.00125028
3.35163401	$3,35054687 - i6,15592322 \times 10^{-14}$	0.00108714
3.88869984	$3,88767777 - i9,42356016 \times 10^{-16}$	0.00102207

Cuadro 4.1: Autovalores del doble pozo correspondientes al valor $D = 4$. Los valores cuánticos han sido obtenidos diagonalizando el hamiltoniano (4.22) en una base de autoestados del oscilador armónico con una frecuencia convenientemente optimizada. Se muestran asimismo los autovalores complejos $E_n \simeq E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$ obtenidos mediante la aproximación perturbativa (4.39) y el error relativo entre el valor cuántico y la parte real del resultado perturbativo.

Miller [Mil74] asocia las trayectorias de *tunneling* con puntos de silla en el plano complejo del tiempo y con singularidades en el potencial para ciertos valores complejos de las coordenadas. Los resultados semiclásicos obtenidos son mejores para energías clásicas mucho menores que la barrera de potencial, donde contribuye una única “rama” de tunneling, mientras que cerca de la barrera clásica la situación se complica. En [Mil79] puede encontrarse una descripción por órbitas periódicas del *tunneling* en el doble pozo incluyendo trayectorias complejas. La aproximación propuesta por Bender *et al* [Ben78] para la función de Green en la representación de integrales de camino proporciona un resultado para el espectro de energía cuántico acorde con los resultados WKB. Esta aproximación incluye también el efecto de trayectorias complejas en las regiones clásicamente prohibidas.

Otros estudios [McL72] contemplan el uso de una continuación analítica a tiempos complejos para la evaluación semiclásica de la función de Green en el formalismo de integrales de camino. El resultado es independiente del camino elegido para determinar la integral de camino de Feynman.

La utilidad del uso de trayectorias complejas no se limita a la descripción semiclásica del paso a través de barreras de potencial, sino del llamado *tunneling dinámico*, que conecta regiones energéticamente accesibles pero dinámicamente separadas. Si bien en el caso monodimensional el *tunneling* dinámico no tiene forma de aparecer, en el caso de sistemas con mayor número de grados de libertad el uso de trayectorias complejas en el espacio de configuraciones ha resultado útil para tratar de describir este tipo de fenómenos [Tak95].

Estas extensiones a una dinámica compleja en la descripción de fenómenos de paso a través de barreras aparece de forma natural en la representación de Bargmann debido a su estructura compleja intrínseca. El estudio del *deep tunneling* constituye un llamativo ejemplo en el que esta idoneidad de los estados coherentes para servir de puente entre las dinámicas cuántica y clásica se pone de manifiesto.

Hasta ahora hemos analizado los niveles con energías inferiores a la energía de la barrera de potencial. Para completar el estudio de la densidad de estados del doble pozo es necesario llevar a cabo un análisis similar para los estados situados por encima de la barrera de potencial. En el caso en que $E > 0$, la estructura de singularidades que presenta la función (4.27) varía respecto a la disposición de los puntos de rama a lo largo del eje real que se tenía para energías negativas. En este caso, existen dos puntos de rama situados en el eje real del plano η y otros dos en el eje imaginario:

$$\begin{aligned} \eta_1 &= -i\sqrt{8D(-1 + \sqrt{1 + E/D})} & ; & & \eta_2 &= -\sqrt{8D(1 + \sqrt{1 + E/D})} \\ \eta_3 &= i\sqrt{8D(-1 + \sqrt{1 + E/D})} & ; & & \eta_4 &= \sqrt{8D(1 + \sqrt{1 + E/D})}. \end{aligned}$$

hace que estas ecuaciones se transformen en

$$\frac{dq'}{dt'} = p' \quad ; \quad \frac{dp'}{dt'} = -\frac{d}{dq'} [-V(q')]. \quad (4.47)$$

La ec. (4.47) permite considerar las soluciones clásicas en la región clásicamente prohibida como las soluciones (con tiempo imaginario) correspondientes al potencial invertido $-V(q')$.

Esto hace que el contorno de integración elegido para calcular la integral (4.28) cambie por completo, puesto que debe incluir los puntos de rama que caen en el eje imaginario. En la Fig. (4.6) se muestra el camino de integración fundamental elegido para el que se cumple el criterio según el cual la parte real del tiempo dado por (4.29) debe crecer en las regiones del camino de integración que caen en el eje real del plano η , mientras que es la parte imaginaria del tiempo la que crece cuando el camino de integración incluye al eje imaginario. La traza del operador de Green [ec. (4.26)] se obtiene como una

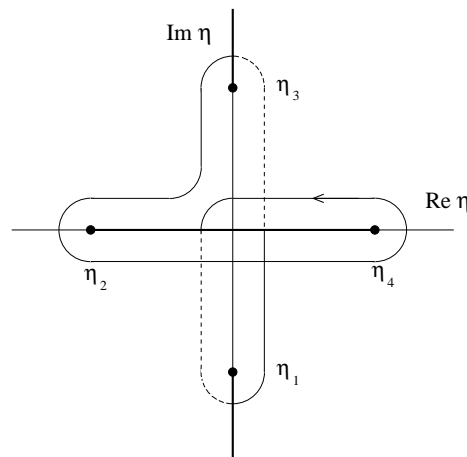


Figura 4.6: Contorno de integración fundamental elegido para $E > 0$. Los cortes de rama se indican en línea negrita. El trazo continuo o discontinuo corresponde al paso de una a otra hoja de la superficie de Riemann asociada a la función compleja (4.27).

suma sobre todas las órbitas periódicas obtenidas como combinaciones de este camino fundamental. Cuantificar la suma de todas las órbitas posibles tal como hicimos para los estados por debajo de la barrera de potencial es una tarea bastante complicada. Sin embargo, puede obtenerse una expresión para $\text{Tr } \hat{g}(E)$ haciendo uso del código simbólico mencionado anteriormente. En este caso, el alfabeto tiene 4 símbolos, $\mathcal{A} = \{1, 2, 3, 4\}$ y el correspondiente grafo de Markov, con 4 vértices o nodos, se muestra en la Fig. (4.7). La matriz de conectividad viene dada por

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i e^{-S_I/\hbar} & i e^{-S_I/(2\hbar)} e^{iS_R/(2\hbar)} \\ 0 & 0 & i e^{-S_I/(2\hbar)} e^{iS_R/(2\hbar)} & i e^{iS_R/\hbar} \\ i e^{-S_I/\hbar} & i e^{-S_I/(2\hbar)} e^{iS_R/(2\hbar)} & 0 & 0 \\ i e^{-S_I/(2\hbar)} e^{iS_R/(2\hbar)} & i e^{iS_R/\hbar} & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

donde $2S_R$ y $2T_R$ denotan, respectivamente, la acción y el periodo (reales) de una trayectoria a lo largo del eje real desde η_4 hasta η_2 y de vuelta a η_4 en la Fig. (4.6), mientras que $i2S_I$ e $i2T_I$ denotan la acción y periodo (imaginarios) de una trayectoria en el eje imaginario desde η_1 hasta η_3 y de nuevo a η_1 . El elemento de matriz M_{ij} corresponde al término de acción de una trayectoria que parte del nodo i -ésimo y

llega al nodo j -ésimo, con el correspondiente factor de fase asociado. Los términos diagonales nulos de la matriz \mathbf{M} son un reflejo de una regla gramatical de este código, que impide la repetición de un mismo símbolo en la secuencia que describe la órbita periódica. La traza del operador de Green podrá escribirse

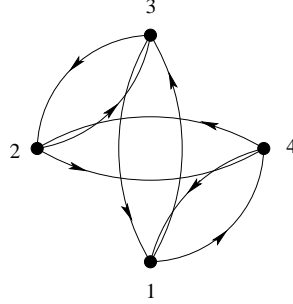


Figura 4.7: Grafo de Markov con 4 nodos correspondiente a la matriz de conectividad \mathbf{M} dada por (4.35).

en términos de la función zeta dinámica como

$$\begin{aligned}
 \text{Tr } \hat{g}_{osc}(E) &= \frac{\partial}{\partial E} \ln \zeta = \frac{\partial}{\partial E} \ln [\det(\mathbf{I} - \mathbf{M})] \\
 &= \frac{\partial}{\partial E} \ln \left[1 + 2 e^{-S_I/\hbar} e^{iS_R/\hbar} + e^{2iS_R/\hbar} + e^{-2S_I/\hbar} \right] \\
 &= \frac{2}{i\hbar} \left[\frac{(iT_I - T_R) e^{-S_I/\hbar} e^{iS_R/\hbar} - T_R e^{2iS_R/\hbar} + iT_I e^{-2S_I/\hbar}}{1 + 2 e^{-S_I/\hbar} e^{iS_R/\hbar} + e^{2iS_R/\hbar} + e^{-2S_I/\hbar}} \right]. \quad (4.48)
 \end{aligned}$$

De nuevo las integrales para obtener las acciones y el periodo son analíticas y vienen dadas en función de las integrales elípticas completas por:

$$\begin{aligned}
 S_R &= \frac{2}{\sqrt{32D}} \int_0^a dx \sqrt{(a^2 - x^2)(x^2 + B^2)} = \frac{2}{\sqrt{32D}} \frac{1}{3} \sqrt{B^2 + a^2} [B^2 K(\sigma) - (B^2 - a^2)E(\sigma)] \\
 T_R &= 2\sqrt{32D} \int_0^a \frac{dx}{\sqrt{(a^2 - x^2)(x^2 + B^2)}} = 2\sqrt{32D} \frac{1}{\sqrt{B^2 + a^2}} K(\sigma) \\
 S_I &= \frac{2}{\sqrt{32D}} \int_0^B dx \sqrt{(a^2 + x^2)(B^2 - x^2)} = \frac{2}{\sqrt{32D}} \frac{1}{3} \sqrt{a^2 + B^2} [a^2 K(\delta) - (a^2 - B^2)E(\delta)] \\
 T_I &= 2\sqrt{32D} \int_0^B \frac{dx}{\sqrt{(a^2 + x^2)(B^2 - x^2)}} = 2\sqrt{32D} \frac{1}{\sqrt{a^2 + B^2}} K(\delta),
 \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
 a^2 &= 8D \left(1 + \sqrt{1 + E/D} \right) \\
 B^2 &= 8D \left(-1 + \sqrt{1 + E/D} \right) = -b^2 \\
 \sigma &= \frac{a}{\sqrt{a^2 + B^2}} \\
 \delta &= \frac{B}{\sqrt{a^2 + B^2}}.
 \end{aligned}$$

El término de la traza correspondiente a las órbitas de longitud cero viene dado por

$$\text{Tr } \hat{g}_0(E) = \frac{2T_R - 2iT_I}{2i\hbar} = \frac{T_R - iT_I}{i\hbar}.$$

En la Fig. (4.5) se muestran los resultados cuántico y semiclásico para un valor de $D = 4$ para estados próximos a la barrera de potencial.

De forma análoga al caso de estados por debajo de la barrera, es posible introducir de forma perturbativa el efecto de la barrera de potencial mediante el parámetro ε , de forma que la condición para un polo se escribe como

$$1 + 2\varepsilon e^{-S_I(E_n)/\hbar} e^{iS_R(E_n)/\hbar} + e^{2iS_R(E_n)/\hbar} + \varepsilon^2 e^{-2S_I(E_n)/\hbar} = 0. \quad (4.49)$$

Desarrollando las autoenergías en potencias de ε según (4.39), desarrollando a su vez las acciones S_R y S_I en torno al orden más bajo, $E_n^{(0)}$, y teniendo en cuenta las relaciones

$$\frac{\partial S_R}{\partial E} = T_R \quad ; \quad \frac{\partial S_I}{\partial E} = -T_I,$$

al sustituir estos desarrollos en (4.49) se podrán obtener las sucesivas correcciones a las autoenergías igualando los términos con las mismas potencias de ε . Así, la ecuación para el orden ε^0 proporciona la condición que debe cumplir la aproximación de orden cero, $E_n^{(0)}$:

$$1 + e^{\frac{2i}{\hbar}S_R(E_n^{(0)})} = 0,$$

es decir:

$$S_R(E_n^{(0)}) = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.50)$$

Los términos de orden ε proporcionan la siguiente corrección, dada por

$$E_n^{(1)} = (-1)^n \frac{\hbar}{T_R} e^{-S_I(E_n^{(0)})/\hbar}, \quad (4.51)$$

mientras que a partir de la igualdad de términos de orden ε^2 se obtiene

$$E_n^{(2)} = -\frac{\hbar}{2T_R^2} \left(\frac{\hbar}{T_R} \frac{\partial T_R}{\partial E} - 2T_I \right) e^{-2S_I(E_n^{(0)})/\hbar} - i\frac{\hbar}{2T_R} e^{-2S_I(E_n^{(0)})/\hbar}.$$

La comparación de estos resultados con los cuánticos se muestra en la tabla (4.1). Igual que en el caso anterior, los resultados semiclásicos son más exactos para estados alejados de la barrera de potencial, como corresponde al límite de grandes números cuánticos.

Este análisis pone de manifiesto cómo la inclusión de trayectorias complejas es necesaria no sólo para describir adecuadamente los fenómenos de *tunneling* a través de la barrera de potencial, sino para determinar de forma completa el espectro de un sistema cuántico. Aparentemente, podría pensarse que

para energías superiores a la energía de la barrera del doble pozo el espectro vendría dado por una suma sobre todas las repeticiones posibles de órbitas periódicas reales que rebotan en los puntos de retroceso clásicos. El resultado correspondería al orden cero de la aproximación perturbativa anterior, esto es, se obtendrían las autoenergías $E_n^{(0)}$ dadas por (4.50). La inclusión de trayectorias complejas corrige esta aproximación, obteniéndose un espectro aproximado dado por $E_n \simeq E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$, con $E_n^{(2)}$ y $E_n^{(2)}$ dados por (4.51) y (4.52), respectivamente.

Apéndice 1: Función de Green a tiempos cortos

La contribución de las órbitas de longitud cero a la traza del operador de Green puede obtenerse a partir de la forma del propagador semiclásico para tiempos infinitesimalmente cortos. Si en la expresión (2.78) para el propagador en la representación de Bargmann

$$(\alpha|\hat{U}(t)|\beta) \sim \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*}\right)^{-1/2} e^{i\frac{\kappa}{2} \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}_x(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \xi_\tau^* \partial \eta_\tau} d\tau} e^{\frac{1}{\hbar} \eta_t \alpha^* + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}_x(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i\xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau} \quad (4.52)$$

aproximamos la solución por su desarrollo hasta términos lineales en el tiempo:

$$\begin{aligned} \xi_t^* &\simeq \xi_0^* + \dot{\xi}_0^* \delta t \\ \eta_t &\simeq \eta_0 + \dot{\eta}_0 \delta t, \end{aligned}$$

el factor preexponencial podrá aproximarse por

$$\left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*}\right)^{-1/2} \sim \left(1 + \frac{\partial \dot{\xi}_0^*}{\partial \xi_0^*} \delta t\right)^{-1/2} \sim \left(1 + i \frac{\partial^2 \mathcal{H}_x(\xi_0^*, \eta_0)}{\partial \xi_0^* \partial \eta_0} \delta t\right)^{-1/2} \sim e^{\frac{-i}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_x(\alpha^*, \beta)}{\partial \alpha^* \partial \beta} \delta t},$$

mientras que la acción, hasta orden δt , vendrá dada por

$$\frac{1}{\hbar} (\eta_0 + \dot{\eta}_0 \delta t) \alpha^* - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_x(\alpha^*, \beta) \delta t - \frac{1}{\hbar} (\xi_0^* + \dot{\xi}_0^* \delta t) \dot{\eta}_0 \delta t \sim \frac{1}{\hbar} \alpha^* \beta - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_x(\alpha^*, \beta) \delta t,$$

donde se ha desarrollado $\mathcal{H}_x(\xi_t^*, \eta_t)$ en torno a $\mathcal{H}_x(\xi_0^*, \eta_0)$ y se han tenido en cuenta las condiciones de contorno $\xi_t^* = \alpha^*$, $\eta_0 = \beta$. (Nótese que en este caso se tiene una solución única dada por las condiciones iniciales $\eta_0 = \beta$, $\xi_0^* \simeq \alpha^* - \dot{\xi}_0^* \delta t$). Así pues, para tiempos cortos el propagador podrá escribirse como

$$(\alpha|\hat{U}(\delta t)|\beta) \sim e^{\frac{-i}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_x(\alpha^*, \beta)}{\partial \alpha^* \partial \beta} \delta t} e^{i\frac{\kappa}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_x(\alpha^*, \beta)}{\partial \alpha^* \partial \beta} \delta t} e^{\frac{1}{\hbar} \alpha^* \beta - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_x(\alpha^*, \beta) \delta t}. \quad (4.53)$$

Teniendo en cuenta las relaciones

$$\mathcal{H}_Q(\alpha^*, \beta) = \left[1 + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^* \partial \beta} + \dots\right] \mathcal{H}_W(\alpha^*, \beta) = \left[1 + \hbar \frac{\partial^2}{\partial \alpha^* \partial \beta} + \dots\right] \mathcal{H}_P(\alpha^*, \beta),$$

puede comprobarse que la ec. (4.53) tanto para las elecciones ($x = W, \kappa = 0$), ($x = Q, \kappa = 1$) como ($x = P, \kappa = -1$), conduce al siguiente resultado para el propagador $\hat{U}(\delta t) \equiv \hat{U}_0(t)$ a tiempos infinitesimalmente cortos:

$$(\alpha|\hat{U}_0(t)|\beta) \sim e^{\frac{-i}{\hbar} \mathcal{H}_Q(\alpha^*, \beta)t} e^{\frac{1}{\hbar} \alpha^* \beta}, \quad (4.54)$$

con independencia de la ordenación utilizada (normal, antinormal o simétrica).

Este resultado corresponde a la representación en estados de Bargmann del propagador a tiempos cortos:

$$\begin{aligned} (\alpha|\hat{U}(\delta t)|\beta) &= (\alpha|e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{H}\delta t}|\beta) \sim (\alpha|\left[1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t\right]|\beta) = e^{\alpha^*\beta/\hbar} - \frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_Q(\alpha^*,\beta)\delta t e^{\alpha^*\beta/\hbar} \\ &\sim e^{\alpha^*\beta/\hbar} e^{\frac{-i}{\hbar}\mathcal{H}_Q(\alpha^*,\beta)\delta t}, \end{aligned}$$

donde se han tenido en cuenta las definiciones $\mathcal{H}_Q(\alpha^*,\beta) = (\alpha|\hat{H}|\beta)/(\alpha|\beta)$ y $(\alpha|\beta) = \exp(\alpha^*\beta/\hbar)$.

De esta forma, la traza del operador de evolución a tiempos cortos vendrá dada por

$$\text{Tr } \hat{U}_0(t) = \int_{\Gamma_{\beta,\alpha^*}} \frac{d\alpha^* d\beta}{2\pi\hbar i} (\alpha|\hat{U}_0(t)|\beta) e^{-\alpha^*\beta/\hbar} \sim \int_{\Gamma_{\alpha,\alpha^*}} \frac{d\alpha^* d\beta}{2\pi\hbar i} e^{\frac{-i}{\hbar}\mathcal{H}_Q(\alpha^*,\beta)t},$$

y la correspondiente traza del operador de Green:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{g}_0(E) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^\tau dt e^{iEt/\hbar} \text{Tr } \hat{U}_0(t) \\ &\sim \frac{1}{i\hbar} \int_0^\tau dt \int_{\Gamma_{\beta,\alpha^*}} \frac{d\alpha^* d\beta}{2\pi\hbar i} e^{\frac{i}{\hbar}[E - \mathcal{H}_Q(\alpha^*,\beta)]t}, \end{aligned}$$

donde τ es un tiempo pequeño, menor que el periodo clásico.⁷ La densidad de estados vendrá dada por la parte imaginaria de esta expresión:

$$\begin{aligned} \rho_0(E) &= \frac{-1}{\pi} \text{Im } \text{Tr } \hat{g}_0(E) \sim \frac{1}{\pi\hbar} \int_0^\tau dt \int_{\Gamma_{\beta,\alpha^*}} \frac{d\alpha^* d\beta}{2\pi\hbar i} \cos[(E - \mathcal{H}_Q(\alpha^*,\beta))t/\hbar] \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\tau}^\tau dt \int_{\Gamma_{\beta,\alpha^*}} \frac{d\alpha^* d\beta}{2\pi\hbar i} e^{\frac{i}{\hbar}[E - \mathcal{H}_Q(\alpha^*,\beta)]t} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{\Gamma_{\beta,\alpha^*}} \frac{d\alpha^* d\beta}{2\pi\hbar i} \frac{\sin[(E - \mathcal{H}_Q(\alpha^*,\beta))\tau/\hbar]}{E - \mathcal{H}_Q(\alpha^*,\beta)}. \end{aligned} \quad (4.55)$$

En el límite $\hbar \rightarrow 0$ esta función tiende a la *densidad de Thomas-Fermi* semiclassical:

$$\rho_0(E) \sim \int_{\Gamma_{\beta,\alpha^*}} \frac{d\alpha^* d\beta}{2\pi\hbar i} \delta[E - \mathcal{H}_Q(\alpha^*,\beta)] \quad (4.56)$$

para cualquier valor finito de τ .

El resultado (4.55) corresponde a llevar a cabo una convolución de la densidad de estados clásica $\rho_{cl}(E)$ con una función sinusoidal si se tiene en cuenta que esta ecuación puede escribirse como

$$\begin{aligned} \rho_0(E) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{\Gamma_{\beta,\alpha^*}} \frac{d\alpha^* d\beta}{2\pi\hbar i} e^{\frac{i}{\hbar}[E - \mathcal{H}_Q(\alpha^*,\beta)]t} F(t) \\ &= (\rho_{cl} * f)(E) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{cl}(\varepsilon) f(E - \varepsilon) d\varepsilon, \end{aligned}$$

⁷Téngase en cuenta que hemos descompuesto la traza del operador de Green como

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{g}(E) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{iEt/\hbar} \text{Tr } \hat{U}(t) \sim \frac{1}{i\hbar} \int_0^\tau dt e^{iEt/\hbar} \text{Tr } \hat{U}_0(t) + \frac{1}{i\hbar} \int_\tau^\infty dt e^{iEt/\hbar} \text{Tr } \hat{U}(t) \\ &\equiv \text{Tr } \hat{g}_0(E) + \text{Tr } \hat{g}_{osc}(E), \end{aligned}$$

con $\tau < T$, donde T es el periodo clásico.

donde $F(t)$ es una función ventana definida como

$$F(t) = \begin{cases} 1, & \text{si } \tau \leq t \leq \tau \\ 0, & \text{en otro caso} \end{cases},$$

$f(E)$ es su transformada inversa de Fourier:

$$f(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iEt/\hbar} F(t) = \frac{\sin(E\tau/\hbar)}{\pi E}$$

y la densidad de estados clásica $\rho_{cl}(E)$ viene dada por

$$\rho_{cl}(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{\Gamma_{\beta, \alpha^*}} \frac{d\alpha^* d\beta}{2\pi\hbar i} e^{\frac{i}{\hbar}[E - \mathcal{H}_Q(\alpha^*, \beta)]t} = \int_{\Gamma_{\beta, \alpha^*}} \frac{d\alpha^* d\beta}{2\pi\hbar i} \delta[E - \mathcal{H}_Q(\alpha^*, \beta)].$$

Apéndice 2: Demostración de la ec. (4.30)

La traza del operador de Green viene dada por la ec. (4.26):

$$\text{Tr } \hat{g}(E) \simeq \frac{1}{i\hbar} \sum_s \int_{\Gamma} d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0} e^{-i\pi\nu_s} e^{\frac{-1}{\hbar} \int_0^{\tau_s} \zeta_s^* \dot{\eta}_s d\tau} \quad (4.57)$$

Como se ha indicado, la integral en η puede descomponerse en una suma de integrales extendidas a tres regiones, Γ_1 , Γ_2 y Γ_b correspondientes a las órbitas periódicas que comienzan y terminan en los pozos 1 y 2 y en la barrera, respectivamente. Denotemos por S_1 , S_2 e iS_b las acciones de una oscilación de ida y vuelta a energía E en cada una de esas tres regiones.

Consideremos en primer lugar las trayectorias que comienzan bajo la barrera. Partiendo de un punto situado en la barrera y regresando a él tras haber dado todas las vueltas posibles en cada uno de los pozos se tiene la siguiente contribución:

$$-e^{-S_b/\hbar} \sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \equiv -e^{-S_b/\hbar} \Sigma_1 \Sigma_2.$$

Si en lugar de dar una vuelta en la barrera se dan dos, se tiene:

$$e^{-S_b/2\hbar} \Sigma_2 (-e^{-S_b/2\hbar}) \Sigma_1 e^{-S_b/2\hbar} \Sigma_2 (-e^{-S_b/2\hbar}) \Sigma_1 = \left[\Sigma_1 (-e^{-S_b/\hbar}) \Sigma_2 \right]^2.$$

Así pues, la contribución de las trayectorias que comienzan y terminan en la zona de la barrera de potencial vendrá dada por

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left[\Sigma_1 (-e^{-S_b/\hbar}) \Sigma_2 \right]^n = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l (-e^{-S_b/\hbar}) \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \right]^n,$$

y el correspondiente término en la traza del operador de Green (4.57) será

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left[\sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l (-e^{-S_b/\hbar}) \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \right]^n \int_{\Gamma_b} d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0}. \quad (4.58)$$

Consideremos a continuación las trayectorias que empiezan y terminan en uno de los pozos, por ejemplo, el pozo 1. Es posible realizar infinitas oscilaciones en este pozo sin pasar por la barrera, y la contribución será:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^n \equiv \sigma_1.$$

La contribución de una órbita que comienza y termina en el pozo 1 y que da una vuelta en la barrera será:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^n e^{-S_b/2\hbar} \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k (-e^{-S_b/2\hbar}) \sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l = \sigma_1 (-e^{-S_b/\hbar}) \Sigma_1 \Sigma_2.$$

Si da dos vueltas en la barrera:

$$\sigma_1 e^{-S_b/2\hbar} \Sigma_2 (-e^{-S_b/2\hbar}) \Sigma_1 e^{-S_b/2\hbar} \Sigma_2 (-e^{-S_b/2\hbar}) \Sigma_1 = \sigma_1 \left[(-e^{-S_b/\hbar}) \Sigma_1 \Sigma_2 \right]^2,$$

y en general la suma de todas las órbitas que tengan su inicio y su fin en el pozo 1 vendrá dada por

$$\sigma_1 \sum_{j=0}^{\infty} \left[(-e^{-S_b/\hbar}) \Sigma_1 \Sigma_2 \right]^j = \sum_{n=1}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^n \sum_{j=0}^{\infty} \left[(-e^{-S_b/\hbar}) \sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \right]^j.$$

La correspondiente contribución a la traza (4.57) será:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^n \sum_{j=0}^{\infty} \left[(-e^{-S_b/\hbar}) \sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \right]^j \int_{\Gamma_1} d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0}. \quad (4.59)$$

El resultado para las trayectorias que comienzan y terminan en el pozo 2 es análogo a (4.59) permutando S_1 por S_2 :

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^n \sum_{j=0}^{\infty} \left[(-e^{-S_b/\hbar}) \sum_{l=0}^{\infty} (-e^{iS_1/\hbar})^l \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iS_2/\hbar})^k \right]^j \int_{\Gamma_2} d\eta_0 \frac{1}{\dot{\eta}_0}. \quad (4.60)$$

La suma de las expresiones (4.58), (4.59) y (4.60) corresponde a la ec. (4.30).

Capítulo 5

Aproximaciones variacionales

En este capítulo se presenta una aproximación a la función de onda de un sistema cuántico obtenida mediante un procedimiento variacional, tanto en un formalismo estacionario como dependiente del tiempo. En ambos casos, a partir de un *ansatz* de estado coherente generalizado para la función de onda, será posible determinar los parámetros de los que ésta depende imponiendo una condición de extremo para cierto funcional.

En el formalismo estacionario se pretende obtener una aproximación al estado fundamental del sistema definiendo este funcional como el valor esperado del operador hamiltoniano en dicho estado. Un desarrollo asintótico de las soluciones variacionales en potencias de \hbar permitirá obtener estos parámetros en el límite semiclásico. Los resultados variacionales constituyen una optimización de los semiclásicos, e incluyen el efecto de fluctuaciones cuánticas que el límite semiclásico es incapaz de recoger, siempre y cuando estos efectos supongan correcciones pequeñas a los resultados semiclásicos.

En el formalismo dependiente del tiempo la aproximación de la función de ondas por un paquete gaussiano permite asociar al sistema cuántico un espacio de fases definido por el espacio de los parámetros de la gaussiana. La condición de extremo para el funcional de Dirac conducirá a unas ecuaciones de evolución para los parámetros que definen el centro de la gaussiana así como para los que definen su anchura. En general, estas ecuaciones diferenciales son no lineales y acopladas. En el límite semiclásico ambas evoluciones se desacoplan, y generalizando la dinámica a un espacio de fases complejo es posible obtener una expresión semiclásica para la evolución de un estado de Bargmann en términos de trayectorias complejas que cumplen unas ecuaciones de Hamilton generalizadas. Para una elección determinada de los parámetros iniciales, es posible reproducir los resultados de la *Thawed Gaussian Approximation* de Heller evaluada en términos de una trayectoria real. Puede demostrarse asimismo que las correcciones a dicha aproximación son de $O(\hbar^{1/2})$. A partir de la evolución semiclásica de un estado de Bargmann puede obtenerse una expresión integral para el operador de evolución en forma de representación de valores iniciales (IVR) que es correcta hasta $O(\hbar)$. Con esta expresión se reproduce el resultado obtenido

en el Capítulo 2 para el propagador semiclásico en la representación de Bargmann, al tiempo que se demuestra el grado de corrección de dicha aproximación. Finalmente, se discuten las diferencias entre los resultados variacionales y semiclásicos ilustrando el método con un ejemplo de un medio Kerr.

5.1. Método variacional estacionario

Para un sistema cuántico conservativo, es posible obtener la ecuación de Schrödinger estacionaria

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (5.1)$$

a partir de un principio variacional considerando el valor esperado del hamiltoniano,

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = E[\Psi],$$

como un funcional de la función de onda de prueba Ψ . La condición de que $\langle \Psi | \Psi \rangle$ sea constante permite redefinir el funcional como

$$\Gamma[\Psi] = \langle \Psi | (\hat{H} - E) | \Psi \rangle, \quad (5.2)$$

en el que E es considerado un multiplicador de Lagrange asociado a la condición de normalización de la función Ψ . Cuando Ψ es un autoestado de \hat{H} , esto es, cuando se satisface la ecuación de Schrödinger (5.1), el funcional $\Gamma[\Psi]$ es estacionario. Efectivamente, una variación infinitesimal $\delta\Psi$ en el vector de estado induce un cambio en el funcional $\Gamma[\Psi]$ dado por

$$\begin{aligned} \delta\Gamma[\Psi] &= \Gamma[\Psi + \delta\Psi] - \Gamma[\Psi] \\ &= \langle \Psi + \delta\Psi | \hat{H} | \Psi + \delta\Psi \rangle - E \langle \Psi + \delta\Psi | \Psi + \delta\Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle + E \langle \Psi | \Psi \rangle \\ &= \langle \delta\Psi | (\hat{H} - E) | \Psi \rangle + \langle \Psi | (\hat{H} - E) | \delta\Psi \rangle + O(\delta\Psi^2). \end{aligned} \quad (5.3)$$

Despreciando los términos de orden superior en $\delta\Psi$, la ec. (5.3) indica que el funcional $\Gamma[\Psi]$ es estacionario, es decir, $\delta\Gamma[\Psi] = 0$, para cualquier variación arbitraria $\delta\Psi$ cuando $|\Psi\rangle$ es un autoestado de \hat{H} con autovalor E .

Consideremos un sistema cuántico genérico descrito por un operador hamiltoniano que por conveniencia escribimos con ordenación normal

$$\hat{H}(a^\dagger, a) = \sum_{i,j} c_{ij} \hbar^{(i+j)/2} a^{\dagger i} a^j. \quad (5.4)$$

Una primera aproximación al estado fundamental *óptimo* $|\phi_0\rangle$ de este sistema consiste en construirlo permitiendo desplazamientos y deformaciones del estado de vacío $|0\rangle$, esto es, aproximarlos como un estado coherente generalizado

$$|\phi_0\rangle = \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(\mathbf{v}, \mathbf{v}^*) |0\rangle, \quad (5.5)$$

donde $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$ y $\hat{S}(v, v^*)$ son los operadores unitarios de desplazamiento y de *squeezing* definidos por

$$\begin{aligned}\hat{D}(\alpha, \alpha^*) &= e^{\hbar^{-1/2}(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)} \\ \hat{S}(v, v^*) &= e^{\frac{1}{2}(v a^{\dagger 2} - v^* a^2)}.\end{aligned}$$

Con esta función de prueba, el funcional (5.2) se escribe

$$\begin{aligned}\Gamma[\phi_0] &= \langle \phi_0 | (\hat{H}(a^\dagger, a) - E) | \phi_0 \rangle \\ &= \langle 0 | \hat{S}^\dagger(v, v^*) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) \hat{H}(a^\dagger, a) \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(v, v^*) | 0 \rangle - E,\end{aligned}\quad (5.6)$$

donde hemos tenido en cuenta que los operadores $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$ y $\hat{S}(v, v^*)$ son unitarios. Puesto que conocemos la acción que tienen estos operadores sobre a y a^\dagger , dada por las ecs. (1.13) y (1.28), podemos aplicar estas transformaciones a cada uno de los términos del operador $\hat{H}(a, a^\dagger)$ en (5.6). De esta forma, el hamiltoniano transformado $\hat{H}' \equiv \hat{S}^\dagger \hat{D}^\dagger \hat{H} \hat{D} \hat{S}$ puede escribirse como un desarrollo en potencias de a^\dagger y a cuyos coeficientes dependen de los parámetros de las transformaciones $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$ y $\hat{S}(v, v^*)$ utilizadas. Haciendo uso sucesivas veces de la relación de conmutación $[a, a^\dagger] = 1$, podremos reordenar el resultado en forma normal, obteniendo finalmente

$$\begin{aligned}\hat{H}'(\alpha, \alpha^*, v, v^*; a^\dagger, a) &\equiv \hat{S}^\dagger(v, v^*) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) \hat{H}(a^\dagger, a) \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(v, v^*) \\ &= H'_0(\alpha, \alpha^*, v, v^*) + H'_{10}(\alpha, \alpha^*, v, v^*) a^\dagger + H'_{01}(\alpha, \alpha^*, v, v^*) a \\ &+ H'_{20}(\alpha, \alpha^*, v, v^*) a^{\dagger 2} + H'_{11}(\alpha, \alpha^*, v, v^*) a^\dagger a + H'_{02}(\alpha, \alpha^*, v, v^*) a^2 + \dots \\ &\equiv \sum_{i,j} H'_{ij}(\alpha, \alpha^*, v, v^*) a^{\dagger i} a^j.\end{aligned}\quad (5.7)$$

(Hemos denotado el término independiente de este desarrollo como H'_0 en lugar de H'_{00} para simplificar la notación). De esta forma, el valor esperado en el funcional (5.6) se reduce al término independiente del desarrollo (5.7):

$$\Gamma[\phi_0] = \langle 0 | \hat{H}'(\alpha, \alpha^*, v, v^*; a^\dagger, a) | 0 \rangle - E = H'_0(\alpha, \alpha^*, v, v^*) - E.\quad (5.8)$$

La definición del estado de prueba ϕ_0 según (5.5) permite identificar las variaciones $\delta\phi_0$ en términos de variaciones infinitesimales $\delta\alpha$, $\delta\alpha^*$, δv , δv^* de los parámetros del desplazamiento y el *squeezing*, de forma que, hasta infinitésimos de primer orden, la variación en el funcional vendrá dada por

$$\begin{aligned}\delta\Gamma[\phi_0] &= \frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, v, v^*)}{\partial \alpha} \delta\alpha + \frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, v, v^*)}{\partial \alpha^*} \delta\alpha^* \\ &+ \frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, v, v^*)}{\partial v} \delta v + \frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, v, v^*)}{\partial v^*} \delta v^* + \dots.\end{aligned}\quad (5.9)$$

La condición de extremo $\delta\Gamma[\phi_0] = 0$ se reduce a las condiciones

$$\frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, v, v^*)}{\partial \alpha} = 0 \quad (5.10a)$$

$$\frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, v, v^*)}{\partial \alpha^*} = 0 \quad (5.10b)$$

$$\frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, v, v^*)}{\partial v} = 0 \quad (5.10c)$$

$$\frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, v, v^*)}{\partial v^*} = 0. \quad (5.10d)$$

Es posible llevar a cabo una transformación de las variables complejas del desplazamiento (α, α^*) y del *squeezing* (v, v^*) a las variables reales (q, p) y (r, ϕ) escribiendo α en forma cartesiana y ξ en forma polar, esto es

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) \quad ; \quad \alpha^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip) \quad (5.11a)$$

$$v = r e^{i\phi} \quad ; \quad v^* = r e^{-i\phi}. \quad (5.11b)$$

Teniendo en cuenta las relaciones

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial q} - i \frac{\partial}{\partial p} \right) \quad ; \quad \frac{\partial}{\partial \alpha^*} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial q} + i \frac{\partial}{\partial p} \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial v} = e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad ; \quad \frac{\partial}{\partial v^*} = e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

las condiciones variacionales (5.10) con respecto a los nuevos parámetros de desplazamiento (q, p) y de *squeezing* (r, ϕ) se escriben

$$\frac{\partial H'_0(q, p, r, \phi)}{\partial q} = 0 \quad (5.12a)$$

$$\frac{\partial H'_0(q, p, r, \phi)}{\partial p} = 0 \quad (5.12b)$$

$$\frac{\partial H'_0(q, p, r, \phi)}{\partial r} = 0 \quad (5.12c)$$

$$\frac{\partial H'_0(q, p, r, \phi)}{\partial \phi} = 0. \quad (5.12d)$$

Otra elección posible de las variables de *squeezing*, más útil para el uso del álgebra matricial asociada a los estados coherentes, viene dada por

$$s = v \frac{\sinh \sqrt{vv^*}}{\sqrt{vv^*}} \quad (5.13a)$$

$$s^* = v^* \frac{\sinh \sqrt{vv^*}}{\sqrt{vv^*}} \quad (5.13b)$$

$$c = \cosh \sqrt{vv^*}, \quad (5.13c)$$

con la condición de ligadura

$$c = \sqrt{1 + ss^*}. \quad (5.14)$$

La existencia de esta ligadura invita a introducir en el funcional (5.8) un multiplicador de Lagrange λ en la forma

$$\Gamma[\phi_0] = H'_0 - E - \lambda(c^2 - ss^*), \quad (5.15)$$

con lo que las condiciones de extremo para este nuevo funcional vienen dadas por

$$\begin{aligned} \frac{\partial H'_0}{\partial s} + \lambda s^* &= 0 \\ \frac{\partial H'_0}{\partial s^*} + \lambda s &= 0 \\ \frac{\partial H'_0}{\partial c} - 2\lambda c &= 0. \end{aligned}$$

A partir de la última ecuación puede obtenerse la expresión del multiplicador λ :

$$\lambda = \frac{1}{2c} \frac{\partial H'_0}{\partial c},$$

de forma que las ecuaciones variacionales (5.10c-5.10d) se escriben

$$\frac{\partial H'_0}{\partial s} + \frac{s^*}{2c} \frac{\partial H'_0}{\partial c} = 0 \quad (5.16a)$$

$$\frac{\partial H'_0}{\partial s^*} + \frac{s}{2c} \frac{\partial H'_0}{\partial c} = 0. \quad (5.16b)$$

Es posible obtener una expresión general para el término independiente $H'_0(\alpha, \alpha^*, v, v^*)$ del hamiltoniano transformado (5.7) teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned} H'_0(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c) &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \langle 0 | \hat{S}^\dagger(s, s^*) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) a^{\dagger n} a^m \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(s, s^*) | 0 \rangle \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \langle 0 | \hat{S}^\dagger(s, s^*) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) e^{\sigma a^\dagger} e^{\sigma^* a} \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(s, s^*) | 0 \rangle \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[e^{ss^* \sigma \sigma^* + \frac{1}{2} s^* c \sigma^2 + \frac{1}{2} s c \sigma^{*2} + \hbar^{-1/2} \alpha^* \sigma + \hbar^{-1/2} \alpha \sigma^*} \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &\equiv \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} [g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

donde hemos definido la *función generatriz* $g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*)$ como

$$g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*) \equiv e^{ss^* \sigma \sigma^* + \frac{1}{2} s^* c \sigma^2 + \frac{1}{2} s c \sigma^{*2} + \hbar^{-1/2} \alpha^* \sigma + \hbar^{-1/2} \alpha \sigma^*}. \quad (5.18)$$

Las derivadas de H'_0 pueden evaluarse en términos de esta función generatriz ¹ como

$$\begin{aligned}\frac{\partial H'_0}{\partial \alpha} &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[\hbar^{-1/2} \sigma^* g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*) \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m-1)/2} m \frac{\partial^{n+m-1}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m-1}} [g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0}\end{aligned}\quad (5.19a)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial H'_0}{\partial \alpha^*} &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[\hbar^{-1/2} \sigma g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*) \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m-1)/2} n \frac{\partial^{n+m-1}}{\partial \sigma^{n-1} \partial \sigma^{*m}} [g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0}\end{aligned}\quad (5.19b)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial H'_0}{\partial s} &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[(s^* \sigma \sigma^* + \frac{c}{2} \sigma^{*2}) g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*) \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \left\{ n m s^* \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^{n-1} \partial \sigma^{*m-1}} [g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right. \\ &\quad \left. + m(m-1) \frac{c}{2} \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m-2}} [g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right\}\end{aligned}\quad (5.19c)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial H'_0}{\partial s^*} &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[(s \sigma \sigma^* + \frac{c_t}{2} \sigma^2) g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*) \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \left\{ n m s \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^{n-1} \partial \sigma^{*m-1}} [g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right. \\ &\quad \left. + n(n-1) \frac{c}{2} \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^{n-2} \partial \sigma^*} [g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right\}\end{aligned}\quad (5.19d)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial H'_0}{\partial c} &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[(\frac{1}{2} s^* \sigma^2 + \frac{1}{2} s \sigma^{*2}) g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*) \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \left\{ n(n-1) \frac{s^*}{2} \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^{n-2} \partial \sigma^{*m}} [g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right. \\ &\quad \left. + m(m-1) \frac{s}{2} \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m-2}} [g(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right\}.\end{aligned}\quad (5.19e)$$

Es interesante comprobar que las condiciones de extremo (5.10) son equivalentes a las condiciones:

$$H'_{10}(\alpha, \alpha^*, v, v^*) = 0 \quad (5.20a)$$

$$H'_{01}(\alpha, \alpha^*, v, v^*) = 0 \quad (5.20b)$$

$$H'_{20}(\alpha, \alpha^*, v, v^*) = 0 \quad (5.20c)$$

$$H'_{02}(\alpha, \alpha^*, v, v^*) = 0, \quad (5.20d)$$

¹Para otra elección de los parámetros de *squeezing* como la dada por (5.11b) es posible definir una función generatriz equivalente, con la forma

$$g(\alpha, \alpha^*, r, \chi; \sigma, \sigma^*) = e^{\sigma \sigma^* \sinh^2 r + \frac{1}{4} (\sigma^2 e^{-i\chi} + \sigma^{*2} e^{i\chi}) + \hbar^{-1/2} \alpha^* \sigma + \hbar^{-1/2} \alpha \sigma^*}.$$

donde $H'_{ij}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*)$ son los coeficientes del desarrollo (5.7). Efectivamente, una variación infinitesimal $\delta\alpha$, $\delta\alpha^*$, $\delta\nu$ y $\delta\nu^*$ de los parámetros del desplazamiento y el *squeezing* producirá una variación en el funcional (5.6) que, hasta primer orden, podemos escribir como

$$\delta\Gamma[\phi_0] \simeq \langle 0|\hat{H}'_S(\delta\alpha, \delta\alpha^*, \delta\nu, \delta\nu^*; a^\dagger, a)|0\rangle - \langle 0|\hat{H}'(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*; a^\dagger, a)|0\rangle, \quad (5.21)$$

donde hemos definido

$$\begin{aligned} \hat{H}'_S(\delta\alpha, \delta\alpha^*, \delta\nu, \delta\nu^*; a^\dagger, a) &\equiv \hat{S}^\dagger(\delta\nu, \delta\nu^*)\hat{D}^\dagger(\delta\alpha, \delta\alpha^*)\hat{H}'(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*; a^\dagger, a)\hat{D}(\delta\alpha, \delta\alpha^*)\hat{S}(\delta\nu, \delta\nu^*) \\ &= e^{\frac{1}{2}(\delta\nu^* a^2 - \delta\nu a^{\dagger 2})} e^{\hbar^{-1/2}(\delta\alpha^* a - \delta\alpha a^\dagger)} \hat{H}' e^{\hbar^{-1/2}(\delta\alpha a^\dagger - \delta\alpha^* a)} e^{\frac{1}{2}(\delta\nu a^{\dagger 2} - \delta\nu^* a^2)} \\ &\simeq \left(\hat{I} + \frac{1}{2}\delta\nu^* a^2 - \frac{1}{2}\delta\nu a^{\dagger 2} \right) \left(\hat{I} + \hbar^{-1/2}\delta\alpha^* a - \hbar^{-1/2}\delta\alpha a^\dagger \right) \hat{H}' \\ &\times \left(\hat{I} + \hbar^{-1/2}\delta\alpha a^\dagger - \hbar^{-1/2}\delta\alpha^* a \right) \left(\hat{I} + \frac{1}{2}\delta\nu a^{\dagger 2} - \frac{1}{2}\delta\nu^* a^2 \right) \\ &\simeq \hat{H}' - \hbar^{-1/2}\delta\alpha [a^\dagger, \hat{H}'] + \hbar^{-1/2}\delta\alpha^* [a, \hat{H}'] - \frac{1}{2}\delta\nu [a^{\dagger 2}, \hat{H}'] + \frac{1}{2}\delta\nu^* [a^2, \hat{H}'] + O(\delta\alpha^2, \delta\nu^2). \end{aligned} \quad (5.22)$$

El álgebra de los estados coherentes permite obtener la forma genérica de los conmutadores que intervienen en (5.22) teniendo en cuenta la expresión para el operador \hat{H}' dada por la ec. (5.7):

$$\begin{aligned} [a^\dagger, \hat{H}'] &= -\frac{\partial \hat{H}'}{\partial a} = -\sum_{i,j} H'_{ij}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) j a^{\dagger i} a^{j-1} \\ &= -H'_{01} - H'_{11} a^\dagger - 2H'_{02} a - H'_{21} a^{\dagger 2} - 2H'_{12} a^\dagger a - 3H'_{03} a^2 - \dots \\ [a, \hat{H}'] &= \frac{\partial \hat{H}'}{\partial a^\dagger} = \sum_{i,j} H'_{ij}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) i a^{\dagger i-1} a^j \\ &= H'_{10} + 2H'_{20} a^\dagger + H'_{11} a + 3H'_{30} a^{\dagger 2} + 2H'_{21} a^\dagger a + H'_{12} a^2 + \dots \\ [a^{\dagger 2}, \hat{H}'] &= -\sum_{i,j} H'_{ij}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) (2j a^{\dagger i+1} a^{j-1} + j(j-1) a^{\dagger i} a^{j-2}) \\ &= -2H'_{02} - 2(H'_{01} + H'_{12}) a^\dagger - 6H'_{03} a \\ &\quad - 2(H'_{11} + H'_{22}) a^{\dagger 2} - 2(2H'_{02} + 3H'_{13}) a^\dagger a - 12H'_{04} a^2 - \dots \\ [a^2, \hat{H}'] &= \sum_{i,j} H'_{ij}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) (2i a^{\dagger i-1} a^{j+1} + i(i-1) a^{\dagger i-2} a^j) \\ &= 2H'_{20} + 6H'_{30} a^\dagger + 2(H'_{10} + H'_{21}) a \\ &\quad + 12H'_{40} a^{\dagger 2} + 2(2H'_{20} + 3H'_{31}) a^\dagger a + 2((H'_{11} + H'_{22}) a^2 + \dots \end{aligned}$$

Al tomar el valor esperado en el vacío de la expresión para $\hat{H}'_S(\delta\alpha, \delta\alpha^*, \delta\nu, \delta\nu^*; a^\dagger, a)$, la ordenación normal hace que los únicos términos que sobrevivan sean los términos independientes de estos commu-

tadores:

$$\langle 0|[a^\dagger, \hat{H}']|0\rangle = -H'_{01}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) \quad (5.23a)$$

$$\langle 0|[a, \hat{H}']|0\rangle = H'_{10}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) \quad (5.23b)$$

$$\langle 0|[a^{\dagger 2}, \hat{H}']|0\rangle = -2H'_{02}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) \quad (5.23c)$$

$$\langle 0|[a^2, \hat{H}']|0\rangle = 2H'_{20}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*), \quad (5.23d)$$

con lo que la variación (5.21) vendrá dada por

$$\begin{aligned} \delta\Gamma[\phi_0] &= H'_0(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) + \hbar^{-1/2} \delta\alpha H'_{01}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) + \hbar^{-1/2} \delta\alpha^* H'_{10}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) \\ &+ \delta\nu H'_{02}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) + \delta\nu^* H'_{20}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*) + \dots - H'_0(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Esta expresión permite identificar

$$\frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*)}{\partial \alpha} = H'_{01}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*)$$

$$\frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*)}{\partial \alpha^*} = H'_{10}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*)$$

$$\frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*)}{\partial \nu} = H'_{02}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*)$$

$$\frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*)}{\partial \nu^*} = H'_{20}(\alpha, \alpha^*, \nu, \nu^*),$$

con lo que queda demostrada la equivalencia entre el conjunto de condiciones (5.10) y (5.20). Es importante notar que *esta equivalencia es válida sólo si el estado que se optimiza es el nivel fundamental del sistema*. En general, la optimización de un nivel excitado requiere un formalismo análogo, pero el estado de prueba deberá construirse en términos de unos operadores diferentes a \hat{D} y \hat{S} . Volveremos a este punto más adelante.

Esta equivalencia permite relacionar el problema de optimización del estado fundamental del sistema con la suposición de cierta *estructura* para el hamiltoniano transformado \hat{H}' , ya que al eliminar los términos lineales y cuadráticos en a^\dagger y a este operador describe un oscilador armónico perturbado de la forma

$$\hat{H}' = H'_0 + H'_{11} a^\dagger a + \sum_{i+j \geq 3} H'_{ij} a^{\dagger i} a^j \equiv \hat{H}'_{arm} + \hat{W}, \quad (5.25)$$

donde la perturbación \hat{W} incluye términos como mínimo de orden cúbico en a^\dagger y a . De esta manera, escribir el estado fundamental del sistema en términos de un desplazamiento y una deformación del estado de vacío $|\phi_0\rangle \simeq \hat{D}(\alpha, \alpha^*)\hat{S}(\nu, \nu^*)|0\rangle$ corresponde a aproximar $\hat{H}' \simeq \hat{H}'_{arm}$. Las correcciones a esta aproximación pueden determinarse por medio de la teoría de perturbaciones cuántica estacionaria estándar, analizando el efecto que tienen los términos cúbicos, cuárticos, etc. de \hat{W} sobre la aproximación

armónica. El método variacional proporciona una elección de este oscilador armónico optimizada respecto al que se obtiene en el límite semiclásico, como veremos a continuación.

Por otra parte, desde un punto de vista práctico, la equivalencia entre las condiciones de extremo (5.10) y (5.20) tiene la ventaja de proporcionar un algoritmo sencillo para calcular los valores de $\{\alpha, \alpha^*, v, v^*\}$ que optimizan el estado fundamental: partiendo del hamiltoniano original \hat{H} , se aplican las transformaciones de desplazamiento y de *squeezing*, se reordena el resultado en forma normal y se determinan los valores de los parámetros de estas transformaciones que anulan los términos lineales y cuadráticos en a^\dagger y a del hamiltoniano transformado \hat{H}' .

5.1.1. Límite semiclásico

El método variacional contiene como un caso extremo el límite semiclásico $\hbar \rightarrow 0$. Los términos dominantes en \hbar de las derivadas (5.19) vienen dados por

$$\frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c)}{\partial \alpha} \simeq \sum_{n,m} c_{nm} m \alpha^{*n} \alpha^{m-1} \equiv \frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha} \quad (5.26a)$$

$$\frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c)}{\partial \alpha^*} \simeq \sum_{n,m} c_{nm} n \alpha^{*n-1} \alpha^m \equiv \frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^*} \quad (5.26b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c)}{\partial s} &\simeq \hbar \sum_{n,m} c_{nm} \left[nms^* \alpha^{*n-1} \alpha^{m-1} + m(m-1) \frac{c}{2} \alpha^{*n} \alpha^{m-2} \right] \\ &\equiv \hbar \left[s^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + \frac{c}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} \right] \end{aligned} \quad (5.26c)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c)}{\partial s^*} &\simeq \hbar \sum_{n,m} c_{nm} \left[nms \alpha^{*n-1} \alpha^{m-1} + n(n-1) \frac{c}{2} \alpha^{*n-2} \alpha^m \right] \\ &\equiv \hbar \left[s \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + \frac{c}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} \right] \end{aligned} \quad (5.26d)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H'_0(\alpha, \alpha^*, s, s^*, c)}{\partial c} &\simeq \hbar \sum_{n,m} c_{nm} \left[n(n-1) \frac{s^*}{2} \alpha^{*n-2} \alpha^m + m(m-1) \frac{s}{2} \alpha^{*n} \alpha^{m-2} \right] \\ &\equiv \hbar \left[\frac{s^*}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} + \frac{s}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} \right], \end{aligned} \quad (5.26e)$$

donde

$$\mathcal{H}(\alpha^*, \alpha) \equiv \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} \alpha^m \quad (5.27)$$

es una función clásica (la función hamiltoniana clásica) correspondiente al orden más bajo en el desarrollo en \hbar de H'_0 . Puesto que hemos considerado operadores hamiltonianos escritos en ordenación normal, esta función corresponde a la forma Q del hamiltoniano, $\mathcal{H}_Q(\alpha^*, \alpha) = \langle \alpha | \hat{H}(a^\dagger, a) | \alpha \rangle$. Por lo tanto, en el

límite $\hbar \rightarrow 0$ las condiciones variacionales (5.10) vienen dadas por

$$\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^*} = 0 \quad (5.28a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha} = 0 \quad (5.28b)$$

$$\left(\frac{c}{2} + \frac{ss^*}{4c}\right) \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} + s^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + \frac{s^{*2}}{4c} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} = 0 \quad (5.28c)$$

$$\frac{s^2}{4c} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} + s \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + \left(\frac{c}{2} + \frac{ss^*}{4c}\right) \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} = 0. \quad (5.28d)$$

Las dos primeras ecuaciones indican que los valores óptimos del desplazamiento en la aproximación semiclásica corresponden a las *configuraciones de equilibrio clásicas*. De esta manera, considerando el desarrollo de Maclaurin

$$\begin{aligned} \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) \hat{H}(a^\dagger, a) \hat{D}(\alpha, \alpha^*) &= \hat{H}(a^\dagger + \hbar^{-1/2} \alpha^*, a + \hbar^{-1/2} \alpha) \\ &= \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha) - \kappa \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + \hbar^{1/2} \frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^*} a^\dagger + \hbar^{1/2} \frac{\partial \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha} a \\ &+ \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} a^{\dagger 2} + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} a^2 + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} (aa^\dagger + a^\dagger a) + O(\hbar^{3/2}), \end{aligned} \quad (5.29)$$

donde κ toma el valor 1, 0 ó -1 para ordenaciones normal, simétrica o antinormal, respectivamente, es inmediato comprobar que anular los términos lineales en a^\dagger y a corresponde a elegir una transformación de desplazamiento tal que $\hat{H}'_D \equiv \hat{D}^\dagger \hat{H} \hat{D}$ corresponda al desarrollo del hamiltoniano en torno a las posiciones de equilibrio clásicas $\partial_{\alpha^*} \mathcal{H} = \partial_{\alpha} \mathcal{H} = 0$ [ecs. (5.28a-5.28b)]. Así, se tiene:

$$\begin{aligned} \hat{H}'_D &\equiv \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) \hat{H}(a^\dagger, a) \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \\ &= \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha) - \kappa \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} \\ &+ \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} a^{\dagger 2} + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} a^2 + \hbar \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) + O(\hbar^{3/2}) \\ &\equiv \hat{H}'_D{}^a + O(\hbar^{3/2}). \end{aligned} \quad (5.30)$$

$\hat{H}'_D{}^a$ corresponde al hamiltoniano de un oscilador armónico para un estado *squeezed*, y los términos de orden $\hbar^{3/2}$ son considerados una perturbación. Puede aplicarse una transformación de *squeezing* \hat{S} para

obtener la frecuencia de este oscilador. De esta forma:

$$\begin{aligned}
\hat{S}^\dagger(s, s^*) \hat{H}_D \hat{S}(s, s^*) &= \hat{S}^\dagger(s, s^*) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) \hat{H}(a^\dagger, a) \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(s, s^*) \\
&= \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha) + \frac{\hbar}{2} \left[(1 + 2ss^* - \kappa) \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + cs \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} + cs^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} \right] \\
&+ \frac{\hbar}{2} \left[s^2 \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} + c^2 \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} + 2cs \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} \right] a^{\dagger 2} \\
&+ \frac{\hbar}{2} \left[c^2 \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} + s^{*2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} + 2cs^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} \right] a^2 \\
&+ \hbar \left[cs \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} + cs^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} + (1 + 2ss^*) \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} \right] a^\dagger a + O(\hbar^{3/2}). \quad (5.31)
\end{aligned}$$

Los parámetros (s, s^*) (así como $c = \sqrt{1 + ss^*}$) de esta transformación deben ser tales que anulen los términos cuadráticos del hamiltoniano transformado. Es posible demostrar que el sistema de ecuaciones que se obtiene al igualar a cero los términos en $a^{\dagger 2}$ y en a^2 en (5.31) es equivalente al sistema de ecuaciones (5.28c-5.28d).² Para esta elección de los parámetros del desplazamiento y del *squeezing* se tiene entonces el siguiente hamiltoniano transformado:

$$\begin{aligned}
\hat{S}^\dagger(s, s^*) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) \hat{H}(a^\dagger, a) \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(s, s^*) \\
&= \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha) + \frac{\hbar}{2} \left[(1 + 2ss^* - \kappa) \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + cs \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} + cs^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} \right] \\
&+ \hbar \left[cs \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} + cs^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} + (1 + 2ss^*) \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} \right] a^\dagger a + O(\hbar^{3/2}) \\
&\equiv \mathcal{H}^{sc} + \hbar \omega^{sc} a^\dagger a + O(\hbar^{3/2}) \\
&\equiv \hat{H}_{arm}^{sc} + \hat{W}^{sc}. \quad (5.32)
\end{aligned}$$

La diferencia entre el método variacional y la aproximación semiclásica radica en la elección de esta aproximación armónica. La aproximación semiclásica considera los autoestados centrados en las configuraciones estáticas de equilibrio clásicas y con una anchura relacionada con las derivadas segundas de \mathcal{H} . La aproximación variacional optimiza este oscilador armónico de orden cero, incluyendo términos que permiten dar cuenta de fluctuaciones cuánticas que “ajustan” mejor el estado de prueba en torno a las posiciones de desplazamiento óptimas (que difieren de las configuraciones de equilibrio clásicas en términos de orden \hbar).

²Puede demostrarse que ambos sistemas de ecuaciones conducen a las relaciones

$$\begin{aligned}
s \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2} &= s^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^{*2}} \\
\frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} &= -\frac{1}{2} \left(\frac{1 + 2ss^*}{cs^*} \right) \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha)}{\partial \alpha^2}.
\end{aligned}$$

En ambos casos la teoría de perturbaciones estacionaria permitirá obtener las correcciones tanto a las autoenergías como a los autoestados de la aproximación armónica. Podemos obtener una estimación del orden de estas correcciones teniendo en cuenta que tanto \hat{W} en (5.25) como \hat{W}^{sc} en (5.32) son de orden $\hbar^{3/2}$, con lo que la corrección a los autoestados vendrá dada por

$$|\Psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{r \neq n} \frac{\langle \varphi_r | \hat{W} | \varphi_n \rangle^{sc}}{E_n^0 - E_r^0} |\varphi_r\rangle^{sc} + \dots \sim |\varphi_n\rangle + O(\hbar^{1/2}), \quad (5.33)$$

mientras que la corrección a las autoenergías será del orden

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle + \sum_{r \neq n} \frac{|\langle \varphi_r | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_r^0} + \dots \sim O(\hbar) + O(\hbar^2) + \dots \quad (5.34)$$

Estas expresiones deben restringirse en principio al caso $n = 0$, puesto que este método ha sido desarrollado para proporcionar una aproximación variacional al *estado fundamental* del sistema cuántico.

5.1.2. Transformaciones de contacto

Hemos visto que aproximar el estado fundamental de un sistema cuántico permitiendo únicamente traslaciones y deformaciones del estado de vacío mediante la aplicación, respectivamente, de los operadores de desplazamiento $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$ y de *squeezing* $\hat{S}(v, v^*)$, corresponde a anular los términos lineales y cuadráticos del hamiltoniano transformado $\hat{S}^\dagger \hat{D}^\dagger \hat{H} \hat{D} \hat{S}$. De esta forma, la optimización del valor esperado $\langle \phi_0 | \hat{H} | \phi_0 \rangle$ con un estado de prueba dado por $|\phi_0\rangle \simeq \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(v, v^*) |0\rangle$ es equivalente al estudio de un oscilador armónico con una perturbación de orden $\hbar^{3/2}$. (Por supuesto, para hamiltonianos cuadráticos esta aproximación es exacta, puesto que la transformación con \hat{D} y \hat{S} proporcionará un hamiltoniano que seguirá siendo cuadrático). Si quisiera aumentarse el grado de corrección de la aproximación armónica podría incluirse en el estado de prueba un operador unitario \hat{U}_1 definido por

$$\hat{U}_1(\gamma_1, \gamma_1^*) = e^{h^{1/2}(\gamma_1 a^{\dagger 3} - \gamma_1^* a^3)}. \quad (5.35)$$

El mismo procedimiento que condujo a la equivalencia de las condiciones variacionales (5.10) y (5.20) puede aplicarse en este caso para demostrar que el problema de optimización con $|\phi_0\rangle = \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(v, v^*) \hat{U}_1(\gamma_1, \gamma_1^*) |0\rangle$ respecto a los parámetros $\{\alpha, \alpha^*, v, v^*, \gamma_1, \gamma_1^*\}$ es equivalente a anular los términos lineales, cuadráticos (términos en $a^{\dagger 2}$ y a^2) y *cúbicos* (términos en $a^{\dagger 3}$ y a^3) del hamiltoniano transformado $\hat{U}_1^\dagger \hat{S}^\dagger \hat{D}^\dagger \hat{H} \hat{D} \hat{S} \hat{U}_1$, cuando éste se expresa en forma normal. De esta manera se produce una optimización de la aproximación armónica, puesto que las correcciones vendrán dadas en este caso por términos de orden \hbar^2 .

Es posible por tanto conseguir una aproximación al estado $|\phi_0\rangle$ cada vez más exacta incluyendo en el *ansatz* variacional una serie de transformaciones unitarias de la forma

$$|\phi_0\rangle = \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(v, v^*) \hat{U}_1(\gamma_1, \gamma_1^*) \cdots \hat{U}_n(\gamma_n, \gamma_n^*) |0\rangle, \quad (5.36)$$

donde

$$\hat{D}(\alpha, \alpha^*) = e^{\hbar^{-1/2}(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)} \quad (5.37a)$$

$$\hat{S}(v, v^*) = e^{\frac{1}{2}(v a^{\dagger 2} - v^* a^2)} \quad (5.37b)$$

$$\hat{U}_1(\gamma_1, \gamma_1^*) = e^{\hbar^{1/2}(\gamma_1 a^{\dagger 3} - \gamma_1^* a^3)} \quad (5.37c)$$

⋮

$$\hat{U}_n(\gamma_n, \gamma_n^*) = e^{\hbar^{n/2}(\gamma_n a^{\dagger n+2} - \gamma_n^* a^{n+2})}. \quad (5.37d)$$

En este caso, el funcional que se desea hacer estacionario viene dado por

$$\Gamma[\phi_0] = \langle \phi_0 | \hat{H} | \phi_0 \rangle - E \equiv \langle 0 | \hat{H}^{(n)} | 0 \rangle - E = H_0^{(n)} - E, \quad (5.38)$$

donde $H_0^{(n)}$ (denotado así en lugar de $H_{00}^{(n)}$) es el término independiente del desarrollo

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(n)} &\equiv \hat{U}_n^\dagger(\gamma_n, \gamma_n^*) \cdots \hat{U}_1^\dagger(\gamma_1, \gamma_1^*) \hat{S}^\dagger(v, v^*) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) \hat{H} \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(v, v^*) \hat{U}_1(\gamma_1, \gamma_1^*) \cdots \hat{U}_n(\gamma_n, \gamma_n^*) \\ &\equiv \hat{U}_n^\dagger(\gamma_n, \gamma_n^*) \cdots \hat{U}_1^\dagger(\gamma_1, \gamma_1^*) \hat{H}^{(0)} \hat{U}_1(\gamma_1, \gamma_1^*) \cdots \hat{U}_n(\gamma_n, \gamma_n^*) \\ &= \sum_{i,j} H_{ij}^{(n)}(\alpha, \alpha^*, v, v^*, \gamma_1, \gamma_1^*, \dots, \gamma_n, \gamma_n^*) a^{\dagger i} a^j. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Los valores óptimos de los parámetros $\{\alpha, \alpha^*, v, v^*, \gamma_1, \gamma_1^*, \dots, \gamma_n, \gamma_n^*\}$ para los que $\Gamma[\phi_0]$ es estacionario corresponden entonces a las soluciones del sistema de ecuaciones

$$\frac{\partial H_0^{(n)}(\alpha, \alpha^*, v, v^*, \gamma_1, \gamma_1^*, \dots, \gamma_n, \gamma_n^*)}{\partial \alpha} = 0 \quad (5.40a)$$

$$\frac{\partial H_0^{(n)}(\alpha, \alpha^*, v, v^*, \gamma_1, \gamma_1^*, \dots, \gamma_n, \gamma_n^*)}{\partial \alpha^*} = 0 \quad (5.40b)$$

⋮

$$\frac{\partial H_0^{(n)}(\alpha, \alpha^*, v, v^*, \gamma_1, \gamma_1^*, \dots, \gamma_n, \gamma_n^*)}{\partial \gamma_n} = 0 \quad (5.40c)$$

$$\frac{\partial H_0^{(n)}(\alpha, \alpha^*, v, v^*, \gamma_1, \gamma_1^*, \dots, \gamma_n, \gamma_n^*)}{\partial \gamma_n^*} = 0. \quad (5.40d)$$

Puede demostrarse que este sistema es equivalente al siguiente:

$$H_{10}^{(n)}(\alpha, \alpha^*, v, v^*, \gamma_1, \gamma_1^*, \dots, \gamma_n, \gamma_n^*) = 0 \quad (5.41a)$$

$$H_{01}^{(n)}(\alpha, \alpha^*, v, v^*, \gamma_1, \gamma_1^*, \dots, \gamma_n, \gamma_n^*) = 0 \quad (5.41b)$$

⋮

$$H_{n+2,0}^{(n)}(\alpha, \alpha^*, v, v^*, \gamma_1, \gamma_1^*, \dots, \gamma_n, \gamma_n^*) = 0 \quad (5.41c)$$

$$H_{0,n+2}^{(n)}(\alpha, \alpha^*, v, v^*, \gamma_1, \gamma_1^*, \dots, \gamma_n, \gamma_n^*) = 0. \quad (5.41d)$$

La actuación de las dos primeras transformaciones, $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$ y $\hat{S}(v, v^*)$, sobre el operador \hat{H} puede calcularse de forma *exacta* dentro del formalismo de estados coherentes-*squeezed*, puesto que al ser lineales o cuadráticos en a^\dagger y a puede hacerse uso de la representación matricial del álgebra h_6 asociada a los operadores $\{\hat{n} + \frac{1}{2}, a^{\dagger 2}, a^2, a^\dagger, a, \hat{I}\}$. Esto permite obtener *todos* los términos del operador $\hat{H}^{(0)} \equiv \hat{H}' = \hat{S}^\dagger \hat{D}^\dagger \hat{H} \hat{D} \hat{S}$. Por el contrario, para el resto de operadores \hat{U}_k , escritos en términos de a^{k+2} y $a^{\dagger k+2}$, existe el problema de que la transformación $\hat{U}_k^{-1} \hat{H} \hat{U}_k$ no puede obtenerse de forma exacta, con lo que el funcional (5.38) que ha de hacerse extremal debe obtenerse de forma aproximada.

Una manera de obtener de forma aproximada el operador transformado $\hat{H}^{(n)}$ definido en (5.39) consiste en hacer uso del llamado *método de las transformaciones de contacto*. Este procedimiento, introducido por primera vez en la física por Van Vleck [Van29, Jor34], consiste en reemplazar el operador hamiltoniano original por otro equivalente pero más simple. Utilizamos el término “equivalente” en un sentido estricto según el cual ambos hamiltonianos están conectados por una transformación unitaria, de forma que tanto el espectro de autovalores como la normalización de las autofunciones se preservan. A continuación explicaremos de forma breve este método siguiendo el formalismo descrito en [Pap82] para el cálculo de los estados vibro-rotacionales de moléculas poliatómicas.

Supongamos que partimos de un hamiltoniano \hat{H} que puede desarrollarse en una serie convergente en potencias de un parámetro λ (que podemos considerar varía entre 0 y 1):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 + \lambda^2 \hat{H}_2 + \dots \quad (5.42)$$

Aplicando a \hat{H} una primera transformación de contacto dada por el operador \hat{U}_1 tenemos:

$$\hat{H}^{(1)} \equiv \hat{U}_1^{-1} \hat{H} \hat{U}_1 = e^{-i\lambda \hat{T}_1} \hat{H} e^{i\lambda \hat{T}_1}, \quad (5.43)$$

donde \hat{T}_1 es un operador hermítico (en principio arbitrario), y por tanto \hat{U}_1 es un operador unitario. Desarrollando la exponencial del operador \hat{U}_1 , podemos escribir

$$\hat{H}^{(1)} = \left(1 - i\lambda \hat{T}_1 - \frac{\lambda^2}{2} \hat{T}_1^2 + \dots\right) \hat{H} \left(1 + i\lambda \hat{T}_1 - \frac{\lambda^2}{2} \hat{T}_1^2 + \dots\right).$$

Sustituyendo en esta expresión el desarrollo (5.42) del hamiltoniano \hat{H} , podemos agrupar los términos con iguales potencias de λ , con lo que el operador transformado $\hat{H}^{(1)}$ se escribe

$$\hat{H}^{(1)} = \hat{H}_0^{(1)} + \lambda \hat{H}_1^{(1)} + \lambda^2 \hat{H}_2^{(1)} + \dots, \quad (5.44)$$

donde

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0^{(1)} &= \hat{H}_0 \\
\hat{H}_1^{(1)} &= \hat{H}_1 - i[\hat{T}_1, \hat{H}_0] \\
\hat{H}_2^{(1)} &= \hat{H}_2 - i[\hat{T}_1, \hat{H}_1] - \frac{1}{2}[\hat{T}_1, [\hat{T}_1, \hat{H}_0]] \\
\hat{H}_3^{(1)} &= \hat{H}_3 - i[\hat{T}_1, \hat{H}_2] - \frac{1}{2}[\hat{T}_1, [\hat{T}_1, \hat{H}_1]] + \frac{i}{3!}[\hat{T}_1, [\hat{T}_1, [\hat{T}_1, \hat{H}_0]]] \\
&\vdots \\
\hat{H}_n^{(1)} &= \hat{H}_n + \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(-i)^{n-m}}{(n-m)!} \underbrace{[\hat{T}_1, [\hat{T}_1, \dots, [\hat{T}_1, \hat{H}_m] \dots]]}_{n-m}.
\end{aligned}$$

Así pues,

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{(1)} &= \hat{H} - i\lambda[\hat{T}_1, \hat{H}] - \frac{\lambda^2}{2}[\hat{T}_1, [\hat{T}_1, \hat{H}]] + \frac{i\lambda^3}{3!}[\hat{T}_1, [\hat{T}_1, [\hat{T}_1, \hat{H}]]] + \dots \\
&= \hat{H} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^n}{n!} \underbrace{[\hat{T}_1, [\hat{T}_1, \dots, [\hat{T}_1, \hat{H}] \dots]]}_n.
\end{aligned} \tag{5.45}$$

En el contexto del cálculo de la energía de los estados vibro-rotacionales moleculares, el criterio de elección del operador hermítico \hat{T}_1 que aparece en (5.43) se establece teniendo en cuenta el hecho de que, para el hamiltoniano original (5.42), los términos de orden superior \hat{H}_1, \hat{H}_2 , etc. tienen elementos de matriz tanto diagonales como no diagonales en la representación de las autofunciones de \hat{H}_0 . Sin embargo, tras haber aplicado la transformación de contacto dada por \hat{U}_1 , se obtiene un operador hamiltoniano $\hat{H}^{(1)}$ tal que no sólo $\hat{H}_0^{(1)}$, sino también $\hat{H}_1^{(1)}$ es diagonal en la representación de autofunciones de $\hat{H}_0^{(1)}$ [ec. (5.44)].

Este procedimiento puede repetirse aplicando una segunda transformación de contacto sobre $\hat{H}^{(1)}$:

$$\hat{H}^{(2)} \equiv \hat{U}_2^{-1} \hat{H}^{(1)} \hat{U}_2 \equiv e^{-i\lambda^2 \hat{T}_2} \hat{H}^{(1)} e^{i\lambda^2 \hat{T}_2} = e^{-i\lambda^2 \hat{T}_2} e^{-i\lambda \hat{T}_1} \hat{H} e^{i\lambda \hat{T}_1} e^{i\lambda^2 \hat{T}_2}. \tag{5.46}$$

Desarrollando \hat{U}_2 en potencias de λ y teniendo en cuenta el desarrollo (5.45) para $\hat{H}^{(1)}$, se tiene

$$\hat{H}^{(2)} = \hat{H}_0^{(2)} + \lambda \hat{H}_1^{(2)} + \lambda^2 \hat{H}_2^{(2)} + \dots, \tag{5.47}$$

donde los primeros términos de este desarrollo vienen dados por

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0^{(2)} &= \hat{H}_0 \\
\hat{H}_1^{(2)} &= \hat{H}_1^{(1)} \\
\hat{H}_2^{(2)} &= \hat{H}_2^{(1)} - i[\hat{T}_2, \hat{H}_0] \\
\hat{H}_3^{(2)} &= \hat{H}_3^{(1)} - i[\hat{T}_2, \hat{H}_1^{(1)}] \\
\hat{H}_4^{(2)} &= \hat{H}_4^{(1)} - i[\hat{T}_2, \hat{H}_1^{(2)}] - \frac{1}{2}[\hat{T}_2, [\hat{T}_2, \hat{H}_0]] \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Vemos que, con esta segunda transformación, $\hat{H}_0^{(2)} + \lambda\hat{H}_1^{(2)} + \lambda^2\hat{H}_2^{(2)} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1^{(1)} + \lambda^2\hat{H}_2^{(2)}$ es ahora diagonal en la representación que diagonaliza $\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1^{(1)}$.

Todas estas sucesivas transformaciones de contacto pueden conseguirse aplicando una única transformación \hat{U} dada por el producto

$$\hat{U} = \hat{U}_1 \hat{U}_2 \cdots \hat{U}_{n-1} \hat{U}_n, \quad (5.48)$$

donde

$$\hat{U}_n = e^{i\lambda^n \hat{T}_n}. \quad (5.49)$$

De esta forma, los operadores transformados

$$\hat{H}^{(n)} = e^{-i\lambda^n \hat{T}_n} \hat{H}^{(n-1)} e^{i\lambda^n \hat{T}_n} \quad (5.50)$$

pueden obtenerse mediante la fórmula iterativa

$$\hat{H}^{(k)} = \hat{H}^{(k-1)} + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^l}{l!} \lambda^{kl+m} \underbrace{[\hat{T}_k, [\hat{T}_k, \dots, [\hat{T}_k, \hat{H}_m] \cdots]]}_l. \quad (5.51)$$

El método de las transformaciones de contacto proporciona, por tanto, un algoritmo para evaluar de forma aproximada el hamiltoniano $\hat{H}^{(n)}$ definido en (5.39). En el problema que nos ocupa, el parámetro perturbativo corresponde a $\lambda = \hbar^{1/2}$, y el operador \hat{U}_n en (5.49) se escribe como (5.37d):

$$\hat{U}_n = e^{\lambda^n \hat{t}_n}, \quad (5.52)$$

donde

$$\hat{t}_n \equiv \gamma_n a^{\dagger n+2} - \gamma_n^* a^{n+2} \quad (5.53)$$

es un operador tal que $-i\hat{t}_n \equiv \hat{T}_n$ es hermítico.³

Como se ha mencionado, en el contexto del cálculo de los estados roto-vibracionales de moléculas poliatómicas el criterio de elección de los operadores hermíticos \hat{T}_n se basa en conseguir que a medida que van aplicándose las sucesivas transformaciones, se vayan obteniendo operadores que son diagonales hasta órdenes en λ cada vez mayores. En nuestro caso, la elección de los parámetros γ_n, γ_n^* que intervienen en los operadores \hat{t}_n se basa en la exigencia de *estabilidad variacional*. Esto es, los parámetros $\gamma_1, \gamma_1^*, \dots, \gamma_n, \gamma_n^*$ de las sucesivas transformaciones $\hat{U}_1, \dots, \hat{U}_n$ (además de los parámetros α, α^*, ν y ν^* de las transformaciones \hat{D} y \hat{S}), deben ser tales que se anulen los términos lineales, cuadráticos, cúbicos, etc. en a^\dagger y a del hamiltoniano transformado $\hat{H}^{(n)}$ (entendiendo por anular los “términos cúbicos”, por ejemplo, los coeficientes de $a^{\dagger 3}$ y a^3 en el desarrollo de $\hat{H}^{(n)}$, y no los términos en $a^{\dagger 2}a$ o $a^\dagger a^2$).

En cuanto a la forma que hemos elegido para los operadores \hat{t}_n , debemos hacer notar que, puesto que los operadores \hat{U}_n han de ser unitarios, la aparición de un operador $a^{\dagger n}$ en \hat{t}_{n-2} impone necesariamente

³Efectivamente, puesto que $\hat{t}_n^\dagger = \gamma_n^* a^{n+2} - \gamma_n a^{\dagger n+2} = -\hat{t}_n$, el operador $\hat{T}_n \equiv -i\hat{t}_n$ cumple $\hat{T}_n^\dagger = i\hat{t}_n^\dagger = \hat{T}_n$, luego \hat{T}_n es hermítico.

la inclusión de a^n para mantener la normalización del estado $|\phi_0\rangle$.⁴ Por otra parte, el hecho de que estos operadores incluyan únicamente términos del tipo $a^{\dagger n}$ y a^n , y no la combinación completa de productos $a^{\dagger i} a^j$ tales que $i + j = n$, se debe a que el método variacional que hemos desarrollado optimiza el estado fundamental del sistema, con lo que la inclusión de estos términos adicionales no aportaría nuevas condiciones para la construcción variacional del estado $|\phi_0\rangle$. (El argumento es el mismo por el que no incluimos un término $a^{\dagger} a$ en el operador de *squeezing* \hat{S} . Si deseara optimizarse por ejemplo el primer nivel excitado $|\Phi_1\rangle$, la construcción variacional del mismo a partir de una serie de operadores actuando sobre $|1\rangle$ sí debería incluir un operador de la forma $\exp(\eta a^{\dagger} a)$, de manera que al establecer las condiciones de extremo para el funcional correspondiente se obtendría una condición variacional que debe cumplir el parámetro η . Esto no sucede en el caso del nivel fundamental, e incluir un operador $\exp(\eta a^{\dagger} a)$ en el estado de prueba no aporta ninguna condición variacional para el parámetro η). En general, la aproximación de cualquier autoestado del hamiltoniano podría obtenerse desarrollando un método análogo al presente. Dado que los operadores utilizados para construir el estado de prueba tendrían una estructura diferente a los operadores $\hat{U}_n(\gamma_n, \gamma_n^*)$ dados por (5.52), las condiciones de optimización respecto a los parámetros γ_n serían equivalentes a otro tipo de condiciones sobre el hamiltoniano transformado, diferentes en general a las condiciones (5.41).

El método de las transformaciones de contacto puede emplearse de dos maneras diferentes. Por una parte, puede utilizarse para conseguir una *aproximación de la función de prueba variacional*, escribiendo $|\phi_0\rangle = \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(v, v^*) \hat{U}_1(\gamma_1, \gamma_1^*) \cdots \hat{U}_n(\gamma_n, \gamma_n^*) |0\rangle$ y desarrollando en serie de potencias de $\lambda = \hbar^{1/2}$ cada uno de los operadores $\hat{U}_k(\gamma_k)$ hasta un orden determinado. (Si se mantienen los términos de cada desarrollo hasta la potencia $\lambda^m = \hbar^{m/2}$, el error cometido será del orden $\lambda^{m+1} = \hbar^{(m+1)/2}$). Para esta función de prueba, pueden determinarse de forma exacta las condiciones variacionales que determinan los parámetros estacionarios.

Por otra parte, dada la función de prueba $|\phi_0\rangle = \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(v, v^*) \hat{U}_1(\gamma_1, \gamma_1^*) \cdots \hat{U}_n(\gamma_n, \gamma_n^*) |0\rangle$, puede hacerse uso de la fórmula iterativa (5.51) para obtener una *aproximación de las condiciones variacionales*, anulando los términos lineales, cuadráticos, etc. del hamiltoniano transformado $\hat{H}^{(k)}$ hasta el orden $\lambda^m = \hbar^{m/2}$ deseado. A pesar de que el orden de las correcciones en este caso también sea $\lambda^{m+1} = \hbar^{(m+1)/2}$, el primer método proporcionará mejores resultados que el segundo, por tratarse de un procedimiento plenamente variacional.

⁴Así por ejemplo, la definición de un estado coherente $|\alpha\rangle$ requiere en principio únicamente la intervención de un operador a^{\dagger} en la forma $e^{-\alpha a^{\dagger}/2\hbar} e^{\hbar^{-1/2}\alpha a^{\dagger}} |0\rangle \equiv \hat{R}(\alpha, \alpha^*) |0\rangle$, donde el operador \hat{R} no es unitario. Si se pretende definir el estado $|\alpha\rangle$ mediante la aplicación de un operador unitario al vacío, entonces debe incluirse un término en a (que no modifica el resultado anterior, puesto que $a|0\rangle = 0$), de forma que

$$|\alpha\rangle = e^{-\alpha a^{\dagger}/2\hbar} e^{\hbar^{-1/2}\alpha a^{\dagger}} e^{-\hbar^{-1/2}\alpha^* a} |0\rangle = e^{\hbar^{-1/2}(\alpha a^{\dagger} - \alpha^* a)} |0\rangle \equiv \hat{D}(\alpha, \alpha^*) |0\rangle,$$

donde $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$ es unitario.

5.1.3. Un ejemplo: el oscilador cuártico

A continuación aplicaremos este método al caso particular del oscilador cuártico, descrito por un operador hamiltoniano de la forma

$$\hat{h} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sigma_1 A \hat{q}^2 + \sigma_2 B \hat{q}^4, \quad (5.54)$$

donde σ_i ($i = 1, 2$) pueden tomar los valores ± 1 para dar cuenta de las distintas formas del potencial, como se muestra en la Fig. (5.1), si bien centraremos nuestra atención en los casos que presentan mayor interés físico, como son el pozo simple ($\sigma_1 = \sigma_2 = +1$) y el doble pozo ($\sigma_1 = -\sigma_2 = -1$). Una aproximación al estado fundamental de este sistema vendrá dada por un *estado squeezed generalizado*, esto es:

$$|\Phi_0\rangle \simeq \hat{D}(q, p) \hat{S}(r, \phi)|0\rangle, \quad (5.55)$$

donde las variables del desplazamiento, (q, p) , y del *squeezing*, (r, ϕ) , están definidas por (5.11).

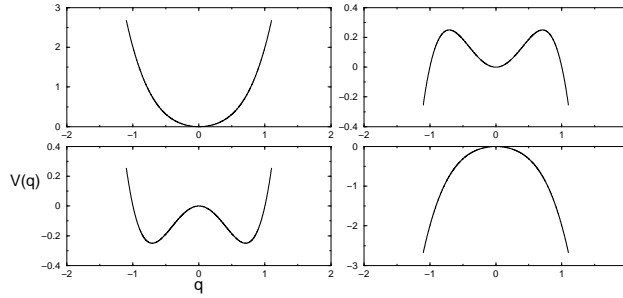


Figura 5.1: Potencial $V(q) = \sigma_1 q^2 + \sigma_2 q^4$, para las posibles combinaciones de $\sigma_{1,2} = \pm 1$.

La simetría que presenta este hamiltoniano (por ser cuadrático en \hat{p}) permite considerar deformaciones del paquete de ondas únicamente a lo largo de los ejes de las cuadraturas \hat{q} y \hat{p} . Puesto que un valor de ϕ corresponde a una rotación de $\phi/2$, [ec. (1.33)] bastará con tomar ϕ igual a 0 o a π para describir estas deformaciones. Si se elige $\phi = 0$, quedará como único parámetro de *squeezing* el factor de *squeezing* r , y el caso $\phi = \pi$ podrá incluirse permitiendo que este factor r pueda tomar valores negativos. Así pues, la simetría del problema hace posible reducir el número de parámetros necesarios para definir la deformación del paquete, quedando r como única variable de *squeezing*.

Es posible demostrar que si en el hamiltoniano (5.54) se llevan a cabo las transformaciones habituales del oscilador armónico de masa m y frecuencia ω

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) \quad ; \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a^\dagger - a) \quad (5.56a)$$

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q} + i\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p} \quad ; \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q} - i\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p}, \quad (5.56b)$$

el resultado corresponde a llevar a cabo una transformación de *squeezing* sobre el operador \hat{h} con un operador $\hat{S}(r, \phi)$ tal que $\phi = 0$ y un factor de *squeezing* r definido por

$$m\omega \equiv e^{-2r}. \quad (5.57)$$

Es decir, la frecuencia ω puede considerarse como el nuevo parámetro de *squeezing* para la transformación $\hat{S}^\dagger(\omega) \hat{h} \hat{S}(\omega)$ (la masa m interviene en (5.57) sólo como una constante). Si a continuación se aplica al hamiltoniano resultante una transformación de desplazamiento que reemplaza a^\dagger por $a^\dagger + \alpha^*/\sqrt{\hbar}$ y a por $a + \alpha/\sqrt{\hbar}$, esto es, si se desplaza el paquete gaussiano de anchura ω , es necesario que la transformación $(\alpha, \alpha^*) \rightarrow (q, p)$ incluya asimismo una dependencia con la frecuencia si se desea que las variables (q, p) identifiquen el centro del paquete en el espacio de fases:

$$q = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}(\alpha^* + \alpha) \quad ; \quad p = i\sqrt{\frac{m\omega}{2}}(\alpha^* - \alpha) \quad (5.58a)$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}q + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega}}p \quad ; \quad \alpha^* = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}q - i\frac{1}{\sqrt{2m\omega}}p. \quad (5.58b)$$

Este procedimiento, en el cual el operador \hat{h} se transforma primero por un *squeezing* y después por un desplazamiento, corresponde a aproximar el estado fundamental del sistema por un estado coherente de dos fotones (ECDF), $|\phi'_0\rangle = \hat{S}(\omega)\hat{D}(q', p')|0\rangle$ [ver ec. (1.52)], puesto que debe tenerse en cuenta el orden en el que actúan los operadores \hat{D} y \hat{S} sobre el hamiltoniano en el cálculo de $\langle\phi'_0|\hat{h}|\phi'_0\rangle = \langle 0|\hat{D}^\dagger(q', p')\hat{S}^\dagger(\omega)\hat{h}\hat{S}(\omega)\hat{D}(q', p')|0\rangle$. Sin embargo, el método variacional que hemos desarrollado utiliza una aproximación del estado fundamental dada por un estado coherente generalizado, $|\phi_0\rangle = \hat{D}(q, p)\hat{S}(\omega)|0\rangle$ [ec. (5.55)], generado mediante un procedimiento inverso al que se requiere para crear un ECDF. Puede demostrarse que las ecuaciones de transformación (5.58) corresponden a una elección de las variables (q', p') tal que los estados $|\phi_0\rangle$ y $|\phi'_0\rangle$ son equivalentes, al cumplirse la condición (1.53).⁵

⁵Efectivamente, considerando la definición de las cuadraturas \hat{q} y \hat{p} más simple, dada por

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a^\dagger + a)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a^\dagger - a),$$

la transformación de estos operadores primero con \hat{D} y después con \hat{S} viene dada, sustituyendo $\phi = 0$ en (1.36), por:

$$\hat{S}^\dagger(r)\hat{D}^\dagger(\alpha_1, \alpha_1^*)\hat{q}\hat{D}(\alpha_1, \alpha_1^*)\hat{S}(r) = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}e^r(a^\dagger + a) + \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1^* + \alpha_1) = e^r\hat{q} + q_1 \quad (5.59a)$$

$$\hat{S}^\dagger(r)\hat{D}^\dagger(\alpha_1, \alpha_1^*)\hat{p}\hat{D}(\alpha_1, \alpha_1^*)\hat{S}(r) = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}e^{-r}(a^\dagger - a) + \frac{i}{\sqrt{2}}(\alpha_1^* - \alpha_1) = e^{-r}\hat{p} + p_1, \quad (5.59b)$$

donde q_1 y p_1 están definidas por

$$\alpha_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 + ip_1) \quad (5.60a)$$

$$\alpha_1^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 - ip_1). \quad (5.60b)$$

El hamiltoniano (5.54) puede ser convenientemente escalado definiendo unos nuevos operadores \hat{Q} y \hat{P} como

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\hbar}} (Am)^{1/4} \hat{q} = \sqrt{\frac{B}{A}} \hat{q} \quad (5.66)$$

$$\hat{P} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\hbar}} (Am)^{-1/4} \hat{p} = \frac{1}{A} \sqrt{\frac{B}{m}} \hat{p}, \quad (5.67)$$

con

$$\varepsilon \equiv \frac{B\hbar}{A^{3/2}m^{1/2}}, \quad (5.68)$$

tales que cumplen la relación de conmutación

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = \frac{\varepsilon}{\hbar} [\hat{q}, \hat{p}] = i\varepsilon. \quad (5.69)$$

Es decir, una de las cuadraturas se amplifica, al tiempo que la otra se atenúa. (Las cuadraturas rotadas, denotadas por \hat{X} e \hat{Y} en (1.32), coinciden en el caso $\phi = 0$ con \hat{q} y \hat{p}). El desplazamiento total en los operadores \hat{q} y \hat{p} viene dado por las variables q_1 y p_1 , y no depende del *squeezing*. Los parámetros q_1 y p_1 (o α_1 y α_1^*) identifican por tanto la posición del centro del paquete gaussiano en el espacio de fases. El parámetro que da cuenta del *squeezing* puede ser redefinido identificando

$$m\omega \equiv e^{-2r}, \quad (5.61)$$

donde m interviene sólo como una constante y ω es la nueva variable de *squeezing*. De esta forma, las ecs. (5.59) se reescriben como

$$\hat{S}^\dagger \hat{D}^\dagger \hat{q} \hat{D} \hat{S} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) + q_1 \quad (5.62a)$$

$$\hat{S}^\dagger \hat{D}^\dagger \hat{p} \hat{D} \hat{S} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a^\dagger - a) + p_2. \quad (5.62b)$$

Análogamente, la transformación de \hat{q} y \hat{p} bajo \hat{D} y \hat{S} aplicados en orden inverso viene dada por las ecs. (1.54), que para $\phi = 0$ tienen la forma

$$\begin{aligned} \hat{D}^\dagger(\alpha_2, \alpha_2^*) \hat{S}^\dagger(r) \hat{q} \hat{S}(r) \hat{D}(\alpha_2, \alpha_2^*) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} e^r (a^\dagger + a) + \frac{1}{\sqrt{2}} e^r (\alpha_2^* + \alpha_2) \\ &\equiv \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) + \frac{q_2}{\sqrt{m\omega}} \end{aligned} \quad (5.63a)$$

$$\begin{aligned} \hat{D}^\dagger(\alpha_2, \alpha_2^*) \hat{S}^\dagger(r) \hat{p} \hat{S}(r) \hat{D}(\alpha_2, \alpha_2^*) &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} e^{-r} (a^\dagger - a) + \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-r} (\alpha_2^* - \alpha_2) \\ &\equiv i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a^\dagger - a) + p_2 \sqrt{m\omega}, \end{aligned} \quad (5.63b)$$

donde hemos hecho uso de la definición (5.61) y las variables (q_2, p_2) han sido definidas de forma análoga a (5.60). En este caso, el desplazamiento total de las cuadraturas depende no sólo de las variables de $\hat{D}(\alpha_2, \alpha_2^*)$, sino también de la nueva variable de *squeezing*, ω . Las transformaciones (5.62) y (5.63) coinciden si se cumplen las condiciones

$$\frac{q_2}{\sqrt{m\omega}} = q_1 \quad (5.64)$$

$$p_2 \sqrt{m\omega} = p_1, \quad (5.65)$$

que corresponden a la condición (1.53) para $\phi = 0$. De esta manera, puede verse que la definición de las cuadraturas cuánticas según (5.56) corresponde a transformar primero con un *squeezing* y después con un desplazamiento, pero al definir las cuadraturas clásicas como (5.58) se cumplen las condiciones (5.64) y se consigue que las variables (q, p) identifiquen el centro del paquete en el espacio de fases.

En función de estos observables puede obtenerse un nuevo operador hamiltoniano escalado dado por

$$\hat{H} \equiv \frac{B}{A^2} \hat{h} = \frac{\hat{P}^2}{2} + \sigma_1 \hat{Q}^2 + \sigma_2 \hat{Q}^4. \quad (5.70)$$

El estado fundamental de este nuevo hamiltoniano podrá aproximarse optimizando convenientemente el valor esperado de \hat{H} respecto a unos nuevos parámetros de desplazamiento y de *squeezing*. El *squeezing* podrá llevarse a cabo mediante un cambio de variables análogo a (5.56), con una frecuencia escalada Ω :

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{2\Omega}} (a^\dagger + a) \quad (5.71a)$$

$$\hat{P} = i\sqrt{\frac{\varepsilon\Omega}{2}} (a^\dagger - a). \quad (5.71b)$$

Por otra parte, la actuación del operador desplazamiento sobre a^\dagger y a puede escribirse en términos de unas nuevas variables $\tilde{\alpha}$ y $\tilde{\alpha}^*$

$$\begin{aligned} \hat{D}^\dagger(\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}^*) a^\dagger \hat{D}(\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}^*) &= a^\dagger + \frac{\tilde{\alpha}^*}{\sqrt{\varepsilon}} \\ \hat{D}^\dagger(\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}^*) a \hat{D}(\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}^*) &= a + \frac{\tilde{\alpha}}{\sqrt{\varepsilon}}, \end{aligned}$$

definidas por

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP) \\ \tilde{\alpha}^* &= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP). \end{aligned}$$

La aplicación del método variacional al operador \hat{H} [ec. (5.70)] proporcionará los valores óptimos de los parámetros $\{Q, P, \Omega\}$ que guardan la siguiente relación con los parámetros $\{q, p, \omega\}$ del hamiltoniano original \hat{h} [ec. (5.54)]:

$$\Omega = \left(\frac{m}{A}\right)^{1/2} \omega \quad (5.72a)$$

$$Q = \sqrt{\Omega} \left(\sqrt{\frac{B}{A}} q\right) = \left(\frac{B\omega}{A}\right)^{1/2} \left(\frac{m}{A}\right)^{1/4} q \quad (5.72b)$$

$$P = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \left(\frac{1}{A} \sqrt{\frac{B}{m}} p\right) = \left(\frac{B}{\omega}\right)^{1/2} \frac{1}{(Am)^{3/4}} p, \quad (5.72c)$$

donde se han puesto de manifiesto las sucesivas transformaciones de *squeezing*: una dada por Ω y otra por ω .

Así pues, a continuación formularemos el método variacional para encontrar una aproximación variacional al estado fundamental del sistema (5.70). El parámetro ε definido en (5.68), que tiene una dependencia lineal con \hbar , hace las veces de parámetro perturbativo para este nuevo problema. Esto permitirá expresar las soluciones de las ecuaciones variacionales como un desarrollo en serie de potencias de

ε , conduciendo a una aproximación semiclásica de las mismas para los órdenes dominantes en ε (o lo que es lo mismo, en \hbar).

En primer lugar, el cambio de variables (5.71) (correspondiente a una transformación de *squeezing* con una deformación controlada por Ω) permite escribir el hamiltoniano (5.70) en forma normal como

$$\begin{aligned} \hat{S}^\dagger(\Omega) \hat{H} \hat{S}(\Omega) &= \frac{\varepsilon\Omega}{4} + \frac{\sigma_1\varepsilon}{2\Omega} + \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{4\Omega^2} + \left(\frac{\varepsilon\Omega}{2} + \frac{\sigma_1\varepsilon}{\Omega} + \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{\Omega^2} \right) a^\dagger a \\ &+ \left(-\frac{\varepsilon\Omega}{4} + \frac{\sigma_1\varepsilon}{2\Omega} + \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{2\Omega^2} \right) a^{\dagger 2} + \left(-\frac{\varepsilon\Omega}{4} + \frac{\sigma_1\varepsilon}{2\Omega} + \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{2\Omega^2} \right) a^2 \\ &+ \frac{\sigma_2\varepsilon^2}{4\Omega^2} a^{\dagger 4} + \frac{\sigma_2\varepsilon^2}{\Omega^2} a^{\dagger 3} a + \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{2\Omega^2} a^{\dagger 2} a^2 + \frac{\sigma_2\varepsilon^2}{\Omega^2} a^\dagger a^3 + \frac{\sigma_2\varepsilon^2}{4\Omega^2} a^4. \end{aligned}$$

A continuación, este hamiltoniano se transforma con un operador desplazamiento reemplazando a por $a + (Q + iP)/\sqrt{2\varepsilon}$ y a^\dagger por $a^\dagger + (Q - iP)/\sqrt{2\varepsilon}$. Volviendo a reordenar el resultado en forma normal, se tiene:

$$\hat{D}^\dagger(Q, P) \hat{S}^\dagger(\Omega) \hat{H}(a^\dagger, a) \hat{S}(\Omega) \hat{D}(Q, P) \equiv \hat{H}'(Q, P, \Omega; a^\dagger, a) = \sum_{i+j=0}^{i+j=4} H'_{ij}(Q, P, \Omega) a^{\dagger i} a^j, \quad (5.73)$$

donde

$$H'_0(Q, P, \Omega) = \frac{P^2\Omega}{2} + \frac{\sigma_1}{\Omega}Q^2 + \frac{\sigma_2}{\Omega^2}Q^4 + \varepsilon \left[\frac{\Omega}{4} + \frac{\sigma_1}{2\Omega} + \frac{3\sigma_2}{\Omega^2}Q^2 \right] + \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{4\Omega^2} \quad (5.74a)$$

$$\begin{aligned} H'_{10}(Q, P, \Omega) &= H'_{01}{}^*(Q, P, \Omega) \\ &= \varepsilon^{1/2} \left[i\frac{\sqrt{2}}{2}P\Omega + \sigma_1\frac{\sqrt{2}}{\Omega}Q + \frac{2\sqrt{2}\sigma_2}{\Omega^2}Q^3 \right] + \varepsilon^{3/2}\frac{3\sqrt{2}\sigma_2}{\Omega^2}Q \end{aligned} \quad (5.74b)$$

$$H'_{20}(Q, P, \Omega) = H'_{02}(Q, P, \Omega) = \varepsilon \left[-\frac{\Omega}{4} + \frac{\sigma_1}{2\Omega} + \frac{3\sigma_2}{\Omega^2}Q^2 \right] + \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{2\Omega^2} \quad (5.74c)$$

$$H'_{11}(Q, P, \Omega) = \varepsilon \left[\frac{\Omega}{2} + \frac{\sigma_1}{\Omega} + \frac{6\sigma_2}{\Omega^2}Q^2 \right] + \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{\Omega^2} \quad (5.74d)$$

$$H'_{30}(Q, P, \Omega) = H'_{03}(Q, P, \Omega) = \varepsilon^{3/2}\frac{\sqrt{2}\sigma_2}{\Omega^2}Q \quad (5.74e)$$

$$H'_{21}(Q, P, \Omega) = H'_{12}(Q, P, \Omega) = \varepsilon^{3/2}\frac{3\sqrt{2}\sigma_2}{\Omega^2}Q \quad (5.74f)$$

$$H'_{40}(Q, P, \Omega) = H'_{04}(Q, P, \Omega) = \frac{\sigma_2\varepsilon^2}{4\Omega^2} \quad (5.74g)$$

$$H'_{31}(Q, P, \Omega) = H'_{13}(Q, P, \Omega) = \frac{\sigma_2\varepsilon^2}{\Omega^2} \quad (5.74h)$$

$$H'_{22}(Q, P, \Omega) = \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{2\Omega^2}. \quad (5.74i)$$

Las soluciones óptimas $\{Q_s, P_s, \Omega_s\}$ del sistema

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial H'_0(Q, P, \Omega)}{\partial Q} \right|_s &= 0 \\ \left. \frac{\partial H'_0(Q, P, \Omega)}{\partial P} \right|_s &= 0 \\ \left. \frac{\partial H'_0(Q, P, \Omega)}{\partial \Omega} \right|_s &= 0 \end{aligned}$$

corresponden a las soluciones del sistema

$$H'_{10}(Q_s, P_s, \Omega_s) = 0 \quad (5.75a)$$

$$H'_{01}(Q_s, P_s, \Omega_s) = 0 \quad (5.75b)$$

$$H'_{20}(Q_s, P_s, \Omega_s) = 0, \quad (5.75c)$$

esto es:

$$\begin{aligned} \sqrt{2\varepsilon} \left[i \frac{P_s \Omega_s}{2} + \frac{\sigma_1}{\Omega_s} Q_s + \frac{2\sigma_2}{\Omega_s^2} Q_s^3 + \frac{3\sigma_2 \varepsilon}{\Omega_s^2} Q_s \right] &= 0 \\ \sqrt{2\varepsilon} \left[-i \frac{P_s \Omega_s}{2} + \frac{\sigma_1}{\Omega_s} Q + \frac{2\sigma_2}{\Omega_s^2} Q_s^3 + \frac{3\sigma_2 \varepsilon}{\Omega_s^2} Q_s \right] &= 0 \\ \varepsilon \left[-\frac{\Omega_s}{4} + \frac{\sigma_1}{2\Omega_s} + \frac{3\sigma_2}{\Omega_s^2} Q_s^2 + \frac{3\sigma_2 \varepsilon}{2\Omega_s^2} \right] &= 0. \end{aligned}$$

Separando las partes real e imaginaria de las dos primeras ecuaciones, este sistema puede escribirse como

$$i\sqrt{2\varepsilon} P_s \Omega_s = 0 \quad (5.76a)$$

$$2\sqrt{2\varepsilon} Q_s \left[\frac{\sigma_1}{\Omega_s} + \frac{2\sigma_2}{\Omega_s^2} Q_s^2 + \frac{3\sigma_2 \varepsilon}{\Omega_s^2} \right] = 0 \quad (5.76b)$$

$$\varepsilon \left[-\frac{\Omega_s}{4} + \frac{\sigma_1}{2\Omega_s} + \frac{3\sigma_2}{\Omega_s^2} Q_s^2 + \frac{3\sigma_2 \varepsilon}{2\Omega_s^2} \right] = 0. \quad (5.76c)$$

Puesto que $\Omega \neq 0$, la ec. (5.76a) proporciona la solución

$$P_s = 0, \quad (5.77)$$

esto es, $p_s = 0$, según (5.72c). Es decir, el estado fundamental del operador \hat{h} puede construirse mediante un desplazamiento del estado de vacío dado por un parámetro α real. Una de las soluciones de la ec. (5.76b) es $Q_s = 0$, en cuyo caso la ec. (5.76c) tiene la forma de una ecuación cúbica para Ω_s

$$\Omega_s^3 - 2\sigma_1 \Omega_s - 6\sigma_2 \varepsilon = 0, \quad (5.78)$$

cuyas soluciones vienen dadas por

$$\Omega_{s1} = \frac{1}{3}\Delta^{1/3} + 2\sigma_1\Delta^{-1/3} \quad (5.79a)$$

$$\Omega_{s2} = -\frac{1}{6}\Delta^{1/3} - \sigma_1\Delta^{-1/3} + i\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{1}{3}\Delta^{1/3} - 2\sigma_1\Delta^{-1/3}\right) \quad (5.79b)$$

$$\Omega_{s3} = -\frac{1}{6}\Delta^{1/3} - \sigma_1\Delta^{-1/3} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{1}{3}\Delta^{1/3} - 2\sigma_1\Delta^{-1/3}\right), \quad (5.79c)$$

donde

$$\Delta = 81\sigma_2\varepsilon + 3\sqrt{-24\sigma_1^3 + 729\sigma_2^2\varepsilon^2}. \quad (5.80)$$

La otra solución de la ec. (5.76b) viene dada por

$$Q_s^2 = -\frac{\sigma_1\Omega_s}{2\sigma_2} - \frac{3\varepsilon}{2}, \quad (5.81)$$

esto es,

$$Q_s = \pm\sqrt{-\frac{\sigma_1\sigma_2\Omega_s + 3\varepsilon}{2}}. \quad (5.82)$$

En este caso, la ecuación cúbica para la frecuencia

$$\Omega_s^3 + 4\sigma_1\Omega_s + 12\sigma_2\varepsilon = 0 \quad (5.83)$$

tiene como soluciones:

$$\Omega_{s1} = \frac{1}{3}\Lambda^{1/3} - 4\sigma_1\Lambda^{-1/3} \quad (5.84a)$$

$$\Omega_{s2} = -\frac{1}{6}\Lambda^{1/3} + 2\sigma_1\Lambda^{-1/3} + i\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{1}{3}\Lambda^{1/3} + 4\sigma_1\Lambda^{-1/3}\right) \quad (5.84b)$$

$$\Omega_{s3} = -\frac{1}{6}\Lambda^{1/3} + 2\sigma_1\Lambda^{-1/3} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{1}{3}\Lambda^{1/3} + 4\sigma_1\Lambda^{-1/3}\right), \quad (5.84c)$$

con

$$\Lambda = -162\sigma_2\varepsilon + 6\sqrt{48\sigma_1^3 + 729\sigma_2^2\varepsilon^2}. \quad (5.85)$$

En las Figs. (5.2) y (5.3) se muestra el cambio cualitativo de las soluciones Ω_{s_i} para $Q_s = 0$ y $Q_s \neq 0$, respectivamente, cuando el parámetro ε varía desde $\varepsilon = 0$ hasta $\varepsilon = 1,0$. Antes de analizar estos resultados, evaluaremos los valores óptimos de Q , P y Ω que se obtienen en el límite semiclásico $\varepsilon \rightarrow 0$. Los parámetros variacionales pueden desarrollarse en potencias del parámetro perturbativo ε :

$$Q = Q_0 + \varepsilon Q_1 + \varepsilon^2 Q_2 + \dots \quad (5.86a)$$

$$P = P_0 + \varepsilon P_1 + \varepsilon^2 P_2 + \dots \quad (5.86b)$$

$$\Omega = \Omega_0 + \varepsilon \Omega_1 + \varepsilon^2 \Omega_2 + \dots \quad (5.86c)$$

Al sustituir estos desarrollos en las ecuaciones variacionales (5.76) y trincar la serie al orden dominante en ε se tiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$i\sqrt{2\varepsilon} P_0 \Omega_0 = 0 \quad (5.87a)$$

$$2\sqrt{2\varepsilon} Q_0 \left(\frac{\sigma_1}{\Omega_0} + \frac{2\sigma_2}{\Omega_0^2} Q_0^2 \right) = 0 \quad (5.87b)$$

$$\varepsilon \left(-\frac{\Omega_0}{4} + \frac{\sigma_1}{2\Omega_0} + \frac{3\sigma_2}{\Omega_0^2} Q_0^2 \right) = 0, \quad (5.87c)$$

cuyas soluciones vienen dadas por

$$\{P_0 = 0, Q_0 = 0, \Omega_0 = 0\} \quad (5.88a)$$

$$\{P_0 = 0, Q_0 = 0, \Omega_0^2 = 2\sigma_1\} \quad (5.88b)$$

$$\left\{ P_0 = 0, Q_0^2 = -\frac{\sigma_1 \sigma_2 \Omega_0}{2}, \Omega_0 = 0 \right\} \quad (5.88c)$$

$$\left\{ P_0 = 0, Q_0^2 = -\frac{\sigma_1 \sigma_2 \Omega_0}{2}, \Omega_0^2 = -4\sigma_1 \right\}. \quad (5.88d)$$

(De hecho, la solución $P_s = 0$ [ec. (5.77)] es válida para todos los órdenes, esto es, $P_0 = P_1 = \dots = 0$). Tanto en el caso $Q_0 = 0$ como $Q_0 \neq 0$ se ha añadido la tercera solución $\Omega_0 = 0$, que se obtiene como límite de las soluciones variacionales (5.79) y (5.84) cuando $\varepsilon \rightarrow 0$.

Estos valores de $\{P_0, Q_0, \Omega_0\}$ para el sistema \hat{H} corresponden a los siguientes valores de $\{p_0, q_0, \omega_0\}$ en el sistema original \hat{h} :

$$\{p_0 = 0, q_0 = 0, \omega_0 = 0\} \quad (5.89a)$$

$$\left\{ p_0 = 0, q_0 = 0, \omega_0 = \pm \sqrt{\frac{2\sigma_1 A}{m}} \right\} \quad (5.89b)$$

$$\left\{ p_0 = 0, q_0^2 = -\frac{\sigma_1 \sigma_2 A}{2B}, \omega_0 = 0 \right\} \quad (5.89c)$$

$$\left\{ p_0 = 0, q_0^2 = -\frac{\sigma_1 \sigma_2 A}{2B}, \omega_0^2 = -\frac{4\sigma_1 A}{m} \right\}. \quad (5.89d)$$

En las Figs. (5.2) y (5.3) se muestra la variación de los valores óptimos de Ω correspondientes respectivamente a la solución $Q_s = 0$ [frecuencias dadas por (5.79)] y a las soluciones $Q_s \neq 0$ [frecuencias dadas por (5.84)], para una variación del parámetro ε entre 0 y 1. Cada panel corresponde a una elección de $\sigma_{1,2} = \pm 1$, y en un recuadro se muestra la correspondiente forma del potencial $V(Q) = \sigma_1 Q^2 + \sigma_2 Q^4$. Los puntos marcados con un círculo corresponden a las soluciones variacionales para $\varepsilon = 0$, esto es, las soluciones semiclásicas.

Los resultados para el pozo simple $V(\hat{Q}) = \hat{Q}^2 + \hat{Q}^4$ se muestran en (5.2-a) y (5.3-a). Para la solución $Q = 0$, los valores semiclásicos para la frecuencia son $\Omega_0 = 0$ y $\Omega_0 = \pm\sqrt{2}$. De éstas, sólo la

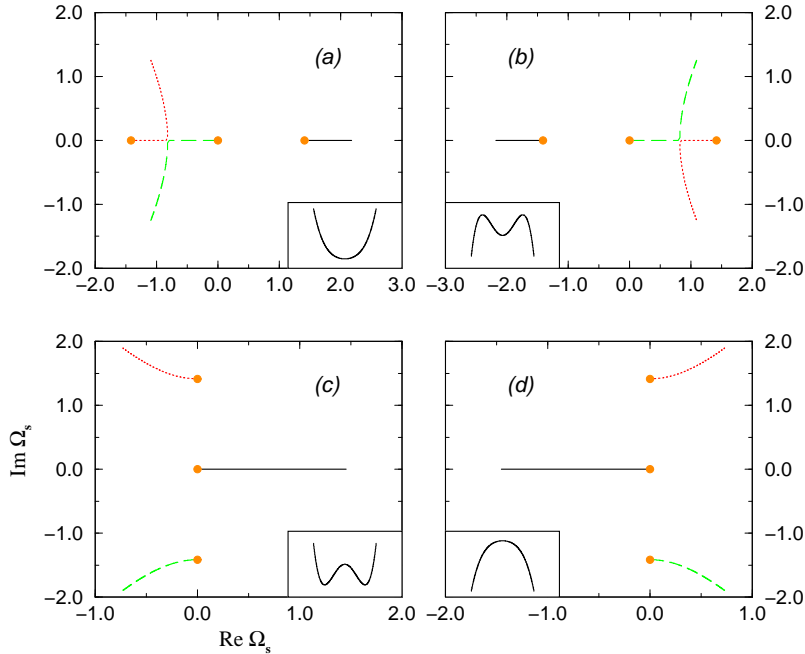


Figura 5.2: Variación de las frecuencias Ω_s óptimas dadas por (5.79) para la solución ($P_s = 0, Q_s = 0$) en un rango de $\varepsilon = 0$ hasta $\varepsilon = 1,0$. Los puntos marcados con un círculo corresponden a los valores iniciales para $\varepsilon = 0$ de cada una de las soluciones de la ecuación cúbica. Se muestran los resultados para (a): $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$, (b): $\sigma_1 = -\sigma_2 = 1$, (c): $\sigma_1 = -\sigma_2 = -1$ y (d): $\sigma_1 = \sigma_2 = -1$. En los recuadros se representa el potencial $V(q) = \sigma_1 q^2 + \sigma_2 q^4$ en cada caso.

solución positiva (correspondiente a $\omega_0 = \sqrt{2A/m}$) corresponde a una configuración estable y determina la anchura de un paquete situado en la posición de equilibrio $q_0 = 0$. [En las unidades del problema original, el paquete coherente de prueba viene dado en representación de posiciones por $\Phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-q)^2 + \frac{i}{\hbar}px}$. Para las soluciones de equilibrio $p = q = 0$ se escribe simplemente como $\Phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$]. El valor $\Omega_0 = 0$ debe descartarse, ya que conduce a la solución $\Phi_0(x) = 0$. Por otra parte, un valor negativo de la frecuencia corresponde a una solución no admisible físicamente puesto que la función de ondas en ese caso no es de cuadrado integrable. El método variacional proporciona una solución Ω_s real y positiva que va aumentando a medida que crece el valor de ε , como cabe esperar. La aparición de soluciones negativas y el comportamiento de las mismas al variar ε son un reflejo de lo que sucede en el caso $\sigma_1 = -\sigma_2 = 1$, como se verá a continuación. Por otra parte, semiclásicamente se obtienen soluciones de extremo en las posiciones definidas por $Q_0^2 = -\Omega_0/2$, con $\Omega_0 = \pm 2i$. Estos valores complejos para Q_0 difícilmente pueden ser interpretados físicamente.

Las soluciones para $V(\hat{Q}) = \hat{Q}^2 - \hat{Q}^4$ se muestran en (5.2-b) y (5.3-b). Clásicamente para $Q = 0$ se obtienen las mismas frecuencias óptimas que para el potencial anterior. Esto es debido a que la aproxi-

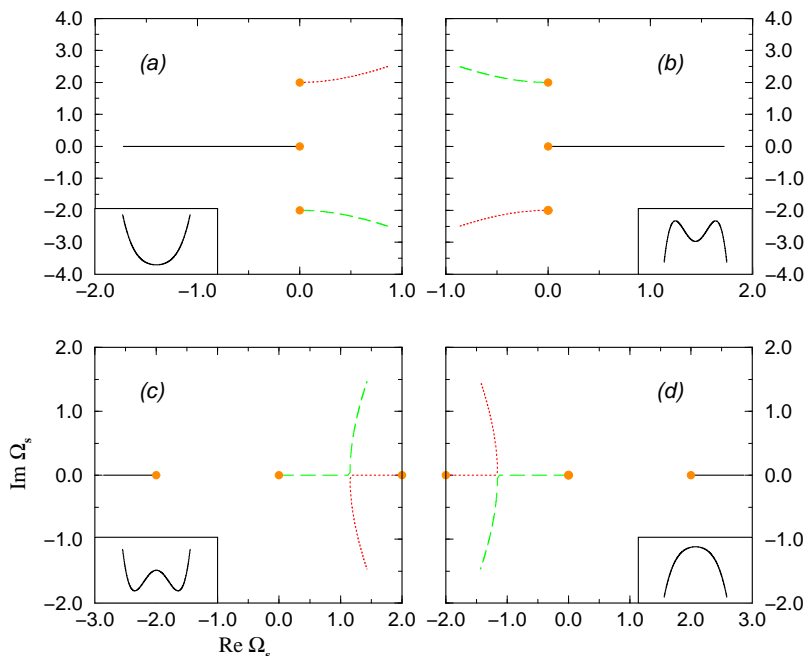


Figura 5.3: Variación de las frecuencias Ω_s óptimas dadas por (5.84) para la solución ($P_s = 0, Q_s \neq 0$) en un rango de $\varepsilon = 0$ hasta $\varepsilon = 1,0$. Los puntos marcados con un círculo corresponden a los valores iniciales $\varepsilon = 0$ de cada una de las soluciones de la ecuación cúbica. Se muestran los resultados para (a): $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$, (b): $\sigma_1 = -\sigma_2 = 1$, (c): $\sigma_1 = -\sigma_2 = -1$ y (d): $\sigma_1 = \sigma_2 = -1$. En los recuadros se representa el potencial $V(\hat{Q}) = \sigma_1 \hat{Q}^2 + \sigma_2 \hat{Q}^4$ en cada caso.

mación semiclásica se limita a centrar el autoestado con frecuencia Ω_0 en la configuración de equilibrio $Q_0 = 0$. Es decir, semiclásicamente se mantiene únicamente información local del término cuadrático del potencial sin posibilidad de distinguir entre un sistema y otro. El método variacional, por el contrario, sí es sensible a estas diferencias y es capaz de dar cuenta de algunos efectos cuánticos al incluir la posibilidad de variar el valor de ε . Las soluciones variacionales para $Q_s = 0$ muestran el siguiente comportamiento: Para $\varepsilon = 0$ las frecuencias vienen dadas por $\Omega_s = 0$ y $\Omega_s = \pm\sqrt{2}$. Al aumentar el valor de ε existen dos frecuencias reales positivas (correspondientes a las líneas punteada y a trazos, respectivamente, en la Fig. (5.2-b)). (Existe además una solución real negativa, que hemos descartado por no corresponder a una solución localizada). La mayor de las frecuencias reales positivas corresponde a la anchura de un paquete estrecho localizado en el fondo del pozo de potencial, mientras que la frecuencia más pequeña correspondería a la anchura de un paquete más ancho, que se extendería sobre las dos barreras de potencial. La primera solución es más estable que la segunda y por tanto mejor desde un punto de vista variacional. A medida que se incrementa el valor de ε , la frecuencia mayor va disminuyendo y la menor aumentando, y ambos paquetes conviven hasta un determinado valor de ε , dado por

$\varepsilon = \sqrt{24/729} = 0,18144$ [ver ec. (5.80)]. A partir de este valor de ε , estos dos paquetes ya no “cabén” en el pozo, las frecuencias adquieren una parte imaginaria y pasan a ser complejas conjugadas entre sí. Dada la definición del parámetro perturbativo $\varepsilon = (B\hbar)/(A^{3/2}m^{1/2})$, aumentar el valor de ε puede entenderse como modificar la forma del potencial dando más peso al término cuártico frente al cuadrático, o bien disminuir la masa m , o bien aumentar \hbar , es decir, hacer “más cuántico” el sistema. Cuánticamente, sabemos que este potencial no sostiene estados ligados, y los estados metaestables correspondientes a resonancias decaen más rápidamente a medida que aumenta el valor de \hbar . Este decaimiento no se refleja en la solución variacional hasta un determinado valor umbral de ε : para valores bajos de ε parece tenerse información únicamente del término cuadrático del potencial, y el método variacional asume que pueden existir estados ligados proporcionando frecuencias reales y positivas para los paquetes centrados en $Q = 0$. Sin embargo, a partir de un valor umbral de ε se detecta de manera brusca la posibilidad de decaer, y se produce una bifurcación en las frecuencias óptimas con la aparición de frecuencias complejas. Este cambio brusco en el comportamiento de las soluciones es consecuencia de las limitaciones de la aproximación del estado de prueba por un estado coherente-*squeezed*.⁶

El caso del potencial de doble pozo, con $\sigma_1 = -\sigma_2 = -1$, se representa en (5.2-c) y (5.3-c). En este caso, las soluciones clásicas para $Q_0 = 0$ vienen dadas por $\Omega_0 = 0$ y $\Omega_0 = \pm i\sqrt{2}$. Descartando las soluciones nula y negativa, esto indica que la aproximación semiclásica únicamente muestra la existencia de un punto de equilibrio inestable en $Q_0 = 0$, lo que da cuenta de las resonancias existentes en el doble pozo debidas a la barrera de potencial, pero no proporciona una solución real y positiva para la frecuencia de un paquete asociado a un estado ligado. Como se observa en la Fig. (5.2-c), el método variacional, por el contrario, no sólo proporciona valores reales y positivos para la frecuencia, sino que además admite soluciones que para $\varepsilon = 0$ son imaginarias puras y van adquiriendo parte real negativa a medida que ε aumenta. Estos pares de soluciones conjugadas podrían dar cuenta de estados de Siegert [Sei91, Pes94]. Si nos fijamos en las soluciones para $Q_s \neq 0$ en el sistema de doble pozo, mostradas

⁶Como puede apreciarse en la Fig. (5.2), los casos (a) y (b), para los que $\sigma_1 = +1$, presentan una estructura de soluciones relacionadas por una simetría de reflexión. Según se ha visto, la aparición de frecuencias complejas con parte real positiva puede interpretarse para el caso (b) en términos de resonancias. La aparición de soluciones complejas (pero con parte real negativa, no admisibles físicamente) para el potencial de pozo simple se debe a que ambos sistemas están relacionados por una rotación de $\pi/2$ en las coordenadas. Así, el hamiltoniano $\hat{h}^{(a)} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + A\hat{q}^2 + B\hat{q}^4$, que en representación de posiciones actúa como el operador

$$\hat{h}^{(a)} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + Aq^2 + Bq^4,$$

bajo la transformación $q' = q e^{i\theta}$ se escribe

$$\hat{h}^{(a)'} = \frac{-\hbar^2}{2m} e^{-2i\theta} \frac{\partial^2}{\partial q'^2} + A e^{-2i\theta} q'^2 + B e^{-4i\theta} q'^4 = e^{-2i\theta} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q'^2} + A q'^2 + B q'^4 e^{2i\theta} \right),$$

y para $\theta = \pi/2$ se tiene

$$h^{(a)'} = - \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q'^2} + A q'^2 - B q'^4 \right) = -\hat{h}^{(b)}.$$

Lo mismo sucede cuando $\sigma_1 = -1$, para los casos (c) y (d).

en la Fig. (5.3-c), vemos que en este caso, las soluciones semiclásicas vienen dadas por $\Omega_0 = \pm 2$, y las posiciones óptimas para el centro del paquete corresponden a $Q_0 = \pm \sqrt{\Omega_0/2}$. Eligiendo la frecuencia positiva como la físicamente aceptable, las posiciones de equilibrio corresponden a $Q_0 = \pm 1$. (La frecuencia negativa proporciona configuraciones estables en $Q_0 = \pm i$, difícilmente interpretables físicamente). Variacionalmente se obtienen soluciones con frecuencia positiva en cada uno de los pozos del potencial. (Estas soluciones proporcionan de hecho soluciones más estables para valores bajos de ε que la solución Ω_s real para $Q = 0$, como veremos al evaluar la energía del nivel fundamental para este potencial). El comportamiento en cada uno de los pozos es similar al descrito anteriormente: para valores bajos de ε se tienen dos soluciones reales en el pozo (la de mayor frecuencia corresponde a la solución más estable), y a partir de un valor umbral de ε (dado por $\varepsilon = \sqrt{48/729} = 0,2566$, ver ec. (5.85)) estas frecuencias reales se convierten en frecuencias complejas conjugadas. Esta bifurcación corresponde a la detección del método variacional de posibilidad de *tunneling* al otro pozo de potencial.

Finalmente, las soluciones para el potencial $V(\hat{Q}) = -\hat{Q}^2 - \hat{Q}^4$ se muestran en (5.2-d). En este caso los pares de frecuencias complejas con parte real positiva dan cuenta de resonancias existentes encima de la barrera. Las otras configuraciones de equilibrio variacionales además de $Q_s = 0$ corresponden a valores de Q complejos, sin sentido físico. (Existen soluciones reales para Q , pero corresponden a valores negativos de Ω , que hemos descartado).

Estos resultados ponen de manifiesto la utilidad del método variacional, no tanto (o no sólo) como un procedimiento para obtener una aproximación al estado fundamental del sistema, sino como un *método de análisis de estabilidad lineal cuántico*. El procedimiento clásico consiste en buscar los valores óptimos de q y p que identifican el centro del paquete en el espacio de fases. El análisis de la estabilidad viene determinado por la frecuencia asociada a cada una de las configuraciones de equilibrio encontradas, puesto que, según indica la ec. (5.32), la frecuencia de la aproximación armónica está directamente relacionada con las derivadas segundas del hamiltoniano clásico. El procedimiento variacional va más allá al incluir en el tratamiento las fluctuaciones cuánticas. A medida que ε (o \hbar) aumenta, se va pasando de un análisis *local* del problema a un análisis más global. Los cambios cualitativos en las soluciones variacionales indican que este método es capaz de detectar efectos puramente cuánticos. (Hemos visto por ejemplo que la aparición de soluciones complejas para la frecuencia está asociada a la descripción de estados cuánticos metaestables de los que el método clásico es incapaz de dar cuenta). Este comportamiento es compatible con el *coarse graining* del espacio de fases que se produce para valores finitos de \hbar , que es responsable de la pérdida de detalle de la estructura fina del espacio de fases clásico. Este método variacional es especialmente útil para el análisis de estabilidad de sistemas de muchos grados de libertad.

Correcciones a la aproximación armónica

Como se ha dicho anteriormente, las condiciones variacionales (5.75), al anular los términos lineales y cuadráticos en a^\dagger y a del hamiltoniano transformado \hat{H}' , dejan a éste en la forma

$$\begin{aligned}\hat{H}' &= H'_0(Q_s, P_s, \Omega_s) + H'_{11}(Q_s, P_s, \Omega_s) a^\dagger a \\ &+ H'_{30}(Q_s, P_s, \Omega_s) a^{\dagger 3} + \cdots + H'_{03}(Q_s, P_s, \Omega_s) a^3 \\ &+ H'_{40}(Q_s, P_s, \Omega_s) a^{\dagger 4} + \cdots + H'_{04}(Q_s, P_s, \Omega_s) a^4 \\ &\equiv \hat{H}'_{arm} + \hat{W},\end{aligned}\tag{5.90}$$

donde

$$\begin{aligned}\hat{H}'_{arm} &\equiv H'_0(Q_s, P_s, \Omega_s) + H'_{11}(Q_s, P_s, \Omega_s) a^\dagger a \\ &= \frac{\varepsilon \Omega_s}{4} + \frac{\sigma_1 \varepsilon}{2\Omega_s} + \frac{3\sigma_2 \varepsilon^2}{4\Omega_s^2} + \left(\frac{\sigma_1}{\Omega_s} + \frac{3\sigma_2 \varepsilon}{\Omega_s^2} \right) Q_s^2 + \frac{\sigma_2}{\Omega_s^2} Q_s^4 \\ &+ \left[\frac{\varepsilon \Omega_s}{2} + \frac{\sigma_1 \varepsilon}{\Omega_s} + \frac{6\sigma_2 \varepsilon}{\Omega_s^2} Q_s^2 + \frac{3\sigma_2 \varepsilon^2}{\Omega_s^2} \right] a^\dagger a\end{aligned}\tag{5.91}$$

es una aproximación armónica del potencial en torno a las soluciones variacionalmente óptimas mientras que \hat{W} , que incluye los términos cúbicos y cuárticos en a^\dagger y a de (5.90)

$$\begin{aligned}\hat{W} &= H'_{30}(Q_s, P_s, \Omega_s) a^{\dagger 3} + \cdots + H'_{03}(Q_s, P_s, \Omega_s) a^3 \\ &+ H'_{40}(Q_s, P_s, \Omega_s) a^{\dagger 4} + \cdots + H'_{04}(Q_s, P_s, \Omega_s) a^4\end{aligned}\tag{5.92}$$

es considerado como una perturbación a la primera aproximación \hat{H}'_{arm} . Las modificaciones que \hat{W} produce en los niveles de energía y en los autoestados de \hat{H}'_{arm} pueden ser tratadas convenientemente mediante la teoría de perturbaciones cuántica estándar.

Así pues, las autoenergías del operador (5.91), definidas por

$$\hat{H}'_{arm}|n\rangle = E_n^{arm}|n\rangle,\tag{5.93}$$

vienen dadas por

$$E_n^{arm} = \left(\frac{\varepsilon \Omega_s}{2} + \frac{\sigma_1 \varepsilon}{\Omega_s} + \frac{6\sigma_2 \varepsilon}{\Omega_s^2} Q_s^2 \right) \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{3\sigma_2 \varepsilon^2}{\Omega_s^2} \left(n + \frac{1}{4} \right) + \frac{\sigma_1}{\Omega_s} Q_s^2 + \frac{\sigma_2}{\Omega_s^2} Q_s^4.$$

En particular, la energía del nivel fundamental $n = 0$ en la aproximación armónica vendrá dada por

$$E_0^{arm} = \frac{\varepsilon \Omega_s}{4} + \frac{\sigma_1 \varepsilon}{2\Omega_s} + \frac{3\sigma_2 \varepsilon}{\Omega_s^2} Q_s^2 + \frac{3\sigma_2 \varepsilon^2}{4\Omega_s^2} + \frac{\sigma_1}{\Omega_s} Q_s^2 + \frac{\sigma_2}{\Omega_s^2} Q_s^4.$$

Para la solución $Q_s = 0$ esta expresión se escribe

$$E_0^{arm} \{Q_s=0\} = \frac{\varepsilon \Omega_s}{4} + \frac{\sigma_1 \varepsilon}{2\Omega_s} + \frac{3\sigma_2 \varepsilon^2}{4\Omega_s^2} = \frac{3\varepsilon \Omega_s}{8} + \frac{\sigma_1 \varepsilon}{4\Omega_s},\tag{5.94a}$$

donde Ω_s viene dada por (5.79), mientras que para las soluciones $Q_s \neq 0$ [ec. (5.82)] la energía del nivel fundamental a orden cero viene dada por

$$E_0^{arm}_{\{Q_s \neq 0\}} = \frac{\varepsilon \Omega_s}{4} - \frac{\sigma_1 \varepsilon}{\Omega_s} - \frac{3\sigma_2 \varepsilon^2}{2\Omega_s^2} - \frac{1}{4\sigma_2} = \frac{3\varepsilon \Omega_s}{8} - \frac{\sigma_1 \varepsilon}{2\Omega_s} - \frac{1}{4\sigma_2}, \quad (5.94b)$$

con Ω_s dada por (5.84).

Es posible obtener de forma perturbativa las autoenergías E_n del operador \hat{H}' dado por (5.90)

$$\hat{H}' |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle \quad (5.95)$$

haciendo uso de la fórmula (5.34). Las correcciones a la energía del nivel fundamental producidas por la perturbación \hat{W} vienen dadas por:⁷

$$\begin{aligned} E_0 &\simeq E_0^{arm} + \langle 0 | \hat{W} | 0 \rangle + \sum_{r \neq 0} \frac{|\langle r | \hat{W} | 0 \rangle|^2}{E_0^{arm} - E_r^{arm}} \\ &= E_0^{arm} - \frac{|\langle 4 | \hat{W} | 0 \rangle|^2}{4\varepsilon \Omega_s} - \frac{|\langle 3 | \hat{W} | 0 \rangle|^2}{3\varepsilon \Omega_s} \\ &= E_0^{arm} - \frac{6H_{40}^{\prime 2}}{\varepsilon \Omega_s} - \frac{2H_{30}^{\prime 2}}{\varepsilon \Omega_s} \\ &= E_0^{arm} - \frac{3\varepsilon^3}{8\Omega_s^5} - \frac{4\varepsilon^2}{\Omega_s^5} Q_s^2, \end{aligned} \quad (5.96)$$

donde se ha tenido en cuenta que

$$E_0^{arm} - E_r^{arm} = -r \varepsilon \Omega_s.$$

Así pues, para la solución $Q_s = 0$ la energía del nivel fundamental en la aproximación armónica se ve corregida por la contribución del nivel 4, obteniéndose el resultado

$$E_{0\{Q_s=0\}} = \varepsilon \left(\frac{3\Omega_s}{8} + \frac{\sigma_1}{4\Omega_s} \right) - \frac{3\varepsilon^3}{8\Omega_s^5}, \quad (5.97a)$$

⁷En general, los únicos elementos de matriz no nulos de \hat{W} asociados a $|\varphi_n\rangle$ vienen dados por

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle &= H'_{22} \langle \varphi_n | a^{\dagger 2} a^2 | \varphi_n \rangle = H'_{22} n(n-1) \\ \langle \varphi_{n+4} | \hat{W} | \varphi_n \rangle &= H'_{40} \langle \varphi_{n+4} | a^{\dagger 4} | \varphi_n \rangle = H'_{40} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} \\ \langle \varphi_{n+3} | \hat{W} | \varphi_n \rangle &= H'_{30} \langle \varphi_{n+3} | a^{\dagger 3} | \varphi_n \rangle = H'_{30} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \\ \langle \varphi_{n+2} | \hat{W} | \varphi_n \rangle &= H'_{31} \langle \varphi_{n+2} | a^{\dagger 3} a | \varphi_n \rangle = H'_{31} n \sqrt{(n+1)(n+2)} \\ \langle \varphi_{n+1} | \hat{W} | \varphi_n \rangle &= H'_{21} \langle \varphi_{n+1} | a^{\dagger 2} a | \varphi_n \rangle = H'_{21} n \sqrt{n+1} \\ \langle \varphi_{n-1} | \hat{W} | \varphi_n \rangle &= H'_{12} \langle \varphi_{n-1} | a^{\dagger} a^2 | \varphi_n \rangle = H'_{12} (n-1) \sqrt{n} \\ \langle \varphi_{n-2} | \hat{W} | \varphi_n \rangle &= H'_{13} \langle \varphi_{n-2} | a^{\dagger} a^3 | \varphi_n \rangle = H'_{13} (n-2) \sqrt{n(n-1)} \\ \langle \varphi_{n-3} | \hat{W} | \varphi_n \rangle &= H'_{03} \langle \varphi_{n-3} | a^3 | \varphi_n \rangle = H'_{03} \sqrt{n(n-1)(n-2)} \\ \langle \varphi_{n-4} | \hat{W} | \varphi_n \rangle &= H'_{04} \langle \varphi_{n-4} | a^4 | \varphi_n \rangle = H'_{04} \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}. \end{aligned}$$

con Ω_s dada por (5.79), mientras que para $Q_s \neq 0$ debe añadirse, además, la contribución del nivel 3:

$$E_{0\{Q_s \neq 0\}} = \varepsilon \left(\frac{3\Omega_s}{8} - \frac{\sigma_1}{2\Omega_s} \right) + \frac{2\sigma_1 \varepsilon^2}{\sigma_2 \Omega_s^4} + \frac{45\varepsilon^3}{8\Omega_s^5} - \frac{1}{4\sigma_2}, \quad (5.97b)$$

con Ω_s dada por (5.84). Debemos hacer notar que no es posible mostrar explícitamente la dependencia total de estas expresiones con el parámetro ε debido a que las soluciones Ω_s en cada caso contienen una dependencia implícita con ε .

Estas expresiones constituyen una aproximación a los autovalores del operador \hat{H}' y proporcionan unos valores escalados de las energías. Mediante los cambios de variable (5.72) pueden obtenerse las autoenergías del operador \hat{h}' original:

$$\begin{aligned} e_{0\{q_s=0\}} &= \frac{3\hbar\omega_s}{8} + \frac{\sigma_1 A \hbar}{4m\omega_s} - \frac{3B^2 \hbar^3}{8m^4 \omega_s^5} \\ e_{0\{q_s \neq 0\}} &= \frac{3\hbar\omega_s}{8} - \frac{\sigma_1 A \hbar}{2m\omega_s} + \frac{2\sigma_1 AB \hbar^2}{\sigma_2 m^3 \omega_s^4} + \frac{45B^2 \hbar^3}{8m^4 \omega_s^5} - \frac{A^2}{4\sigma_2 B}, \end{aligned}$$

donde ω_s en uno y otro caso vienen dados por (5.79) y (5.84), respectivamente, teniendo en cuenta la relación (5.72a) entre Ω y ω .

Las autofunciones $|\Psi_n\rangle$ de \hat{H}' , que en primera aproximación vienen dadas por los autovectores $|n\rangle$ de \hat{H}'_{arm} , puede obtenerse de manera aproximada añadiendo correcciones según la fórmula perturbativa (5.33). Para el caso del nivel fundamental se tiene:

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &\simeq |0\rangle + \sum_{r \neq 0} \frac{\langle r | \hat{W} | 0 \rangle}{E_0^{arm} - E_r^{arm}} |r\rangle \\ &= |0\rangle - \frac{\sigma_2 \varepsilon \sqrt{6}}{8\Omega_s^3} |4\rangle - \frac{2\sqrt{3}\sigma_2 \varepsilon^{1/2} Q_s}{3\Omega_s^3} |3\rangle. \end{aligned} \quad (5.98)$$

Es decir, el estado fundamental en $Q_s = 0$ se obtiene como una superposición lineal de los estados estacionarios $|0\rangle$ y $|4\rangle$ del oscilador armónico \hat{H}'_{arm} , mientras que para las soluciones $Q_s \neq 0$ interviene además el estado $|3\rangle$, lo que tiene sentido si se tiene en cuenta que las funciones impares del oscilador armónico presentan nodos en $q = 0$.

Correcciones a la aproximación armónica: límite semiclásico

Según se ha visto, las ecuaciones variacionales semiclásicas (5.87) anulan los términos lineales y cuadráticos de \hat{H}' para el orden dominante en ε . Esto hace que dicho operador venga dado por:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{lsc} &= H'_0(Q_0, P_0, \Omega_0) + \tilde{H}'_{10}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^\dagger + \tilde{H}'_{01}(Q_0, P_0, \Omega_0) a \\ &+ \tilde{H}'_{20}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^{\dagger 2} + H'_{11}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^\dagger a + \tilde{H}'_{02}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^2 \\ &+ H'_{30}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^{\dagger 3} + \dots + H'_{03}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^3 \\ &+ H'_{40}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^{\dagger 4} + \dots + H'_{04}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^4. \end{aligned} \quad (5.99)$$

Como puede verse, los términos lineales y cuadráticos no han sido eliminados del todo, quedando aún los términos que no han sido incluidos en las ecuaciones variacionales semiclásicas (5.87):

$$\begin{aligned}\tilde{H}'_{10}(Q_0, P_0, \Omega_0) &= \tilde{H}'_{01}(Q_0, P_0, \Omega_0) = \frac{3\sqrt{2}\sigma_2\varepsilon^{3/2}}{\Omega_0^2}Q_0 \\ \tilde{H}'_{20}(Q_0, P_0, \Omega_0) &= \tilde{H}'_{02}(Q_0, P_0, \Omega_0) = \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{2\Omega_0^2}.\end{aligned}$$

Por el mismo procedimiento seguido anteriormente, es posible considerar una aproximación armónica de \hat{H}^{lsc} e incluir el resto de términos en una perturbación que corrija dicha aproximación. Hemos de señalar que la descomposición de \hat{H}^{lsc} como “orden cero” + “perturbación” no es única. En la teoría de perturbaciones cuántica, al separar $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ es necesario que los elementos de matriz de \hat{W} sean mucho menores que los de \hat{H}_0 (o más precisamente, que los elementos de matriz de \hat{W} sean mucho menores que las diferencias entre los autovalores de \hat{H}_0). En la aproximación semiclásica que estamos considerando, el criterio para elegir \hat{H}_0 (que notaremos por \hat{H}_{arm}^{lsc}) se basa en la *elección del mejor oscilador armónico posible* que pueda construirse a partir de la información que se tiene al aproximar las soluciones variacionalmente óptimas $\{Q_s, P_s, \Omega_s\}$ por $Q \simeq Q_0$, $P \simeq P_0$ y $\Omega \simeq \Omega_0$. De esta forma, el operador \hat{H}^{lsc} dado por (5.99) podrá descomponerse como

$$\hat{H}^{lsc} = \hat{H}_{arm}^{lsc} + \hat{W}^{sc},$$

donde

$$\begin{aligned}\hat{H}_{arm}^{lsc} &\equiv H_0^{lsc} + H_{11}^{lsc} a^\dagger a & (5.100) \\ &= \frac{P_0^2 \Omega_0}{2} + \frac{\sigma_1}{\Omega_0} Q_0^2 + \frac{\sigma_2}{\Omega_0^2} Q_0^4 + \varepsilon \left(\frac{\Omega_0}{4} + \frac{\sigma_1}{2\Omega_0} + \frac{3\sigma_2}{\Omega_0^2} Q_0^2 \right) + \left[\frac{\varepsilon \Omega_0}{2} + \frac{\sigma_1 \varepsilon}{\Omega_0} + \frac{6\sigma_2 \varepsilon}{\Omega_0^2} Q_0^2 \right] a^\dagger a & (5.101)\end{aligned}$$

Como se ve, no hemos elegido la aproximación armónica \hat{H}_{arm}^{lsc} como $H_0 + H_{11} a^\dagger a$ (tal y como se hizo en (5.91)), sino que para ser consecuentes con la aproximación semiclásica hemos escrito

$$\begin{aligned}H_0' &\equiv H_0^{lsc} + \tilde{H}'_0 \\ H_{11}' &\equiv H_{11}^{lsc} + \tilde{H}'_{11},\end{aligned}$$

donde H_0^{lsc} y H_{11}^{lsc} están definidos en (5.100) mientras que

$$\begin{aligned}\tilde{H}'_0 &\equiv \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{4\Omega^2} \\ \tilde{H}'_{11} &\equiv \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{\Omega^2},\end{aligned}$$

por ser de orden ε^2 , pasan a formar parte de la perturbación \hat{W}^{sc} [ver ec. (5.103)]. En otras palabras, $H_0^{lsc}(Q_0, P_0, \Omega_0)$ es la energía que hemos optimizado semiclásicamente, y da una estimación de $\langle 0 | \hat{D}^\dagger(Q, P) \hat{S}^\dagger(\Omega) \hat{H} \hat{S}(\Omega) \hat{D} | 0 \rangle$

que es correcta hasta $O(\varepsilon^2)$.⁸

Así pues, los autovalores del operador (5.100), definidos por

$$\hat{H}_{arm}^{lsc}|n\rangle = E_n^{armsc}|n\rangle,$$

vendrán dados por

$$E_n^{armsc} = \frac{P_0^2 \Omega_0}{2} + \frac{\sigma_1}{\Omega_0} Q_0^2 + \frac{\sigma_2}{\Omega_0^2} Q_0^4 + \left[\frac{\varepsilon \Omega_0}{2} + \frac{\sigma_1 \varepsilon}{\Omega_0} + \frac{6\sigma_2 \varepsilon}{\Omega_0^2} Q_0^2 \right] \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Para el nivel fundamental, se tiene

$$E_0^{armsc} = \frac{P_0^2 \Omega_0}{2} + \frac{\sigma_1}{\Omega_0} Q_0^2 + \frac{\sigma_2}{\Omega_0^2} Q_0^4 + \frac{\varepsilon \Omega_0}{4} + \frac{\sigma_1 \varepsilon}{2\Omega_0} + \frac{3\sigma_2 \varepsilon}{\Omega_0^2} Q_0^2.$$

Para la solución $Q_0 = 0$ se tiene

$$E_0^{armsc} \{Q_0=0\} = \frac{\varepsilon \Omega_0}{2}, \quad (5.102a)$$

con $\Omega_0 = \pm \sqrt{2\sigma_1}$, mientras que para la solución $Q_0 = \pm \sqrt{-\sigma_1 \sigma_2 \Omega_0 / 2}$ se tiene

$$E_0^{armsc} \{Q_0 \neq 0\} = \frac{\varepsilon \Omega_0}{2} - \frac{1}{4\sigma_2}, \quad (5.102b)$$

con $\Omega_0 = \pm \sqrt{-4\sigma_1}$. Es decir, para las soluciones $Q_0 \neq 0$ se añade o se sustrae (dependiendo del signo de σ_2) la energía correspondiente a la altura de la barrera (o pozo, según el caso) de potencial.

Estos resultados son corregidos al incluir el efecto de la perturbación \hat{W}^{sc} , dada por

$$\begin{aligned} \hat{W}^{sc} &= \tilde{H}'_0(Q_0, P_0, \Omega_0) + \tilde{H}'_{10}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^\dagger + \tilde{H}'_{01}(Q_0, P_0, \Omega_0) a \\ &+ \tilde{H}'_{20}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^{\dagger 2} + \tilde{H}'_{11}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^\dagger a + \tilde{H}'_{02}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^2 \\ &+ H'_{30}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^{\dagger 3} + \dots + H'_{03}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^3 \\ &+ H'_{40}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^{\dagger 4} + \dots + H'_{04}(Q_0, P_0, \Omega_0) a^4. \end{aligned}$$

De esta forma, las autoenergías E_n^{sc} del operador \hat{H}^{lsc}

$$\hat{H}^{lsc}|\Psi\rangle^{sc} = E_n^{sc}|\Psi\rangle^{sc}$$

⁸Podría pensarse en tomar como orden cero en H_0^{lsc} únicamente los términos que no dependen de ε , esto es, $\frac{P_0^2 \Omega_0}{2} + \frac{\sigma_1}{\Omega_0} Q_0^2 + \frac{\sigma_2}{\Omega_0^2} Q_0^4$, pero es una elección peor, puesto que no proporciona una energía de punto cero para $Q_0 = 0$ (y para $Q_0 \neq 0$ se reduce simplemente al factor $-1/(4\sigma_2)$). Por otra parte, para obtener una estimación de $\langle 0|\hat{D}^\dagger(Q, P)\hat{S}^\dagger(\Omega)\hat{H}\hat{S}(\Omega)\hat{D}(Q, P)|0\rangle$ que incluya términos de orden ε^2 , tendrían que haberse obtenido las soluciones variacionales hasta orden ε , esto es, tendríamos que conocer Q_1, P_1 y Ω_1 en (5.86).

pueden obtenerse mediante la fórmula (5.34). Para el caso del nivel fundamental se tiene ⁹

$$\begin{aligned}
E_0^{sc} &\simeq E_0^{armsc} + \langle 0|\hat{W}^{sc}|0\rangle + \sum_{r \neq 0} \frac{|\langle r|\hat{W}^{sc}|0\rangle|^2}{E_0^{armsc} - E_r^{armsc}} \\
&= E_0^{armsc} + \langle 0|\hat{W}^{sc}|0\rangle - \frac{|\langle 4|\hat{W}^{sc}|0\rangle|^2}{4\varepsilon\Omega_0} - \frac{|\langle 3|\hat{W}^{sc}|0\rangle|^2}{3\varepsilon\Omega_0} - \frac{|\langle 2|\hat{W}^{sc}|0\rangle|^2}{2\varepsilon\Omega_0} - \frac{|\langle 1|\hat{W}^{sc}|0\rangle|^2}{\varepsilon\Omega_0} \\
&= E_0^{armsc} + \tilde{H}'_0 - \frac{6H'^2_{40}}{\varepsilon\Omega_0} - \frac{2H'^2_{30}}{\varepsilon\Omega_0} - \frac{\tilde{H}'^2_{20}}{\varepsilon\Omega_0} - \frac{\tilde{H}'^2_{10}}{\varepsilon\Omega_0} \\
&= E_0^{armsc} + \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{4\Omega_0} - \frac{21\varepsilon^3}{8\Omega_0^5} - \frac{22\varepsilon^2}{\Omega_0^5} Q_0^2,
\end{aligned}$$

donde se ha tenido en cuenta que $E_0^{armsc} - E_r^{armsc} = -r\varepsilon\Omega_0$. De esta manera, para la solución $Q_0 = 0$ la energía del nivel fundamental no sólo se ve corregida, como en el caso variacional, por el nivel 4, sino que interviene también el nivel 2, obteniéndose:

$$E_0^{sc} \{Q_0=0\} = \frac{\varepsilon\Omega_0}{2} + \frac{3\sigma_2\varepsilon^2}{8\sigma_1} - \frac{21\varepsilon^3}{8\Omega_0^5}, \quad (5.103a)$$

con $\Omega_0 = \pm\sqrt{2\sigma_1}$, mientras que para la solución $Q_0 = \pm\sqrt{-\sigma_1\sigma_2\Omega_0/2}$ hay contribución no sólo del nivel 3, sino del 1:

$$E_0^{sc} \{Q_0 \neq 0\} = \frac{\varepsilon\Omega_0}{2} - \frac{1}{4\sigma_2} + \frac{\sigma_2\varepsilon^2}{2\sigma_1} - \frac{21\varepsilon^3}{8\Omega_0^5}, \quad (5.103b)$$

con $\Omega_0 = \pm\sqrt{-4\sigma_1}$. En las unidades del sistema original se tiene

$$e_0^{sc} \{q_0=0\} = \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{3\sigma_2 B \hbar^2}{8\sigma_1 A} - \frac{21\hbar^3}{8m^4\omega_0^5},$$

con $\omega_0 = \pm\sqrt{2\sigma_1 A/m}$, y

$$e_0^{sc} \{q_0 \neq 0\} = \frac{\hbar\omega_0}{2} - \frac{A^2}{4\sigma_2 B} + \frac{\sigma_2 B \hbar^2}{2m\sigma_1 A} - \frac{21B^2 \hbar^3}{8m^4\omega_0^5},$$

⁹En este caso, los únicos elementos de matriz no nulos de \hat{W}^{sc} asociados al estado $|\varphi_n\rangle$ son

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_n|\hat{W}^{sc}|\varphi_n\rangle &= \tilde{H}'_0 + \tilde{H}'_{11}n + H'_{22}n(n-1) \\
\langle \varphi_{n+4}|\hat{W}^{sc}|\varphi_n\rangle &= H'_{40}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} \\
\langle \varphi_{n+3}|\hat{W}^{sc}|\varphi_n\rangle &= H'_{30}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \\
\langle \varphi_{n+2}|\hat{W}^{sc}|\varphi_n\rangle &= \tilde{H}'_{20}\sqrt{(n+1)(n+2)} + H'_{31}n\sqrt{(n+1)(n+2)} \\
\langle \varphi_{n+1}|\hat{W}^{sc}|\varphi_n\rangle &= \tilde{H}'_{10}\sqrt{n+1} + H'_{21}n\sqrt{n+1} \\
\langle \varphi_{n-1}|\hat{W}^{sc}|\varphi_n\rangle &= \tilde{H}'_{01}\sqrt{n} + H'_{12}(n-1)\sqrt{n} \\
\langle \varphi_{n-2}|\hat{W}^{sc}|\varphi_n\rangle &= \tilde{H}'_{02}\sqrt{n(n-1)} + H'_{13}(n-2)\sqrt{n(n-1)} \\
\langle \varphi_{n-3}|\hat{W}^{sc}|\varphi_n\rangle &= H'_{03}\sqrt{n(n-1)(n-2)} \\
\langle \varphi_{n-4}|\hat{W}^{sc}|\varphi_n\rangle &= H'_{04}\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}.
\end{aligned}$$

para $q_0 = \pm \sqrt{-\sigma_1 A / (2\sigma_2 B)}$, con $\omega_0 = \pm \sqrt{-4\sigma_1 A / m}$.

En cuanto al vector de estado, la expresión perturbativa (5.33) proporciona la siguiente aproximación para $|\Psi_0\rangle^{sc}$:

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle^{sc} &\simeq |0\rangle + \sum_{r \neq 0} \frac{\langle r | \hat{W}^{sc} | 0 \rangle}{E_0^{armsc} - E_r^{armsc}} |r\rangle \\ &= |0\rangle - \frac{\sigma_2 \epsilon \sqrt{6}}{8\Omega_0^3} |4\rangle - \frac{2\sqrt{3}\sigma_2 \epsilon^{1/2} Q_0}{3\Omega_0^3} |3\rangle - \frac{3\sqrt{2}\sigma_2 \epsilon}{4\Omega_0^3} |2\rangle - \frac{3\sqrt{2}\sigma_2 \epsilon^{1/2} Q_0}{\Omega_0^3} |1\rangle. \end{aligned} \quad (5.104)$$

Es decir, para $Q_0 = 0$ el estado fundamental se escribe como una combinación lineal de los estados $|0\rangle$, $|2\rangle$ y $|4\rangle$ del oscilador armónico, mientras que las soluciones $Q_0 = \pm \sqrt{-\sigma_1 \sigma_2 \Omega_0 / 2}$ tienen contribución de los estados $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ y $|4\rangle$.

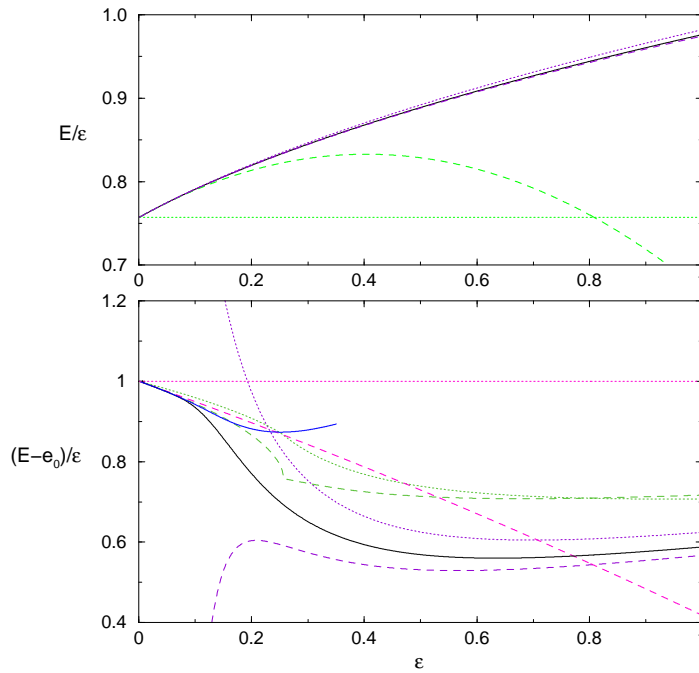


Figura 5.4: Variación de la energía del nivel fundamental del pozo simple (arriba) y del doble pozo (abajo) para una variación de ϵ desde 0 hasta 1. En el caso del pozo simple se representan los resultados para la solución $Q_s = 0$, mientras que en el doble pozo se representan las soluciones tanto para $Q_s = 0$ como para $Q_s \neq 0$. El resultado cuántico se representa con una línea continua negra, mientras que los resultados variacional y semiclásico se muestran con líneas punteadas (aproximación armónica) o a trazos (correcciones perturbativas) cuya equivalencia de colores se indica en el texto.

En la Fig. (5.4) se muestran los resultados para la energía del nivel fundamental del pozo simple (recuadro superior) y del doble pozo (recuadro inferior) obtenidas tanto a partir del método variacional como del límite semiclásico. En ambos casos (variacional y semiclásico) se muestra el resultado de

la aproximación armónica y las correcciones perturbativas. El cálculo de la energía variacional se ha realizado para la solución de frecuencia real. Estos resultados se comparan con el resultado cuántico obtenido al diagonalizar el hamiltoniano \hat{H} en una base de autoestados $\{|n\rangle\}$ del oscilador armónico, $[\hat{p}^2/(2m) + \frac{1}{2}m\tilde{\omega}^2\hat{q}^2]|n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\tilde{\omega}|n\rangle$. La frecuencia de este oscilador armónico es arbitraria, y se ha elegido como el valor óptimo semiclásico, $\tilde{\omega} = \sqrt{2}$. Se ha representado en el eje de ordenadas el valor de E/ε para poder apreciar mejor las diferencias entre los distintos resultados.

Para el caso del pozo simple [Fig. (5.4)-arriba] se han representado las soluciones variacional y semiclásica para $Q = 0$. Se observa que la aproximación semiclásica (líneas verdes a puntos y a trazos para las soluciones armónica y perturbativa, respectivamente) es válida únicamente para valores muy bajos del parámetro ε , mientras que el acuerdo entre el resultado variacional y el cuántico es excelente. Puede apreciarse que la sobrestimación de la energía del nivel fundamental proporcionada por la aproximación armónica variacional (línea violeta punteada) es corregida por las perturbaciones (línea violeta a trazos), obteniéndose un resultado más ajustado al resultado cuántico exacto (línea negra continua). No obstante, el error en la aproximación aumenta con ε (desde un valor prácticamente nulo para $\varepsilon = 0$ hasta un error absoluto de 0,0017 para $\varepsilon = 1$).

En el caso del doble pozo [Fig. (5.4)-abajo] se ha representado el valor de $(E - e_0)/\varepsilon$ frente a ε , donde $e_0 = -1/4$ es el valor mínimo de la energía en el fondo de los pozos (se ha tomado el cero de energía en lo alto de la barrera de potencial). En este caso no hemos representado la solución semiclásica para $Q_0 = 0$, puesto que corresponde al valor $\Omega_0 = 0$ [ver Fig. (5.2-c)] y no representa una solución físicamente aceptable. Los resultados variacionales (líneas violeta a puntos y a trazos para las soluciones armónica y perturbativa, respectivamente) muestran buen acuerdo con la solución cuántica excepto para valores bajos de ε . Esto es debido a que para este rango de valores de ε la solución variacional más estable corresponde a $Q_s \neq 0$. Como puede observarse en la Fig. (5.3-c), existe un rango de valores de ε (comprendido entre 0 y 0,2566) para el que existen frecuencias reales positivas en cada uno de los pozos. La solución de frecuencia mayor es más estable que la de frecuencia menor, y es la que se ha elegido para representar (en color verde) la energía variacional en la Fig. (5.4)-abajo). En color magenta se representa la solución semiclásica, que para $Q \neq 0$ sí es aceptable físicamente, al corresponder a un valor de $\Omega_0 = 2$ real y positivo. La línea punteada horizontal con valor igual a la unidad corresponde a la solución armónica semiclásica dada por $E_0^{armsc} = \varepsilon\Omega_0/2 - \sigma_2/4 = \varepsilon - 1/4$, mientras que al añadirse las correcciones perturbativas se tiene la línea magenta a trazos. Las soluciones variacionales (línea verde punteada para la aproximación armónica y línea verde a trazos para las correcciones) mejoran estos resultados aproximándolos al resultado cuántico. Debe tenerse en cuenta que para valores bajos de ε el *tunneling* a través de la barrera de potencial da lugar a la existencia de un doblete asociado a las funciones de onda simétrica y antisimétrica en los pozos. La energía variacional (líneas verde) se aproxima al valor medio de la energía del doblete, representada por una línea continua azul en la Fig. (5.4). A medida que

aumenta el valor de ϵ la energía del doblete va aumentando. Al llegar al valor $\epsilon = 0,2566$, que es cuando se produce la bifurcación en las frecuencias variacionales, convirtiéndose en complejas, el doblete de hecho ya no existe. (En la figura puede apreciarse un cambio brusco en la solución variacional para este valor de ϵ). En ese momento las posiciones Q_s de equilibrio pasan de ser reales a complejas, y debe elegirse como solución variacional más estable la asociada a $Q = 0$ (representada por las líneas de color violeta en la figura: línea punteada para la aproximación armónica y línea a trazos para las correcciones perturbativas). La transición de una solución a otra no puede producirse de forma suave, puesto que se trata de paquetes distintos. Por otra parte, puede observarse que el acuerdo para la solución $Q = 0$ no es tan bueno como en el caso del pozo simple, debido a que para el doble pozo $Q_0 = 0$ es una solución clásicamente inestable.

Estos resultados ponen de manifiesto la utilidad del método variacional como herramienta de optimización de los resultados semiclásicos, consecuencia de una mejor elección de la aproximación armónica del problema. Sin embargo, esta optimización será más efectiva en los casos en que la aproximación semiclásica proporcione un resultado que sea físicamente aceptable. En cierta manera, la efectividad del método variacional requiere la existencia de una dinámica semiclásica subyacente que soporte los resultados variacionales. Esto es debido a que la solución clásica es el orden cero sobre el que se desarrolla el método variacional. Cuando no exista una solución aceptable clásicamente, los resultados variacionales deberán ser valorados de forma cualitativa, más que cuantitativa, interpretando los cambios en las soluciones como un reflejo de efectos cuánticos.

5.2. Método variacional dependiente del tiempo

En la sección anterior hemos aproximado el estado fundamental de un sistema cuántico optimizando la energía respecto a los parámetros de los que depende la función de onda de prueba utilizada (en nuestro caso, un paquete gaussiano asociado a un estado *squeezed* generalizado). Por supuesto, un procedimiento análogo dependiente del tiempo nos permitirá obtener una aproximación a la evolución temporal de la función de onda, y con ello una aproximación semiclásica al propagador cuántico. Este procedimiento variacional toma como base la acción de Dirac [Dir30],

$$\Gamma = \int dt \langle \Psi(t) | (i\hbar\partial_t - \hat{H}) | \Psi(t) \rangle, \quad (5.105)$$

de forma que la condición $\delta\Gamma = 0$ frente a variaciones independientes de $|\Psi(t)\rangle$ y $\langle\Psi(t)|$ (o bien de las partes real e imaginaria de $\Psi(x,t)$, puesto que son campos conjugados) da lugar a la ecuación de Schrödinger y a su compleja conjugada, respectivamente. La acción Γ se anula cuando se evalúa para el estado cuántico verdadero $|\Psi\rangle(t)$. La evolución temporal de $|\Psi\rangle(t)$ puede aproximarse haciendo que ésta tenga lugar a través de la dinámica de un conjunto de parámetros $\zeta_t \equiv (\zeta_{1t}, \zeta_{2t}, \dots)$. Así, por ejemplo, si hacemos que $|\Psi\rangle$ sea una gaussiana, ζ_t representará los parámetros de esta gaussiana. De esta forma, al sistema cuántico en cuestión puede asociarse un sistema hamiltoniano clásico en el que el espacio de fases puede identificarse con el espacio de los parámetros. En general, la bondad de la aproximación dependerá del grado de exactitud con que el movimiento verdadero pueda ser representado por el conjunto de parámetros elegido. Este esquema de aproximación, generalmente llamado *Principio Variacional Dependiente del Tiempo* (PVDT) [Dir30, Kla63, Jac79, Kra81, Kan81], constituye un procedimiento sistemático para asociar la dinámica de un sistema cuántico con un espacio de fases clásico. Dicho método supone una alternativa al método usual, en el cual los cálculos cuánticos llevados a cabo en el espacio de Hilbert son proyectados sobre el espacio de fases clásico mediante la utilización de “símbolos” (tales como el símbolo P , Q o de Weyl para operadores con ordenación normal, antinormal o simétrica, respectivamente, y otras distribuciones en el espacio de fases de las que se ha hablado en el Capítulo 1). El hecho de que esta técnica parta directamente del operador hamiltoniano cuántico sin hacer ninguna referencia al sistema clásico, y además pueda aplicarse incluso a sistemas que no tienen una dinámica clásica bien definida, ha hecho que algunos autores se refieran a ella como una *dinámica semicuántica* [Zha93, Pat94a, Pat94b, Zha95], que incluye a las dinámicas clásica y semiclásica como límites especiales o truncamientos de la misma.

Los paquetes de onda gaussianos presentan ciertas propiedades que los hacen bastante adecuados para ser utilizados como funciones de prueba en el TDVP. Por una parte, puesto que la transformada de Fourier de una gaussiana es asimismo una gaussiana, tienen un buen comportamiento en el espacio de fases. Por otra, su dinámica puede parametrizarse de forma sencilla por las variables (c-números) que es-

pecifican su centroide y su anchura. Además, debido a que forman un conjunto sobrecompleto, cualquier función de onda arbitraria puede desarrollarse en términos de gaussianas (aunque sea un número infinito de ellas). Estas propiedades han hecho que el uso de tales funciones en métodos variacionales basados en el TDVP se haya extendido a distintos campos de la física, desde las teorías de campo medio usadas en física nuclear o en teoría cuántica de campos [Kov89, Min97] hasta la química cuántica, aplicándose a problemas tales como la propagación de solitones [Cru00], oscilaciones y ondas no lineales [Whi74] o *scattering* en sistemas de fermiones [Dro95]. Todos estos métodos son conocidos con nombres como aproximación variacional gaussiana dependiente del tiempo, o *ansatz* de estado coherente-*squeezed*. [Jac79, Raj83, Pat94a, Pat94b, Co086, Hel75, Hel76, Lit86a, Lit86b, Liu98a, Liu98b].

Hemos elegido como funciones de prueba estados coherentes generalizados de la forma

$$|\Psi\rangle(t) = e^{i\phi_t} \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(v_t, v_t^*)|0\rangle, \quad (5.106)$$

siendo \hat{D} y \hat{S} los operadores de desplazamiento y *squeezing*, respectivamente, y ϕ_t una cierta fase (en principio compleja) que habrá que determinar. De este modo, la evolución temporal de la función de onda vendrá determinada por la evolución del conjunto de parámetros $\{\alpha_t, \alpha_t^*, v_t, v_t^*, \phi_t, \phi_t^*\}$. (Los valores iniciales $\{\alpha_0, \alpha_0^*, v_0, v_0^*, \phi_0, \phi_0^*\}$ de estas variables pueden elegirse como aquéllos que optimizan el problema estacionario, siguiendo el procedimiento descrito en la sección anterior). Como sabemos, la condición de extremo para el funcional Γ conduce a las ecuaciones de Euler-Lagrange para una lagrangiana $\mathcal{L}(\alpha_t, v_t, \phi_t; \dot{\alpha}_t, \dot{v}_t, \dot{\phi}_t)$ definida por

$$\begin{aligned} \Gamma &= \int_{t_1}^{t_2} dt \langle 0 | \hat{S}^\dagger(v_t, v_t^*) \hat{D}^\dagger(\alpha_t, \alpha_t^*) e^{-i\phi_t} (i\hbar\partial_t - \hat{H}) e^{i\phi_t} \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(v_t, v_t^*) | 0 \rangle \\ &\equiv \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}(\alpha_t, \alpha_t^*, v_t, v_t^*, \phi_t, \phi_t^*; \dot{\alpha}_t, \dot{\alpha}_t^*, \dot{v}_t, \dot{v}_t^*, \dot{\phi}_t, \dot{\phi}_t^*). \end{aligned} \quad (5.107)$$

Efectivamente, variaciones infinitesimales $\delta\zeta_t$, $\delta\dot{\zeta}_t$ en los parámetros $\zeta_t \equiv (\alpha_t, \alpha_t^*, v_t, v_t^*, \phi_t, \phi_t^*)$, $\dot{\zeta}_t \equiv (\dot{\alpha}_t, \dot{\alpha}_t^*, \dot{v}_t, \dot{v}_t^*, \dot{\phi}_t, \dot{\phi}_t^*)$ tales que $\delta\zeta_{t_1} = \delta\zeta_{t_2} = 0$, producen una variación en la acción Γ que, hasta primer orden en $\delta\zeta_t$, $\delta\dot{\zeta}_t$, viene dada por

$$\begin{aligned} \delta\Gamma &= \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}(\zeta_t + \delta\zeta_t; \dot{\zeta}_t + \delta\dot{\zeta}_t) - \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}(\zeta_t; \dot{\zeta}_t) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\zeta_t} \delta\zeta_t + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\zeta}_t} \delta\dot{\zeta}_t + \dots \right) \\ &\simeq \int_{t_1}^{t_2} dt \delta\zeta_t \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\zeta_t} - \frac{d}{dt} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\zeta}_t} \right), \end{aligned}$$

donde hemos escrito $\delta\dot{\zeta}_t = \frac{d}{dt}\delta\zeta_t$ y al realizar la segunda integral por partes hemos tenido en cuenta que los términos de superficie se anulan debido a las condiciones de contorno $\delta\zeta_{t_1} = \delta\zeta_{t_2} = 0$. Puesto que $\delta\Gamma = 0$ para cualquier valor de dt y $\delta\zeta_t$, esta condición de extremo corresponde al conjunto de *ecuaciones*

de Euler-Lagrange (EEL):

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \zeta_t} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\zeta}_t} = 0,$$

esto es:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \alpha_t} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\alpha}_t} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \alpha_t^*} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\alpha}_t^*} = 0 \quad (5.108a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_t} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{v}_t} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_t^*} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{v}_t^*} = 0 \quad (5.108b)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_t} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_t} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_t^*} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_t^*} = 0. \quad (5.108c)$$

La lagrangiana definida en (5.107), para un operador hamiltoniano escrito en forma normal como

$$\hat{H}(a, a^\dagger) = \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} a^{\dagger n} a^m \quad (5.109)$$

viene dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &\equiv \langle 0 | \hat{S}_{v_t, v_t^*}^\dagger \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*}^\dagger e^{-i\phi_t^*} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) e^{i\phi_t} \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} | 0 \rangle \\ &\equiv i\hbar \langle 0 | \hat{S}_{v_t, v_t^*}^\dagger \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*}^\dagger e^{-i\phi_t^*} \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i\phi_t} \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} \right) | 0 \rangle - e^{i(\phi_t - \phi_t^*)} H'_0(\alpha_t, \alpha_t^*, v_t, v_t^*), \end{aligned} \quad (5.110)$$

donde temporalmente escribiremos $\hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \equiv \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*)$ y $\hat{S}_{v_t, v_t^*} \equiv \hat{S}(v_t, v_t^*)$ para simplificar la notación, y donde $H'_0(\alpha_t, \alpha_t^*, v_t, v_t^*)$ (denotado así en lugar de H'_{00}) es el término de orden más bajo del desarrollo

$$\hat{H}'(\alpha_t, \alpha_t^*, v_t, v_t^*; a, a^\dagger) \equiv \hat{S}_{v_t, v_t^*}^\dagger \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*}^\dagger \hat{H}(a, a^\dagger) \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} = \sum_{i,j} H'_{ij}(\alpha_t, \alpha_t^*, v_t, v_t^*) a^{\dagger i} a^j. \quad (5.111)$$

Definiendo el operador \hat{H}^{DS} mediante

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} \right) \equiv \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} \hat{H}^{DS}, \quad (5.112)$$

podemos escribir la derivada temporal de la ec. (5.110) como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i\phi_t} \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} \right) &= i\dot{\phi}_t e^{i\phi_t} \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} + e^{i\phi_t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} \right) \\ &= i\dot{\phi}_t e^{i\phi_t} \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} + e^{i\phi_t} \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} \hat{H}^{DS} \\ &= e^{i\phi_t} \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} \left(i\dot{\phi}_t + \hat{H}^{DS} \right), \end{aligned} \quad (5.113)$$

con lo que la lagrangiana (5.110) toma la forma

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\zeta_t, \dot{\zeta}_t) &= i\hbar \langle 0 | \hat{S}_{v_t, v_t^*}^\dagger \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*}^\dagger e^{-i\phi_t^*} e^{i\phi_t} \hat{D}_{\alpha_t, \alpha_t^*} \hat{S}_{v_t, v_t^*} \left(i\dot{\phi}_t + \hat{H}^{DS} \right) | 0 \rangle - e^{i(\phi_t - \phi_t^*)} H'_0(\alpha_t, \alpha_t^*, v_t, v_t^*) \\ &= e^{i(\phi_t - \phi_t^*)} \left[i\hbar \left(i\dot{\phi}_t + H_0^{DS}(\alpha_t, \alpha_t^*, v_t, v_t^*; \dot{\alpha}_t, \dot{\alpha}_t^*, \dot{v}_t, \dot{v}_t^*) \right) - H'_0(\alpha_t, \alpha_t^*, v_t, v_t^*) \right], \end{aligned} \quad (5.114)$$

donde

$$H_0^{DS}(\alpha_t, \alpha_t^*, v_t, v_t^*, \dot{\alpha}_t, \dot{\alpha}_t^*, \dot{v}_t, \dot{v}_t^*) \equiv \langle 0 | \hat{H}^{DS} | 0 \rangle \quad (5.115)$$

es el término independiente del operador \hat{H}^{DS} (que igualmente denotamos de esta forma en lugar de H_{00}^{DS} para simplificar la notación). Este operador, definido en (5.112), viene dado por

$$\hat{H}^{DS} = \hat{S}^\dagger(v_t, v_t^*) \partial_t \hat{S}(v_t, v_t^*) + \hat{S}^\dagger(v_t, v_t^*) \hat{D}^\dagger(\alpha_t, \alpha_t^*) \partial_t \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(v_t, v_t^*), \quad (5.116)$$

y para obtener una expresión del mismo resulta útil hacer uso de la representación matricial del álgebra h_6 asociada a los operadores $\{\hat{n} + \frac{1}{2}, a^{\dagger 2}, a^2, a^\dagger, a, \hat{I}\}$. Es conveniente indicar que en lo sucesivo el *squeezing* vendrá descrito bien por las variables (v_t, v_t^*) o bien por las variables (s_t, s_t^*) , relacionadas entre sí mediante (5.13), de manera que emplearemos indistintamente la notación $\hat{S}(s_t, s_t^*)$ o $\hat{S}(v_t, v_t^*)$ según convenga. De esta forma, la matriz asociada a \hat{H}^{DS} vendrá dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{M}[\hat{H}^{DS}] &= \mathbf{M}[\hat{S}(-s_t, -s_t^*)] \cdot \mathbf{M}[\hat{S}(s_t, s_t^*)] \\ &+ \mathbf{M}[\hat{S}(-s_t, -s_t^*)] \cdot \mathbf{M}[\hat{D}(-\alpha_t, -\alpha_t^*)] \cdot \mathbf{M}[\hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*)] \cdot \mathbf{M}[\hat{S}(s_t, s_t^*)], \end{aligned}$$

esto es:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}[\hat{H}^{DS}] &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1+s_t s_t^*} & -s_t & 0 \\ 0 & -s_t^* & \sqrt{1+s_t s_t^*} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{s_t s_t^* + s_t s_t^*}{2\sqrt{1+s_t s_t^*}} & s_t & 0 \\ 0 & s_t^* & \frac{s_t s_t^* + s_t s_t^*}{2\sqrt{1+s_t s_t^*}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1+s_t s_t^*} & -s_t & 0 \\ 0 & -s_t^* & \sqrt{1+s_t s_t^*} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha_t/\sqrt{\hbar} & 1 & 0 & 0 \\ -\alpha_t^*/\sqrt{\hbar} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\alpha_t^*/\sqrt{\hbar} & \alpha_t/\sqrt{\hbar} & 1 \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dot{\alpha}_t/\sqrt{\hbar} & 0 & 0 & 0 \\ \dot{\alpha}_t^*/\sqrt{\hbar} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dot{\alpha}_t^*/\sqrt{\hbar} & -\dot{\alpha}_t/\sqrt{\hbar} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1+s_t s_t^*} & s_t & 0 \\ 0 & s_t^* & \sqrt{1+s_t s_t^*} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &\equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & 0 \\ M_{31} & M_{32} & -M_{22} & 0 \\ M_{41} & M_{31} & -M_{21} & 0 \end{pmatrix} \quad (5.117) \\ &= M_{22} \mathbf{M}[\hat{n} + \frac{1}{2}] - \frac{M_{41}}{2} \mathbf{M}[\hat{I}] - M_{31} \mathbf{M}[a] + M_{21} \mathbf{M}[a^\dagger] + \frac{M_{23}}{2} \mathbf{M}[a^{\dagger 2}] - \frac{M_{32}}{2} \mathbf{M}[a^2]. \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta las representaciones matriciales de los elementos de h_6 dadas por (1.65), el operador

\hat{H}^{DS} tiene la forma

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{DS} &= \frac{1}{2\hbar}(\alpha_t^* \dot{\alpha}_t - \alpha_t \dot{\alpha}_t^*) + \frac{1}{4}(s_t^* \dot{s}_t - s_t \dot{s}_t^*) \\
&+ \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \left(\dot{\alpha}_t \sqrt{1 + s_t s_t^*} - s_t \dot{\alpha}_t^* \right) a^\dagger + \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \left(-\dot{\alpha}_t^* \sqrt{1 + s_t s_t^*} + s_t^* \dot{\alpha}_t \right) a \\
&+ \left(\frac{\dot{s}_t \sqrt{1 + s_t s_t^*}}{2} - \frac{s_t s_t^* \dot{s}_t}{4\sqrt{1 + s_t s_t^*}} - \frac{s_t^2 \dot{s}_t^*}{4\sqrt{1 + s_t s_t^*}} \right) a^{\dagger 2} \\
&+ \frac{1}{2}(s_t^* \dot{s}_t - s_t \dot{s}_t^*) a^\dagger a \\
&+ \left(-\frac{s_t^* \sqrt{1 + s_t s_t^*}}{2} + \frac{s_t s_t^* \dot{s}_t^*}{4\sqrt{1 + s_t s_t^*}} + \frac{s_t^{*2} \dot{s}_t}{4\sqrt{1 + s_t s_t^*}} \right) a^2.
\end{aligned} \tag{5.118}$$

Así pues, la lagrangiana (5.114) se escribe:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\zeta_t, \dot{\zeta}_t) &= e^{i(\phi_t - \phi_t^*)} \left[i\hbar \left(i\dot{\phi}_t + H_0^{DS}(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*; \dot{\alpha}_t, \dot{\alpha}_t^*, \dot{s}_t, \dot{s}_t^*) \right) - H_0'(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*) \right] \\
&= e^{i(\phi_t - \phi_t^*)} \left[-\hbar \dot{\phi}_t + \frac{i}{2}(\alpha_t^* \dot{\alpha}_t - \alpha_t \dot{\alpha}_t^*) + \frac{i\hbar}{4}(s_t^* \dot{s}_t - s_t \dot{s}_t^*) - H_0'(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*) \right].
\end{aligned} \tag{5.119}$$

El término independiente $H_0'(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*)$ del hamiltoniano transformado (5.111) puede obtenerse haciendo uso de la función generatriz definida en (5.18):

$$\begin{aligned}
H_0'(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t) &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \langle 0 | \hat{S}^\dagger(s_t, s_t^*) \hat{D}^\dagger(\alpha_t, \alpha_t^*) a^{\dagger n} a^m \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(s_t, s_t^*) | 0 \rangle \\
&= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \langle 0 | \hat{S}^\dagger(s_t, s_t^*) \hat{D}^\dagger(\alpha_t, \alpha_t^*) e^{\sigma a^\dagger} e^{\sigma^* a} \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(s_t, s_t^*) | 0 \rangle \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\
&= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[e^{s_t s_t^* \sigma \sigma^* + \frac{1}{2} s_t^* c_t \sigma^2 + \frac{1}{2} s_t c_t \sigma^{*2} + \hbar^{-1/2} \alpha_t^* \sigma + \hbar^{-1/2} \alpha_t \sigma^*} \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\
&\equiv \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} [g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0}.
\end{aligned} \tag{5.120}$$

En esta expresión hemos hecho uso de la variable c_t definida por $c_t = \cosh \sqrt{v_t v_t^*}$ y relacionada con los parámetros del *squeezing* s_t y s_t^* a través de la ecuación de ligadura

$$c_t \equiv \sqrt{1 + s_t s_t^*}. \tag{5.121}$$

La existencia de esta ligadura permite introducir un multiplicador de Lagrange λ y definir una nueva lagrangiana, $\tilde{\mathcal{L}}$, relacionada con la anterior mediante

$$\tilde{\mathcal{L}} = \mathcal{L} - \lambda (c_t^2 - s_t s_t^*). \tag{5.122}$$

Las EEL (5.108a-5.108b) para esta nueva lagrangiana vienen dadas por

$$\dot{\alpha}_t^* = i \frac{\partial H'_0}{\partial \alpha_t} - \frac{i}{2} \alpha_t^* (\dot{\phi}_t - \dot{\phi}_t^*) \quad (5.123a)$$

$$\dot{\alpha}_t = -i \frac{\partial H'_0}{\partial \alpha_t^*} - \frac{i}{2} \alpha_t (\dot{\phi}_t - \dot{\phi}_t^*) \quad (5.123b)$$

$$\dot{s}_t^* = \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial H'_0}{\partial s_t} - \frac{2i}{\hbar} \lambda s_t^* e^{-i(\phi_t - \phi_t^*)} - \frac{i}{2} s_t^* (\dot{\phi}_t - \dot{\phi}_t^*) \quad (5.123c)$$

$$\dot{s}_t = \frac{-2i}{\hbar} \frac{\partial H'_0}{\partial s_t^*} + \frac{2i}{\hbar} \lambda s_t e^{-i(\phi_t - \phi_t^*)} - \frac{i}{2} s_t (\dot{\phi}_t - \dot{\phi}_t^*). \quad (5.123d)$$

La EEL para c_t no es una ecuación diferencial, sino una ecuación algebraica a partir de la cual puede obtenerse el multiplicador de Lagrange λ :

$$\lambda = \frac{-1}{2c_t} e^{i(\phi_t - \phi_t^*)} \frac{\partial H'_0}{\partial c_t}, \quad (5.124)$$

lo que permite simplificar las ecuaciones (5.123c-5.123d) como

$$\dot{s}_t^* = \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial H'_0}{\partial s_t} + \frac{i}{\hbar} \frac{s_t^*}{c_t} \frac{\partial H'_0}{\partial c_t} - \frac{i}{2} s_t^* (\dot{\phi}_t - \dot{\phi}_t^*) \quad (5.125a)$$

$$\dot{s}_t = \frac{-2i}{\hbar} \frac{\partial H'_0}{\partial s_t^*} - \frac{i}{\hbar} \frac{s_t}{c_t} \frac{\partial H'_0}{\partial c_t} - \frac{i}{2} s_t (\dot{\phi}_t - \dot{\phi}_t^*). \quad (5.125b)$$

Las EEL para ϕ_t y ϕ_t^* dan lugar a la misma ecuación diferencial:

$$\dot{\phi}_t = \dot{\phi}_t^* = \frac{i}{2\hbar} (\alpha_t^* \dot{\alpha}_t - \alpha_t \dot{\alpha}_t^*) + \frac{i}{4} (s_t^* \dot{s}_t - s_t \dot{s}_t^*) - \frac{1}{\hbar} H'_0, \quad (5.126)$$

con lo que podemos concluir que la variable ϕ_t es *real* (como por otra parte indica el hecho de que la parte derecha de la igualdad en (5.126) es real).¹⁰ Es conveniente introducir el cambio de variables

$$\varphi_t \equiv \hbar \phi_t, \quad (5.128)$$

¹⁰ ϕ_t es un factor de fase global que debe incluirse siempre que se trate un problema variacional dependiente del tiempo. Así, en general, si $\mathcal{L} = \langle \Psi_t | (i\hbar \partial_t - \hat{H}) | \Psi_t \rangle$ es la lagrangiana asociada a la función $|\Psi_t\rangle$, la lagrangiana para $|\Psi_t'\rangle = |\Psi_t\rangle f_t$, siendo f_t una función compleja de t , vendrá dada por

$$\mathcal{L}' = \langle \Psi_t' | (i\hbar \partial_t - \hat{H}) | \Psi_t' \rangle = i\hbar \langle \Psi_t | f_t^* \dot{f}_t | \Psi_t \rangle + i\hbar \langle \Psi_t | f_t^* f_t \partial_t | \Psi_t \rangle - \langle \Psi_t | f_t^* \hat{H} f_t | \Psi_t \rangle = i\hbar f_t^* \dot{f}_t + f_t^* f_t \mathcal{L}.$$

Las ecuaciones de Euler-Lagrange $\partial_x \mathcal{L}' - \frac{d}{dt} \partial_{\dot{x}} \mathcal{L}' = 0$ para $x = f_t, f_t^*$

$$i\hbar \dot{f}_t^* = \mathcal{L}'_{f_t^*} \quad ; \quad -i\hbar \dot{f}_t = \mathcal{L}'_{f_t}, \quad (5.127)$$

pueden integrarse obteniéndose

$$f_t = e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{L}' dt'} \quad ; \quad f_t^* = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{L}' dt'}.$$

Por lo tanto, la forma más general de una función que satisfaga un problema variacional dependiente del tiempo viene dada por

$$|\Psi_t'\rangle = |\Psi_t\rangle e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{L}' dt'} \equiv |\Psi_t\rangle e^{i\varphi_t}.$$

de forma que la aproximación al estado (5.106) puede escribirse como

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(v_t, v_t^*) e^{i\varphi_t/\hbar}, \quad (5.129)$$

y la ecuación para la variable dinámica (real) φ_t toma la forma

$$\dot{\varphi}_t = \frac{i}{2} (\alpha_t^* \dot{\alpha}_t - \alpha_t \dot{\alpha}_t^*) + \frac{i\hbar}{4} (s_t^* \dot{s}_t - s_t \dot{s}_t^*) - H_0'. \quad (5.130)$$

Esta fase consta de dos partes: una de ellas consiste en el último término, que da cuenta de la evolución temporal y es una *fase dinámica*, que puede escribirse como

$$\varphi_t^d = - \int_0^t H_0'(\alpha_\tau, \alpha_\tau^*, s_\tau, s_\tau^*) d\tau. \quad (5.131)$$

La otra parte puede verse como la diferencia entre la fase total y la fase dinámica, y puede entenderse como una *fase geométrica*:

$$\varphi_t^g = \frac{i}{2} \int_0^t (\alpha_\tau^* \dot{\alpha}_\tau - \alpha_\tau \dot{\alpha}_\tau^*) d\tau + \frac{i\hbar}{4} \int_0^t (s_\tau^* \dot{s}_\tau - s_\tau \dot{s}_\tau^*) d\tau. \quad (5.132)$$

El primer término de esta fase geométrica sobrevive en el límite clásico, y es una expresión generalizada de la fase de Bohr-Sommerfeld $\int p dq$. Puede demostrarse que corresponde con la versión clásica de Aharonov-Anandan de la fase de Berry [Lit88]. El segundo término está relacionado con la estabilidad lineal y es posible identificarlo con la fase de Maslov.

Las ecuaciones anteriores se simplifican para dar finalmente

$$\dot{\alpha}_t^* = i \frac{\partial H_0'}{\partial \alpha_t} \quad (5.133a)$$

$$\dot{\alpha}_t = -i \frac{\partial H_0'}{\partial \alpha_t^*} \quad (5.133b)$$

$$\dot{s}_t^* = \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial H_0'}{\partial s_t} + \frac{i}{\hbar} \frac{s_t^*}{c_t} \frac{\partial H_0'}{\partial c_t} \quad (5.133c)$$

$$\dot{s}_t = \frac{-2i}{\hbar} \frac{\partial H_0'}{\partial s_t^*} - \frac{i}{\hbar} \frac{s_t}{c_t} \frac{\partial H_0'}{\partial c_t}. \quad (5.133d)$$

De esta manera, las ecuaciones de movimiento para un hamiltoniano genérico (5.109) quedan completamente especificadas, puesto que las derivadas de H_0' pueden determinarse a partir de la expresión (5.120):

$$\begin{aligned}\frac{\partial H'_0}{\partial \alpha_t} &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[\hbar^{-1/2} \sigma^* g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*) \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m-1)/2} m \frac{\partial^{n+m-1}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m-1}} [g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0}\end{aligned}\quad (5.134a)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial H'_0}{\partial \alpha_t^*} &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[\hbar^{-1/2} \sigma g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*) \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m-1)/2} n \frac{\partial^{n+m-1}}{\partial \sigma^{n-1} \partial \sigma^{*m}} [g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0}\end{aligned}\quad (5.134b)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial H'_0}{\partial s_t} &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[(s_t^* \sigma \sigma^* + \frac{c_t}{2} v^{*2}) g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*) \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \left\{ nm s_t^* \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^{n-1} \partial \sigma^{*m-1}} [g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right. \\ &\quad \left. + m(m-1) \frac{c_t}{2} \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m-2}} [g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right\}\end{aligned}\quad (5.134c)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial H'_0}{\partial s_t^*} &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[(s_t \sigma \sigma^* + \frac{c_t}{2} \sigma^2) g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*) \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \left\{ nm s_t \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^{n-1} \partial \sigma^{*m-1}} [g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right. \\ &\quad \left. + n(n-1) \frac{c_t}{2} \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^{n-2} \partial \sigma^*} [g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right\}\end{aligned}\quad (5.134d)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial H'_0}{\partial c_t} &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \frac{\partial^{n+m}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m}} \left[\left(\frac{1}{2} s_t^* \sigma^2 + \frac{1}{2} s_t \sigma^{*2} \right) g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*) \right] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} \left\{ n(n-1) \frac{s_t^*}{2} \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^{n-2} \partial \sigma^{*m}} [g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right. \\ &\quad \left. + m(m-1) \frac{s_t}{2} \frac{\partial^{n+m-2}}{\partial \sigma^n \partial \sigma^{*m-2}} [g(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t; \sigma, \sigma^*)] \Big|_{\sigma=\sigma^*=0} \right\}.\end{aligned}\quad (5.134e)$$

Puede demostrarse, de manera análoga al caso estacionario, que la resolución del sistema de ecuaciones variacionales de Euler-Lagrange (5.108) es equivalente a resolver el sistema de ecuaciones:

$$\tilde{H}_{00}(\zeta_t; \dot{\zeta}_t) = 0 \quad (5.135a)$$

$$\tilde{H}_{10}(\zeta_t; \dot{\zeta}_t) = 0 \quad (5.135b)$$

$$\tilde{H}_{01}(\zeta_t; \dot{\zeta}_t) = 0 \quad (5.135c)$$

$$\tilde{H}_{20}(\zeta_t; \dot{\zeta}_t) = 0 \quad (5.135d)$$

$$\tilde{H}_{02}(\zeta_t; \dot{\zeta}_t) = 0, \quad (5.135e)$$

donde $\tilde{H}_{ij}(\zeta_t; \dot{\zeta}_t)$ son los coeficientes del desarrollo

$$\begin{aligned} \hat{H}(\zeta_t, \dot{\zeta}_t; a, a^\dagger) &\equiv e^{-i\phi_t^*} \hat{S}^\dagger(\mathbf{v}_t, \mathbf{v}_t^*) \hat{D}^\dagger(\alpha_t, \alpha_t^*) (\hat{H}(a, a^\dagger) - i\hbar\partial_t) e^{i\phi_t} \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(\mathbf{v}_t, \mathbf{v}_t^*) \\ &= \sum_{i,j} \tilde{H}_{ij}(\zeta_t; \dot{\zeta}_t) a^{\dagger i} a^j. \end{aligned} \quad (5.136)$$

Para ello, consideremos la acción de Dirac (5.105), escrita como

$$\Gamma = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}(\zeta_t, \dot{\zeta}_t) = - \int_{t_1}^{t_2} dt \langle 0 | \hat{H}(\zeta_t, \dot{\zeta}_t; a, a^\dagger) | 0 \rangle, \quad (5.137)$$

donde $\zeta_t \equiv (\alpha_t, \alpha_t^*, \mathbf{v}_t, \mathbf{v}_t^*, \phi_t, \phi_t^*)$, $\dot{\zeta}_t \equiv (\dot{\alpha}_t, \dot{\alpha}_t^*, \dot{\mathbf{v}}_t, \dot{\mathbf{v}}_t^*, \dot{\phi}_t, \dot{\phi}_t^*)$ y \hat{H} viene dado por (5.136). Al inicio de este capítulo se ha mostrado cómo variaciones infinitesimales en los parámetros ζ_t y $\dot{\zeta}_t$ inducen una variación infinitesimal en esta acción, de manera que la condición $\delta\Gamma = 0$ conduce a las EEL. Pueden obtenerse unas ecuaciones variacionales equivalentes teniendo en cuenta que el efecto de estas pequeñas variaciones puede obtenerse aplicando una transformación infinitesimal al operador \hat{H} , de forma que

$$\begin{aligned} \hat{H}_\delta &\equiv \hat{S}^\dagger(\delta\mathbf{v}_t, \delta\mathbf{v}_t^*) \hat{D}^\dagger(\delta\alpha_t, \delta\alpha_t^*) e^{-i\delta\phi_t^*} \hat{H} e^{i\delta\phi_t} \hat{D}(\delta\alpha_t, \delta\alpha_t^*) \hat{S}(\delta\mathbf{v}_t, \delta\mathbf{v}_t^*) \\ &= e^{\frac{1}{2}(\delta\mathbf{v}_t^* a^2 - \delta\mathbf{v}_t a^{\dagger 2})} e^{\hbar^{-1/2}(\delta\alpha_t^* a - \delta\alpha_t a^\dagger)} e^{-i\delta\phi_t^*} \hat{H} e^{i\delta\phi_t} e^{\hbar^{-1/2}(\delta\alpha_t a^\dagger - \delta\alpha_t^* a)} e^{\frac{1}{2}(\delta\mathbf{v}_t a^{\dagger 2} - \delta\mathbf{v}_t^* a^2)} \\ &\simeq \left(\hat{I} + \frac{1}{2}\delta\mathbf{v}_t^* a^2 - \frac{1}{2}\delta\mathbf{v}_t a^{\dagger 2} \right) \left(\hat{I} + \hbar^{-1/2}\delta\alpha_t^* a - \hbar^{-1/2}\delta\alpha_t a^\dagger \right) (1 - i\delta\phi_t^*) \hat{H} \\ &\times (1 + i\delta\phi_t) \left(\hat{I} + \hbar^{-1/2}\delta\alpha_t a^\dagger - \hbar^{-1/2}\delta\alpha_t^* a \right) \left(\hat{I} + \frac{1}{2}\delta\mathbf{v}_t a^{\dagger 2} - \frac{1}{2}\delta\mathbf{v}_t^* a^2 \right) \\ &\simeq \hat{H} + i\delta\phi_t \hat{H} - i\delta\phi_t^* \hat{H} - \hbar^{-1/2}\delta\alpha_t [a^\dagger, \hat{H}] + \hbar^{-1/2}\delta\alpha_t^* [a, \hat{H}] - \frac{1}{2}\delta\mathbf{v}_t [a^{\dagger 2}, \hat{H}] + \frac{1}{2}\delta\mathbf{v}_t^* [a^2, \hat{H}] + \dots, \end{aligned}$$

donde hemos despreciado los términos de orden superior en $\delta\zeta_t$. El correspondiente efecto de estas variaciones en la lagrangiana vendrá dado por tanto por

$$\begin{aligned} -\mathcal{L}_\delta &\equiv \langle 0 | \hat{H}_\delta | 0 \rangle \\ &= \tilde{H}_{00} + i\delta\phi_t \tilde{H}_{00} - i\delta\phi_t^* \tilde{H}_{00} + \hbar^{-1/2}\delta\alpha_t \tilde{H}_{01} + \hbar^{-1/2}\delta\alpha_t^* \tilde{H}_{10} + \delta\mathbf{v}_t \tilde{H}_{02} + \delta\mathbf{v}_t^* \tilde{H}_{20} + \dots, \end{aligned}$$

donde hemos hecho uso de las ecs. (5.23) aplicadas al operador \hat{H} . Como consecuencia de esta transformación infinitesimal, la acción sufrirá una variación dada por

$$\begin{aligned} \delta\Gamma &= \int dt \mathcal{L}_\delta - \int dt \mathcal{L} = \int dt \left(-\langle 0 | \hat{H}_\delta | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle \right) \\ &\simeq \int dt \left(-i\delta\phi_t \tilde{H}_{00} + i\delta\phi_t^* \tilde{H}_{00} - \hbar^{-1/2}\delta\alpha_t \tilde{H}_{01} - \hbar^{-1/2}\delta\alpha_t^* \tilde{H}_{10} - \delta\mathbf{v}_t \tilde{H}_{02} - \delta\mathbf{v}_t^* \tilde{H}_{20} \right). \end{aligned}$$

La condición $\delta\Gamma = 0$ para cualquier variación $\delta\zeta_t$ conduce al sistema de ecuaciones (5.135).

5.2.1. El propagador semiclásico

El método variacional dependiente del tiempo contiene a la dinámica semiclásica como uno de sus límites (límite $\hbar \rightarrow 0$). Para obtener las ecuaciones de evolución semiclásicas de los parámetros variacionales ζ_t es necesario determinar el orden dominante (en \hbar) de los desarrollos (5.134). Éstos vienen dados por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_0^l(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t)}{\partial \alpha_t} &\simeq \sum_{n,m} c_{nm} m \alpha_t^{*n} \alpha_t^{m-1} \equiv \frac{\partial \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t} \\ \frac{\partial H_0^l(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t)}{\partial \alpha_t^*} &\simeq \sum_{n,m} c_{nm} n \alpha_t^{*n-1} \alpha_t^m \equiv \frac{\partial \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^*} \\ \frac{\partial H_0^l(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t)}{\partial s_t} &\simeq \hbar \sum_{n,m} c_{nm} \left[n m s_t^* \alpha_t^{*n-1} \alpha_t^{m-1} + m(m-1) \frac{c_t}{2} \alpha_t^{*n} \alpha_t^{m-2} \right] \\ &\equiv \hbar \left[s_t^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t \partial \alpha_t^*} + \frac{c_t}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^2} \right] \\ \frac{\partial H_0^l(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t)}{\partial s_t^*} &\simeq \hbar \sum_{n,m} c_{nm} \left[n m s_t \alpha_t^{*n-1} \alpha_t^{m-1} + n(n-1) \frac{c_t}{2} \alpha_t^{*n-2} \alpha_t^m \right] \\ &\equiv \hbar \left[s_t \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t \partial \alpha_t^*} + \frac{c_t}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^{*2}} \right] \\ \frac{\partial H_0^l(\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*, c_t)}{\partial c_t} &\simeq \hbar \sum_{n,m} c_{nm} \left[n(n-1) \frac{s_t^*}{2} \alpha_t^{*n-2} \alpha_t^m + m(m-1) \frac{s_t}{2} \alpha_t^{*n} \alpha_t^{m-2} \right] \\ &\equiv \hbar \left[\frac{s_t^*}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^{*2}} + \frac{s_t}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^2} \right], \end{aligned}$$

donde $\mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)$ es una función clásica correspondiente al orden más bajo del desarrollo (5.120) de $H_0^l = \langle 0 | \hat{S}^\dagger \hat{D}^\dagger \hat{H} \hat{D} \hat{S} | 0 \rangle$, dado por

$$\mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t) = \sum_{n,m} c_{nm} \alpha_t^{*n} \alpha_t^m. \quad (5.138)$$

Así pues, en el límite semiclásico las ecuaciones de movimiento para los parámetros que determinan el estado de prueba $|\Psi(t)\rangle$ vienen dadas por

$$\dot{\alpha}_t^* = i \frac{\partial \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t} \quad (5.139a)$$

$$\dot{\alpha}_t = -i \frac{\partial \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^*} \quad (5.139b)$$

$$\dot{s}_t^* = i \left[\left(c_t + \frac{s_t s_t^*}{2c_t} \right) \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^2} + 2s_t^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t \partial \alpha_t^*} + \frac{s_t^{*2}}{2c_t} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^{*2}} \right] \quad (5.139c)$$

$$\dot{s}_t = -i \left[\frac{s_t^2}{2c_t} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^2} + 2s_t \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t \partial \alpha_t^*} + \left(c_t + \frac{s_t s_t^*}{2c_t} \right) \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\alpha_t^*, \alpha_t)}{\partial \alpha_t^{*2}} \right]. \quad (5.139d)$$

Estas ecuaciones indican que en el límite semiclásico la evolución de los parámetros del desplazamiento y del *squeezing* es independiente, puesto que las ecuaciones en (α_t, α_t^*) y (s_t, s_t^*) se desacoplan.

Las variables α_t y α_t^* (“variables promedio”), que especifican el centroide del paquete gaussiano, siguen una evolución clásica gobernada por las ecuaciones de Hamilton. Por otra parte, la evolución de las variables s_t y s_t^* (“variables de fluctuación”), como veremos, está directamente relacionada con la estabilidad lineal clásica, y da cuenta de la deformación del paquete de ondas.

En el Capítulo 2 se obtuvo una expresión semiclásica para el operador de evolución en forma de IVR (representación de valores iniciales). Es posible obtener esta forma a partir del límite semiclásico del método variacional a través de una generalización del mismo en la que se construye el estado de prueba mediante operadores no unitarios. A continuación comprobaremos que para un caso particular es posible reproducir los resultados de la *Thawed Gaussian Approximation* (TGA) propuesta por Heller [Hel75, Hel76], y analizaremos en detalle el orden de corrección de dicha aproximación.

Consideremos pues un estado de Bargmann inicial, $|\beta\rangle$, y evaluemos su evolución $\hat{U}(t)|\beta\rangle$. Para ello, podemos hacer uso de un *operador desplazamiento generalizado* (en general no unitario) y escribir

$$|\eta_0\rangle = e^{\eta_0 \xi_0^*/2\hbar} \hat{D}(\eta_0, \xi_0^*)|0\rangle \equiv e^{\eta_0 \xi_0^*/2\hbar} e^{\hbar^{-1/2}(\eta_0 a^\dagger - \xi_0^* a)}|0\rangle, \quad (5.140)$$

donde ξ_0^* es una variable compleja arbitraria. Únicamente en el caso de que ξ_0^* sea complejo conjugado de η_0 , el operador $\hat{D}(\eta_0, \xi_0^*)$ será unitario. Para la evolución del estado $|\beta\rangle$ proponemos el siguiente *ansatz*:

$$\hat{U}(t) = \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{U}'(t), \quad (5.141)$$

es decir, suponemos que este estado evoluciona acorde a un operador desplazamiento (no unitario) dependiente del tiempo, y “el resto” de la evolución la incluimos en principio en un operador $\hat{U}'(t)$ que habrá que determinar. (Veremos que podrá escribirse como un *squeezing* generalizado y una cierta fase, como una generalización de la aproximación (5.106)). Esta aproximación está sujeta a las condiciones iniciales

$$\begin{aligned} \hat{U}'(0) &= e^{\eta_0 \xi_0^*/2\hbar} \hat{I} \\ \eta_0 &= \beta \\ \xi_0^* &\text{ arbitrario.} \end{aligned}$$

Sustituyendo la expresión (5.141) en la ecuación de evolución para $\hat{U}(t)$, dada por $i\hbar \dot{\hat{U}}(t) = \hat{H} \hat{U}(t)$, se tiene la siguiente ecuación de evolución para $\hat{U}'(t)$:

$$i\hbar \frac{d\hat{U}'(t)}{dt} = \left[\hat{D}^{-1}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{H} \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) - i\hbar \hat{D}^{-1}(\eta_t, \xi_t^*) \frac{d\hat{D}(\eta_t, \xi_t^*)}{dt} \right] \hat{U}'(t) \equiv \hat{H}'_D(t) \hat{U}'(t). \quad (5.142)$$

El primer término de $\hat{H}'_D(t)$ en (5.142), teniendo en cuenta las propiedades del operador desplazamiento, se escribe como

$$\hat{D}^{-1}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{H}(a^\dagger, a) \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) = \hat{H}(a^\dagger + \hbar^{-1/2} \xi_t^*, a + \hbar^{-1/2} \eta_t). \quad (5.143)$$

Y llevando a cabo un desarrollo de Maclaurin de este operador se tiene

$$\begin{aligned} & \hat{H}(a^\dagger + \hbar^{-1/2}\xi_t^*, a + \hbar^{-1/2}\eta_t) \\ &= \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t) - \kappa \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^* \partial \eta_t} + \hbar^{1/2} \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^*} a^\dagger + \hbar^{1/2} \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t} a \\ &+ \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^{*2}} a^{\dagger 2} + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t^2} a^2 + \hbar \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t \partial \xi_t^*} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + O(\hbar^{3/2}), \end{aligned} \quad (5.144)$$

donde el parámetro κ toma los valores 1, -1 o 0 para ordenaciones normal, antinormal o simétrica, respectivamente, del operador \hat{H} . Esta expresión es un desarrollo en potencias de $\hbar^{1/2}$ del operador transformado $\hat{D}^{-1} \hat{H} \hat{D}$, y en el término de $O(\hbar^{3/2})$ está incluida una suma de productos de tres o más operadores de creación y aniquilación.

El segundo término de $\hat{H}'_D(t)$ en (5.142) viene dado por

$$i\hbar \hat{D}^{-1}(\eta_t, \xi_t^*) \frac{d\hat{D}(\eta_t, \xi_t^*)}{dt} = \frac{i}{2}(\xi_t^* \dot{\eta}_t - \dot{\xi}_t^* \eta_t) + i\hbar^{1/2} \dot{\eta}_t a^\dagger - i\hbar^{1/2} \dot{\xi}_t^* a, \quad (5.145)$$

lo que hace que el operador \hat{H}'_D se escriba como

$$\begin{aligned} \hat{H}'_D(t) &= \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t) - \kappa \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^* \partial \eta_t} - \frac{i}{2}(\xi_t^* \dot{\eta}_t - \dot{\xi}_t^* \eta_t) \\ &+ \hbar^{1/2} \left(\frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^*} - i\dot{\eta}_t \right) a^\dagger + \hbar^{1/2} \left(\frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t} + i\dot{\xi}_t^* \right) a + \hat{H}_s^{(0)}(t) + O(\hbar^{3/2}), \end{aligned} \quad (5.146)$$

donde

$$\hat{H}_s^{(0)}(t) = \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^{*2}} a^{\dagger 2} + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t^2} a^2 + \hbar \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t \partial \xi_t^*} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (5.147)$$

Los parámetros ξ_t^* y η_t de la transformación de desplazamiento pueden *elegirse* de manera que los términos de orden $\hbar^{1/2}$ en \hat{H}'_D , que son lineales en los operadores a^\dagger y a , se cancelen. Esta condición conduce a las ecuaciones de Hamilton (5.139a-5.139b):

$$\dot{\eta}_t = -i \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^*} \quad (5.148a)$$

$$\dot{\xi}_t^* = i \frac{\partial \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t}. \quad (5.148b)$$

Es decir, asumir que la evolución de \hat{U}' tiene lugar de acuerdo a un hamiltoniano \hat{H}'_D que no contiene términos lineales en a^\dagger y a corresponde a suponer que los parámetros del desplazamiento evolucionan acorde a las ecuaciones de Hamilton.

Si este operador \hat{U}' se escribe ahora como

$$\hat{U}'(t) = \hat{S}(v_t, \mu_t^*) \hat{R}(\rho_t) e^{i\psi_t} \hat{U}''(t) \equiv e^{\frac{1}{2}(v_t a^{\dagger 2} - \mu_t^* a^2)} e^{\rho_t (a^\dagger a + \frac{1}{2})} e^{i\psi_t} \hat{U}''(t), \quad (5.149)$$

donde $\hat{S}(v_t, \mu_t^*)$ es un *operador de squeezing generalizado* (no unitario a no ser que v_t y μ_t^* sean complejos conjugados entre sí), la ecuación de evolución para el operador “restante” $\hat{U}''(t)$ vendrá dada por

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{U}''(t)}{dt} &= [\hat{R}^{-1}(\rho_t) \hat{S}^{-1}(v_t, \mu_t^*) (\hat{H}'_D(t) + \hbar\psi_t - i\hbar\hat{H}^{SR}(t)) \hat{S}(v_t, \mu_t^*) \hat{R}(\rho_t)] \hat{U}''(t) \\ &\equiv [\hat{R}^{-1}(\rho_t) \hat{S}^{-1}(v_t, \mu_t^*) \hat{H}^{DSR} \hat{S}(v_t, \mu_t^*) \hat{R}(\rho_t)] \hat{U}''(t) \\ &\equiv \hat{H}''(t) \hat{U}''(t), \end{aligned} \quad (5.150)$$

donde $\hat{H}^{SR}(t)$ está definido tal que

$$\frac{\partial}{\partial t} (\hat{S}(v_t, \mu_t^*) \hat{R}(\rho_t)) = \hat{H}^{SR}(t) (\hat{S}(v_t, \mu_t^*) \hat{R}(\rho_t)). \quad (5.151)$$

Este operador puede obtenerse haciendo uso de la representación matricial del álgebra h_6 para la expresión

$$\hat{H}^{SR} = \hat{S} \hat{S}^{-1} + \hat{S} \hat{R} \hat{R}^{-1} \hat{S}^{-1}, \quad (5.152)$$

por un procedimiento similar al seguido para obtener el operador \hat{H}^{DS} en (5.112). Llevando a cabo los productos matriciales correspondientes, se obtiene una matriz de la forma

$$\mathbf{M}_{h_6} [\hat{H}^{SR}] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M_{22} & M_{23} & 0 \\ 0 & M_{32} & M_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = M_{22} \mathbf{M}_{h_6} \left[a^\dagger a + \frac{1}{2} \right] + \frac{M_{23}}{2} \mathbf{M}_{h_6} [a^{\dagger 2}] - \frac{M_{32}}{2} \mathbf{M}_{h_6} [a^2], \quad (5.153)$$

de donde

$$\begin{aligned} \hat{H}^{SR}(t) &= \left(\frac{1}{2} (s_t s_t^* - \dot{s}_t s_t^*) + \dot{\rho}_t (1 + 2s_t s_t^*) \right) \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \\ &+ \left(\frac{2\dot{s}_t - s_t^2 s_t^* + s_t s_t^* \dot{s}_t}{4\sqrt{1 + s_t s_t^*}} - \dot{\rho}_t s_t \sqrt{1 + s_t s_t^*} \right) a^{\dagger 2} + \left(\frac{-2\dot{s}_t^* + s_t^{*2} \dot{s}_t - s_t s_t^* \dot{s}_t^*}{4\sqrt{1 + s_t s_t^*}} - \dot{\rho}_t s_t^* \sqrt{1 + s_t s_t^*} \right) a^2 \\ &\equiv H_{11}^{SR} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + H_{20}^{SR} a^{\dagger 2} + H_{02}^{SR} a^2, \end{aligned} \quad (5.154)$$

donde s_t y s_t^* están definidos como

$$s_t = v_t \frac{\sinh \sqrt{v_t \mu_t^*}}{\sqrt{v_t \mu_t^*}} \quad (5.155a)$$

$$s_t^* = \mu_t^* \frac{\sinh \sqrt{v_t \mu_t^*}}{\sqrt{v_t \mu_t^*}} \quad (5.155b)$$

(y en general no son variables conjugadas puesto que v_t y μ_t^* no lo son).

Teniendo en cuenta que los términos lineales del operador \hat{H}'_D han sido anulados, el operador \hat{H}^{DSR}

en (5.150) tiene la forma

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{DSR}(t) &\equiv \hat{H}'_D(t) + \hbar \hat{\Psi}_t - i\hbar \hat{H}^{SR}(t) \\
&= \left(\mathcal{H} - \kappa \frac{\hbar}{2} \mathcal{H}_{\eta_t \xi_t^*} - \frac{i}{2} (\xi_t^* \dot{\eta}_t - \dot{\xi}_t^* \eta_t) + \hbar \hat{\Psi}_t \right) + (\hbar \mathcal{H}_{\eta_t \xi_t^*} - i\hbar H_{11}^{SR}) \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \\
&+ \left(\frac{\hbar}{2} \mathcal{H}_{\xi_t^* \xi_t^*} - i\hbar H_{20}^{SR} \right) a^{\dagger 2} + \left(\frac{\hbar}{2} \mathcal{H}_{\eta_t \eta_t} - i\hbar H_{02}^{SR} \right) a^2 + O(\hbar^{3/2}) \\
&\equiv H_0^{DSR} + H_{11}^{DSR} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + H_{20}^{DSR} a^{\dagger 2} + H_{02}^{DSR} a^2 + O(\hbar^{3/2}). \tag{5.156}
\end{aligned}$$

Al transformar este operador con \hat{S} y \hat{R} , haciendo uso de nuevo del álgebra matricial y después de algunas manipulaciones algebraicas se tiene:

$$\begin{aligned}
\hat{H}''(t) &\equiv \hat{R}^{-1}(\rho_t) \hat{S}^{-1}(\nu_t, \mu_t^*) \hat{H}^{DSR}(t) \hat{S}(\nu_t, \mu_t^*) \hat{R}(\rho_t) \\
&= H_0^{DSR} + \left[H_{11}^{DSR} (1 + 2s_t s_t^*) + 2\sqrt{1 + s_t s_t^*} (s_t H_{02}^{DSR} + s_t^* H_{20}^{DSR}) \right] \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \\
&+ \left[e^{-2\rho_t} \left(s_t H_{11}^{DSR} \sqrt{1 + s_t s_t^*} + s_t^2 H_{02}^{DSR} + H_{20}^{DSR} (1 + s_t s_t^*) \right) \right] a^{\dagger 2} \\
&+ \left[e^{2\rho_t} \left(s_t^* H_{11}^{DSR} \sqrt{1 + s_t s_t^*} + s_t^{*2} H_{20}^{DSR} + H_{02}^{DSR} (1 + s_t s_t^*) \right) \right] a^2 + O(\hbar^{3/2}). \tag{5.157}
\end{aligned}$$

Los parámetros $\{\Psi_t, \nu_t, \mu_t^*, \rho_t\}$ en el operador (5.149) pueden elegirse de forma que este operador $\hat{H}''(t)$, que gobierna la evolución de $\hat{U}''(t)$, contenga, como mínimo, términos de $O(\hbar^{3/2})$. Se demuestra que para que los términos en $a^{\dagger 2}$ y a^2 se anulen, los parámetros de $\hat{S}(\nu_t, \mu_t^*)$ deben ser tales que cumplan las ecuaciones de evolución

$$\dot{s}_t = i \left[\left(c_t + \frac{s_t s_t^*}{2c_t} \right) \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t^2} + 2s_t^* \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t \partial \xi_t^*} + \frac{s_t^{*2}}{2c_t} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^{*2}} \right] \tag{5.158a}$$

$$\dot{s}_t = -i \left[\frac{s_t^2}{2c_t} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t^2} + 2s_t \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t \partial \xi_t^*} + \left(c_t + \frac{s_t s_t^*}{2c_t} \right) \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^{*2}} \right]. \tag{5.158b}$$

Estas ecuaciones corresponden precisamente a las ecs. (5.139c-5.139d), con s_t y s_t^* definidas por (5.155). La cancelación del término en $(a^\dagger a + 1/2)$ proporciona la ecuación de evolución del parámetro ρ_t :

$$\dot{\rho}_t = -i \left[\frac{s_t}{2c_t} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t^2} + \frac{s_t^*}{2c_t} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \xi_t^{*2}} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t)}{\partial \eta_t \partial \xi_t^*} \right]. \tag{5.159}$$

Y finalmente, anulando el término independiente de $\hat{H}''(t)$ se obtiene la ecuación diferencial para la fase Ψ_t :

$$\dot{\Psi}_t = -\frac{1}{\hbar} \mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_t) + \frac{\kappa}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \eta_t \partial \xi_t^*} + \frac{i}{2\hbar} (\xi_t^* \dot{\eta}_t - \dot{\xi}_t^* \eta_t), \tag{5.160}$$

que se integra directamente como

$$\Psi_t = -\frac{i}{2\hbar} \xi_t^* \eta_t + \frac{i}{2\hbar} \xi_0^* \eta_0 + \frac{1}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau + \frac{\kappa}{2} F(\xi_t^*, \eta_0, t), \tag{5.161}$$

donde

$$F(\xi_t^*, \eta_0, t) \equiv \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \xi_\tau^* \partial \eta_\tau} d\tau. \quad (5.162)$$

Es importante notar que el operador

$$\hat{U}_s^{(0)}(t) \equiv \hat{S}(v_t, \mu_t^*) \hat{R}(\rho_t) = e^{\frac{1}{2}(v_t a^{\dagger 2} - \mu_t^* a^2)} e^{\rho_t (a^\dagger a + \frac{1}{2})} \quad (5.163)$$

cumple la ecuación de evolución

$$i \frac{d\hat{U}_s^{(0)}(t)}{dt} = \hat{H}_s^{(0)}(t) \hat{U}_s^{(0)}(t), \quad (5.164)$$

donde $\hat{H}_s^{(0)}(t)$ viene dado por (5.147). La matriz asociada a este operador en el álgebra h_6 viene dada por

$$\mathbf{M}_{h_6} [\hat{H}_s^{(0)}](t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \xi_t^* \partial \eta_t} & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \xi_t^{*2}} & 0 \\ 0 & -\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \eta_t^2} & -\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \eta_t \partial \xi_t^*} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.165)$$

y de forma similar, la matriz correspondiente al operador $\hat{U}_s^{(0)}(t)$ está dada por

$$\mathbf{M}_{h_6} [\hat{U}_s^{(0)}](t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cosh \theta_t e^{\rho_t} & v_t \frac{\sinh \theta_t}{\theta_t} e^{-\rho_t} & 0 \\ 0 & \mu_t^* \frac{\sinh \theta_t}{\theta_t} e^{-\rho_t} & \cosh \theta_t e^{-\rho_t} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.166)$$

con $\theta_t^2 = \rho_t^2 + v_t \mu_t^*$. En esta representación matricial, la ecuación de evolución (5.164) se escribe

$$i \frac{d}{dt} \mathbf{M}_{h_6} [\hat{U}_s^{(0)}](t) = \mathbf{M}_{h_6} [\hat{H}_s^{(0)}](t) \cdot \mathbf{M}_{h_6} [\hat{U}_s^{(0)}](t), \quad (5.167)$$

con la condición inicial $\mathbf{M}_{h_6} [\hat{U}_s^{(0)}](0) = \hat{I}$ (matriz identidad).

La forma de la matriz $\mathbf{M}_{h_6} [\hat{H}_s^{(0)}]$ indica que la ec. (5.167) es precisamente la ecuación de evolución para la matriz de estabilidad asociada a la trayectoria compleja $\{\xi_\tau^*, \eta_\tau; 0 \leq \tau \leq t\}$, solución de las ecuaciones de Hamilton (5.148).¹¹ Por lo tanto, $\mathbf{M}_{h_6} [\hat{U}_s^{(0)}](t)$ es la matriz fundamental de estabilidad dada por

$$\mathbf{M}_{h_6} [\hat{U}_s^{(0)}](t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial \eta_t}{\partial \eta_0} & \frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_0^*} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \xi_t^*}{\partial \eta_0} & \frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.170)$$

¹¹Efectivamente, dado un sistema dinámico descrito por las ecuaciones diferenciales

$$\begin{aligned} \dot{\eta}_t &= -i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \xi_t^*} \equiv f_\eta \\ \dot{\xi}_t^* &= i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \eta_t} \equiv f_{\xi^*}, \end{aligned} \quad (5.168)$$

es importante caracterizar la estabilidad lineal, que controla la forma en que las perturbaciones infinitesimales evolucionan en

De esta forma, los parámetros v_t , μ_t^* y ρ_t en (5.166) pueden ser determinados a partir del conocimiento de esta matriz, de forma equivalente a la integración de las ecuaciones (5.158-5.159).

Así pues, la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}''(t) = \hat{H}''(t) \hat{U}''(t), \quad (5.171)$$

junto a la condición inicial

$$\hat{U}''(0) = e^{\eta_0 \xi_0^*/2\hbar} \hat{I} \quad (5.172)$$

pueden condensarse en la ecuación integral

$$\hat{U}''(t) = e^{\eta_0 \xi_0^*/2\hbar} \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}''(\tau) \hat{U}''(\tau) d\tau, \quad (5.173)$$

cuya solución general vendrá dada por una serie de Dyson debido a la dependencia temporal del operador \hat{H}'' . Puesto que, por construcción, el orden más bajo en \hat{H}'' es $\hbar^{3/2}$, el factor \hbar en el denominador de (5.173) hace que el orden dominante en el operador \hat{U}'' sea $\hbar^{1/2}$. Así, en general \hat{U}'' vendrá dado por el desarrollo perturbativo

$$\hat{U}'' = e^{\eta_0 \xi_0^*/2\hbar} \hat{I} + \hbar^{1/2} \hat{U}^{(1/2)} + \dots \quad (5.174)$$

Con estos resultados, la evolución de un estado de Bargmann $|\beta\rangle$ puede aproximarse por

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \hat{U}(t)|\beta\rangle \simeq e^{i\Psi_t} \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{S}(v_t, \mu_t^*) \hat{R}(\rho_t) \left[e^{\eta_0 \xi_0^*/2\hbar} \hat{I} + \hbar^{1/2} \hat{U}^{(1/2)} + \dots \right] |0\rangle \\ &= e^{\frac{1}{2\hbar} \xi_t^* \eta_t + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_\tau) + i\xi_t^* \dot{\eta}_\tau] d\tau + \kappa \frac{i}{2} F(\xi_t^*, \eta_0, t)} \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{S}(v_t, \mu_t^*) \hat{R}(\rho_t) \left[\hat{I} + O(\hbar^{1/2}) \right] |0\rangle \\ &= e^{\frac{1}{2\hbar} \xi_t^* \eta_t + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_t^*, \eta_\tau) + i\xi_t^* \dot{\eta}_\tau] d\tau + \kappa \frac{i}{2} F(\xi_t^*, \eta_0, t)} \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{U}_s^{(0)} \left[\hat{I} + O(\hbar^{1/2}) \right] |0\rangle, \end{aligned} \quad (5.175)$$

donde todas las magnitudes que intervienen están evaluadas en términos de la trayectoria compleja $\{\xi_\tau^*, \eta_\tau; 0 \leq \tau \leq t\}$ que satisface las ecuaciones de Hamilton (5.148) con $\eta_0 = \beta$ y ξ_0^* arbitrario, así como el tiempo. Así, una trayectoria que se desvíe una cantidad infinitesimal de la trayectoria de referencia cumple:

$$\begin{pmatrix} \delta\eta_t \\ \delta\xi_t^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_\eta}{\partial \eta_t} & \frac{\partial f_\eta}{\partial \xi_t^*} \\ \frac{\partial f_{\xi^*}}{\partial \eta_t} & \frac{\partial f_{\xi^*}}{\partial \xi_t^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\eta_t \\ \delta\xi_t^* \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \xi_t^* \partial \eta_t} & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \xi_t^{*2}} \\ -\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \eta_t^2} & -\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \eta_t \partial \xi_t^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\eta_t \\ \delta\xi_t^* \end{pmatrix} \equiv -i \mathbf{H}_{din}(t) \begin{pmatrix} \delta\eta_t \\ \delta\xi_t^* \end{pmatrix},$$

donde $\mathbf{H}_{din}(t)$ suele recibir el nombre de *matriz dinámica*. Puesto que esta ecuación es lineal, su solución puede expresarse como

$$\begin{pmatrix} \delta\eta_t \\ \delta\xi_t^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \eta_t}{\partial \eta_0} & \frac{\partial \eta_t}{\partial \xi_0^*} \\ \frac{\partial \xi_t^*}{\partial \eta_0} & \frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\eta_0 \\ \delta\xi_0^* \end{pmatrix} \equiv \mathbf{U}_s(t) \begin{pmatrix} \delta\eta_0 \\ \delta\xi_0^* \end{pmatrix},$$

donde $\mathbf{U}_s(t)$ es la *matriz fundamental* o *matriz de estabilidad*, dada por

$$\mathbf{U}_s(t) = \mathbb{T} e^{-i \int_0^t \mathbf{H}_{din}(\tau) d\tau},$$

donde $\mathbb{T} \exp \int_0^t (\cdot) d\tau$ denota una exponencial con ordenación temporal, esto es, una serie de Dyson. La matriz fundamental obedece por tanto a la ecuación de evolución

$$i \frac{d}{dt} \mathbf{U}_s(t) = \mathbf{H}_{din}(t) \cdot \mathbf{U}_s(t). \quad (5.169)$$

La construcción de la matriz fundamental requiere la integración simultánea de las ecuaciones (5.168) y (5.169).

en términos de la estabilidad de dicha trayectoria. Por lo tanto, para cada elección de ξ_0^* , se tendrá una forma diferente para el término dominante en la ec. (5.175).

La *Thawed Gaussian Approximation* de Heller corresponde a la elección particular $\xi_0^* = \beta^* = \eta_0^*$, que proporciona una trayectoria *real* en el espacio de fases. En este formalismo se asume, como en este caso, una forma gaussiana para el paquete de ondas, y los parámetros que la caracterizan evolucionan en el tiempo. La evolución de estos parámetros no se obtiene de forma variacional, sino por sustitución directa de la función de onda de prueba en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, desarrollando el potencial en serie de Taylor en torno al centro instantáneo del paquete y truncando este desarrollo hasta orden cuadrático. De esta manera, puesto que a cada instante de tiempo el paquete “siente” un potencial armónico, mantiene la forma gaussiana. Este truncamiento del potencial en orden cuadrático corresponde a las condiciones variacionales (5.139). Como hemos comprobado, el error en esta aproximación es de $O(\hbar^{1/2})$. En general, el límite $\hbar \rightarrow 0$ de una expresión presenta mayores problemas de convergencia si las correcciones son de orden $\hbar^{1/2}$ que si son de orden \hbar , de forma que para que una aproximación sea aceptable semiclásicamente, es conveniente que sea exacta hasta $O(\hbar)$. Como veremos a continuación, la aproximación al operador de evolución cumplirá este requisito.

El resultado (5.175) puede utilizarse para evaluar el elemento de matriz

$$\langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta \rangle = e^{\gamma \alpha^* / 2\hbar} \langle 0 | \hat{D}^{-1}(\gamma, \alpha^*) \hat{U}(t) | \beta \rangle, \quad (5.176)$$

donde γ es arbitrario. El término $O(\hbar^{1/2})$ restante tiene una contribución dominante de la forma $\hbar^{1/2} \hat{U}_s^{(1/2)}(a^\dagger, a, a^{\dagger 3}, a^{\dagger 2}a)$ donde $\hat{U}_s^{(1/2)}$ es una función lineal de estos operadores.¹² Teniendo en cuenta (5.175) podemos escribir

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta \rangle &= e^{\frac{\gamma \alpha^*}{2\hbar} + \frac{\xi_t^* \eta_t}{2\hbar} + \kappa \frac{i}{2} F(\xi_t^*, \eta_t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau} \\ &\times \left[\langle 0 | \hat{D}^{-1}(\gamma, \alpha^*) \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{U}_s^{(0)}(t) | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{D}^{-1}(\gamma, \alpha^*) \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{U}_s^{(0)}(t) \left(\hbar^{1/2} \hat{U}_s^{(1/2)} + O(\hbar) \right) | 0 \rangle \right]. \end{aligned}$$

El término proporcional a $\hbar^{1/2}$ puede eliminarse mediante una elección adecuada del parámetro arbitrario ξ_0^* . De esta manera, si se elige de forma que $\xi_t^* = \alpha^*$ (también podría elegirse $\gamma = \eta_t$, aunque esta condición no se requiere) y teniendo en cuenta que

$$\langle 0 | \hat{D}^{-1}(\gamma, \alpha^*) \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{U}_s^{(0)}(t) | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{U_{33}^s}} e^{\frac{1}{2\hbar} \frac{U_{23}^s}{U_{33}^s} (-\alpha^* + \xi_t^*)^2 + \frac{1}{2\hbar} (-\alpha^* + \xi_t^*) (\gamma - \eta_t) + \frac{1}{2\hbar} (\alpha^* \eta_t - \gamma \xi_t^*)},$$

donde hemos denotado por U_{ij}^s el elemento (i, j) de la matriz $\mathbf{M}_{h_6} [\hat{U}_s^{(0)}](t)$, se obtiene

$$\langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta \rangle = e^{\kappa \frac{i}{2} F(\alpha^*, t) + \frac{1}{\hbar} \alpha^* \eta_t + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau} \left[\frac{1}{\sqrt{U_{33}^s}} + \hbar^{1/2} \langle 0 | \hat{U}_s^{(1/2)} | 0 \rangle + O(\hbar) \right].$$

¹²Nótese que en general en $\hat{U}_s^{(1/2)}$ habrá términos lineales en a^\dagger y a que proceden de las conmutaciones necesarias para ordenar en forma normal los términos cúbicos.

Teniendo en cuenta la forma mencionada para el operador $\hat{U}_s^{(1/2)}$, el término proporcional a $\hbar^{1/2}$ se anula. De hecho, todos los términos en el desarrollo (5.174) de \hat{U}'' en potencias de $\hbar^{1/2}$ correspondientes a potencias de la forma $\hbar^{j/2}$, con j impar, se anulan al evaluar su valor esperado en el vacío, al estar escritos como suma de términos que involucran el producto de un número impar de operadores de creación y de destrucción. De esta manera, se recupera el resultado obtenido mediante el método WKB generalizado para el propagador en estados de Bargmann:

$$(\alpha|\hat{U}(t)|\beta) = \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*} \right)^{-1/2} e^{\kappa \frac{i}{2} F(\alpha^*, \beta, t)} e^{\frac{1}{\hbar} \alpha^* \eta_t + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau} + O(\hbar). \quad (5.177)$$

Hemos de hacer hincapié en que el *ansatz* (5.175) *no* constituye una aproximación para el operador de evolución en sí mismo, puesto que depende del estado inicial considerado, a saber, un estado de Bargmann. Lo que se ha obtenido es una *aproximación para la evolución temporal de un paquete gaussiano*. Por supuesto, los paquetes coherentes no consituyen las condiciones iniciales más generales en las que se pueda estar interesado. Sin embargo, cualquier condición inicial arbitraria $|\Psi(0)\rangle$ puede representarse como una combinación lineal de estados coherentes, y éstos pueden propagarse individualmente.¹³ De esta forma, haciendo uso de una resolución de la identidad de los estados coherentes dada por

$$\hat{1} = \int_{\Gamma_{\eta_0, \xi_0^*}} \frac{d\eta_0 d\xi_0^*}{2\pi\hbar i} e^{-\xi_0^* \eta_0 / \hbar} |\eta_0\rangle \langle \xi_0|, \quad (5.178)$$

así como de la forma asintótica (5.175) para la evolución semiclassical de un estado de Bargmann, puede obtenerse la siguiente forma IVR para el operador de evolución:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &= \int_{\Gamma_{\eta_0, \xi_0^*}} \frac{d\eta_0 d\xi_0^*}{2\pi\hbar i} e^{-\xi_0^* \eta_0 / \hbar} \hat{U}(t) |\eta_0\rangle \langle \xi_0| \\ &\sim \int_{\Gamma_{\eta_0, \xi_0^*}} \frac{d\eta_0 d\xi_0^*}{2\pi\hbar i} e^{-\frac{1}{\hbar} \xi_0^* \eta_0} e^{\frac{1}{2\hbar} \xi_t^* \eta_t + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i \xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau + \kappa \frac{i}{2} F(\xi_t^*, t)} \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{U}_s^{(0)}(t) |0\rangle \langle \xi_0|. \end{aligned} \quad (5.179)$$

A partir del análisis del error en (5.175) podría decirse que el error en esta aproximación es $O(\hbar^{1/2})$. Sin embargo, al llevar a cabo la integración sobre (infinitos) estados coherentes individuales, *las correcciones de orden $\hbar^{1/2}$ de cada una de las propagaciones individuales se cancela*. Esto puede comprobarse utilizando la resolución integral del operador $\hat{U}(t)$ dada por (5.179) para evaluar el elemento de matriz $(\alpha|\hat{U}(t)|\beta)$. Si la integración se aproxima mediante el método de fase estacionaria, las condiciones de fase estacionaria vendrán dadas por $\xi_t^* = \alpha^*$ y $\eta_0 = \beta$ que, como hemos visto, son precisamente las condiciones para que se cancelen los términos de $O(\hbar^{1/2})$. Esta demostración se muestra a continuación.

¹³En la aproximación de Heller la evolución temporal está incluida en los parámetros de la gaussiana, mientras que en la aproximación (5.175) la dependencia temporal está puesta en los operadores. Una ventaja de esta aproximación es que el estado inicial no necesariamente tiene que ser gaussiano.

El elemento de matriz de $\hat{U}(t)$ vendrá dado por

$$\begin{aligned}
& (\alpha|\hat{U}(t)|\beta) \\
& \sim \int_{\Gamma_{\eta_0, \xi_0^*}} \frac{d\eta_0 d\xi_0^*}{2\pi\hbar i} e^{-\frac{1}{\hbar}\xi_0^*\eta_0} e^{\frac{1}{2\hbar}\xi_t^*\eta_t + \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i\xi_\tau^*\dot{\eta}_\tau] d\tau + \kappa \frac{i}{2} F(\xi_t^*, t)} \\
& \times \langle 0|\hat{D}^{-1}(\gamma, \alpha^*) \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{U}_s^{(0)}(t)|0\rangle (\xi_0|\beta) \\
& \equiv \int_{\Gamma_{\eta_t, \xi_0^*}} \frac{d\eta_t d\xi_0^*}{2\pi\hbar i} \frac{1}{\left|\frac{\partial\eta_t}{\partial\eta_0}\right|} \frac{1}{\sqrt{U_{33}^s}} e^{\kappa \frac{i}{2} F} e^{\frac{i}{\hbar} S(\eta_t, \xi_0^*)}, \tag{5.180}
\end{aligned}$$

donde hemos hecho uso del resultado (5.177), hemos llevado a cabo un cambio de variables $\eta_0 \rightarrow \eta_t$ y hemos definido la fase total $S(\eta_t, \xi_0^*)$ como

$$\frac{i}{\hbar} S(\eta_t, \xi_0^*) = \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) - i\eta_\tau \dot{\xi}_\tau^*] d\tau - \frac{1}{\hbar} \xi_t^* \eta_t + \frac{1}{2\hbar} U_{23}^s (U_{33}^s)^{-1} (-\alpha^* + \xi_t^*)^2 + \frac{1}{\hbar} \alpha^* \eta_t + \frac{1}{\hbar} \xi_0^* \beta, \tag{5.181}$$

donde U_{ij}^s denotan los elementos de la matriz de estabilidad (5.170). En primer lugar aproximaremos la integral en η_t por el método de *saddle point*. La condición estacionaria viene dada por

$$\left. \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S(\eta_t, \xi_0^*)}{\partial \eta_t} \right|_{\xi_0^*} = -\frac{1}{\hbar} \xi_t^* + \frac{1}{\hbar} \alpha^* = 0, \tag{5.182}$$

esto es:

$$\xi_t^* = \alpha^*. \tag{5.183}$$

Desarrollando la fase en torno al punto estacionario hasta orden cuadrático se tiene:

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} S &= \frac{i}{\hbar} S^{(0)} + \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\partial S^{(0)}}{\partial \eta_t} + \frac{\partial S^{(0)}}{\partial \xi_t^*} \frac{\partial \xi_t^*}{\partial \eta_t} \right) \delta\eta_t + \frac{i}{2\hbar} \left[\frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \eta_t^2} + \frac{\partial^2 S^{(0)}}{\partial \xi_t^{*2}} \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \eta_t} \right)^2 \right] \delta\eta_t^2 + \dots \\
&= \frac{i}{\hbar} S^{(0)} + \frac{1}{2\hbar} \left[-\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \eta_t} + U_{23}^s (U_{33}^s)^{-1} \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \eta_t} \right)^2 \right] \delta\eta_t^2 + \dots. \tag{5.184}
\end{aligned}$$

Puesto que la integral en η_t se evalúa considerando la variable ξ_0^* constante, las variaciones en η_t y en ξ_t^* pueden relacionarse mediante

$$\begin{pmatrix} \delta\eta_t \\ \delta\xi_t^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{22}^s & U_{23}^s \\ U_{32}^s & U_{33}^s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\eta_0 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{5.185}$$

de donde

$$\delta\xi_t^* = U_{32}^s (U_{22}^s)^{-1} \delta\eta_t. \tag{5.186}$$

De esta forma, la fase (5.184) puede aproximarse por

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} S &= \frac{i}{\hbar} S^{(0)} + \frac{1}{2\hbar} [-U_{32}^s (U_{22}^s)^{-1} + U_{23}^s (U_{33}^s)^{-1} (U_{32}^s)^2 (U_{22}^s)^{-2}] \delta\eta_t^2 + \dots \\
&= \frac{i}{\hbar} S^{(0)} - \frac{1}{2\hbar} U_{32}^s (U_{22}^s)^{-2} (U_{33}^s)^{-1} \delta\eta_t^2, \tag{5.187}
\end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta que la matriz de estabilidad es simpléctica y su determinante es la unidad:

$U_{22}^s U_{33}^s - U_{23}^s U_{32}^s = 1$. La integral (5.180) puede aproximarse por tanto por

$$\begin{aligned} (\alpha|\hat{U}(t)|\beta) &\sim \int_{\Gamma_{\xi_0^*}} \frac{d\xi_0^*}{\sqrt{2\pi\hbar i}} (U_{22}^s)^{-1} (U_{33}^s)^{-1/2} e^{\kappa \frac{i}{2} F} e^{\frac{i}{\hbar} S^{(0)}(\xi_0^*)} |U_{32}^s (U_{22}^s)^{-2} (U_{33}^s)^{-1}|^{-1/2} \\ &= \int_{\Gamma_{\xi_0^*}} \frac{d\xi_0^*}{\sqrt{2\pi\hbar i}} (U_{32}^s)^{-1/2} e^{\kappa \frac{i}{2} F} e^{\frac{i}{\hbar} S^{(0)}(\xi_0^*)} \end{aligned} \quad (5.188)$$

donde

$$\frac{i}{\hbar} S^{(0)}(\xi_0^*) = \frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) - i\eta_\tau \dot{\xi}_\tau^*] d\tau + \frac{1}{\hbar} \xi_0^* \beta. \quad (5.189)$$

Esta integral restante puede aproximarse asimismo por fase estacionaria. La condición de *saddle point* viene dada por

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial S^{(0)}(\xi_0^*)}{\partial \xi_0^*} = -\frac{1}{\hbar} \eta_0 + \frac{1}{\hbar} \beta = 0, \quad (5.190)$$

es decir:

$$\eta_0 = \beta. \quad (5.191)$$

En este caso el desarrollo de la fase $S^{(0)}$ en torno al punto estacionario viene dado por

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} S^{(0)}(\xi_0^*) &= \frac{i}{\hbar} S_0^{(0)}(\xi_0^*) + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S_0^{(0)}(\xi_0^*)}{\partial \xi_0^*} \delta \xi_0^* + \frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 S_0^{(0)}(\xi_0^*)}{\partial \xi_0^{*2}} \delta \xi_0^{*2} + \dots \\ &= \frac{i}{\hbar} S_0^{(0)}(\xi_0^*) - \frac{1}{2\hbar} \frac{\partial \eta_0}{\partial \xi_0^*} \delta \xi_0^{*2} + \dots \end{aligned} \quad (5.192)$$

Dado que la anterior integral en η_t ha fijado el valor de ξ_t^* (según la condición estacionaria $\xi_t^* = \alpha^*$), las variaciones de ξ_0^* y de η_0 pueden relacionarse mediante

$$\begin{pmatrix} \delta \eta_t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{22}^s & U_{23}^s \\ U_{32}^s & U_{33}^s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \eta_0 \\ \delta \xi_0^* \end{pmatrix}, \quad (5.193)$$

de donde

$$\delta \eta_0 = -U_{33}^s (U_{32}^s)^{-1} \delta \xi_0^*. \quad (5.194)$$

La fase se escribe entonces como

$$\frac{i}{\hbar} S^{(0)}(\xi_0^*) = \frac{i}{\hbar} S_0^{(0)}(\xi_0^*) + \frac{1}{2\hbar} U_{33}^s (U_{32}^s)^{-1} \delta \xi_0^{*2} \quad (5.195)$$

y la integral gaussiana conduce al resultado

$$(\alpha|\hat{U}(t)|\beta) \sim (U_{32}^s)^{-1/2} e^{\kappa \frac{i}{2} F} e^{\frac{i}{\hbar} S_0^{(0)}(\xi_0^*)} |U_{33}^s (U_{32}^s)^{-1}|^{-1/2}, \quad (5.196)$$

esto es:

$$\begin{aligned} (\alpha|\hat{U}(t)|\beta) &\sim \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*} \right)^{-1/2} e^{\kappa \frac{i}{2} \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \xi_\tau^* \partial \eta_\tau} d\tau} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) - i\eta_\tau \dot{\xi}_\tau^*] d\tau} + \frac{1}{\hbar} \xi_0^* \beta \\ &\sim \left(\frac{\partial \xi_t^*}{\partial \xi_0^*} \right)^{-1/2} e^{\kappa \frac{i}{2} \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau)}{\partial \xi_\tau^* \partial \eta_\tau} d\tau} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [-\mathcal{H}(\xi_\tau^*, \eta_\tau) + i\xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau} + \frac{1}{\hbar} \alpha^* \eta_t. \end{aligned} \quad (5.197)$$

Así pues, tal como deseábamos demostrar, la aproximación de las integrales por fase estacionaria proporciona las condiciones $\xi_t^* = \alpha^*$ y $\eta_0 = \beta$ que, tal como hemos visto, son las condiciones necesarias para cancelar las correcciones de orden $\hbar^{1/2}$ en las propagaciones de cada estado coherente individual. La expresión integral (5.179) proporciona por tanto una aproximación IVR al operador de evolución que es *correcta hasta orden \hbar* . Cuando los contornos de integración $\Gamma_{\xi_0^*, \eta_0}$ se eligen en el espacio de fases real (de forma que $\eta_0 = \xi_0$), y se usa el símbolo de Weyl para el operador hamiltoniano (lo que corresponde a la elección $\kappa = 0$), la ec. (5.179) proporciona la representación IVR de Heller del propagador.

[En la *Frozen Gaussian Approximation* (FGA) propuesta por Heller [Hel81] la función de onda se aproxima mediante una superposición de paquetes gaussianos. Cada uno de ellos está centrado en una trayectoria clásica (que coincide con los valores medios de posición y momento) y tiene una fase dada por la integral de acción clásica a lo largo del camino de dicha trayectoria, evolucionando en el tiempo sin distorsionar su forma. La deformación global del paquete de ondas se debe a una “correlación colectiva” existente en la superposición de las distintas gaussianas constituyentes. Es de suponer que esta superposición de paquetes coherentes destruye asimismo los errores (que, tal como hemos demostrado, son de orden $\hbar^{1/2}$) en las evoluciones de los estados individuales, proporcionando una aproximación semiclásica correcta hasta $O(\hbar)$.]

Se han propuesto distintas representaciones integrales en forma de IVR del operador de evolución que proporcionan aproximaciones semiclásicas equivalentes del propagador cuántico. Existen diferencias entre las aproximaciones basadas en gaussianas que mantienen fija la anchura del paquete (como el caso de la aproximación propuesta por Herman y Kluk (HK) [Her84]), y las que permiten que el paquete “respire” modificando su anchura (tal es el caso de la aproximación de Baranger *et al* [Bar01], que para el caso de una única trayectoria corresponde a la *Thawed Gaussian Approximation* (TGA) de Heller [Hel75]). Aparentemente, los resultados numéricos de las aproximaciones basadas en gaussianas “congeladas” (frozen Gaussians) se asemejan más a los resultados cuánticos que los proporcionados por la TGA. Algunas modificaciones *ad hoc* de la TGA producen una mejora de los resultados aproximándolos a los de HK, al tratar de eliminar el decaimiento temporal del parámetro que da la anchura de la gaussiana, bien tomando raíces de orden superior de este parámetro, o bien calculándolo en términos de la frecuencia de una aproximación armónica global de la dinámica (global en el sentido de que las trayectorias individuales son propagadas utilizando la dinámica no lineal, al contrario que la aproximación gaussiana de Tomsovic y Heller [Tom93], que hace uso de un desarrollo local del potencial hasta segundo orden) [Har04]. Sin embargo, una explicación más fundamental que justifique la validez de un tipo de aproximaciones frente a otra y que fundamente el deterioro de la aproximación a tiempos largos así como la rápida pérdida de conservación de la norma aún no ha sido dada.

En esta sección hemos analizado el grado de exactitud de la aproximación dada por (5.175) para la evolución de un estado coherente, determinando el orden de sus correcciones como $O(\hbar^{1/2})$. Asimismo,

hemos comprobado que la forma integral IVR (5.179) para el operador de evolución proporciona una expresión para el propagador en la representación de Bargmann, dada por (5.197), que es correcta hasta $O(\hbar)$, reproduciendo los resultados obtenidos en el Capítulo 2 mediante una generalización del método WKB a una dinámica compleja. Cabe preguntarse por el orden de las correcciones que incluye el método variacional frente a su límite semiclásico. Es decir, si la evolución del estado coherente $|\beta\rangle$ se aproxima por

$$\begin{aligned} |\Psi^v(t)\rangle &\simeq e^{i\phi_t/\hbar} \hat{D}(\beta_t, \beta_t^*) \hat{S}(v_t, v_t^*) |0\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [\frac{i}{2}(\beta_\tau^* \dot{\beta}_\tau - \dot{\beta}_\tau \beta_\tau^*) + \frac{i\hbar}{4}(s_\tau^* \dot{s}_\tau - \dot{s}_\tau s_\tau^*) - H'_0(\beta_\tau, \beta_\tau^*, s_\tau, s_\tau^*)] d\tau} e^{\hbar^{-1/2}(\beta_t a^\dagger - \beta_t^* a)} e^{\frac{1}{2}(v_t a^{\dagger 2} - v_t^* a^2)} |0\rangle, \end{aligned} \quad (5.198)$$

donde las variables $\beta_\tau, \beta_\tau^*, s_\tau, s_\tau^*$ evolucionan acorde a las ecuaciones variacionales “completas” (5.133) y H'_0 viene dado por (5.120), en general puede decirse que esta aproximación será más exacta que la que se obtiene al considerar únicamente los términos dominantes en la evolución de las variables $\beta_\tau, \beta_\tau^*, s_\tau, s_\tau^*$, dada por las ecs. (5.139), en las que las ecuaciones diferenciales para las “variables promedio” (β_τ, β_τ^*) están desacopladas de las ecuaciones para las “variables de fluctuación” (s_τ, s_τ^*), y el orden más bajo de $H'_0(\beta_\tau, \beta_\tau^*, s_\tau, s_\tau^*)$ viene dado por el hamiltoniano clásico $\mathcal{H}(\beta_\tau, \beta_\tau^*)$:

$$|\Psi^{sc}(t)\rangle \simeq e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [\frac{i}{2}(\beta_\tau^* \dot{\beta}_\tau - \dot{\beta}_\tau \beta_\tau^*) + \frac{i\hbar}{4}(s_\tau^* \dot{s}_\tau - \dot{s}_\tau s_\tau^*) - \mathcal{H}(\beta_\tau, \beta_\tau^*)] d\tau} e^{\hbar^{-1/2}(\beta_t a^\dagger - \beta_t^* a)} e^{\frac{1}{2}(v_t a^{\dagger 2} - v_t^* a^2)} |0\rangle. \quad (5.199)$$

Sin embargo, no es posible determinar el grado de corrección de la ec. (5.198) respecto a (5.199). Esto es debido a que el método variacional está íntimamente ligado a un desarrollo asintótico semiclásico, y para aumentar el grado de exactitud de la aproximación habría que modificar el estado de prueba, incluyendo, además de los operadores \hat{D} y \hat{S} , una serie de operadores unitarios $\hat{U}_n(\gamma_{nt})$ definidos por

$$\hat{U}_n(\gamma_{nt}, \gamma_{nt}^*) = e^{\hbar^{n/2}(\gamma_{nt} a^{\dagger n+2} - \gamma_{nt}^* a^{n+2})}, \quad (5.200)$$

de forma que la función de onda a tiempo t pueda aproximarse por

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\phi_t/\hbar} \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(v_t, v_t^*) \hat{U}_1(\gamma_{1t}, \gamma_{1t}^*) \cdots \hat{U}_n(\gamma_{nt}, \gamma_{nt}^*) |0\rangle. \quad (5.201)$$

Si mantenemos la aproximación incluyendo sólo \hat{D} y \hat{S} como en (5.198), es de esperar que los resultados variacionales constituyan una optimización de los semiclásicos, puesto que la evolución de los parámetros variacionales se lleva a cabo mediante unas ecuaciones diferenciales que incluyen términos de orden superior en \hbar . Ahora bien, esto es así siempre y cuando las dinámicas variacional y semiclásica sean cualitativamente semejantes. En el caso de que difieran de forma significativa, habrá que considerar los resultados variacionales con cierta reserva, puesto que puede darse el caso de que los efectos mostrados sean un artefacto del método, y sean las propias correcciones las que introduzcan estos efectos espúreos en la dinámica. En este sentido, algunos autores [Bal01, Co094, Co098] cuestionan la existencia física real del llamado “caos semicuántico”, término con el que se conoce el fenómeno según el cual

el acoplamiento entre un sistema cuántico y uno clásico puede *inducir* una dinámica caótica del estado cuántico en su espacio de Hilbert. Este término se reserva para el caso en que ni el sistema clásico ni el cuántico serían caóticos por sí mismos, y el caos aparece como resultado del acoplamiento entre ellos.¹⁴ Este fenómeno aparece en los casos en los que el sistema en estudio es separable en una parte que se trata clásicamente y otra cuánticamente, por ejemplo, cualquier sistema cuántico que de forma natural pueda dividirse en un subsistema rápido (cuántico) y uno lento (clásico) mediante la aproximación de Born-Oppenheimer [Blu94], o un átomo (cuántico) en interacción con un campo en una cavidad (clásica) [Mil83, Eid86]. En el presente caso, la dinámica clásica correspondiente a la evolución de las variables del desplazamiento (α_r, α_i^*) se ve afectada por las fluctuaciones cuánticas introducidas por las variables de *squeezing* (s_r, s_i^*) . Por lo tanto, es de suponer que para valores muy bajos de \hbar tanto el método variacional como el semiclásico reproduzcan de forma aproximada la evolución cuántica, constituyendo el primero una optimización de los resultados del segundo. Sin embargo, para valores mayores de \hbar los resultados de ambos métodos no sólo diferirán entre sí, sino que en cualquier caso ambos dejarán de constituir una buena aproximación a la evolución del estado.

5.2.2. Método variacional de Demkov

En las secciones precedentes hemos obtenido una aproximación a la función de onda a partir de un principio variacional, lo que ha permitido expresar de forma integral el operador de evolución como un promedio sobre las propagaciones individuales de infinitos estados coherentes, y de ahí obtener sus elementos de matriz mediante una integración por fase estacionaria. Existe un método, propuesto por Demkov [Dem63, Mur95], para calcular directamente las amplitudes de transición

$$T_{\beta\alpha} = \langle \alpha | \hat{U}(t_f, t_0) | \beta \rangle \quad (5.202)$$

de forma variacional. La propia construcción del método permite introducir de forma natural operadores no unitarios, como hemos hecho anteriormente, para poder dar cuenta de las condiciones de contorno del problema. En general, denotando por Ψ_{\pm} las funciones de onda exactas y por Φ_{\pm} las funciones de prueba, que difieren de las exactas en una variación de primer orden

$$\Phi_{\pm}(t) = \Psi_{\pm}(t) + \delta\Psi_{\pm}(t), \quad (5.203)$$

las condiciones de contorno que se imponen son las siguientes:

$$\langle \Phi_{+}(t_f) | = \langle \Psi_{+}(t_f) | = \langle \alpha | \quad (5.204a)$$

$$| \Phi_{-}(t_0) \rangle = | \Psi_{-}(t_0) \rangle = | \beta \rangle. \quad (5.204b)$$

¹⁴No debe confundirse este término con el de “caos cuántico” (o “caología cuántica”, según ha definido Berry [Ber89]), que es el estudio de fenómenos semiclásicos característicos de sistemas cuyo análogo clásico muestra comportamiento caótico.

La expresión variacional para la amplitud de transición viene dada por

$$T_{\beta\alpha}^v = \langle \Phi_+(t_f) | \Phi_-(t_f) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \Phi_+(t) | \left(\hat{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) | \Phi_-(t) \rangle, \quad (5.205)$$

que debe ser estacionaria frente a variaciones de las funciones de prueba Φ_{\pm} sujetas a las condiciones de contorno (5.204). Nótese que para los autoestados exactos del hamiltoniano \hat{H} , el segundo término de (5.205) se anula, y la expresión variacional para $T_{\beta\alpha}$ se reduce a la expresión exacta (5.202).

Una variación infinitesimal $\delta\Phi_{\pm}$ en las funciones de prueba tendrá como consecuencia una variación en $T_{\beta\alpha}^v$ dada por

$$\begin{aligned} \delta T_{\beta\alpha}^v &= \langle \delta\Phi_+(t_f) | \Phi_-(t_f) \rangle + \langle \Phi_+(t_f) | \delta\Phi_-(t_f) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt \delta \langle \Phi_+(t) | \hat{H} | \Phi_-(t) \rangle \\ &\quad - \int_{t_0}^{t_f} dt \left[\langle \delta\Phi_+(t) | \frac{\partial}{\partial t} | \Phi_-(t) \rangle + \langle \Phi_+(t) | \frac{\partial}{\partial t} | \delta\Phi_-(t) \rangle \right] \\ &= \langle \Phi_+(t_f) | \delta\Phi_-(t_f) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt \delta \langle \Phi_+(t) | \hat{H} | \Phi_-(t) \rangle \\ &\quad - \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \delta\Phi_+(t) | \dot{\Phi}_-(t) \rangle - \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \Phi_+(t) | \frac{\partial}{\partial t} \delta\Phi_-(t) \rangle, \end{aligned} \quad (5.206)$$

donde se ha tenido en cuenta la primera condición de contorno, $\langle \delta\Phi_+(t_f) | = 0$ [ec. (5.204a)]. Evaluando por partes la última integral en (5.206) se tiene:

$$\begin{aligned} \delta T_{\beta\alpha}^v &= \langle \Phi_+(t_f) | \delta\Phi_-(t_f) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt \delta \langle \Phi_+(t) | \hat{H} | \Phi_-(t) \rangle - \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \delta\Phi_+(t) | \dot{\Phi}_-(t) \rangle \\ &\quad - \left[\langle \Phi_+(t_f) | \delta\Phi_-(t_f) \rangle - \langle \Phi_+(t_0) | \delta\Phi_-(t_0) \rangle - \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \dot{\Phi}_+(t) | \delta\Phi_-(t) \rangle \right] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \delta\Phi_+(t) | \hat{H} | \Phi_-(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \Phi_+(t) | \hat{H} | \delta\Phi_-(t) \rangle \\ &\quad - \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \delta\Phi_+(t) | \dot{\Phi}_-(t) \rangle - \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \dot{\Phi}_+(t) | \delta\Phi_-(t) \rangle, \end{aligned} \quad (5.207)$$

donde ahora se ha tenido en cuenta la segunda condición de contorno, $|\delta\Phi_-(t_0)\rangle = 0$ [ec. (5.204b)].¹⁵

Esta variación puede escribirse como

$$\delta T_{\beta\alpha}^v \equiv \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \delta\Phi_+(t) | \left(\hat{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) | \Phi_-(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \Phi_+(t) | \left(\hat{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) | \delta\Phi_-(t) \rangle, \quad (5.208)$$

¹⁵La inclusión del término $\langle \Phi_+(t_f) | \Phi_-(t_f) \rangle$ en el funcional (5.205) que quiere hacerse estacionario se justifica por el tipo de condiciones de contorno a dos tiempos que tiene el problema. Si este funcional se hubiera definido simplemente como

$$\Gamma = \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \Phi_+(t) | \left(\hat{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) | \Phi_-(t) \rangle,$$

al llevar a cabo variaciones infinitesimales en Φ_{\pm} se tendría

$$\begin{aligned} \delta\Gamma &= \int_{t_0}^{t_f} dt \delta \langle \Phi_+(t) | \hat{H} | \Phi_-(t) \rangle - i\hbar \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \delta\Phi_+(t) | \dot{\Phi}_-(t) \rangle - i\hbar \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \dot{\Phi}_+(t) | \delta\Phi_-(t) \rangle \\ &\equiv [A] + [B] + [C]. \end{aligned}$$

donde el símbolo $\overleftarrow{\partial}/\partial t$ indica que la derivada temporal debe aplicarse a lo que se encuentra a la izquierda de este operador, en este caso $\langle \Phi_+(t) |$. Si $T_{\alpha\beta}$ es estacionario, entonces $\delta T_{\alpha\beta} = 0$ para cualquier variación arbitraria de $\langle \Phi_+(t) |$ y de $|\Phi_-(t)\rangle$. De esta manera, y puesto que las variaciones de Φ_{\pm} están sujetas a condiciones de contorno diferentes, habrán de cumplirse dos ecuaciones diferentes correspondientes a las ecuaciones de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_+} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_+} = 0 \quad (5.209)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_-} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_-} = 0 \quad (5.210)$$

para la lagrangiana

$$\mathcal{L} = \langle \Phi_+(t) | \left(\hat{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) | \Phi_-(t) \rangle. \quad (5.211)$$

Aplicaremos el método variacional de Demkov para obtener una aproximación al elemento de matriz $\langle \alpha | \hat{U}(t_f, t_0) | \beta \rangle$. Dado que estamos tratando con sistemas para los que \hat{H} es independiente del tiempo, el operador de evolución $\hat{U}(t_f, t_0)$ depende sólo de la diferencia $t_f - t_0$. Puede elegirse entonces, con toda generalidad, el instante inicial como $t_0 = 0$ y el instante final como $t_f = t$. Las funciones Φ_{\pm} de prueba a un tiempo τ vendrán dadas por

$$\begin{aligned} |\Phi_-(\tau)\rangle &= e^{i\phi_\tau} \hat{D}(\eta_\tau, \xi_\tau^*) \hat{S}(\nu_\tau, \mu_\tau^*) |0\rangle = e^{i\phi_\tau} e^{\hbar^{-1/2}(\eta_\tau a^\dagger - \xi_\tau^* a)} e^{\frac{1}{2}(\nu_\tau a^{\dagger 2} - \mu_\tau^* a^2)} |0\rangle \\ \langle \Phi_+(\tau) | &= \langle 0 | e^{-i\phi_\tau^*} \hat{S}^{-1}(\nu_\tau, \mu_\tau^*) \hat{D}^{-1}(\eta_\tau, \xi_\tau^*) = \langle 0 | e^{-i\phi_\tau^*} e^{\frac{-1}{2}(\nu_\tau a^{\dagger 2} - \mu_\tau^* a^2)} e^{\hbar^{-1/2}(-\eta_\tau a^\dagger + \xi_\tau^* a)}. \end{aligned}$$

Es importante notar que en estas expresiones las variables complejas (η_τ, ξ_τ^*) , (ν_τ, μ_τ^*) , así como (ϕ_τ, ϕ_τ^*) *no* son complejas conjugadas entre sí, es decir, estamos proponiendo un operador de evolución que *no es unitario*. Esta extensión de la dinámica a operadores que no pertenecen al espacio de Hilbert se justifica por el tipo de condiciones de contorno a dos tiempos que presenta el problema de la determinación de $\langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta \rangle$, y es análoga a las generalizaciones a trayectorias complejas que hemos propuesto para la

Evaluando la integral [C] por partes, se tiene

$$\begin{aligned} \delta \Gamma &= \int_{t_0}^{t_f} dt \delta \langle \Phi_+(t) | \hat{H} | \Phi_-(t) \rangle - i\hbar \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \delta \Phi_+(t) | \dot{\Phi}_-(t) \rangle \\ &\quad - i\hbar \left[\langle \Phi_+(t_f) | \delta \Phi_-(t_f) \rangle - \langle \Phi_+(t_0) | \delta \Phi_-(t_0) \rangle - \int_{t_0}^{t_f} dt \langle \dot{\Phi}_+(t) | \delta \Phi_-(t) \rangle \right]. \end{aligned}$$

El término $\langle \Phi_+(t_0) | \delta \Phi_-(t_0) \rangle$ se anula debido a la condición de contorno (5.204b), y es precisamente para cancelar el término $\langle \Phi_+(t_f) | \delta \Phi_-(t_f) \rangle$ por lo que se incluye $\langle \Phi_+(t_f) | \Phi_-(t_f) \rangle$ en el funcional. Dado que

$$\langle \Phi_+(t_f) | \Phi_-(t_f) \rangle = \langle \Phi_+(t_0) | \hat{U}^{-1} \hat{U} | \Phi_-(t_0) \rangle = \langle \Phi_+(t_0) | \Phi_-(t_0) \rangle,$$

podía haberse elegido $\langle \Phi_+(t_0) | \Phi_-(t_0) \rangle$ como término adicional al funcional Γ , en cuyo caso tendría que evaluarse la integral [B] por partes para cancelar el término $\langle \delta \Phi_+(t_0) | \Phi_-(t_0) \rangle$ (que no se anula con las condiciones de contorno (5.204)). Es por tanto la existencia de condiciones de contorno mixtas a dos tiempos lo que obliga a incluir un término adicional en el funcional que desea hacerse estacionario.

aproximación del operador de evolución en la representación de Bargmann. Las condiciones de contorno

$$|\Phi_-(\tau=0)\rangle = |\beta\rangle \quad (5.212a)$$

$$\langle\Phi_+(\tau=t)| = \langle\alpha| \quad (5.212b)$$

fijan el valor de algunos de los parámetros en los tiempos inicial y final. Así, para $\tau=0$ se tiene

$$\begin{aligned} |\Phi_-(\tau=0)\rangle &= |\beta\rangle = e^{\hbar^{-1/2}\beta a^\dagger}|0\rangle = e^{\hbar^{-1/2}\beta a^\dagger} e^{-\hbar^{-1/2}\beta^* a}|0\rangle = e^{\beta\beta^*/(2\hbar)} e^{\hbar^{-1/2}(\beta a^\dagger - \beta^* a)}|0\rangle \\ &= e^{i\phi_0} e^{\hbar^{-1/2}(\eta_0 a^\dagger - \xi_0^* a)} e^{\frac{1}{2}(v_0 a^{\dagger 2} - \mu_0^* a^2)}|0\rangle, \end{aligned}$$

de donde

$$\eta_0 = \beta \quad (5.213a)$$

$$v_0 = 0 \quad (5.213b)$$

$$i\phi_0 = \frac{\eta_0 \xi_0^*}{2\hbar} = \frac{\beta \xi_0^*}{2\hbar}, \quad (5.213c)$$

quedando indeterminados los parámetros ξ_0^* y μ_0^* . Análogamente, en el instante final

$$\begin{aligned} \langle\Phi_+(\tau=t)| &= \langle\alpha| = \langle 0| e^{\hbar^{-1/2}\alpha^* a} = \langle 0| e^{-\hbar^{-1/2}\alpha a^\dagger} e^{\hbar^{-1/2}\alpha^* a} = \langle 0| e^{\hbar^{-1/2}(-\alpha a^\dagger + \alpha^* a)} e^{-\alpha\alpha^*/(2\hbar)} \\ &= \langle 0| e^{-i\phi_t^*} e^{\frac{-1}{2}(v_t a^{\dagger 2} - \mu_t^* a^2)} e^{\hbar^{-1/2}(-\eta_t a^\dagger + \xi_t^* a)}, \end{aligned}$$

de donde

$$\xi_t^* = \alpha^* \quad (5.214a)$$

$$\mu_t^* = 0 \quad (5.214b)$$

$$i\phi_t^* = \frac{\eta_t \xi_t^*}{2\hbar} = \frac{\eta_t \alpha^*}{2\hbar}, \quad (5.214c)$$

quedando en este caso indeterminados los valores de las variables η_t y v_t . Como vemos, tanto en el instante inicial como en el final, las fases ϕ y ϕ^* quedan determinadas “a medias”. En estas condiciones, la amplitud de transición se obtiene haciendo estacionario el funcional (5.205), dado por

$$\begin{aligned} T_{\beta\alpha}^v &= \langle 0| e^{-i\phi_t^*} \hat{S}^{-1}(v_t, \mu_t^*) \hat{D}^{-1}(\eta_t, \xi_t^*) e^{i\phi_t} \hat{D}(\eta_t, \xi_t^*) \hat{S}(v_t, \mu_t^*) |0\rangle \\ &+ \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau \langle 0| e^{-i\phi_\tau^*} \hat{S}^{-1}(v_\tau, \mu_\tau^*) \hat{D}^{-1}(\eta_\tau, \xi_\tau^*) \left(\hat{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \right) e^{i\phi_\tau} \hat{D}(\eta_\tau, \xi_\tau^*) \hat{S}(v_\tau, \mu_\tau^*) |0\rangle \\ &\equiv e^{i(\phi_t - \phi_t^*)} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau \mathcal{L}(\eta_\tau, \xi_\tau^*, v_\tau, \mu_\tau^*, \phi_\tau, \phi_\tau^*; \dot{\eta}_\tau, \dot{\xi}_\tau^*, \dot{v}_\tau, \dot{\mu}_\tau^*, \dot{\phi}_\tau, \dot{\phi}_\tau^*). \end{aligned} \quad (5.215)$$

La forma funcional de esta lagrangiana está dada por la ec. (5.114) (con un cambio de signo respecto a ésta debido a las diferentes definiciones de los funcionales Γ y $T_{\beta\alpha}^v$), esto es:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= e^{i(\phi_t - \phi_t^*)} \left[H_0^l(\zeta_t) - i\hbar \left(i\dot{\phi}_t + H_0^{DS}(\zeta_t; \dot{\zeta}_t) \right) \right] \\ &= e^{i(\phi_t - \phi_t^*)} \left[H_0^l(\zeta_t) + \hbar\dot{\phi}_t - \frac{i}{2}(\xi_t^* \dot{\eta}_t - \eta_t \dot{\xi}_t^*) - \frac{i\hbar}{4}(s_t^* \dot{s}_t - s_t \dot{s}_t^*) \right], \end{aligned} \quad (5.216)$$

donde $H'_0(\zeta_t)$ viene dado por (5.120) y la evolución de las variables $\zeta_t \equiv \{\eta_t, \xi_t^*, s_t, s_t^*\}$ así como ϕ_t y ϕ_t^* viene determinada por las correspondientes ecuaciones de Euler-Lagrange, análogas a (5.133). [Nótese que las variables (α_t, α_t^*) en (5.133) corresponden en este caso a las variables (η_t, ξ_t^*) , así como (s_t, s_t^*) están definidas por (5.155) en términos de las variables (v_t, μ_t^*) . Los parámetros ϕ_t y ϕ_t^* cumplen la misma ecuación diferencial

$$\hbar\dot{\phi}_t = \frac{i}{2}(\xi_t^* \dot{\eta}_t - \eta_t \dot{\xi}_t^*) + \frac{i\hbar}{4}(s_t^* \dot{s}_t - s_t \dot{s}_t^*) - H'_0, \quad (5.217)$$

lo que hace que el término de la lagrangiana en (5.215) se cancele y que la amplitud de transición $T_{\beta\alpha}^v$ venga dada por

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{U}(t) | \beta \rangle &= e^{i(\phi_t - \phi_t^*)} = e^{-\frac{i}{4} \int_0^t (s_\tau^* \dot{s}_\tau - s_\tau \dot{s}_\tau^*) d\tau} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [-H'_0(\eta_\tau, \xi_\tau^*, s_\tau, s_\tau^*) + \frac{i}{2}(\xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau - \eta_\tau \dot{\xi}_\tau^*)] d\tau - \frac{1}{2\hbar} \eta_t \alpha^*} \\ &= e^{-\frac{i}{4} \int_0^t (s_\tau^* \dot{s}_\tau - s_\tau \dot{s}_\tau^*) d\tau} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [-H'_0(\eta_\tau, \xi_\tau^*, s_\tau, s_\tau^*) + i\xi_\tau^* \dot{\eta}_\tau] d\tau - \frac{1}{2\hbar} \beta \xi_0^*} \\ &= e^{-\frac{i}{4} \int_0^t (s_\tau^* \dot{s}_\tau - s_\tau \dot{s}_\tau^*) d\tau} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [-H'_0(\eta_\tau, \xi_\tau^*, s_\tau, s_\tau^*) - i\eta_\tau \dot{\xi}_\tau^*] d\tau + \frac{1}{2\hbar} \beta \xi_0^* - \frac{1}{\hbar} \eta_t \alpha^*}, \end{aligned} \quad (5.218)$$

sujeta a las condiciones de contorno (5.213) y (5.214). Esta expresión, en el límite semiclásico, deberá coincidir con la expresión (5.177).

5.2.3. Un ejemplo: el medio Kerr

El método que hemos expuesto puede aplicarse al estudio del fenómeno óptico no lineal conocido como *efecto Kerr*. [Imo85, Yur86, Kit86, Wal94] Este efecto, por el cual el campo de radiación sufre una modulación de la fase que depende de la propia intensidad de la radiación, tiene lugar en medios no lineales (a los que suele llamarse *medios Kerr*) que tienen una susceptibilidad no lineal de tercer orden [Imo85]. Estos medios poseen por tanto un índice de refracción que es proporcional a la intensidad del campo. El hamiltoniano para el campo eléctrico (con un único modo) en el medio Kerr puede escribirse como

$$\hat{H} = \hbar\omega_0 a^\dagger a + \hbar \frac{\chi}{2} a^{\dagger 2} a^2 \equiv \hat{H}_0 + \hat{H}_K, \quad (5.219)$$

donde ω_0 es la frecuencia de la radiación y el parámetro de anarmonicidad χ es real y proporcional a la susceptibilidad no lineal de tercer orden $\chi^{(3)}$ así como al índice de refracción no lineal n_2 del medio Kerr [Imo85].¹⁶

¹⁶La susceptibilidad χ es un parámetro fenomenológico que incluye una dependencia lineal con \hbar , dada por

$$\chi = \frac{\hbar\omega_0^2 n_2}{c\epsilon_0 n_0^2 A \tau}. \quad (5.220)$$

En esta expresión, n_0 y n_2 son las partes lineal y no lineal, respectivamente, del índice de refracción del medio, y la onda que viaja a través del medio Kerr (supuesta plana, monocromática y polarizada) es tratada como una secuencia de paquetes de onda localizados, moviéndose a una velocidad $v = c/n_0$ (siendo c la velocidad de la luz en el vacío). ϵ_0 es la constante dieléctrica del vacío (relacionada con la constante dieléctrica del medio mediante $\epsilon = n_0^2 \epsilon_0$), A es el área de una sección transversal del haz

Para establecer una analogía entre las descripciones clásica y cuántica de este sistema, es conveniente estudiar la evolución de observables como a^\dagger y a en la imagen de interacción o de Dirac. Dicha representación se obtiene mediante la aplicación de una transformación unitaria $\hat{T}_0(t)$ generada por \hat{H}_0 y definida por

$$\hat{T}_0(t) \equiv e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} = e^{-i\omega_0 a^\dagger a t}. \quad (5.221)$$

En esta imagen, los operadores de creación y aniquilación a^\dagger y a (independientes del tiempo en la representación de Schrödinger) vienen dados por

$$a_I^\dagger(t) \equiv \hat{T}_0^\dagger(t) a^\dagger \hat{T}_0(t) = e^{i\omega_0 a^\dagger a t} a^\dagger e^{-i\omega_0 a^\dagger a t} = a^\dagger e^{i\omega_0 t} \quad (5.222a)$$

$$a_I(t) \equiv \hat{T}_0^\dagger(t) a \hat{T}_0(t) = e^{i\omega_0 a^\dagger a t} a e^{-i\omega_0 a^\dagger a t} = a e^{-i\omega_0 t}, \quad (5.222b)$$

mientras que el operador hamiltoniano (5.219) tiene la forma

$$\begin{aligned} \hat{H}_I &\equiv \hat{T}_0^\dagger(t) \hat{H} \hat{T}_0(t) + i\hbar \frac{d\hat{T}_0^\dagger(t)}{dt} \hat{T}_0(t) \\ &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} (\hat{H}_0 + \hat{H}_K) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} - \hat{H}_0 \hat{T}_0^\dagger(t) \hat{T}_0(t) \\ &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{H}_K e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \\ &= \hbar \frac{\chi}{2} a_I^{\dagger 2}(t) a_I^2(t) = \hbar \frac{\chi}{2} a^{\dagger 2} a^2 = \hat{H}_K. \end{aligned} \quad (5.223)$$

Vemos que ésta es una imagen de interacción en el sentido de que el movimiento libre generado por el hamiltoniano no perturbado \hat{H}_0 ha sido omitido. Puesto que $[\hat{H}_0, \hat{H}_K] = 0$, el hamiltoniano en la imagen de interacción se reduce simplemente a \hat{H}_K .

Para obtener la evolución los operadores $a_I^\dagger(t)$ y $a_I(t)$ es conveniente pasar a la imagen de Heisenberg. Así, las ecuaciones de movimiento son las ecuaciones de Heisenberg:

$$\frac{da_I^\dagger(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [a_I^\dagger(t), \hat{H}_K] = i\chi a_I^\dagger(t) a_I(t) a(t) \quad (5.224a)$$

$$\frac{da_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [a_I(t), \hat{H}_K] = -i\chi a_I^\dagger(t) a_I(t) a(t). \quad (5.224b)$$

Puesto que el operador número de fotones $\hat{n} = a^\dagger a$ es una constante del movimiento, ya que $[\hat{n}, \hat{H}] = 0$, la estadística del número de fotones es invariante temporal:

$$a_I^\dagger(t) a_I(t) = a^\dagger a = \hat{n}. \quad (5.225)$$

óptico y τ es la longitud temporal de cada paquete. El índice de refracción dependiente de la intensidad puede expresarse como

$$n(|\mathcal{E}|^2) = n_0 + \frac{1}{2} n_2 |\mathcal{E}|^2,$$

donde \mathcal{E} es una amplitud de campo compleja definida por $E(z, t) = \frac{1}{2} \mathcal{E}(z, t) e^{i(kz - \omega_0 t)} + c.c.$, siendo $k = \omega_0/v$ una constante de propagación. Más adelante será necesario escribir de forma explícita esta dependencia de la susceptibilidad χ con \hbar para obtener de forma correcta el límite clásico de las expresiones cuánticas que obtengamos.

La integración de las ecuaciones (5.224) da como resultado

$$a^\dagger(t) = a^\dagger(0) e^{i\chi\hat{n}t} = a^\dagger e^{i\chi a^\dagger a t} \quad (5.226a)$$

$$a(t) = a(0) e^{-i\chi\hat{n}t} = a e^{-i\chi a^\dagger a t}. \quad (5.226b)$$

Este resultado indica que el campo experimenta un cambio de fase que es proporcional al número de fotones.

Supongamos que el estado inicial (esto es, el campo a la entrada del medio Kerr) es un estado coherente $|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha, \alpha^*)|0\rangle$. La amplitud media a un tiempo t posterior (esto es, la excitación coherente del campo a la salida del medio Kerr) vendrá dada por

$$\begin{aligned} \langle\alpha|a(t)|\alpha\rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \langle 0|\hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) e^{-i\chi a^\dagger a t} \hat{D}(\alpha, \alpha^*)|0\rangle \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \langle 0|\hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) e^{-i\chi a^\dagger a t} \hat{D}(\alpha, \alpha^*) e^{i\chi a^\dagger a t} e^{-i\chi a^\dagger a t}|0\rangle. \end{aligned} \quad (5.227)$$

Este valor esperado puede calcularse teniendo en cuenta la propiedad

$$e^{-i\chi a^\dagger a t} f(a, a^\dagger) e^{i\chi a^\dagger a t} = f(e^{i\chi t} a, e^{-i\chi t} a^\dagger),$$

que, para el caso del operador desplazamiento, se escribe

$$\begin{aligned} e^{-i\chi a^\dagger a t} \hat{D}(\alpha, \alpha^*) e^{i\chi a^\dagger a t} &= e^{-i\chi a^\dagger a t} e^{\hbar^{-1/2}(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)} e^{i\chi a^\dagger a t} \\ &= e^{\hbar^{-1/2}(\alpha e^{-i\chi t} a^\dagger - \alpha^* e^{i\chi t} a)} \\ &\equiv e^{\hbar^{-1/2}(\alpha_t a^\dagger - \alpha_t^* a)} \equiv \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*), \end{aligned}$$

donde hemos definido

$$\begin{aligned} \alpha_t &\equiv \alpha e^{-i\chi t} \\ \alpha_t^* &\equiv \alpha^* e^{i\chi t}. \end{aligned}$$

De esta forma, la ec. (5.227) se escribe

$$\langle\alpha|a(t)|\alpha\rangle \equiv \frac{\alpha(t)}{\sqrt{\hbar}} = \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \langle 0|\hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) e^{-i\chi a^\dagger a t}|0\rangle. \quad (5.228)$$

Haciendo uso de las relaciones BCH el producto de operadores en esta expresión puede reordenarse de forma conveniente, de manera que al tomar valor esperado en el vacío se tiene

$$\alpha(t) = \alpha e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{\hbar}(1-e^{-i\chi t})} = \alpha e^{-2\frac{|\alpha|^2}{\hbar}\sin^2(\chi t/2) - i\frac{|\alpha|^2}{\hbar}\sin(\chi t)}. \quad (5.229)$$

Para tiempos cortos, $\chi t \ll 1$, podemos aproximar

$$\alpha(t) \simeq \alpha e^{-\frac{|\alpha|^2}{2\hbar}\chi^2 t^2 - i\frac{|\alpha|^2}{\hbar}\chi t}. \quad (5.230)$$

Este resultado refleja dos efectos: Por una parte, la exponencial compleja da cuenta de la rotación que experimenta la amplitud media, dada por $|\alpha|^2 \chi t / \hbar$. Este es el cambio de fase no lineal mencionado anteriormente. Por otra parte, se observa un decaimiento de la amplitud a tiempos cortos que va cuadráticamente con el tiempo. Este decaimiento es debido a que el efecto Kerr transforma las fluctuaciones en intensidad que tiene el estado coherente inicial en fluctuaciones de fase [Wal94].

A pesar de este decaimiento en la amplitud media, la ec. (5.229) indica que para $\chi t = 2\pi$ la amplitud recupera su valor inicial, dado por α . Este es un ejemplo de *recurrencia cuántica* que no tiene lugar clásicamente, y es debido en última instancia a la naturaleza discreta que tiene la distribución del número de fotones para un campo cuantizado. De hecho, puede comprobarse que para $\chi t = \pi$ el sistema evoluciona a un estado que es una superposición coherente de estados coherentes:

$$|\Psi(\chi t = \pi)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{i\pi/4} |\alpha\rangle + e^{-i\pi/4} |-\alpha\rangle \right]. \quad (5.231)$$

(Este fenómeno sería muy difícil de observar experimentalmente, ya que los valores típicos de χ requerirían tiempos de interacción enormemente grandes, lo que en la práctica significa longitudes de interacción extremadamente largas. Por otra parte, la disipación dificulta en gran medida la observación de tal superposición de estados coherentes en un medio Kerr [Wal94].)

El cálculo de la evolución del valor medio del observable $a^\dagger(t)$ conduce a la expresión compleja conjugada de la ec. (5.229):

$$\frac{\alpha^*(t)}{\sqrt{\hbar}} \equiv \langle \alpha | a^\dagger(t) | \alpha \rangle = \frac{\alpha^*}{\sqrt{\hbar}} e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{\hbar}(1-e^{i\chi t})}. \quad (5.232)$$

Las ecs. (5.229) y (5.232) permiten escribir

$$|\alpha(t)|^2 = \alpha(t) \alpha^*(t) = \alpha\alpha^* e^{-2\frac{\alpha\alpha^*}{\hbar}(1-\cos\chi t)}. \quad (5.233)$$

Las fluctuaciones que se producen cuánticamente en la amplitud del campo, con recurrencias a tiempos dados por $\chi t = 2n\pi$, así como el decaimiento cuadrático que se produce a tiempos cortos, dado por

$$\alpha(t)\alpha^*(t) \simeq \alpha\alpha^* e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{\hbar}\chi^2 t^2}, \quad (5.234)$$

no tienen lugar clásicamente. A tiempos muy cortos, las dinámicas cuántica y clásica coinciden, y para que el límite clásico ($\hbar \rightarrow 0$) de la expresión (5.234) sea correcto, es necesario que el parámetro fenomenológico χ incluya una dependencia con \hbar . Ya hemos mencionado la existencia de esta dependencia [ec. (5.220)], así que en adelante la mostraremos explícitamente definiendo el parámetro γ mediante $\chi \equiv 4\hbar\gamma$ (donde el factor 4 se incluye por conveniencia). En función de este parámetro se obtiene el límite clásico correcto de la ec. (5.234):

$$\alpha(t)\alpha^*(t) \simeq \alpha\alpha^* e^{-\alpha\alpha^* 16\hbar\gamma^2 t^2} \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} \alpha\alpha^*, \quad (5.235)$$

resultado que indica la ausencia de fluctuaciones en la dinámica clásica.

Si no hubiéramos pasado a imagen de interacción, habríamos obtenido el resultado

$$\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega_0 t - \frac{|\alpha|^2}{\hbar}(1 - e^{-i4\hbar\gamma t})} \quad (5.236a)$$

$$\alpha^*(t) = \alpha^* e^{i\omega_0 t - \frac{|\alpha|^2}{\hbar}(1 - e^{i4\hbar\gamma t})}. \quad (5.236b)$$

En este sentido, vemos que pasar de la imagen de Schrödinger a la imagen de interacción es equivalente a hacer una transformación a un sistema rotante con frecuencia ω_0 . Esta frecuencia desaparece no obstante al calcular el producto $|\alpha(t)|^2 = \alpha(t)\alpha^*(t)$, obteniéndose el mismo resultado que el dado en (5.233).

El método variacional proporcionará unas ecuaciones diferenciales que rigen la evolución de los parámetros de desplazamiento y *squeezing*. Para poder establecer una comparación entre los resultados cuántico y variacional, es conveniente obtener la expresión de las ecuaciones diferenciales cuánticas, que se obtienen derivando las ecuaciones (5.236) con respecto al tiempo:

$$\dot{\alpha}(t) = -i\omega_0 \alpha(t) - i4\gamma|\alpha|^2 e^{-i4\hbar\gamma t} \alpha(t)$$

$$\dot{\alpha}^*(t) = i\omega_0 \alpha^*(t) + i4\gamma|\alpha|^2 e^{i4\hbar\gamma t} \alpha^*(t).$$

El cambio de variables

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) \quad (5.237a)$$

$$\alpha^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip) \quad (5.237b)$$

permite obtener las ecuaciones diferenciales para las variables q y p :

$$\dot{q}(t) = \omega_0 p + 2\gamma(q^2 + p^2) p \cos(4\hbar\gamma t) - 2\gamma(q^2 + p^2) q \sin(4\hbar\gamma t) \quad (5.238a)$$

$$\dot{p}(t) = -\omega_0 q - 2\gamma(q^2 + p^2) q \cos(4\hbar\gamma t) - 2\gamma(q^2 + p^2) p \sin(4\hbar\gamma t), \quad (5.238b)$$

cuyas soluciones vienen dadas por

$$q(t) = e^{-\frac{q^2+p^2}{2\hbar}(1-\cos(4\hbar\gamma t))} \left[\cos\left(\frac{q^2+p^2}{2\hbar} \sin(4\hbar\gamma t)\right) (q \cos \omega_0 t + p \sin \omega_0 t) + \sin\left(\frac{q^2+p^2}{2\hbar} \sin(4\hbar\gamma t)\right) (p \cos \omega_0 t - q \sin \omega_0 t) \right] \quad (5.239a)$$

$$p(t) = e^{-\frac{q^2+p^2}{2\hbar}(1-\cos(4\hbar\gamma t))} \left[\cos\left(\frac{q^2+p^2}{2\hbar} \sin(4\hbar\gamma t)\right) (p \cos \omega_0 t - q \sin \omega_0 t) - \sin\left(\frac{q^2+p^2}{2\hbar} \sin(4\hbar\gamma t)\right) (q \cos \omega_0 t + p \sin \omega_0 t) \right]. \quad (5.239b)$$

El operador hamiltoniano cuántico

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hbar\omega_0 a^\dagger a + 2\hbar^2\gamma a^{\dagger 2} a^2 = (\hbar\omega_0 - 2\hbar^2\gamma) a^\dagger a + 2\hbar^2\gamma (a^\dagger a)^2 \\ &= \frac{1}{2}(\omega_0 - 4\hbar\gamma)(\hat{q}^2 + \hat{p}^2) + \frac{\gamma}{2}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2)^2 - \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{3}{2}\hbar^2\gamma, \end{aligned} \quad (5.240)$$

donde se ha escrito el campo en términos de las cuadraturas \hat{q} y \hat{p}

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{q} + i\hat{p}) \quad (5.241a)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{q} - i\hat{p}), \quad (5.241b)$$

tiene asociada la siguiente función clásica en el formalismo de estados coherentes:

$$\mathcal{H}_{cl} = \frac{\langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle}{\langle \alpha | \alpha \rangle} = \omega_0 \alpha \alpha^* + 2\gamma \alpha^2 \alpha^{*2} = \frac{\omega_0}{2} (q^2 + p^2) + \frac{\gamma}{2} (q^2 + p^2)^2. \quad (5.242)$$

Las ecuaciones diferenciales que se obtienen tomando el límite $\hbar \rightarrow 0$ en las ecuaciones cuánticas (5.238) corresponden a las ecuaciones de Hamilton para el hamiltoniano clásico \mathcal{H}_{cl} :

$$\dot{q} = \omega_0 p + 2\gamma(q^2 + p^2) p \equiv \frac{\partial \mathcal{H}_{cl}}{\partial p} \quad (5.243a)$$

$$\dot{p} = -\omega_0 q - 2\gamma(q^2 + p^2) q \equiv -\frac{\partial \mathcal{H}_{cl}}{\partial q}, \quad (5.243b)$$

lo que convierte a q y p en variables canónicas conjugadas. A partir de estas ecuaciones puede comprobarse cómo la magnitud

$$I \equiv \frac{1}{2}(q^2 + p^2) \quad (5.244)$$

es una constante del movimiento, puesto que su corchete de Poisson con el hamiltoniano clásico es cero:

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial I}{\partial p} \dot{p} = \frac{\partial I}{\partial q} \frac{\partial \mathcal{H}_{cl}}{\partial p} - \frac{\partial I}{\partial p} \frac{\partial \mathcal{H}_{cl}}{\partial q} \equiv \{I, \mathcal{H}_{cl}\} = q \dot{q} + p \dot{p} = 0.$$

En función de esta constante del movimiento, las ecuaciones (5.243), escritas como

$$\dot{q} = (\omega_0 + 4\gamma I) p \equiv \omega p \quad (5.245a)$$

$$\dot{p} = -(\omega_0 + 4\gamma I) q \equiv -\omega q \quad (5.245b)$$

pueden integrarse fácilmente dando como resultado

$$q_t = q_0 \cos \omega t + p_0 \sin \omega t \quad (5.246a)$$

$$p_t = p_0 \cos \omega t - q_0 \sin \omega t. \quad (5.246b)$$

La periodicidad en la dinámica de las variables conjugadas q y p invita a efectuar una transformación canónica a *variables de acción-ángulo*, (J, θ) . La variable de acción J se define como

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint p dq, \quad (5.247)$$

donde la integral se lleva a cabo a lo largo de un ciclo del movimiento. A partir de las soluciones (5.246) puede comprobarse cómo la constante de movimiento I definida en (5.244) corresponde a la variable de acción, puesto que

$$2\pi J \equiv \oint p dq = \int_0^{2\pi/\omega} p \dot{q} dt = \omega \int_0^{2\pi/\omega} p^2 dt = \pi(q_0^2 + p_0^2) \equiv 2\pi I. \quad (5.248)$$

En estas nuevas variables, el hamiltoniano es sólo función de la acción, de modo que la ec. (5.242) se escribe

$$\mathcal{H}_{cl}(J) = \omega_0 J + 2\gamma J^2. \quad (5.249)$$

La evolución de J y θ viene dada por las ecuaciones canónicas

$$j = -\frac{\partial \mathcal{H}_{cl}(J)}{\partial \theta} = 0 \quad (5.250a)$$

$$\dot{\theta} = \frac{\partial \mathcal{H}_{cl}(J)}{\partial J} = \omega_0 + 4\gamma J \equiv \omega(J), \quad (5.250b)$$

que son fácilmente integradas como

$$J = const = \frac{1}{2}(q_0^2 + p_0^2)$$

$$\theta(t) = \omega(J)t + \theta_0 = (\omega_0 + 4\gamma J)t + \theta_0,$$

siendo $\omega(J)$ la frecuencia característica del movimiento.

Todos los cálculos que hemos realizado pueden repetirse para el caso en que el estado inicial sea un estado coherente-*squeezed*, $|\alpha s\rangle = \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(s, s^*) |0\rangle$, en lugar de un estado coherente puro $|\alpha\rangle$. En este caso el valor esperado del operador $a(t)$ [ec. (5.226)] vendrá dado por

$$\langle \alpha s | a(t) | \alpha s \rangle = \langle 0 | \hat{S}^\dagger(s, s^*) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) e^{-i\chi a^\dagger a t} a \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(s, s^*) | 0 \rangle, \quad (5.251)$$

donde $\chi = 4\hbar\gamma$, como sabemos, aunque mantendremos la notación de χ para simplificar las expresiones. Este producto de operadores puede evaluarse haciendo uso de la representación matricial del álgebra h_6 escribiendo esta expresión como

$$\langle \alpha s | a(t) | \alpha s \rangle = \frac{\partial}{\partial \mu} \langle 0 | \hat{S}^\dagger(s, s^*) \hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) e^{-i\chi a^\dagger a t} e^{\mu a} \hat{D}(\alpha, \alpha^*) \hat{S}(s, s^*) | 0 \rangle \Big|_{\mu=0}. \quad (5.252)$$

Con algo de álgebra puede demostrarse que este valor esperado viene dado por

$$\begin{aligned} \langle \alpha s | a(t) | \alpha s \rangle &= \frac{\alpha e^{i\chi t} - (\alpha s s^* - \alpha^* s \sqrt{1 + s s^*}) (1 - e^{i\chi t})}{\sqrt{\hbar} (e^{2i\chi t} (1 + s s^*) - s s^*)^{3/2}} \\ &\times \exp \left[-i\omega_0 t + 2i\chi t + \frac{\alpha \alpha^* (e^{i\chi t} - e^{2i\chi t})}{\hbar (e^{2i\chi t} (1 + s s^*) - s s^*)} \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{(\alpha \alpha^* s s^* - (\alpha^2 s + \alpha^2 s^*) \sqrt{1 + s s^*}) (1 - 2e^{i\chi t} + e^{2i\chi t})}{\hbar (e^{2i\chi t} (1 + s s^*) - s s^*)} \right]. \end{aligned} \quad (5.253)$$

Es sencillo comprobar cómo para el caso $s = s^* = 0$ se recupera la expresión (5.229), mientras que para $t = 0$ se obtiene el resultado (correcto)

$$\langle \alpha s | a | \alpha s \rangle = \langle 0 | \left(s a^\dagger + \sqrt{1 + s s^*} a + \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right) | 0 \rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}}. \quad (5.254)$$

Método variacional

Una vez obtenida la evolución dinámica cuántica de $|\alpha(t)\rangle$, así como su límite clásico, podemos comparar estos resultados con los que se obtienen al aplicar el método variacional dependiente del tiempo al medio Kerr. Así, si la aproximación a la evolución de un estado coherente inicial se escribe

$$|\Psi(t)\rangle \simeq e^{i\phi_t/\hbar} \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(s_t, s_t^*) |0\rangle, \quad (5.255)$$

las ecuaciones diferenciales para los parámetros α_t , α_t^* , s_t y s_t^* se obtienen al plantear las ecuaciones de Euler-Lagrange para la lagrangiana $\tilde{\mathcal{L}}$ asociada al operador hamiltoniano (5.240), dada por

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{L}} &= \mathcal{L} - \lambda(c_t^2 - s_t s_t^*) \\ &= -\hbar\dot{\phi}_t + \frac{i}{2}(\alpha_t^* \dot{\alpha}_t - \alpha_t \dot{\alpha}_t^*) + \frac{i\hbar}{4}(s_t^* \dot{s}_t - s_t \dot{s}_t^*) - H'_{00}(\alpha_t, s_t) - \lambda(c_t^2 - s_t s_t^*) \\ &= -\hbar\dot{\phi}_t + \frac{i}{2}(\alpha_t^* \dot{\alpha}_t - \alpha_t \dot{\alpha}_t^*) + \frac{i\hbar}{4}(s_t^* \dot{s}_t - s_t \dot{s}_t^*) - \omega_0 \alpha_t \alpha_t^* - \hbar\omega_0 s_t s_t^* - 2\gamma\alpha_t^2 \alpha_t^{*2} \\ &\quad - 4\hbar^2 \gamma s_t^2 s_t^{*2} - 8\hbar\gamma\alpha_t \alpha_t^* s_t s_t^* - 2\hbar\gamma\alpha_t^2 s_t^* c_t - 2\hbar\gamma\alpha_t^{*2} s_t c_t - 2\hbar^2 \gamma s_t s_t^* c_t^2 \\ &\quad - \lambda(c_t^2 - s_t s_t^*). \end{aligned} \quad (5.256)$$

Estas ecuaciones vienen dadas por:

$$\dot{\alpha}_t = -i\omega_0 \alpha_t - 4i\gamma\alpha_t^2 \alpha_t^* - 8i\hbar\gamma\alpha_t s_t s_t^* - 4i\hbar\gamma\alpha_t^* s_t c_t \quad (5.257a)$$

$$\dot{\alpha}_t^* = i\omega_0 \alpha_t^* + 4i\gamma\alpha_t^{*2} \alpha_t + 8i\hbar\gamma\alpha_t^* s_t s_t^* + 4i\hbar\gamma\alpha_t s_t^* c_t \quad (5.257b)$$

$$\begin{aligned} \dot{s}_t &= -2i\omega_0 s_t - 16i\gamma\alpha_t \alpha_t^* s_t - 4i\gamma\alpha_t^2 c_t - 2i\gamma \frac{\alpha_t^2 s_t s_t^*}{c_t} - 2i\gamma \frac{\alpha_t^{*2} s_t^2}{c_t} \\ &\quad - 20i\hbar\gamma s_t^2 s_t^* - 4i\hbar\gamma s_t c_t^2 \end{aligned} \quad (5.257c)$$

$$\begin{aligned} \dot{s}_t^* &= 2i\omega_0 s_t + 16i\gamma\alpha_t \alpha_t^* s_t^* + 4i\gamma\alpha_t^{*2} c_t + 2i\gamma \frac{\alpha_t^{*2} s_t s_t^*}{c_t} + 2i\gamma \frac{\alpha_t^2 s_t^{*2}}{c_t} \\ &\quad + 20i\hbar\gamma s_t^{*2} s_t + 4i\hbar\gamma s_t^* c_t^2. \end{aligned} \quad (5.257d)$$

La oscilación con frecuencia ω_0 puede eliminarse trabajando en la imagen de interacción que, como se ha mencionado, equivale a hacer una transformación de las variables $\{\alpha_t, \alpha_t^*, s_t, s_t^*\}$ a unas nuevas variables $\{\alpha_t', \alpha_t'^*, s_t', s_t'^*\}$ definidas por:

$$\begin{aligned} \alpha_t' &= \alpha_t e^{i\omega_0 t} \\ \alpha_t'^* &= \alpha_t^* e^{-i\omega_0 t} \\ s_t' &= s_t e^{2i\omega_0 t} \\ s_t'^* &= s_t^* e^{-2i\omega_0 t}. \end{aligned}$$

Este cambio de variables corresponde por tanto a una rotación de frecuencia ω_0 para las variables del desplazamiento (α_t, α_t^*) y una rotación de frecuencia $2\omega_0$ para las variables del *squeezing* (s_t, s_t^*). Es

inmediato observar cómo con esta transformación desaparecen los términos de estas ecuaciones que contienen ω_0 . Renombrando las variables con prima como variables sin primar, las ecuaciones (5.257) se escriben

$$\dot{\alpha}_t = -4i\gamma\alpha_t^2\alpha_t^* - 8i\hbar\gamma\alpha_t s_t s_t^* - 4i\hbar\gamma\alpha_t^* s_t c_t \quad (5.258a)$$

$$\dot{\alpha}_t^* = 4i\gamma\alpha_t^{*2}\alpha_t + 8i\hbar\gamma\alpha_t^* s_t s_t^* + 4i\hbar\gamma\alpha_t s_t^* c_t \quad (5.258b)$$

$$\dot{s}_t = -16i\gamma\alpha_t\alpha_t^* s_t - 4i\gamma\alpha_t^2 c_t - 2i\gamma\frac{\alpha_t^2 s_t s_t^*}{c_t} - 2i\gamma\frac{\alpha_t^{*2} s_t^2}{c_t} - 20i\hbar\gamma s_t^2 s_t^* - 4i\hbar\gamma s_t c_t^2 \quad (5.258c)$$

$$\dot{s}_t^* = 16i\gamma\alpha_t\alpha_t^* s_t^* + 4i\gamma\alpha_t^{*2} c_t + 2i\gamma\frac{\alpha_t^{*2} s_t s_t^*}{c_t} + 2i\gamma\frac{\alpha_t^2 s_t^{*2}}{c_t} + 20i\hbar\gamma s_t^{*2} s_t + 4i\hbar\gamma s_t^* c_t^2. \quad (5.258d)$$

La ecuación de Euler-Lagrange para la variable $c_t \equiv \sqrt{1+s_t s_t^*}$ permite obtener la expresión para el multiplicador de Lagrange:

$$\lambda = -\frac{\hbar\gamma}{c_t}\alpha_t^2 s_t^* - \frac{\hbar\gamma}{c_t}\alpha_t^{*2} s_t - 2\hbar^2\gamma s_t s_t^*. \quad (5.259)$$

A partir de estas ecuaciones es inmediato comprobar que existen dos magnitudes conservadas en este problema. Una de ellas por supuesto es la energía, dada por

$$\begin{aligned} H'_0 &= \langle \Psi(t) | \hat{H} | \Psi(t) \rangle = \langle 0 | \hat{S}^\dagger(s_t, s_t^*) \hat{D}^\dagger(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{H} \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(s_t, s_t^*) | 0 \rangle \\ &= \omega_0 \alpha_t \alpha_t^* + 2\gamma \alpha_t^2 \alpha_t^{*2} + \hbar \omega_0 s_t s_t^* + 8\hbar \gamma \alpha_t \alpha_t^* s_t s_t^* \\ &+ 2\hbar \gamma \alpha_t^2 s_t^* \sqrt{1+s_t s_t^*} + 2\hbar \gamma \alpha_t^{*2} s_t \sqrt{1+s_t s_t^*} + 2\hbar^2 \gamma s_t s_t^* + 6\hbar^2 \gamma s_t^2 s_t^{*2}. \end{aligned} \quad (5.260)$$

(La comprobación es directa, sin más que derivar esta ecuación con respecto al tiempo y sustituir las expresiones para $\dot{\alpha}_t$, $\dot{\alpha}_t^*$, \dot{s}_t y \dot{s}_t^* dadas por (5.257)). La otra magnitud conservada es el valor esperado del operador número $\hat{n} = a^\dagger a$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle 0 | \hat{S}^\dagger(s_t, s_t^*) \hat{D}^\dagger(\alpha_t, \alpha_t^*) a^\dagger a \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(s_t, s_t^*) | 0 \rangle &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\alpha_t \alpha_t^*}{\hbar} + s_t s_t^* \right) \\ &= \frac{1}{\hbar} (\dot{\alpha}_t \alpha_t^* + \alpha_t \dot{\alpha}_t^*) + \dot{s}_t s_t^* + s_t \dot{s}_t^* = 0. \end{aligned}$$

Denotaremos por J_v esta constante del movimiento (multiplicada por \hbar por conveniencia):

$$J_v \equiv \hbar \langle \Psi(t) | a^\dagger a | \Psi(t) \rangle = \alpha_t \alpha_t^* + \hbar s_t s_t^* = const. \quad (5.261)$$

En el límite $\hbar \rightarrow 0$ las ecuaciones diferenciales (5.258) se desacoplan. Las ecuaciones para α_t y α_t^*

$$\dot{\alpha}_t = -4i\gamma\alpha_t^2\alpha_t^*$$

$$\dot{\alpha}_t^* = 4i\gamma\alpha_t^{*2}\alpha_t$$

pueden integrarse directamente y el resultado puede escribirse en términos de la constante de movimiento

$$J \equiv \alpha_t \alpha_t^*$$

$$\alpha_t = \alpha e^{-4i\gamma J t} \quad (5.262a)$$

$$\alpha_t^* = \alpha^* e^{4i\gamma J t}. \quad (5.262b)$$

Nótese que en este límite la constante de movimiento J_v se reduce a J , según puede verse en (5.261). Asimismo, la otra constante de movimiento, H'_0 , dada por (5.260), corresponde en este límite a la energía clásica: $\mathcal{H} = \omega_0 \alpha_t \alpha_t^* + 2\gamma \alpha_t^2 \alpha_t^{*2} = \omega_0 J + 2\gamma J^2$. Las ecuaciones diferenciales para s_t y s_t^* vendrán dadas por

$$\begin{aligned} \dot{s}_t &= -16i\gamma J s_t - 4i\gamma \alpha_t^2 c_t - 2i\gamma \frac{\alpha_t^2 s_t s_t^*}{c_t} - 2i\gamma \frac{\alpha_t^{*2} s_t^2}{c_t} \\ \dot{s}_t^* &= 16i\gamma J s_t^* + 4i\gamma \alpha_t^{*2} c_t + 2i\gamma \frac{\alpha_t^{*2} s_t s_t^*}{c_t} + 2i\gamma \frac{\alpha_t^2 s_t^{*2}}{c_t}. \end{aligned}$$

Puede llevarse a cabo un cambio de variables, y pasar del conjunto de parámetros complejos $\{\alpha, \alpha^*, s, s^*\}$ a un conjunto de parámetros reales $\{q_\alpha, p_\alpha, q_s, p_s\}$ mediante las ecuaciones de transformación

$$\alpha_t = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_\alpha + ip_\alpha) \quad (5.263a)$$

$$\alpha_t^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_\alpha - ip_\alpha) \quad (5.263b)$$

$$s_t = q_s + ip_s \quad (5.263c)$$

$$s_t^* = q_s - ip_s. \quad (5.263d)$$

En función de estas nuevas variables, las ecuaciones diferenciales (5.257) tienen la forma

$$\begin{aligned} \dot{q}_\alpha &= \omega_0 p_\alpha + 2\gamma p_\alpha (q_\alpha^2 + p_\alpha^2) + 8\hbar\gamma p_\alpha (q_s^2 + p_s^2) \\ &\quad + 4\hbar\gamma (q_\alpha p_s - p_\alpha q_s) \sqrt{1 + q_s^2 + p_s^2} \\ \dot{p}_\alpha &= -\omega_0 q_\alpha - 2\gamma q_\alpha (q_\alpha^2 + p_\alpha^2) - 8\hbar\gamma q_\alpha (q_s^2 + p_s^2) \\ &\quad - 4\hbar\gamma (q_\alpha q_s + p_\alpha p_s) \sqrt{1 + q_s^2 + p_s^2} \\ \dot{q}_s &= 2\omega_0 p_s + 8\gamma p_s (q_\alpha^2 + p_\alpha^2) + \frac{2\gamma}{\sqrt{1 + q_s^2 + p_s^2}} (q_\alpha^2 - p_\alpha^2) q_s p_s \\ &\quad + \frac{4\gamma}{\sqrt{1 + q_s^2 + p_s^2}} q_\alpha p_\alpha (1 + q_s^2 + 2p_s^2) + 4\hbar\gamma p_s + 24\hbar\gamma p_s (q_s^2 + p_s^2) \\ \dot{p}_s &= -2\omega_0 q_s - 8\gamma q_s (q_\alpha^2 + p_\alpha^2) - \frac{2\gamma}{\sqrt{1 + q_s^2 + p_s^2}} (1 + 2q_s^2 + p_s^2) (q_\alpha^2 - p_\alpha^2) \\ &\quad - \frac{4\gamma}{\sqrt{1 + q_s^2 + p_s^2}} q_\alpha p_\alpha q_s p_s - 4\hbar\gamma q_s - 24\hbar\gamma q_s (q_s^2 + p_s^2). \end{aligned}$$

Por otra parte, la energía (5.260) se escribe ¹⁷

$$H'_0 = \frac{\omega_0}{2}(q_\alpha^2 + p_\alpha^2) + \frac{\gamma}{2}(q_\alpha^2 + p_\alpha^2)^2 + \hbar\omega_0(q_s^2 + p_s^2) + 4\hbar\gamma(q_\alpha^2 + p_\alpha^2)(q_s^2 + p_s^2) \\ + 2\hbar\gamma\sqrt{1 + q_s^2 + p_s^2}(q_\alpha^2 q_s - p_\alpha^2 p_s + 2q_\alpha p_\alpha p_s) + 2\hbar^2\gamma(q_s^2 + p_s^2) + 6\hbar^2\gamma(q_s^2 + p_s^2)^2. \quad (5.266)$$

El límite $\hbar \rightarrow 0$ en estas nuevas variables conduce a los resultados clásicos dados anteriormente. Por una parte, el término dominante en H'_0 , dado por (5.266) corresponde al hamiltoniano clásico \mathcal{H}_{cl} [ec. (5.242)]:

$$\mathcal{H}_{cl} = \frac{\omega_0}{2}(q_\alpha^2 + p_\alpha^2) + \frac{\gamma}{2}(q_\alpha^2 + p_\alpha^2)^2 \equiv \omega_0 J + 2\gamma J^2. \quad (5.267)$$

¹⁷Es importante indicar que las ecuaciones de transformación (5.263), si bien definen (q_α, p_α) como variables canónicas conjugadas, no sucede lo mismo para el par de variables (q_s, p_s) . Las ecuaciones diferenciales (5.257) pueden escribirse como

$$\dot{\alpha} = -i \frac{\partial H'_0}{\partial \alpha^*} \quad ; \quad \dot{\alpha}^* = i \frac{\partial H'_0}{\partial \alpha} \quad (5.264a)$$

$$\dot{s} = -\frac{2i}{\hbar} \frac{\partial H'_0}{\partial s^*} \quad ; \quad \dot{s}^* = \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial H'_0}{\partial s}. \quad (5.264b)$$

Si se lleva a cabo un cambio de variables mediante las ecuaciones de transformación

$$\alpha_t = \kappa(q_\alpha + ip_\alpha) \quad ; \quad \alpha_t^* = \kappa(q_\alpha - ip_\alpha) \quad (5.265a)$$

$$s_t = \kappa'(\tilde{q}_s + i\tilde{p}_s) \quad ; \quad s_t^* = \kappa'(\tilde{q}_s - i\tilde{p}_s), \quad (5.265b)$$

donde κ y κ' son constantes reales, el conjunto de ecuaciones (5.264) podrá escribirse como

$$\dot{q}_\alpha = \frac{1}{2\kappa^2} \frac{\partial H'_0}{\partial p_\alpha} \quad ; \quad \dot{p}_\alpha = -\frac{1}{2\kappa^2} \frac{\partial H'_0}{\partial q_\alpha}$$

$$\dot{\tilde{q}}_s = \frac{1}{\hbar\kappa'^2} \frac{\partial H'_0}{\partial \tilde{p}_s} \quad ; \quad \dot{\tilde{p}}_s = -\frac{1}{\hbar\kappa'^2} \frac{\partial H'_0}{\partial \tilde{q}_s}.$$

Si se desea que los pares de variables (q_α, p_α) y $(\tilde{q}_s, \tilde{p}_s)$ sean variables canónicas, su evolución temporal debe regirse por las ecuaciones de Hamilton. Esto hace que las constantes κ y κ' sean tales que

$$\frac{1}{2\kappa^2} = \frac{1}{\hbar\kappa'^2} = 1,$$

con lo que el cambio de variables (5.265) vendrá dado por

$$\alpha_t = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_\alpha + ip_\alpha) \quad ; \quad \alpha_t^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_\alpha - ip_\alpha)$$

$$s_t = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}(\tilde{q}_s + i\tilde{p}_s) \quad ; \quad s_t^* = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}(\tilde{q}_s - i\tilde{p}_s).$$

Con esta transformación, tanto las variables (q_α, p_α) como $(\tilde{q}_s, \tilde{p}_s)$ son variables canónicas. Ahora bien, para que estas últimas puedan seguir siendo interpretadas como variables de *squeezing*, no deben depender de \hbar . (El operador $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$ produce un desplazamiento en el espacio de fases cuya magnitud depende del valor de \hbar utilizado para teselar el espacio de fases. Por este motivo hemos dejado explícita esa dependencia escribiendo el operador como $\hat{D}(\alpha, \alpha^*) = \exp(\hbar^{-1/2}(\alpha a^\dagger - \alpha^* a))$, y por tanto las variables clásicas α y α^* no dependen de \hbar . Sin embargo, el operador de *squeezing* deforma el círculo de incertidumbre convirtiéndolo en una elipse cuya rotación respecto a los ejes de cuadratura viene determinada por el parámetro de *squeezing*. Esta rotación no debe depender del valor de \hbar .) Por este motivo, la transformación (5.263c-d) para las variables de *squeezing* se lleva a cabo mediante un par de variables (q_s, p_s) relacionadas con $(\tilde{q}_s, \tilde{p}_s)$ por $(q_s = \tilde{q}_s/\sqrt{\hbar}, p_s = \tilde{p}_s/\sqrt{\hbar})$. De esta manera, se sacrifica la ventaja de tratar con variables canónicas conjugadas frente a la exigencia de interpretar físicamente estas variables como un *squeezing*. Por otra parte, la ausencia de una dependencia de \hbar en la transformación (5.263c-d) permite obtener de forma correcta el límite semiclásico del problema variacional, como se verá a continuación.

Las ecuaciones de evolución para los parámetros del desplazamiento vienen dadas por las ecuaciones de Hamilton:

$$\begin{aligned}\dot{q}_\alpha &= \omega_0 p_\alpha + 2\gamma p_\alpha (q_\alpha^2 + p_\alpha^2) \equiv \frac{\partial \mathcal{H}_{cl}}{\partial p_\alpha} \\ \dot{p}_\alpha &= -\omega_0 q_\alpha - 2\gamma q_\alpha (q_\alpha^2 + p_\alpha^2) \equiv \frac{\partial \mathcal{H}_{cl}}{\partial q_\alpha}\end{aligned}$$

que, en función de la constante de movimiento $J \equiv (q_\alpha^2 + p_\alpha^2)/2$, se escriben en la forma

$$\begin{aligned}\dot{q}_\alpha &= (\omega_0 + 4\gamma J) p_\alpha \equiv \omega p_\alpha \\ \dot{p}_\alpha &= -(\omega_0 + 4\gamma J) q_\alpha \equiv \omega q_\alpha,\end{aligned}$$

y se integran como

$$q_{\alpha t} = q_{\alpha 0} \cos \omega t + p_{\alpha 0} \sin \omega t \quad (5.268a)$$

$$p_{\alpha t} = p_{\alpha 0} \cos \omega t - q_{\alpha 0} \sin \omega t. \quad (5.268b)$$

Las magnitudes J y ω corresponden, respectivamente, a la variable de acción (5.247) y a la frecuencia clásica del movimiento (5.250) definidas en el formalismo de variables de acción-ángulo.

Por otra parte, las ecuaciones clásicas (no lineales) para las variables de *squeezing* vienen dadas por:

$$\begin{aligned}\dot{q}_s &= 2(\omega_0 + 8\gamma J) p_s + \frac{2\gamma}{\sqrt{1 + q_s^2 + p_s^2}} (q_\alpha^2 - p_\alpha^2) q_s p_s \\ &+ \frac{4\gamma}{\sqrt{1 + q_s^2 + p_s^2}} q_\alpha p_\alpha (1 + q_s^2 + 2p_s^2)\end{aligned} \quad (5.269a)$$

$$\begin{aligned}\dot{p}_s &= -2(\omega_0 + 8\gamma J) q_s - \frac{2\gamma}{\sqrt{1 + q_s^2 + p_s^2}} (1 + 2q_s^2 + p_s^2) (q_\alpha^2 - p_\alpha^2) \\ &- \frac{4\gamma}{\sqrt{1 + q_s^2 + p_s^2}} q_\alpha p_\alpha q_s p_s.\end{aligned} \quad (5.269b)$$

A continuación se muestran los resultados de la evolución temporal del cuadrado del valor esperado de la amplitud del campo, $|\langle a(t) \rangle|^2 = \langle \alpha | a(t) | \alpha \rangle \langle \alpha | a^\dagger(t) | \alpha \rangle \equiv \alpha_t \alpha_t^* / \hbar$, tanto para el cálculo cuántico exacto como para la aproximación variacional, así como para el límite semiclásico. El problema puede escalarse convenientemente redefiniendo el parámetro temporal como $\theta \equiv 4\hbar\gamma t$. (En imagen de interacción, la ecuación de Schrödinger $i\partial_t |\Psi\rangle = 2\hbar\gamma a^\dagger a^2 |\Psi\rangle$ podrá escribirse como $i\partial_\theta |\Psi\rangle = 1/2 a^\dagger a^2 |\Psi\rangle$, lo que es equivalente a una elección de $\gamma = \hbar/4$). Se ha elegido $\omega_0 = 0$. Para la evolución cuántica de la amplitud del campo, la ec. (5.233) indica que para tiempos cortos ($\theta \ll 1$) se tiene

$$|\langle a(t) \rangle|^2 \simeq n e^{-n\theta^2} \simeq n(1 - n\theta^2), \quad (5.270)$$

donde $n \equiv \langle \Psi(0) | a^\dagger a | \Psi(0) \rangle = \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = \alpha \alpha^* / \hbar$ es el número de fotones en el instante inicial, de donde

$$n - |\langle a(t) \rangle|^2 \simeq n^2 \theta^2. \quad (5.271)$$

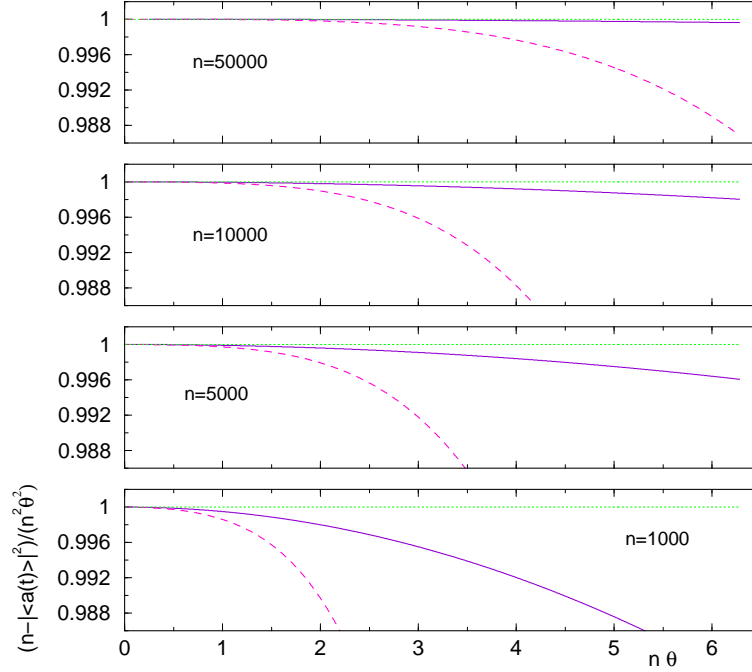


Figura 5.5: Cálculo de $(n - |\langle a(t) \rangle|^2) / (n^2 \theta^2)$ para distintos valores del número de fotones inicial $n = \alpha \alpha^* / \hbar$. Se representan los resultados cuántico (línea continua), variacional (línea a trazos) y semiclassical (línea punteada) hasta un tiempo final θ_f dado por $n\theta_f = 2\pi$.

En la Fig. (5.5) se ha representado el valor cuántico (línea continua) de $(n - |\langle a(t) \rangle|^2) / (n^2 \theta^2)$ frente a $n\theta$ hasta un tiempo final correspondiente al periodo de una oscilación clásica, que según (5.250b) viene dado por $T = 2\pi/\omega = 2\pi/(4\gamma J) = 2\pi/(4\gamma \hbar n)$, esto es, hasta un tiempo final $\theta_f = 4\hbar\gamma T = 2\pi/n$. Para este tiempo, la diferencia (5.271) toma el valor $n - |\langle a(t) \rangle|^2 \simeq 4\pi^2$ independientemente del número de fotones n que presente el estado coherente en el instante inicial, siempre que este número sea suficientemente grande, puesto que la condición $\theta_f \ll 1$ para que la aproximación (5.271) sea válida corresponde a $n \gg 1$.

Variacionalmente, la conservación del valor esperado del operador número de fotones implica que $\langle \Psi(t) | a^\dagger a | \Psi(t) \rangle = \alpha_t \alpha_t^* / \hbar + s_t s_t^* = \text{const} = \alpha_0 \alpha_0^* / \hbar \equiv n$, puesto que estamos considerando el caso en el que el estado inicial es un estado coherente puro e inicialmente el *squeezing* es nulo. En consecuencia, la magnitud $n - \alpha_t \alpha_t^* / \hbar$ da cuenta de la evolución temporal de $s_t s_t^*$. Es decir, inicialmente el número medio de fotones viene completamente determinado por los parámetros del desplazamiento, mientras que al ir evolucionando el estado se va produciendo una transferencia de un modo a otro de manera que ni $\alpha_t \alpha_t^*$ ni $s_t s_t^*$ se mantienen constantes por separado, pero sí la suma $\alpha_t \alpha_t^* + \hbar s_t s_t^*$. En la Fig. (5.5) se ha representado el valor de $(n - \alpha_t \alpha_t^* / \hbar) / (n^2 \theta^2)$ en línea a trazos.

Finalmente, se ha evaluado el valor de $s_t s_t^*$, esto es, el valor de $n - \alpha_t \alpha_t^* / \hbar$ en el límite semiclassical,

en el que las ecuaciones de evolución de los parámetros del desplazamiento (α_t, α_t^*) se desacoplan de las ecuaciones para el *squeezing*. En este caso, la magnitud $\alpha_t \alpha_t^* / \hbar$ sí es constante de movimiento, y determinar la evolución de las variables (s_t, s_t^*) es equivalente a integrar la ecuación de evolución de la matriz de estabilidad del sistema. El resultado se muestra en la Fig. (5.5) con línea punteada.

Los resultados mostrados en la Fig. (5.5) indican, por una parte, que cuanto mayor sea el número de fotones del estado coherente inicial, la aproximación variacional será capaz de reproducir la dinámica cuántica por más tiempo. La aproximación del resultado cuántico a tiempos cortos dada por (5.271) es válida siempre que $n - |\langle a(t) \rangle|^2 \ll n$. El método variacional, al estar basado en un desarrollo perturbativo, asume que el efecto del *squeezing* será menor que el del desplazamiento, de forma que en la conservación de $\alpha_t \alpha_t^* / \hbar + s_t s_t^* = n$ es necesario que la magnitud $s_t s_t^*$ sea pequeña en relación a $\alpha_t \alpha_t^*$. (En la Fig. (5.6) se observa que, efectivamente, $(n - \alpha_t \alpha_t^* / \hbar) / n = s_t s_t^* / n \ll 1$, lo que por otra parte indica que la transferencia de un modo a otro no es completa). Por este motivo la aproximación variacional podrá dar cuenta de la dinámica cuántica únicamente a tiempos muy cortos, puesto que fuera de este rango se dejan de cumplir las condiciones de validez del propio método. Por otra parte, tal como se ha escalado el problema, el límite semiclásico $\hbar \rightarrow 0$ corresponde al límite $n \rightarrow \infty$ de grandes números cuánticos. Los resultados muestran que en este límite la aproximación semiclásica a tiempos cortos proporciona un resultado que se ajusta a la dinámica cuántica incluso mejor que la aproximación variacional. [Ver la gráfica superior para $n = 50000$].

Al disminuir el valor de n , esto es, a medida que aumenta el valor de \hbar , ambas descripciones (variacional y semiclásica) dejan de ser válidas. A pesar de esto, el método variacional es capaz de describir el decaimiento exponencial inicial del valor esperado de la amplitud del campo, $|\langle a(t) \rangle|^2$, si bien no puede llegar a reproducir el colapso que tiene lugar cuánticamente.¹⁸ La aproximación semiclásica es incapaz de describir este decaimiento, puesto que $\alpha_t \alpha_t^*$ se mantiene constante a lo largo de la evolución clásica.

En general, la aproximación variacional descansa en un desarrollo perturbativo de las soluciones, cuyo orden dominante corresponde a la solución semiclásica. Para dar validez a los resultados proporcionados por el método variacional es necesario que éstos no difieran cualitativamente de la dinámica semiclásica. Las deformaciones en el paquete debidas a las anarmonicidades del potencial son difíciles

¹⁸El decaimiento completo de la amplitud cuántica no puede reproducirse variacionalmente a partir de la evolución de un único estado coherente. Sin embargo, es posible obtener el valor esperado del operador $a(t)$ haciendo uso de las funciones de distribución en el espacio de fases:

$$\langle a \rangle(t) = \int \int \frac{d^2 \alpha}{\pi \hbar} Q(\alpha^*, \alpha; t) \alpha, \quad (5.272)$$

donde se ha tenido en cuenta que el símbolo \mathcal{P} asociado al operador a viene dado por α . Puede obtenerse una expresión analítica para la función $Q(\alpha^*, \alpha)$ de un estado coherente-*squeezed* haciendo uso de la representación matricial del álgebra h_6 asociada a los estados coherentes:

$$\begin{aligned} Q(\alpha^*, \alpha; t) &= \langle \alpha | \hat{\rho}(t) | \alpha \rangle = |\langle \alpha | \Psi(t) \rangle|^2 = |\langle 0 | \hat{D}^\dagger(\alpha) \hat{D}(\alpha_t) \hat{S}(s_t) | 0 \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{\pi \sqrt{1 + s_t s_t^*}} e^{\frac{-1}{\hbar} (\alpha - \alpha_t)(\alpha^* - \alpha_t^*) + \frac{1}{2\hbar \sqrt{1 + s_t s_t^*}} [(\alpha - \alpha_t)^2 s_t^* + (\alpha^* - \alpha_t^*)^2 s_t]}, \end{aligned} \quad (5.273)$$

de describir únicamente con un paquete coherente-*squeezed*.

Accidentalmente, el método variacional es capaz de reproducir varias oscilaciones de la amplitud del campo cuántica para valores muy bajos de n , como se muestra en la Fig. (5.6). Esto es debido a que los autoestados del oscilador armónico son autoestados para el medio Kerr, descrito por $\hat{H} = \hat{H}_0 + \kappa \hat{H}_0^2$, donde \hat{H}_0 es el hamiltoniano libre del oscilador armónico. Para un valor muy bajo de $\alpha\alpha^*$, el estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha, \alpha^*)|0\rangle$ es prácticamente el estado fundamental del sistema (esto es, el estado fundamental del oscilador armónico) apenas desplazado:

$$\begin{aligned} |\Psi(0)\rangle &= \hat{D}(\alpha)|0\rangle \simeq \left[\hat{I} + \hbar^{-1/2}(\alpha a^\dagger - \alpha^* a) + \frac{1}{2\hbar}(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)^2 + \dots \right] |0\rangle \\ &= \left(1 - \frac{\alpha\alpha^*}{2\hbar}\right)|0\rangle + \hbar^{-1/2}\alpha|1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2\hbar}\alpha^2|2\rangle + \dots \end{aligned} \quad (5.275)$$

Serán suficiente dos parámetros para describir bien la evolución temporal de este estado (que den cuenta respectivamente de $\alpha e^{iE_1 t/\hbar}$ y de $\alpha^2 e^{iE_2 t/\hbar}$), es decir, la expresión $|\Psi(t)\rangle \simeq \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*)\hat{S}(s_t, s_t^*)|0\rangle$ será una buena aproximación a la evolución del estado coherente $|\alpha\rangle$, siempre que α sea suficientemente pequeño como para poder truncar el desarrollo (5.275) hasta segundo orden.

Esta validez del método variacional para valores tan bajos de n no es general, y se da en el medio Kerr debido a que el estado inicial puede desarrollarse perturbativamente en torno al estado fundamental del oscilador armónico, que es el estado fundamental del sistema Kerr. En la Fig. (5.6) se ha representado el valor de $(n - |\langle a(t) \rangle|^2)/n$ para la evolución cuántica (línea continua), variacional (línea a trazos) y semiclásica (línea punteada). Se observa que la aproximación variacional es capaz de reproducir varias oscilaciones cuánticas para valores muy bajos de n . En este caso, se está lejos del límite semiclásico, y el valor de s_t, s_t^* únicamente puede describir un crecimiento cuadrático inicial, sin posibilidad de producir oscilación alguna.

con lo que el valor esperado (5.272) viene dado por la integral

$$\begin{aligned} \langle a \rangle(t) &= \frac{1}{\pi\sqrt{1+s_t s_t^*}} \iint \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \alpha e^{\frac{-1}{\hbar}(\alpha-\alpha_t)(\alpha^*-\alpha_t^*) + \frac{1}{2\hbar\sqrt{1+s_t s_t^*}}[(\alpha-\alpha_t)^2 s_t^* + (\alpha^*-\alpha_t^*)^2 s_t]} \\ &= \frac{1}{\pi\sqrt{1+q_{s_t}^2 + p_{s_t}^2}} \iint \frac{dq_\alpha dp_\alpha}{2\pi\hbar} \left\{ (q_\alpha + ip_\alpha) e^{\frac{-1}{\hbar}[(q_\alpha - q_{\alpha_t})^2 + (p_\alpha - p_{\alpha_t})^2]} \right. \\ &\quad \times \left. e^{\frac{1}{2\hbar\sqrt{1+q_{s_t}^2 + p_{s_t}^2}}[(q_\alpha - q_{\alpha_t})^2 q_{s_t} - (p_\alpha - p_{\alpha_t})^2 q_{s_t} + 2(q_\alpha - q_{\alpha_t})(p_\alpha - p_{\alpha_t})p_{s_t}]} \right\}, \end{aligned} \quad (5.274)$$

con el cambio de variables (5.263). En este caso, es de esperar que al evaluar esta integral se produzcan interferencias destructivas entre todos los estados coherentes que intervienen, y pueda reproducirse el decaimiento esperado en $\langle a \rangle(t)$.

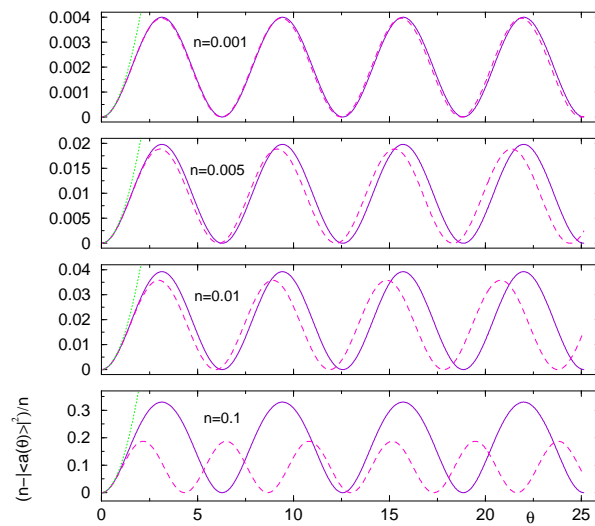


Figura 5.6: Cálculo de $(n - |\langle a(\theta) \rangle|^2)/n$ para distintos valores del número de fotones inicial $n = \alpha\alpha^*/\hbar$. Se representan los resultados cuántico (línea continua), variacional (línea a trazos) y semiclassical (línea punteada).

Conclusiones y perspectivas

En este trabajo se ha puesto de manifiesto la idoneidad de la representación de Bargmann como un marco adecuado en el que llevar a cabo aproximaciones semiclásicas de objetos cuánticos. La principal ventaja de esta representación radica en las propiedades geométricas que posee el espacio de parámetros complejos que representa el conjunto de estados coherentes. La estructura simpléctica asociada a esta variedad compleja permite interpretarla como un espacio de fases para el sistema cuántico. Por este motivo los estados coherentes desempeñan un papel tan importante en el estudio de la correspondencia cuántico-clásica y en la derivación de aproximaciones semiclásicas.

Otra ventaja importante de esta representación es consecuencia de su estructura compleja analítica, que proporciona la base matemática adecuada para llevar a cabo aproximaciones de *saddle point*. Esta estructura compleja intrínseca de la representación de Bargmann hace posible incluir trayectorias complejas en el formalismo semiclásico sin tener que recurrir a una complexificación *ad hoc* de la dinámica clásica.

A continuación se resumen los principales resultados obtenidos en este trabajo:

- Aplicando un formalismo WKB en la representación de Bargmann se ha obtenido una aproximación a la función de onda que es *uniforme* y no singular en la región clásicamente permitida del espacio de fases. La expresión obtenida es diferente para cada esquema de ordenación cuántica elegido y no presenta los problemas de divergencia en las cústicas que sufre la aproximación WKB en la representación de coordenadas.
- Las condiciones de cuantización para la energía se obtienen imponiendo una condición de analiticidad a la función compleja uniforme $\Psi(\alpha^*)$.
- Un formalismo análogo dependiente del tiempo ha conducido a una aproximación semiclásica para la función $\Psi(\alpha^*, t)$. La elección particular de un estado de Bargmann como estado inicial conduce a una aproximación semiclásica para el propagador cuántico que requiere para su determinación la integración de una trayectoria compleja que evoluciona acorde a unas ecuaciones de Hamilton generalizadas y sometida a unas condiciones de contorno a dos tiempos (inicial y final). La

amplitud de transición se escribe en términos de la acción de dicha trayectoria compleja, así como de su estabilidad lineal. Se ha presentado una expresión unificada para los distintos esquemas de ordenación cuántica posibles. El resultado coincide con las expresiones semiclásicas para el propagador obtenidas por otros autores a partir de un formalismo de integrales de camino en estados coherentes. A diferencia de éstas, la presente aproximación ha sido derivada de forma directa, sin hacer uso de la aproximación de fase estacionaria.

- A partir de esta aproximación para el propagador, y utilizando una resolución generalizada de la identidad en la representación de Bargmann, se ha obtenido una expresión integral del operador de evolución en forma de distribución \mathcal{P} generalizada. Esta resolución del propagador, derivada a partir de una aproximación de *saddle point*, constituye una representación de valores iniciales (IVR), en la que las trayectorias están determinadas por condiciones dadas únicamente en el instante inicial. Para una elección particular de la variedad de integración, las trayectorias que intervienen en la IVR son reales, y los elementos de matriz del operador de evolución en la representación de coordenadas proporcionan la expresión de Herman-Kluk del propagador.
- Se ha desarrollado un método basado en el uso de operadores unitarios para obtener una expresión globalmente uniforme para la función de onda independiente del tiempo en la representación de coordenadas. Esta aproximación requiere la integración de una única trayectoria clásica a lo largo de un periodo de la órbita clásica para el caso de sistemas ligados y depende de un parámetro λ relacionado directamente con la transformación unitaria empleada. La aproximación de la integral por el método de *saddle point* conduce a la expresión WKB de la función de onda, con la consiguiente aparición de singularidades. Esta pérdida de uniformidad se consigue asimismo para los valores límite $\lambda \rightarrow 0$ y $\lambda \rightarrow \infty$, que conducen respectivamente a las funciones WKB en la representación de momentos y coordenadas. Se han obtenido expresiones para estos casos extremos mediante un procedimiento análogo al anterior haciendo uso de transformaciones no unitarias.
- Un formalismo similar dependiente del tiempo ha permitido extraer de la dinámica las autofunciones mediante transformación Fourier. En este caso se ha hecho uso de una transformación unitaria independiente del tiempo, y mediante la integración de una única trayectoria clásica ha sido posible obtener tanto las autofunciones $\varphi_n(x)$ como las condiciones de cuantización para la energía.
- Se ha obtenido una aproximación para la traza del operador de Green que involucra una suma sobre todas las órbitas periódicas del sistema. Para potenciales simples con un único punto de equilibrio, las órbitas que intervienen son reales, y la expresión correspondiente para la traza del operador de Green viene dada por la fórmula de la traza de Gutzwiller para el caso monodimensional. La

correspondiente densidad de estados en este caso conduce a las condiciones de cuantización para las acciones clásicas dadas por la teoría WKB. No obstante, es en el caso de potenciales que presentan varios mínimos donde se ponen de manifiesto las ventajas de la naturaleza compleja de la representación de Bargmann. En este caso, la suma sobre órbitas periódicas se extiende no sólo a las trayectorias reales existentes en las regiones clásicamente accesibles del sistema, sino también a órbitas complejas en las zonas clásicamente prohibidas, permitiendo la descripción de fenómenos puramente cuánticos como el *tunneling*. Un procedimiento perturbativo adicional ha permitido obtener el desdoblamiento de niveles predicho por la teoría WKB para un potencial de doble pozo simétrico.

- Se ha desarrollado un método para obtener el estado fundamental de un sistema cuántico mediante un procedimiento variacional que, partiendo de un *ansatz* de estado coherente-*squeezed* para la función de onda, determina los valores óptimos de los parámetros que minimizan la energía del nivel fundamental. Se ha presentado una manera alternativa de obtener las ecuaciones variacionales para estos parámetros, imponiendo cierta estructura para un operador hamiltoniano transformado por los operadores que intervienen en el estado de prueba. Este método puede ser considerado como un método de análisis de estabilidad cuántico, que va más allá del análisis clásico al incorporar en el formalismo las fluctuaciones cuánticas. Asimismo se han analizado posibles optimizaciones de la aproximación de estado coherente generalizado, incluyendo operadores de orden superior en el estado de prueba.
- La aplicación de un método de aproximación variacional gaussiana dependiente del tiempo ha posibilitado estudiar la dinámica de un sistema cuántico en un espacio de fases clásico definido como el espacio de los parámetros que definen la gaussiana. Asumiendo que la evolución de un estado coherente puede aproximarse por $|\Psi(t)\rangle \simeq \hat{D}(\alpha_t, \alpha_t^*) \hat{S}(s_t, s_t^*) |0\rangle$, se han obtenido las ecuaciones diferenciales que rigen la evolución de los parámetros que identifican tanto el centroide de la gaussiana como su deformación. En el límite semiclásico, ambas evoluciones se desacoplan y las variables promedio (α_t, α_t^*) evolucionan acorde a las ecuaciones clásicas de Hamilton, mientras que las variables de fluctuación (s_t, s_t^*) siguen una evolución determinada por la estabilidad lineal de las trayectorias clásicas. Llevando a cabo una generalización a una dinámica compleja, hemos obtenido una aproximación para la evolución de un estado de Bargmann en el límite semiclásico, $\hat{U}(t)|\beta\rangle$. Para una elección particular de los parámetros iniciales, se obtiene una aproximación en términos de trayectorias reales que corresponde a la *Thawed Gaussian Approximation* propuesta por Heller. Hemos puesto de manifiesto que el error de esta aproximación es $O(\hbar^{1/2})$. A partir de este resultado se ha obtenido una expresión integral en forma de IVR para el operador de evolución mediante el uso de una adecuada resolución de la identidad. Esta forma IVR, diferente a la forma

\mathcal{P} generalizada obtenida mediante el formalismo WKB, constituye una representación de valores iniciales asintótica que es correcta semiclásicamente: si se utiliza para evaluar el elemento de matriz $(\alpha|\hat{U}(t)|\beta)$ aproximando las integrales correspondientes por el método de *saddle point*, las correcciones de orden $\hbar^{1/2}$ de cada una de las propagaciones individuales se cancelan, y se obtiene un resultado válido hasta $O(\hbar)$. Este resultado coincide con la expresión del propagador obtenida mediante el formalismo WKB en la representación de Bargmann.

Perspectivas: Aplicación a sistemas multidimensionales

En esta memoria hemos presentado diversas aproximaciones semiclásicas en la representación de Bargmann para sistemas en una dimensión. Estos sistemas resultan apropiados para comprobar el funcionamiento de las técnicas descritas y en ellos resulta más sencillo llevar a cabo los cálculos analíticos que conducen a dichas aproximaciones. No obstante, sin duda son los sistemas de mayor número de grados de libertad los que presentan un mayor interés físico, no sólo porque constituyen sistemas más realistas, sino porque ofrecen nuevas posibilidades de comportamiento dinámico respecto a los sistemas de un grado de libertad.

Algunos de los resultados obtenidos en el caso monodimensional son directamente generalizables a sistemas con N grados de libertad. Este es el caso del propagador semiclásico en la representación de Bargmann, o de la resolución del operador de evolución en forma de IVR. En estos casos la generalización es directa, si bien debe tenerse especial cuidado al llevar a cabo los sucesivos cambios de variables, haciendo uso de las reglas de productos de determinantes jacobianos.

Otros resultados difícilmente pueden ser generalizados, como sucede con el procedimiento WKB para construir la función de onda estacionaria en la representación de Bargmann, como se obtuvo en la sección (2.1). En este caso, la elección de los caminos de integración adecuados para evaluar la integral de acción compleja N -dimensional resulta inviable, pues estos caminos deben rodear las singularidades presentadas por la función $\gamma_E(\alpha^*)$, donde γ y α^* son vectores con componentes complejas γ_k y α_k^* , respectivamente ($k = 1, \dots, N$).

La extensión al caso N -dimensional de la densidad de estados debe apelar necesariamente al tipo de dinámica clásica subyacente. Cuando esta dinámica es hiperbólica, la fórmula de la traza de Gutzwiller proporciona una descripción del espectro cuántico en términos de las órbitas periódicas aisladas e inestables del sistema clásico correspondiente. En el caso de sistemas integrables, el *ansatz* de Berry-Tabor relaciona la densidad de estados con los toros resonantes. Es posible derivar las fórmulas de Gutzwiller y de Berry-Tabor dentro del formalismo de estados de Bargmann. Remitimos a [Mar04] para una descripción detallada de esta generalización.

Apéndice A

Función normal asociada a un operador simétrico

Cualquier función $f(a, a^\dagger)$ de los operadores bosónicos a y a^\dagger , que satisfacen la relación de conmutación $[a, a^\dagger] = 1$, se define por su desarrollo en series de potencias de estos operadores, que en general tendrá la forma

$$f(a, a^\dagger) = \sum_l \cdots \sum_n f(l, m, \dots, n) a^{\dagger l} a^m a^{\dagger r} \cdots a^n, \quad (\text{A.1})$$

donde l, m, \dots son enteros positivos o cero. Siempre podemos utilizar repetidas veces la relación de conmutación $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ para reordenar los operadores a y los a^\dagger entre ellos. Si lo hacemos de tal forma que todos los operadores a en cada término de la suma quedan a la derecha de los a^\dagger , se dice entonces que la función f está ordenada de forma *normal*, y podemos escribirla como

$$f(a, a^\dagger) \equiv f^{(n)}(a, a^\dagger) = \sum_{i,j} f_{ij}^{(n)} a^{\dagger i} a^j, \quad (\text{A.2})$$

donde los coeficientes del desarrollo, $f_{ij}^{(n)}$ son independientes de a y a^\dagger .

Otra alternativa consiste en conmutar todos los a a la izquierda de los a^\dagger , de forma que *la misma* función f pueda escribirse como

$$f(a, a^\dagger) \equiv f^{(A)}(a, a^\dagger) = \sum_{i,j} f_{ij}^{(A)} a^i a^{\dagger j}. \quad (\text{A.3})$$

Se dice entonces que la función se encuentra en forma *antinormal*. En general, $f_{ij}^{(n)} \neq f_{ij}^{(A)}$, mientras que

$$f(a, a^\dagger) = f^{(n)}(a, a^\dagger) = f^{(A)}(a, a^\dagger). \quad (\text{A.4})$$

Puesto que las formas normal y antinormal de una función que puede desarrollarse en serie de potencias son únicas, podemos establecer una correspondencia biunívoca entre $f^{(n)}(a, a^\dagger)$ [o $f^{(A)}(a, a^\dagger)$] y las

funciones ordinarias $\tilde{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*)$ [o $\tilde{f}^{(a)}(\alpha, \alpha^*)$] de la variable compleja α . Esta correspondencia será de gran utilidad a la hora de obtener la forma normal (o antinormal) de una función $f(a, a^\dagger)$ sin tener que llevar a cabo “a mano” el procedimiento de la reordenación de operadores, que en ocasiones puede resultar bastante tedioso. Con este fin definimos el *operador ordenación normal*, $\hat{\mathcal{N}}$ que actúa reemplazando α^* por $\hbar^{1/2}a^\dagger$ y α por $\hbar^{1/2}a$, con todos los a^\dagger a la izquierda de los a :

$$\hat{\mathcal{N}}\{\alpha^i \alpha^{*j}\} = \hbar^{\frac{i+j}{2}} a^\dagger{}^j a^i. \quad (\text{A.5})$$

Este operador (lineal) cumple las siguientes propiedades:

$$\hat{\mathcal{N}}\{c \tilde{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*)\} = c f^{(n)}(a, a^\dagger) \quad (\text{A.6})$$

$$\hat{\mathcal{N}}\{\tilde{f}_1^{(n)}(\alpha, \alpha^*) + \tilde{f}_2^{(n)}(\alpha, \alpha^*)\} = f_1^{(n)}(a, a^\dagger) + f_2^{(n)}(a, a^\dagger) \quad (\text{A.7})$$

$$\hat{\mathcal{N}}\{c\} = c \hat{I} \quad (\text{A.8})$$

$$\hat{\mathcal{N}}\hat{\mathcal{N}}^{-1} = 1, \quad (\text{A.9})$$

donde $c \in \mathbb{C}$ es cualquier constante compleja, \hat{I} es el operador identidad y $\hat{\mathcal{N}}^{-1}$ es el operador que transforma la función de operadores $f(a, a^\dagger)$ en una función ordinaria $\tilde{f}^{(N)}(\alpha, \alpha^*)$ de la variable compleja α , reemplazando a por $\hbar^{-1/2}\alpha$ y a^\dagger por $\hbar^{-1/2}\alpha^*$ de forma que

$$\hat{\mathcal{N}}^{-1}\{a^\dagger{}^i a^j\} = \hbar^{-\frac{(i+j)}{2}} \alpha^{*i} \alpha^j. \quad (\text{A.10})$$

Este operador cumple asimismo las siguientes propiedades:

$$\hat{\mathcal{N}}^{-1}\{c f^{(n)}(a, a^\dagger)\} = c \tilde{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*) \quad (\text{A.11})$$

$$\hat{\mathcal{N}}^{-1}\{f_1^{(n)}(a, a^\dagger) + f_2^{(n)}(a, a^\dagger)\} = \tilde{f}_1^{(n)}(\alpha, \alpha^*) + \tilde{f}_2^{(n)}(\alpha, \alpha^*) \quad (\text{A.12})$$

$$\hat{\mathcal{N}}^{-1}\{c \hat{I}\} = c. \quad (\text{A.13})$$

Por lo tanto, para obtener la función $\tilde{f}^{(N)}(\alpha, \alpha^*)$ debe escribirse primero $f(a, a^\dagger)$ en forma normal y luego reemplazar a por $\hbar^{-1/2}\alpha$ y a^\dagger por $\hbar^{-1/2}\alpha^*$.

De forma similar puede definirse un operador $\hat{\mathcal{A}}^{-1}$ que se aplica a operadores ordenados antinormalmente mediante

$$\hat{\mathcal{A}}^{-1}\{a^i a^\dagger{}^j\} = \hbar^{-\frac{(i+j)}{2}} \alpha^i \alpha^{*j} \quad (\text{A.14})$$

$$\hat{\mathcal{A}}^{-1}\{c f^{(A)}(a, a^\dagger)\} = c \tilde{f}^{(A)}(\alpha, \alpha^*) \quad (\text{A.15})$$

$$\hat{\mathcal{A}}^{-1}\{f_1^{(A)}(a, a^\dagger) + f_2^{(A)}(a, a^\dagger)\} = \tilde{f}_1^{(A)}(\alpha, \alpha^*) + \tilde{f}_2^{(A)}(\alpha, \alpha^*) \quad (\text{A.16})$$

$$\hat{\mathcal{A}}^{-1}\{c \hat{I}\} = c. \quad (\text{A.17})$$

Y definiendo $\hat{\mathcal{A}}$ como el inverso de $\hat{\mathcal{A}}^{-1}$:

$$\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{A}}^{-1} = \hat{\mathcal{A}}^{-1}\hat{\mathcal{A}} = 1, \quad (\text{A.18})$$

puede utilizarse para obtener un su actuación sobre una función de α y α^* es tal que

$$\hat{\mathcal{A}} \left\{ \alpha^i \alpha^{*j} \right\} = \hbar^{\frac{i+j}{2}} a^i a^{\dagger j} \quad (\text{A.19})$$

$$\hat{\mathcal{A}}^{-1} \left\{ c f^{(A)}(a, a^\dagger) \right\} = c \tilde{f}^{(A)}(\alpha, \alpha^*) \quad (\text{A.20})$$

$$\hat{\mathcal{A}}^{-1} \left\{ f_1^{(A)}(a, a^\dagger) + f_2^{(A)}(a, a^\dagger) \right\} = \tilde{f}_1^{(A)}(\alpha, \alpha^*) + \tilde{f}_2^{(A)}(\alpha, \alpha^*) \quad (\text{A.21})$$

$$\hat{\mathcal{A}}^{-1} \left\{ c \hat{I} \right\} = c. \quad (\text{A.22})$$

De nuevo, $\hat{\mathcal{A}}$ reemplaza α por $\hbar^{1/2}a$, α^* por $\hbar^{1/2}a^\dagger$ y coloca todos los a^\dagger a la derecha de los a .

Una ordenación intermedia entre la normal y la antinormal es la llamada *ordenación simetrizada*. De forma análoga a los casos anteriores, puede definirse un *operador de ordenación simetrizada*, $\hat{\mathcal{S}}$ que, aplicado a una función clásica de α y α^* permite obtener un operador de a y a^\dagger

$$f^{(s)}(a, a^\dagger) = \hat{\mathcal{S}} \left\{ \tilde{f}^{(s)}(\alpha, \alpha^*) \right\} \quad (\text{A.23})$$

y su actuación es tal que reemplaza α por $\hbar^{1/2}a$, α^* por $\hbar^{1/2}a^\dagger$ y toma el promedio de todas las posibles ordenaciones de estos operadores.

Para poder establecer una relación entre las distintas funciones clásicas asociadas a un operador cuántico es necesario enunciar los siguientes teoremas:

Teorema 1: La función normal asociada, $\tilde{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*)$, está dada por el elemento de matriz diagonal de $f(a, a^\dagger)$ en la representación de estados coherentes:

$$\tilde{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*) = \langle \alpha | f(a, a^\dagger) | \alpha \rangle = \text{Tr} \left[| \alpha \rangle \langle \alpha | f(a, a^\dagger) \right], \quad (\text{A.24})$$

donde $a | \alpha \rangle = \hbar^{-1/2} \alpha | \alpha \rangle$. A la función normal asociada $\tilde{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*)$ se le denomina *representación Q* del operador $f(a, a^\dagger)$, que denotamos por $\mathcal{F}_Q(\alpha, \alpha^*)$.

Teorema 2: Una función $f(a, a^\dagger)$ puede ponerse en forma normal por medio de

$$f^{(n)}(a, a^\dagger) = \hat{\mathcal{N}} \left\{ \langle \alpha | f(a, a^\dagger) | \alpha \rangle \right\} = \hat{\mathcal{N}} \left\{ \tilde{f} \left(\hbar^{-1/2} \alpha + \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial \alpha^*}, \hbar^{-1/2} \alpha^* \right) \cdot 1 \right\}, \quad (\text{A.25})$$

donde $\tilde{f}(\hbar^{-1/2} \alpha + \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial \alpha^*}, \hbar^{-1/2} \alpha^*)$ se obtiene reemplazando a por $\hbar^{-1/2} \alpha + \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial \alpha^*}$ y a^\dagger por $\hbar^{-1/2} \alpha^*$ en el desarrollo en serie de potencias original de la función $f(a, a^\dagger)$. Nótese que si f está ya en forma normal se tiene simplemente

$$\tilde{f}^{(N)} \left(\hbar^{-1/2} \alpha + \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial \alpha^*}, \hbar^{-1/2} \alpha^* \right) \cdot 1 = \tilde{f}^{(N)}(\hbar^{-1/2} \alpha, \hbar^{-1/2} \alpha^*) \equiv \mathcal{F}_Q(\hbar^{-1/2} \alpha, \hbar^{-1/2} \alpha^*), \quad (\text{A.26})$$

puesto que todos los términos $[\hbar^{-1/2}\alpha + \hbar^{1/2}\partial_{\alpha^*}]$ aparecerán a la derecha y $(\partial_{\alpha^*}) \cdot 1 = 0$.

Teorema 3: Cualquier función $f(a, a^\dagger)$ que se comporte adecuadamente puede ser representada por la integral

$$f(a, a^\dagger) = f^{(a)}(a, a^\dagger) = \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle\langle\alpha| \tilde{f}^{(a)}(\alpha, \alpha^*) = \hat{\mathcal{A}} \left\{ \tilde{f}^{(a)}(\alpha, \alpha^*) \right\}, \quad (\text{A.27})$$

donde $\tilde{f}^{(a)}(\alpha, \alpha^*)$ es la función antinormal asociada. Este teorema establece que el operador de ordenación antinormal es equivalente al operador integral $\int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle\langle\alpha|$. A la función $\tilde{f}^{(a)}(\alpha, \alpha^*)$ se le denomina *representación \mathcal{P}* del operador $f(a, a^\dagger)$, denotada por $\mathcal{F}_P(\alpha, \alpha^*)$.

Teorema 4: La forma antinormal de $f(a, a^\dagger)$ puede obtenerse mediante

$$\begin{aligned} f^{(a)}(a, a^\dagger) &= \hat{\mathcal{A}} \left\{ \tilde{f} \left(\hbar^{-1/2}\alpha, \hbar^{-1/2}\alpha^* - \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial\alpha} \right) \cdot 1 \right\} \\ &= \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle\langle\alpha| \tilde{f} \left(\hbar^{-1/2}\alpha, \hbar^{-1/2}\alpha^* - \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial\alpha} \right) \cdot 1, \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

donde $\tilde{f}(\hbar^{-1/2}\alpha, \hbar^{-1/2}\alpha^* - \hbar^{1/2}\partial_\alpha)$ se obtiene a partir del desarrollo en serie de potencias original de $f(a, a^\dagger)$, reemplazando cada a por $\hbar^{-1/2}\alpha$ y cada a^\dagger por $\hbar^{-1/2}\alpha^* - \hbar^{1/2}\partial_\alpha$. Nótese que si f ya está en forma antinormal, entonces

$$\begin{aligned} \tilde{f} \left(\hbar^{-1/2}\alpha, \hbar^{-1/2}\alpha^* - \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial\alpha} \right) \cdot 1 &= \sum_{i,j} f_{ij}^{(a)} \hbar^{-\frac{(i+j)}{2}} \alpha^i \left(\alpha^* - \hbar \frac{\partial}{\partial\alpha} \right)^j \cdot 1 \\ &= \sum_{i,j} f_{ij}^{(a)} \hbar^{-\frac{(i+j)}{2}} \alpha^i \alpha^{*j} = \tilde{f}^{(a)}(\alpha, \alpha^*) = \mathcal{F}_P(\alpha, \alpha^*), \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

puesto que $(\partial_\alpha) \cdot 1 = 0$. Este teorema es el análogo al Teorema 2 para la ordenación antinormal.

Teorema 5: La forma simetrizada de $f(a, a^\dagger)$ puede obtenerse mediante

$$f^{(s)}(a, a^\dagger) = \hat{\mathcal{S}} \left\{ \tilde{f} \left(\left(\hbar^{-1/2}\alpha + \frac{\hbar^{1/2}}{2} \frac{\partial}{\partial\alpha^*} \right), \left(\hbar^{-1/2}\alpha^* - \frac{\hbar^{1/2}}{2} \frac{\partial}{\partial\alpha} \right) \right) \cdot 1 \right\}, \quad (\text{A.30})$$

donde $\tilde{f}(\hbar^{-1/2}\alpha + \hbar^{1/2}/2\partial_{\alpha^*}, \hbar^{-1/2}\alpha^* - \hbar^{1/2}/2\partial_\alpha)$ se obtiene reemplazando a por $\hbar^{-1/2}\alpha + \hbar^{1/2}/2\partial_{\alpha^*}$ y a^\dagger por $\hbar^{-1/2}\alpha^* - \hbar^{1/2}/2\partial_\alpha$ en el desarrollo en serie de potencias original de la función $f(a, a^\dagger)$.

A continuación expondremos la demostración de la ec. (2.19) para la función normal asociada a un operador \hat{H} expresado como una combinación simetrizada de operadores \hat{q} y \hat{p} . Consideraremos en primer lugar un caso sencillo con una función de la forma

$$f(a, a^\dagger) = \hbar^{\frac{n+m}{2}} (c_1 a^\dagger + c_2 a)^n (d_1 a^\dagger + d_2 a)^m \equiv \hat{p}^n \hat{q}^m, \quad (\text{A.31})$$

donde hemos hecho uso de las transformaciones ¹

$$\hat{q} = \hbar^{1/2}(d_1 a^\dagger + d_2 a) \quad (\text{A.32})$$

$$\hat{p} = \hbar^{1/2}(c_1 a^\dagger + c_2 a). \quad (\text{A.33})$$

En este caso, haciendo uso de (la inversa del) Teorema 2, se tiene

$$\begin{aligned} \tilde{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*) &= \langle \alpha | f(a, a^\dagger) | \alpha \rangle \\ &= \hbar^{\frac{n+m}{2}} \left[c_1 \hbar^{-1/2} \alpha^* + c_2 \left(\hbar^{-1/2} \alpha + \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right]^n \left[d_1 \hbar^{-1/2} \alpha^* + d_2 \left(\hbar^{-1/2} \alpha + \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right]^m \\ &= \left[c_1 \alpha^* + c_2 \left(\alpha + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right]^{(n)} \left[c_1 \alpha^* + c_2 \left(\alpha + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right] \\ &\times \left[d_1 \alpha^* + d_2 \left(\alpha + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right]^{(m)} \left[d_1 \alpha^* + d_2 \left(\alpha + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Estamos interesados en recopilar los términos de orden \hbar^0 y \hbar^1 de este desarrollo. No es difícil ver que el término de orden cero está dado por

$$\tilde{f}_0^{(n)}(\alpha, \alpha^*) = (c_1 \alpha^* + c_2 \alpha)^n (d_1 \alpha^* + d_2 \alpha)^m \equiv p^n q^m, \quad (\text{A.35})$$

donde q y p son las variables clásicas definidas por

$$q = d_1 \alpha^* + d_2 \alpha \quad (\text{A.36})$$

$$p = c_1 \alpha^* + c_2 \alpha. \quad (\text{A.37})$$

Consideremos a continuación los términos de orden \hbar . Por una parte, la contribución de los términos que provienen de \hat{p}^n será:

$$c_1 c_2 \sum_{j=1}^{n-1} (n-j) p^{n-2} q^m = c_1 c_2 \frac{n(n-1)}{2} p^{n-2} q^m. \quad (\text{A.38})$$

De forma análoga, los que proceden de \hat{q}^m contribuirán con

$$d_1 d_2 \sum_{j=1}^{m-1} (m-j) p^n q^{m-2} = d_1 d_2 \frac{m(m-1)}{2} p^n q^{m-2}, \quad (\text{A.39})$$

mientras que los términos cruzados darán

$$c_2 d_1 n m p^{n-1} q^{m-1}. \quad (\text{A.40})$$

¹En general esta transformación tiene la forma

$$\begin{aligned} \hat{q} &= \tilde{d}_1 a^\dagger + \tilde{d}_2 a \\ \hat{p} &= \tilde{c}_1 a^\dagger + \tilde{c}_2 a, \end{aligned}$$

pero es preferible mostrar la dependencia explícita con \hbar de los coeficientes \tilde{c}_i, \tilde{d}_i ($i = 1, 2$) para simplificar la notación posterior.

Uniendo estas contribuciones tendremos

$$\begin{aligned}
\tilde{f}_1^{(n)}(\alpha, \alpha^*) &= c_1 c_2 \frac{n(n-1)}{2} p^{n-2} q^m + d_1 d_2 \frac{m(m-1)}{2} p^n q^{m-2} \\
&+ c_2 d_1 n m p^{n-1} q^{m-1} \\
&= \frac{1}{2} \frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial p^2} (p^n q^m) + \frac{1}{2} \frac{\partial q}{\partial \alpha} \frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial q^2} (p^n q^m) \\
&+ \frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial q \partial p} (p^n q^m), \tag{A.41}
\end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta las ecuaciones de transformación (A.36) y (A.37), de forma que podemos escribir

$$\begin{aligned}
\tilde{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*) &= p^n q^m \\
&+ \hbar \left[\frac{1}{2} \frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial p^2} (p^n q^m) + \frac{1}{2} \frac{\partial q}{\partial \alpha} \frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial q^2} (p^n q^m) + \frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial q \partial p} (p^n q^m) \right] \\
&+ O(\hbar^2). \tag{A.42}
\end{aligned}$$

Es sencillo comprobar que en el caso de una función dada por $f(a, a^\dagger) = \hat{q}^m \hat{p}^n$ se obtiene un resultado similar, salvo los términos cruzados, que vendrán dados por

$$d_2 c_1 n m q^{m-1} p^{n-1} = \frac{\partial q}{\partial \alpha} \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial q \partial p} (q^m p^n). \tag{A.43}$$

De esta forma, un operador de la forma

$$\hat{U} = \frac{1}{2} (\hat{p}^n \hat{q}^m + \hat{q}^m \hat{p}^n) \tag{A.44}$$

tendrá como función normal asociada

$$\begin{aligned}
U^{(n)}(\alpha, \alpha^*) &= \mathcal{U}^{(0)} + \frac{\hbar}{2} \left[\frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \mathcal{U}^{(0)} + \frac{\partial q}{\partial \alpha} \frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \mathcal{U}^{(0)} \right. \\
&+ \left. \left(\frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial q}{\partial \alpha^*} + \frac{\partial q}{\partial \alpha} \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \right) \frac{\partial^2}{\partial q \partial p} \mathcal{U}^{(0)} \right] + O(\hbar^2), \tag{A.45}
\end{aligned}$$

donde

$$\mathcal{U}^{(0)} \equiv \frac{1}{2} (p^n q^m + q^m p^n) = p^n q^m \tag{A.46}$$

es el término de orden cero de $\langle \alpha | \hat{U} | \alpha \rangle$.

Consideremos a continuación un operador del tipo

$$\hat{V} = \hat{p}^k \hat{q}^m \hat{p}^l. \tag{A.47}$$

En este caso, la función normal asociada tiene la forma

$$\begin{aligned}
V^{(n)}(\alpha, \alpha^*) &= \left[c_1 \alpha^* + c_2 \left(\alpha + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right]^{(k)} \left[c_1 \alpha^* + c_2 \left(\alpha + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right] \\
&\times \left[d_1 \alpha^* + d_2 \left(\alpha + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right]^{(m)} \left[d_1 \alpha^* + d_2 \left(\alpha + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right] \\
&\times \left[c_1 \alpha^* + c_2 \left(\alpha + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right]^{(l)} \left[c_1 \alpha^* + c_2 \left(\alpha + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \right]. \tag{A.48}
\end{aligned}$$

Contabilizando los términos que dan contribución al orden \hbar , después de algunas manipulaciones algebraicas tenemos:

$$\begin{aligned}
V_1^{(n)}(\alpha, \alpha^*) &= c_2 c_1 \frac{k(k-1)}{2} p^{k-2} q^m p^l + c_2 d_1 k m p^{k-1} q^{m-1} p^l \\
&+ c_2 c_1 k l p^{k-1} q^m p^{l-1} + d_2 d_1 \frac{m(m-1)}{2} p^k q^{m-2} p^l \\
&+ d_2 c_1 l m p^k q^{m-1} p^{l-1} + c_2 c_1 \frac{l(l-1)}{2} p^k q^m p^{l-2} \\
&= \frac{1}{2} c_1 c_2 (k+l)(k+l-1) p^{k+l-2} q^m + \frac{1}{2} d_1 d_2 m(m-1) p^{k+l} q^{m-2} \\
&+ m(c_2 d_1 k + d_2 c_1 l) p^{k+l-1} q^{m-1}.
\end{aligned} \tag{A.49}$$

Si $k+l=n$, puede verse que los dos primeros términos de (A.49) corresponden a los dos primeros de la ec. (A.41). El último término será:

$$m(c_2 d_1 (n-l) + d_2 c_1 l) p^{n-1} q^{m-1} \tag{A.50}$$

Es en este punto donde consideramos la condición de que el operador \hat{V} sea una combinación *simetrizada* de operadores \hat{q} y \hat{p} , esto es, consideramos *todas* las combinaciones posibles de k y l tales que $k+l=n$. Si esto es así, se tiene la suma

$$\begin{aligned}
&m \sum_{l=1}^{n-1} (c_2 d_1 (n-l) + d_2 c_1 l) p^{n-1} q^{m-1} \\
&= m \left(c_2 d_1 \frac{n(n-1)}{2} + d_2 c_1 \frac{n(n-1)}{2} \right) p^{n-1} q^{m-1} \\
&= \frac{1}{2} m n (n-1) (c_2 d_1 + d_2 c_1) p^{n-1} q^{m-1}.
\end{aligned} \tag{A.51}$$

La combinación simetrizada de operadores supone sumar sobre todas las posibles ordenaciones de dichos operadores y dividir por el número de combinaciones utilizadas. En este caso, habría que dividir por un factor $(n-1)$, lo cual conduce al resultado (A.45).²

Así pues, un operador hamiltoniano \hat{H} que esté escrito en términos de los operadores \hat{q} y \hat{p} combinados de forma simetrizada tendrá como función normal asociada en la representación de estados

²En el caso de que hubiéramos considerado un operador de la forma $\hat{q}^i \hat{p}^n \hat{q}^j$, habríamos obtenido el resultado

$$\frac{1}{2} c_1 c_2 n(n-1) p^{n-2} q^{i+j} + \frac{1}{2} d_1 d_2 (i+j)(i+j-1) p^n q^{i+j-2} + n(c_2 d_1 i + d_2 c_1 j) p^{n-1} q^{i+j-1},$$

de forma que, sumando sobre todas las posibles combinaciones de i y j tales que $i+j=m$ y dividiendo por $(m-1)$, habríamos obtenido el mismo resultado:

$$\frac{1}{2} c_1 c_2 n(n-1) p^{n-2} q^m + \frac{1}{2} d_1 d_2 m(m-1) p^n q^{m-2} + \frac{1}{2} n m (c_2 d_1 + d_2 c_1) p^{n-1} q^{m-1}.$$

coherentes:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle &= \mathcal{H}^{(0)}(q, p) + \frac{\hbar}{2} \left[\frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \mathcal{H}^{(0)}(q, p) + \frac{\partial q}{\partial \alpha} \frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \mathcal{H}^{(0)}(q, p) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial q}{\partial \alpha^*} + \frac{\partial q}{\partial \alpha} \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \right) \frac{\partial^2}{\partial q \partial p} \mathcal{H}^{(0)}(q, p) \right] + O(\hbar^2), \end{aligned} \quad (\text{A.52})$$

donde la función clásica $\mathcal{H}^{(0)}(q, p)$ se obtiene al sustituir en el operador $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p})$ \hat{q} por q y \hat{p} por p .

Teniendo en cuenta las relaciones

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} = \frac{\partial q}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial q} + \frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial p} \quad (\text{A.53})$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha^*} = \frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \frac{\partial}{\partial q} + \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \frac{\partial}{\partial p}, \quad (\text{A.54})$$

podemos escribir

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \alpha \partial \alpha^*} &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} + \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \right] \\ &= \frac{\partial q}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial q} \left[\frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} + \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \right] + \frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial p} \left[\frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} + \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \right] \\ &= \frac{\partial q}{\partial \alpha} \frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q^2} + \frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p^2} + \left(\frac{\partial q}{\partial \alpha} \frac{\partial p}{\partial \alpha^*} + \frac{\partial p}{\partial \alpha} \frac{\partial q}{\partial \alpha^*} \right) \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q \partial p}. \end{aligned}$$

De esta forma, la ec. (A.52) puede escribirse como

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle &= \mathcal{H}^{(0)}(\alpha, \alpha^*) + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}^{(0)}(\alpha, \alpha^*)}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + O(\hbar^2) \\ &= \left(1 + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + \dots \right) \mathcal{H}^{(0)}(\alpha, \alpha^*), \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

donde $\mathcal{H}^{(0)}(\alpha, \alpha^*)$ es una función ordinaria de α y α^* independiente de \hbar que tiene la forma de la función hamiltoniana clásica, obtenida al reemplazar en el operador $\hat{H}(a, a^\dagger)$ a por $\alpha/\sqrt{\hbar}$ y a^\dagger por $\alpha^*/\sqrt{\hbar}$.

Queda por tanto demostrada la ec. (2.19). Generalizando la notación, esta ecuación establece la relación existente entre los símbolos \mathcal{Q} y \mathcal{W} asociados a un operador genérico \hat{H} :

$$\mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha, \alpha^*) = \left(1 + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + \dots \right) \mathcal{H}_{\mathcal{W}}(\alpha, \alpha^*). \quad (\text{A.56})$$

Es interesante notar que el término en derivadas cruzadas que aparece en la ec. (A.52) se anula para una transformación

$$\alpha = k_1 q + k_2 p \quad (\text{A.57})$$

$$\alpha^* = k_1^* q + k_2^* p \quad (\text{A.58})$$

que cumpla

$$k_1 k_2^* + k_1^* k_2 = 0, \quad (\text{A.59})$$

en cuyo caso la ec. (A.52) se escribe

$$\mathcal{H}_Q(q, p) = \left[1 - \frac{\hbar}{8k_1^*k_2} \left(\frac{k_1}{k_2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} + \frac{k_2^*}{k_1^*} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \right) + \dots \right] \mathcal{H}_W(q, p). \quad (\text{A.60})$$

Esto sucede para la transformación usual en el oscilador armónico (con masa unidad, $m = 1$) $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2\hat{q}^2 = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$, dada por

$$\alpha = \sqrt{\frac{\omega}{2}}q + \frac{i}{\sqrt{2\omega}}p \quad (\text{A.61})$$

$$\alpha^* = \sqrt{\frac{\omega}{2}}q - \frac{i}{\sqrt{2\omega}}p, \quad (\text{A.62})$$

para la cual la condición (A.59) se lee $\frac{1}{\sqrt{2}}(-i+i) = 0$. El símbolo de Weyl para este operador viene dado por

$$\mathcal{H}_W(q, p) \equiv \mathcal{H}^{(0)}(q, p) = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q^2, \quad (\text{A.63})$$

y la ec. (A.52) proporciona como función normal asociada de \hat{H} (o símbolo Q) el resultado

$$\mathcal{H}_Q(q, p) = \left[1 + \frac{\hbar\omega}{4} \left(\frac{\partial^2}{\partial p^2} + \frac{1}{\omega^2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \right) \right] \mathcal{H}_W(q, p) = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q^2 + \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (\text{A.64})$$

(Nótese que en este caso la serie (A.52) puede truncarse a este orden, puesto que las derivadas superiores de \mathcal{H}_W son nulas). En términos de las variables (α, α^*) se tiene ³

$$\mathcal{H}_W(\alpha, \alpha^*) = \omega\alpha\alpha^*, \quad (\text{A.65})$$

mientras que

$$\mathcal{H}_Q(\alpha, \alpha^*) = \left(1 + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\alpha^*} \right) \mathcal{H}_W(\alpha, \alpha^*) = \omega\alpha\alpha^* + \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (\text{A.66})$$

como puede comprobarse directamente a partir de la definición $\mathcal{H}_Q(\alpha, \alpha^*) = \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle$.

³Nótese que el operador \hat{H} tal como está escrito corresponde a una combinación simetrizada de operadores a y a^\dagger , puesto que $\hat{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} (a^\dagger a + a a^\dagger)$.

Apéndice B

La aproximación de fase estacionaria

Muchas aproximaciones semiclásicas están basadas en la evaluación de integrales N -dimensionales del tipo

$$I(\lambda) = \int d^N \mathbf{x} f(\mathbf{x}) e^{i\lambda\phi(\mathbf{x})},$$

para valores asintóticamente grandes del parámetro real λ , donde las funciones $f(\mathbf{x})$ y $\phi(\mathbf{x})$ son reales y monovaluadas. Por lo general, el parámetro λ se corresponde con $1/\hbar$, con lo que consideraremos el desarrollo asintótico de la integral

$$I(\hbar) = \int d^N \mathbf{x} f(\mathbf{x}) e^{\frac{i}{\hbar}\phi(\mathbf{x})} \quad (\text{B.1})$$

en el límite $\hbar \rightarrow 0$. Por simplicidad consideraremos en primer lugar el caso unidimensional, y generalizaremos el resultado al caso N -dimensional.

Supongamos que $x = x_s$ sea un punto en el que la derivada $\phi'(x)$ *no* se anule. Existirá entonces un pequeño entorno \mathcal{U}_{x_s} de x_s en el que $\phi(x)$ varíe al ir cambiando x . Para valores pequeños de \hbar , la variación en ϕ/\hbar es rápida, de forma que las partes real e imaginaria de $\exp(i\phi/\hbar)$ oscilan fuertemente en torno a cero. Si consideramos la integral extendida a este entorno,

$$I_{x_s}(\hbar) = \int_{\mathcal{U}_{x_s}} dx f(x) e^{\frac{i}{\hbar}\phi(x)},$$

podemos aproximar la función $f(x)$ por $f(x_s)$, de forma que, para valores pequeños de \hbar , las rápidas oscilaciones de $\exp(i\phi/\hbar)$ producen cancelaciones que, a su vez, tienden a disminuir el valor de la integral $I_{x_s}(\hbar)$.

Supongamos ahora que la derivada $\phi'(x)$ se anule en $x = x_s$. En este caso, independientemente de lo pequeña que sea \hbar , existirá un entorno \mathcal{U}_{x_s} de $x = x_s$ en el cual ϕ/\hbar no varía rápidamente. (El entorno \mathcal{U}_{x_s} se reduce al punto $x = x_s$ en el límite $\hbar \rightarrow 0$.) De esta forma, cuando x va variando a lo largo del entorno \mathcal{U}_{x_s} , $\exp(i\phi/\hbar)$ ya no oscila rápidamente, y por tanto no tienen lugar las cancelaciones anteriores. Podemos decir que el valor de la integral $I(\hbar)$, para valores pequeños de \hbar , dependerá principalmente del

comportamiento de las funciones $f(x)$ y $\phi(x)$ cerca de los puntos en los que $\phi'(x)$ es cero, denominados *puntos estacionarios* de $\phi(x)$.

Supondremos que las funciones $f(x)$ y $\phi(x)$ son suficientemente suaves como para poder llevar a cabo las operaciones que haremos a continuación, esto es, que $f(x) \in C(-\infty, +\infty)$, $\phi(x) \in C^2(-\infty, +\infty)$, y que $\phi'(x)$ se anula únicamente en el punto $x = x_s$, con $\phi''(x_s) \neq 0$. Por simplicidad, supondremos asimismo que $f(x_s) \neq 0$. Desarrollando en serie de Taylor la función $\phi(x)$ en torno al punto estacionario $x = x_s$, la integral (B.1) se escribe como

$$I(\hbar) = \int dx f(x) e^{\frac{i}{\hbar} [\phi(x_s) + \frac{1}{2} \phi''(x_s)(x-x_s)^2 + \dots]},$$

donde hemos tenido en cuenta la condición de fase estacionaria $\phi'(x_s) = 0$. Considerando que la función $f(x)$ varía lentamente en torno a x_s en comparación con la función exponencial, podemos quedarnos con el orden dominante en el desarrollo de la amplitud, y truncar el desarrollo de la fase en el orden cuadrático, de forma que la integral se aproxima por

$$I(\hbar) \approx f(x_s) e^{\frac{i}{\hbar} \phi(x_s)} \int dx e^{\frac{i}{2\hbar} \phi''(x_s)(x-x_s)^2}.$$

Esta integral gaussiana es una integral de Fresnel que puede evaluarse explícitamente. La aproximación a la integral es, por tanto:

$$I(\hbar) \approx f(x_s) e^{\frac{i}{\hbar} \phi(x_s)} \left(\frac{2\pi\hbar}{|\phi''(x_s)|} \right)^{1/2} e^{\frac{i\mu\pi}{4}}, \quad (\text{B.2})$$

donde el parámetro μ da cuenta del signo positivo/negativo de la derivada segunda $\phi''(x_s)$. La expresión (B.2) se conoce como *fórmula de fase estacionaria* y al procedimiento analítico que nos ha conducido a su determinación se le denomina *método de fase estacionaria* [Ble75]. Si generalizamos este método a más dimensiones, los puntos estacionarios \mathbf{x}_s son aquéllos que cumplen la condición

$$\left. \frac{\partial}{\partial x_i} \phi(\mathbf{x}) \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_s} = 0, \quad \forall i = 1, \dots, N.$$

Estos puntos estacionarios son simples, de forma que el determinante de la matriz (simétrica) $\mathbf{D}(\mathbf{x}_s)$ de derivadas segundas de la fase evaluadas en la condición de fase estacionaria, cuyos elementos de matriz vienen dados por

$$\mathbf{D}_{ij}(\mathbf{x}_s) = \left. \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \phi(\mathbf{x}) \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_s},$$

con $i, j = 1, \dots, N$, cumple

$$\det \mathbf{D}(\mathbf{x}_s) \neq 0.$$

Esta matriz interviene en el desarrollo de la fase $\phi(\mathbf{x})$ hasta segundo orden, y eligiendo un sistema de coordenadas adecuado que diagonalice \mathbf{D} , la integral N -dimensional (B.1) puede aproximarse por integrales

de Fresnel monodimensionales. La fórmula de fase estacionaria en este caso es la siguiente:

$$I(\hbar) \approx \sum_{\mathbf{x}_s} (2\pi\hbar)^{N/2} |\det \mathbf{D}(\mathbf{x}_s)|^{-1/2} f(\mathbf{x}_s) e^{\frac{i}{\hbar}\phi(\mathbf{x}_s) + \frac{i\pi}{4} \text{sig} \mathbf{D}(\mathbf{x}_s)},$$

donde la suma se extiende sobre todos los puntos estacionarios \mathbf{x}_s de $\phi(\mathbf{x})$, y la prescripción *sig* denota la *signatura* de la matriz \mathbf{D} , esto es, el número de autovalores positivos menos el número de autovalores negativos. En ocasiones esta fórmula se escribe en función sólo del número de autovalores negativos $n(\mathbf{x}_s)$ de la matriz $\mathbf{D}(\mathbf{x}_s)$:

$$I(\hbar) \approx \sum_{\mathbf{x}_s} (2\pi\hbar i)^{N/2} |\det \mathbf{D}(\mathbf{x}_s)|^{-1/2} f(\mathbf{x}_s) e^{\frac{i}{\hbar}\phi(\mathbf{x}_s) - \frac{i\pi}{2} n(\mathbf{x}_s)}. \quad (\text{B.3})$$

La fórmula de fase estacionaria se utiliza en las aproximaciones semiclásicas siempre que la matriz \mathbf{D} en (B.3) no tenga autovalores nulos. El caso de autovalores cero requeriría ir más allá de la aproximación gaussiana, lo que significa que el desarrollo de Taylor de la fase se truncaría incluyendo términos de tercer orden, lo cual da lugar a aproximaciones de las integrales en términos de funciones de Airy. (Ver [Ble75, Cvi] para más detalles).

A lo largo de este trabajo haremos uso en varias ocasiones de aproximaciones de integrales de variable compleja por el método de fase estacionaria. Los resultados (B.2) y (B.3) no pueden extrapolarse directamente al caso de funciones complejas, y debe tenerse especial cuidado con las condiciones de convergencia de las integrales. Así pues, supongamos que extendemos la integral

$$I(\lambda) = \int dx f(x) e^{\lambda\phi(x)}$$

fuera del eje real y queremos obtener una aproximación de

$$I(\lambda) = \int_{\Gamma} dz f(z) e^{\lambda\phi(z)} \quad (\text{B.4})$$

para valores de $\lambda \gg 1$. Por supuesto, el valor de la integral dependerá del comportamiento del integrando a lo largo del camino de integración Γ . Sin embargo, restringiremos el problema al caso de funciones $f(z)$ y $\phi(z)$ que sean *analíticas*. Sea z_0 un extremo de $\phi(z)$, es decir, un punto tal que $\phi'(z_0) = 0$. Este punto crítico no corresponde con un máximo o un mínimo de la función $\phi(z)$, sino con un punto de silla (o un *saddle*) de dicha función. ¹

¹Efectivamente, si $\phi(z) = \phi(x + iy) = u(x, y) + iv(x, y)$ es analítica, se cumplen las condiciones de Cauchy-Riemann

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad ; \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x},$$

de donde

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0.$$

Si z_0 es un extremo de $\phi(z)$, entonces $\partial_x \phi(z_0) = \partial_y \phi(z_0) = 0$, y la condición $\partial_{xx} \phi(z_0) = -\partial_{yy} \phi(z_0)$ hace que ϕ no pueda tener un máximo o un mínimo en z_0 (un máximo requeriría que se cumplieran al mismo tiempo las condiciones $\partial_{xx} u < 0$ y $\partial_{yy} u < 0$).

Desarrollando $\phi(z)$ en torno al saddle z_0 se tiene

$$\begin{aligned}\phi(z) &= \phi(z_0) + \frac{1}{2}\phi''(z_0)(z-z_0)^2 + \frac{1}{3!}\phi'''(z_0)(z-z_0)^3 + \dots \\ &= \phi(z_0) + \frac{1}{2}|\phi''(z_0)| e^{i\delta_0} (z-z_0)^2 + \dots,\end{aligned}\quad (\text{B.5})$$

donde hemos introducido δ_0 como la fase de $\phi''(z_0)$. Supondremos que la derivada tercera y superiores tienen un efecto despreciable en el comportamiento asintótico de $e^{\lambda\phi(z)}$, lo cual es una buena suposición siempre que la derivada segunda no se anule en el punto crítico: $\phi''(z_0) \neq 0$. De esta manera, *elegimos el camino de integración que pasa por z_0* , escribiendo

$$z = z_0 + e^{i\theta}\rho$$

de forma que $dz = e^{i\theta}d\rho$. A lo largo de este camino, la función $\phi(z)$ debe tomar la forma

$$\phi(z) = \phi(z_0) - \frac{1}{2}|\phi''(z_0)|\rho^2 + \dots,\quad (\text{B.6})$$

que debe coincidir con la ec. (B.5). Comparando ambas expresiones se tiene que cumplir

$$e^{i\delta_0} e^{2i\theta}\rho^2 = -\rho^2 = e^{i\pi}\rho^2,$$

de donde se obtiene el ángulo θ del camino de integración:

$$e^{i\theta} = e^{-i\delta_0/2+i\pi/2}.$$

El camino es por tanto:

$$z - z_0 = e^{-i\delta_0/2+i\pi/2}\rho.\quad (\text{B.7})$$

Una vez elegido el camino de integración, la integral (B.4) puede aproximarse restringiendo el intervalo de integración al segmento $-\rho_1 < \rho < \rho_1$:

$$I(\lambda) \simeq f(z_0) e^{\lambda\phi(z_0)} \int_{-\rho_1}^{\rho_1} e^{i\theta} d\rho e^{-\frac{\lambda}{2}|\phi''(z_0)|\rho^2}.\quad (\text{B.8})$$

La naturaleza altamente localizada de la gaussiana garantiza que la integral sea independiente de los límites $\pm\rho_1$. Para ello, este parámetro debe ser mayor que la anchura de la gaussiana, es decir:

$$\rho_1 \gg \frac{2}{\sqrt{\lambda|\phi''(z_0)|}}.$$

El cambio de variables $t = \rho\sqrt{\lambda|\phi''(z_0)|}$ permite escribir la integral (B.8) como

$$\begin{aligned}I(\lambda) &\simeq f(z_0) e^{\lambda\phi(z_0)} e^{i\theta} \int_{-\rho_1\sqrt{\lambda|\phi''(z_0)|}}^{\rho_1\sqrt{\lambda|\phi''(z_0)|}} \frac{dt}{\sqrt{\lambda|\phi''(z_0)|}} e^{-t^2/2} \\ &= f(z_0) e^{\lambda\phi(z_0)} e^{i\theta} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda|\phi''(z_0)|}} \\ &= f(z_0) e^{\lambda\phi(z_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda|\phi''(z_0)|}} e^{-i\delta_0/2+i\pi/2},\end{aligned}\quad (\text{B.9})$$

donde hemos evaluado la integral gaussiana sustituyendo los límites de integración por $\pm\infty$.

Como caso particular, nos interesará obtener la aproximación de integrales de la forma

$$I(\hbar) = \int \frac{d\alpha}{\sqrt{2\pi\hbar i}} f(\alpha) e^{i\psi(\alpha)/\hbar}.$$

En este caso, $\lambda\phi(z) \equiv i\psi(\alpha)/\hbar$, y denotando el saddle por α_0 podemos desarrollar

$$\begin{aligned} e^{i\psi(\alpha)/\hbar} &= e^{\frac{i}{\hbar}\psi(\alpha_0) + \frac{i}{2\hbar}\psi''(\alpha_0)(\alpha-\alpha_0)^2 + \dots} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\psi(\alpha_0) + \frac{1}{2\hbar}|\psi''(\alpha_0)| e^{i\tilde{\delta}_0} e^{i\pi/2}(\alpha-\alpha_0)^2 + \dots} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\psi(\alpha_0) + \frac{1}{2\hbar}|\psi''(\alpha_0)| e^{i\tilde{\delta}_0} e^{i\pi/2} e^{2i\theta}\rho^2 + \dots}, \end{aligned}$$

donde $\alpha = \alpha_0 + e^{i\theta}\rho$ y $\tilde{\delta}_0$ denota la fase de $\psi''(\alpha_0)$. Eligiendo el camino de integración de forma que

$$e^{i\psi(\alpha)/\hbar} = e^{\frac{i}{\hbar}\psi(\alpha_0) - \frac{1}{2\hbar}|\psi''(\alpha_0)|\rho^2 + \dots},$$

se tiene

$$e^{i\theta} = e^{i\pi/4} e^{-i\tilde{\delta}_0/2}. \quad (\text{B.10})$$

Podemos aproximar entonces

$$\int d\alpha f(\alpha) e^{i\psi(\alpha)/\hbar} \simeq f(\alpha_0) e^{i\psi(\alpha_0)/\hbar} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{|\psi''(\alpha_0)|}} e^{i\pi/4} e^{-i\tilde{\delta}_0/2},$$

de donde

$$\int \frac{d\alpha}{\sqrt{2\pi\hbar i}} f(\alpha) e^{i\psi(\alpha)/\hbar} \simeq f(\alpha_0) e^{i\psi(\alpha_0)/\hbar} \frac{1}{\sqrt{|\psi''(\alpha_0)|}} e^{-i\tilde{\delta}_0/2}. \quad (\text{B.11})$$

Es importante tener en cuenta que la fase θ que determina el camino de integración está definida en el intervalo $0 \leq \theta \leq 2\pi$ para dar cuenta de todas las direcciones posibles del contorno elegido. Las ecs. (B.7) o (B.10) indican que la fase $\tilde{\delta}_0$ de la derivada segunda está definida en el intervalo $0 \leq \tilde{\delta}_0 \leq 4\pi$.

La generalización de esta fórmula al caso N -dimensional

$$I(\lambda) = \int_{\Gamma_1} \dots \int_{\Gamma_N} d^N \mathbf{z} f(\mathbf{z}) e^{\lambda\phi(\mathbf{z})} \quad (\text{B.12})$$

requiere elegir los caminos de integración que pasen por los N saddles z_{i0} (con $i = 1, \dots, N$), definidos según $\partial_{z_i}\phi(\mathbf{z}_0) = 0$. Aplicando una transformación de variables adecuada que diagonalice la matriz de derivadas segundas, esta integral multidimensional podrá factorizarse en N integrales monodimensionales, cada una de las cuales podrá aproximarse según la fórmula (B.9). La integral (B.12) podrá aproximarse pues por

$$I(\lambda) \simeq \sum_{\mathbf{z}_0} \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^{N/2} f(\mathbf{z}_0) e^{\lambda\phi(\mathbf{z}_0)} \frac{1}{|\text{Det } \mathbf{D}|^{1/2}} e^{iN\pi/2 - i\sum_j \delta_{0j}/2}, \quad (\text{B.13})$$

donde \mathbf{D} es la matriz de derivadas segundas $D_{ij} = \partial_{z_i, z_j}^2 \phi(\mathbf{z}_0)$, y δ_{0_j} denota la fase de cada derivada segunda. En el caso de que el integrando sea una función que varíe con el tiempo, la fase total acumulada de la derivada segunda, $\delta = \sum_j \delta_{0_j}$, deberá ser determinada módulo 4π .

En particular, la integral bidimensional siguiente puede aproximarse como

$$I(\hbar) = \int_{\Gamma_\alpha} \int_{\Gamma_\beta} \frac{d\alpha d\beta}{2\pi\hbar i} f(\alpha, \beta) e^{i\psi(\alpha, \beta)/\hbar} \simeq f(\alpha_0, \beta_0) e^{i\psi(\alpha_0, \beta_0)/\hbar} \frac{1}{|\text{Det } \mathbf{D}|^{1/2}} e^{-i(\delta_1 + \delta_2)/2}, \quad (\text{B.14})$$

donde $\delta_{1,2}$ son las fases de los autovalores de la matriz 2×2 de derivadas segundas de $\psi(\alpha_0, \beta_0)$. En [Del02] se analiza el método de *saddle-point* para integrales de Laplace multidimensionales en el caso de que los contornos de integración tengan fronteras.

Apéndice C

La aproximación WKB a la función de onda

El método WKB constituye un procedimiento de cálculo aproximado de niveles y funciones de onda, propuesto de forma independiente y casi simultánea por G. Wentzel y L. Brillouin en 1926, y mejorado posteriormente por H. A. Kramers. Al estar basado en parte en técnicas matemáticas desarrolladas por Jeffreys, también es conocido como aproximación WKBJ [Mor53].

Consideremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula de masa m sometida a un potencial $V(\mathbf{q})$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{q}) + V(\mathbf{q})\Psi(\mathbf{q}) = E\Psi(\mathbf{q}). \quad (\text{C.1})$$

Una solución de esta ecuación podrá escribirse, de forma general, como

$$\Psi(\mathbf{q}) = A e^{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{q})},$$

en cuyo caso la ec. (C.1) es completamente equivalente a la ecuación

$$-\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S(\mathbf{q}) + \frac{1}{2m}(\nabla S(\mathbf{q}))^2 + V(\mathbf{q}) - E = 0. \quad (\text{C.2})$$

La solución $S(\mathbf{q})$ de la ec. (C.2) depende del valor del parámetro \hbar , que en general será pequeño comparado con las acciones típicas del problema. Admitiendo un desarrollo formal de $S(\mathbf{q})$ en potencias de \hbar ,

$$S(\mathbf{q}) = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n S_n(\mathbf{q}) = S_0(\mathbf{q}) + \hbar S_1(\mathbf{q}) + \hbar^2 S_2(\mathbf{q}) + \dots, \quad (\text{C.3})$$

se obtendrá una ecuación para cada orden de \hbar al sustituir el desarrollo (C.3) en la ec. (C.2). El método WKB permite obtener los dos primeros términos de este desarrollo (es decir, un término más allá de la aproximación clásica) en el caso *monodimensional*.

Así pues, se trata de resolver las ecuaciones básicas

$$\frac{d^2\Psi(q)}{dq^2} - \frac{p_1^2(q)}{\hbar^2}\Psi(q) = 0, \quad \text{si } V(q) > E \quad (\text{C.4a})$$

$$\frac{d^2\Psi(q)}{dq^2} + \frac{p_2^2(q)}{\hbar^2}\Psi(q) = 0, \quad \text{si } V(q) < E \quad (\text{C.4b})$$

correspondientes a la ecuación de Schrödinger (C.1), donde

$$p_1(q) \equiv \sqrt{2m[V(q) - E]} \quad (\text{C.5a})$$

$$p_2(q) \equiv \sqrt{2m[E - V(q)]} \quad (\text{C.5b})$$

están definidas de forma que sean siempre variables reales.

Para el caso en que $V(q) > E$, la sustitución de

$$\Psi(q) = A e^{\frac{i}{\hbar}S(q)} \quad (\text{C.6})$$

en la ec. (C.4a) proporciona el equivalente monodimensional de la ec. (C.2):

$$i\hbar \frac{d^2S(q)}{dq^2} - \left(\frac{dS(q)}{dq} \right)^2 - p_1^2(q) = 0. \quad (\text{C.7})$$

Sustituyendo el desarrollo de $S(q)$

$$S(q) = S_0(q) + \hbar S_1(q) + \hbar^2 S_2(q) + \dots \quad (\text{C.8})$$

en (C.7) obtenemos las siguientes ecuaciones para los órdenes más bajos en \hbar :

$$- \left(\frac{dS_0(q)}{dq} \right)^2 - p_1^2(q) = 0 \quad (\text{C.9a})$$

$$i\hbar \frac{d^2S_1(q)}{dq^2} - 2 \frac{dS_0(q)}{dq} \frac{dS_1(q)}{dq} = 0, \quad (\text{C.9b})$$

que al ser integradas proporcionan las soluciones:

$$S_0(q) = \pm i \int^q dq' p_1(q')$$

$$S_1(q) = \frac{i\hbar}{2} \ln p_1(q),$$

donde se han omitido las constantes de integración, que pueden ser absorbidas en el coeficiente A . (El punto inicial de la integral en $S_0(q)$ es arbitrario). De esta forma, a este orden de aproximación la función de onda quedará expresada como una combinación lineal de las funciones exponenciales:

$$\Psi_{\pm}(q) = \frac{A_{\pm}}{\sqrt{p_1(q)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^q dq' p_1(q')}. \quad (\text{C.10})$$

De forma similar, en el caso en que $V(q) < E$, la ecuación diferencial a resolver es

$$i\hbar \frac{d^2 S(q)}{dq^2} - \left(\frac{dS(q)}{dq} \right)^2 + p_2^2(q) = 0.$$

Al sustituir en esta ecuación el desarrollo (C.8), la identificación de los términos de orden \hbar conduce a la misma ecuación para $S_1(q)$ obtenida en (C.9b), mientras que para el orden \hbar^0 se obtiene

$$- \left(\frac{dS_0(q)}{dq} \right)^2 + p_2^2(q) = 0,$$

que se integra como

$$S_0(q) = \pm \int^q dq' p_2(q').$$

La aproximación semiclásica para la función de onda vendrá dada en este caso por una combinación de las funciones oscilatorias

$$\Psi_{\pm}(q) = \frac{B_{\pm}}{\sqrt{p_2(q)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^q dq' p_2(q')}, \quad (\text{C.11})$$

llamadas *soluciones básicas WKB*.

La exactitud de estas soluciones puede ser evaluada comparando la magnitud de los términos sucesivos S_0 y $\hbar S_1$ en la serie (C.8) para S . Puede demostrarse que la expresión (C.8) no corresponde en general a una serie convergente, sino que se trata de un desarrollo asintótico válido para $\hbar \rightarrow 0$. En la ec. (C.11), la función $p(q) = \sqrt{2m[E - V(q)]}$ desempeña el papel de un momento "local" de la partícula, por lo que la exponencial es esencialmente $\exp[\pm ip_{\text{medio}}(q)q]$. Por otra parte, puesto que $|\Psi_{\pm}(q)|^2 \sim 1/|p(q)|$ debe representar la densidad de probabilidad de hallar a la partícula en el punto q , parece lógico que en el límite semiclásico sea inversamente proporcional a la velocidad de la partícula en ese punto. La solución (C.11) será válida para aquellos valores de q para los que se cumpla $|S_0(q)| \gg \hbar |S_1(q)| \gg \hbar^2 |S_2(q)|$. En términos de la longitud de onda local reducida, $\bar{\lambda}(q) = \hbar/p(q)$, la desigualdad $\hbar |S_1(q)/S_0(q)| \ll 1$ se satisfará si y sólo si

$$\frac{1}{2} \left| \frac{d\bar{\lambda}(q)}{dq} \right| \ll 1,$$

lo que indica que la aproximación dada por (C.11) será aceptable únicamente en aquellas regiones en las que $\bar{\lambda}(q)$ cambie muy poco al variar la posición q . A la inversa, en las cercanías de los *puntos de retroceso*, caracterizados por $p(q) = 0$ y que separan las zonas permitidas y prohibidas del movimiento clásico a energía E , la longitud de onda asociada $\bar{\lambda}(q)$ varía de forma muy rápida. La rotunda divergencia mostrada por las funciones Ψ_{\pm} en dichos puntos limitan la validez de las soluciones básicas WKB a regiones alejadas de los puntos de retroceso.

Así pues, la aproximación WKB para la función de onda en la región comprendida entre dos puntos

de retroceso adyacentes, pero lejos¹ de éstos, vendrá dada por

$$\Psi(q) = \frac{A_+}{\sqrt{p_1(q)}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int^q dq' p_1(q')} + \frac{A_-}{\sqrt{p_1(q)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int^q dq' p_1(q')}, \quad \text{si } V(q) > E \quad (\text{C.12a})$$

$$\Psi(q) = \frac{B_+}{\sqrt{p_2(q)}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int^q dq' p_2(q')} + \frac{B_-}{\sqrt{p_2(q)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int^q dq' p_2(q')}, \quad \text{si } V(q) < E, \quad (\text{C.12b})$$

donde $p_1(q)$ y $p_2(q)$ vienen dadas por (C.5) y A_{\pm} , B_{\pm} son constantes arbitrarias.

Para que el método WKB resulte útil, es preciso encontrar una forma de relacionar entre sí los distintos pares de constantes arbitrarias que aparecen en cada una de las zonas delimitadas por el potencial $V(q)$. Para ello, lo que se hace es suponer que la función $V(q) - E$ tiene un cero simple en el punto de retroceso $q = q_0$, de forma que en un entorno de este punto el potencial puede aproximarse de forma lineal como

$$V(q) \simeq E - \alpha(q - q_0), \quad (\text{C.13})$$

siendo α una constante (finita) positiva. Resolviendo la ecuación de Schrödinger de forma exacta en cada una de las regiones en las que se supone que la aproximación (C.13) es válida, imponiendo la continuidad de la función de onda y de sus primeras derivadas en el punto de retroceso y conectando asintóticamente las funciones en las regiones en que q tiende a $\pm\infty$, se obtienen las siguientes *fórmulas de conexión*:²

$$\Psi(q) = \frac{A}{\sqrt{p_1(q)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_q^{q_0} dq' p_1(q')} \longrightarrow \Psi(q) = \frac{2A}{\sqrt{p_2(q)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{q_0}^q dq' p_2(q') - \frac{\pi}{4}\right) \quad (\text{C.14a})$$

$$\Psi(q) = \frac{A \sin \eta}{\sqrt{p_1(q)}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_q^{q_0} dq' p_1(q')} \longleftarrow \Psi(q) = \frac{A}{\sqrt{p_2(q)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{q_0}^q dq' p_2(q') - \frac{\pi}{4} + \eta\right), \quad (\text{C.14b})$$

para $E > V(q)$ si $q < q_0$. Para el caso en que $E < V(q)$, con $q > q_0$ se tiene

$$\Psi(q) = \frac{2A}{\sqrt{p_2(q)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_q^{q_0} dq' p_2(q') - \frac{\pi}{4}\right) \longleftarrow \Psi(q) = \frac{A}{\sqrt{p_1(q)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{q_0}^q dq' p_1(q')} \quad (\text{C.15a})$$

$$\Psi(q) = \frac{A}{\sqrt{p_2(q)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_q^{q_0} dq' p_2(q') - \frac{\pi}{4} + \eta\right) \longrightarrow \Psi(q) = \frac{A \sin \eta}{\sqrt{p_1(q)}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_{q_0}^q dq' p_1(q')}. \quad (\text{C.15b})$$

¹Por “lejos” se entiende que estas soluciones son asintóticamente válidas en el sentido de que pueden ser utilizadas a una distancia de varias longitudes de onda del punto de retroceso más cercano, siempre que la longitud de onda sea una función que varíe lentamente, como suele ser el caso.

²La obtención de estas fórmulas es un problema de cierta complejidad matemática que puede llevarse a cabo a través de diversos métodos. En algunos casos se pretende pasar de una zona a otra por el punto de retroceso a través del plano complejo. La solución propuesta por Langer [Lan37] tiene en cuenta el hecho de que, por una parte, las funciones (C.14) son multivaluadas en la región en torno al punto de retroceso, que se presenta como una singularidad, mientras que por otra parte, las soluciones de la ecuación de Schrödinger son funciones univaluadas. Puesto que la aproximación de una función univaluada por una multivaluada puede mantenerse únicamente en una región restringida, la formulación del método WKB deberá necesariamente involucrar el fenómeno de Stokes. (Langer propone una solución basada en funciones de Bessel en la que este fenómeno puede ser obviado. No obstante, si se desea recuperar la expresión tradicional para las fórmulas de conexión [ecs. (C.14)] haciendo uso de desarrollos asintóticos de las funciones de Bessel, sí es necesario apelar a este fenómeno).

Una continuación de este método debida a Silverstone [Sil85] proporciona una versión de las fórmulas de conexión basada en la propiedad de sumabilidad en sentido Borel que muestran los desarrollos asintóticos de las funciones de Airy. El punto clave consiste en tener en cuenta que la región clásicamente prohibida cae en una línea de Stokes. La solución exponencialmente creciente *real* tiene un desarrollo WKB explícitamente *complejo*, mientras que el desarrollo WKB exponencialmente creciente explícitamente real representa una solución compleja. (Ver [Sil85] y un resumen en [Gal78] para más detalles).

La validez de estas fórmulas requiere que $\sin \eta \neq 0$. Es importante hacer constar que estas fórmulas son correctas sólo en el sentido indicado por las flechas.³

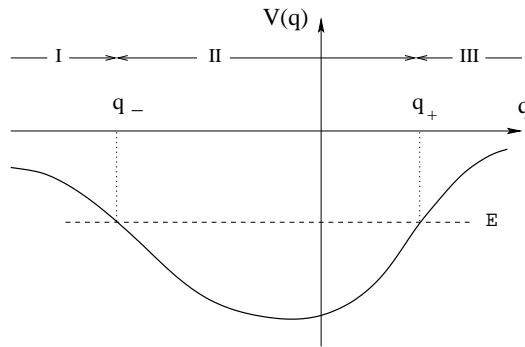


Figura C.1: Potencial $V(q)$ cuyos puntos de retroceso son q_- y q_+ a la energía E .

El método WKB permite obtener una fórmula aproximada para las energías correspondientes a los estados ligados por un pozo unidimensional. Supongamos un potencial $V(q)$ como el de la figura (C.1), que presenta sólo dos puntos de retroceso, q_- y q_+ , a la energía E . En la zona I y lejos del punto de retroceso q_- , la aproximación a la función de onda del estado ligado de energía E viene dada por

$$\Psi_I(q) = \frac{A}{\sqrt{p_1(q)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{q_-}^q dq' p_1(q')},$$

pues la normalizabilidad de los estados ligados prohíbe la presencia de la exponencial creciente. Haciendo uso de las fórmulas de conexión se tiene

$$\begin{aligned} \Psi_{II} &= \frac{2A}{\sqrt{p_2(q)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{q_-}^q dq' p_2(q') - \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{2A}{\sqrt{p_2(q)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_q^{q_+} dq' p_2(q') - \frac{\pi}{4} + \eta \right), \end{aligned} \quad (C.16)$$

con

$$\eta = \frac{\pi}{2} - \frac{1}{\hbar} \int_{q_-}^{q_+} dq p_2(q).$$

Si se cumpliera que $\sin \eta \neq 0$, las fórmulas de conexión (C.14) implicarían la existencia de una amplitud exponencialmente creciente en la región III . La condición de estado ligado exige por lo tanto que se cumpla que $\sin \eta = 0$, esto es:

$$\sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{q_-}^{q_+} dq p_2(q) - \frac{\pi}{2} \right) = 0,$$

³ Así por ejemplo, el carácter unidireccional de la fórmula de conexión (C.14a) se debe a que un pequeño error en la fase del coseno podría originar un ángulo $\eta \sim O(\hbar)$ que automáticamente daría lugar a exponenciales crecientes en la zona prohibida, que resultarían dominantes frente a la exponencial decreciente. Es frecuente en la literatura utilizar indiscriminadamente estas relaciones sin tener en cuenta el sentido de las flechas, lo que podría en principio conducir a resultados incorrectos.

de donde

$$\int_{q_-}^{q_+} dq \sqrt{2m[E - V(q)]} = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{C.17})$$

siendo n un entero mayor o igual que cero. Recíprocamente, si se cumple la ec. (C.17), las funciones WKB exponencialmente decrecientes en las zonas *I* y *III* conducen a una única solución WKB en la zona *II*, salvo una constante multiplicativa, como puede verse a partir de las fórmulas de conexión.

La ec. (C.17) constituye una expresión de una de las reglas de cuantización de Bohr-Sommerfeld en la vieja teoría cuántica:

$$2 \int_{q_-}^{q_+} dq \sqrt{2m[E - V(q)]} = h \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{C.18})$$

La parte izquierda de (C.18) corresponde a la integral a lo largo de un ciclo completo del movimiento (de q_- a q_+ y de vuelta a q_-) del momento $\sqrt{2m[E - V(q)]}$. La parte derecha es el valor cuántico de la integral de fase, con números cuánticos semienteros en lugar de enteros.⁴

De esta manera, el método WKB permite obtener las condiciones de cuantización para un sistema cuántico imponiendo las condiciones de contorno adecuadas para las funciones (C.12), que deben mostrar un decrecimiento exponencial en los límites $\pm\infty$.

La forma de la solución (C.16) permite mostrar fácilmente que n se corresponde con el número de nodos de la función de onda WKB entre los puntos de retroceso. Puesto que, como hemos comentado, las soluciones WKB son válidas únicamente a una distancia de varias longitudes de onda a partir de los puntos de retroceso, podemos deducir que la aproximación será buena sólo si los puntos de retroceso distan entre sí varias longitudes de onda, o bien si n es grande en comparación con la unidad. Esto confirma la interpretación semiclassical del método WKB, puesto que se espera que proporcione mejores resultados en el límite clásico de grandes números cuánticos.

Sin embargo, la aproximación WKB ofrece resultados bastante buenos para los estados más bajos en muchos sistemas. Como caso extremo se tiene el del oscilador armónico, $V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2q^2$, para el cual se obtienen resultados que son *exactos* para todos los niveles cuánticos. En efecto, puesto que los puntos de retroceso para este sistema vienen dados por $q_{\pm} = \pm\sqrt{2E/(m\omega^2)}$, la integral (C.17) tiene el valor

$$\int_{-\sqrt{2E/(m\omega^2)}}^{+\sqrt{2E/(m\omega^2)}} dq \sqrt{2m \left[E - \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \right]} = \frac{E\pi}{\omega}.$$

La condición de cuantización impuesta por la ec. (C.17) proporciona unos valores para la energía dados por

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

que coinciden, para cualquier $n \geq 0$, con el resultado cuántico exacto.

⁴Hemos de hacer notar que si en la expresión (C.18) se sustituye $(n + 1/2)$ por n , se obtiene la regla de cuantificación de SWI (Sommerfeld-Wilson-Ishiwara). (No es por tanto tan sorprendente que los niveles energéticos de la vieja teoría cuántica coincidan, aproximadamente, con los que resultan de resolver la ecuación de Schrödinger).

Conviene indicar por último un procedimiento debido a Maslov [Mas81] que se enfrenta al problema de la divergencia de la aproximación WKB en los puntos de retroceso tratando de evitar los farragosos cálculos que conducen a las fórmulas de conexión. La idea consiste en evitar la singularidad que suponen los puntos de retroceso en la representación de coordenadas cambiando a la representación de momentos mediante la transformada de Fourier

$$\bar{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dq e^{-\frac{i}{\hbar}qp} \Psi(q),$$

continuar en esta representación hasta el siguiente punto de retroceso y volver de nuevo a la representación de coordenadas mediante

$$\Psi(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}qp} \bar{\Psi}(p).$$

Estas integrales se evalúan de forma aproximada mediante el método de fase estacionaria [ver Apéndice (B)], obteniéndose finalmente

$$\Psi(q) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}S(q) - \frac{i\pi}{2}}}{|p(q)|^{1/2}}, \quad (\text{C.19})$$

con $S(q) = \int^q dq' p(q')$. Este resultado se obtiene para el caso de un potencial con pendiente finita. En el caso de una pared infinita (billares), la función de onda debe anularse en la pared, de forma que la fase extra en (C.19) es $-\pi$ en lugar de $-\pi/2$. La condición de cuantización se obtiene exigiendo que la función de onda calculada después de un periodo completo sea univaluada, de donde

$$\frac{1}{\hbar} \oint p(q) dq = 2\pi \left(n + \frac{m}{4} \right), \quad (\text{C.20})$$

donde m corresponde al número de puntos de retroceso del potencial. Puede encontrarse una descripción detallada del procedimiento de uniformización de Maslov y Fedoriuk [Mas81] en [Del86].

Bibliografía

- [Ali68] M. R. Aliev and V. T. Aleksanyan, *Optika i Spektroskopiya* **24**, 520 (1968).
- [Arn89] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (Springer Verlag, New York, 1978, Second edition 1989).
- [Bal84] N. L. Balazs and B. K. Jennings, *Phys. Rep.* **104**, 347-391 (1984).
- [Bal01] L. E. Ballentine, *Phys. Rev. E* **63**, 056204 (2001).
- [Bar01] M. Baranger, M. A. M. de Aguiar, F. Keck, H. J. Korsch, and B. Schellhaaß, *J. Phys. A* **34**, 7227 (2001).
- [Bar61] V. Bargmann, *Commun. Pure and Appl. Math.* **14**, 187 (1961).
- [Ben78] I. Bender, D. Gromes, H. J. Rothe, and K. D. Rothe, *Nucl. Phys. B* **136**, 259 (1978).
- [Ber78] M. V. Berry, en *Topics in Nonlinear Dynamics. A tribute to Sir Edward Bullard*, ed. Siebe Jorna (American Institute of Physics Conference Proceeding, n. 46, 16, 1978).
- [Ber89] M. Berry, *Physica Scripta* **40**, 335 (1989).
- [Bla81] J. P. Blaizot and H. Orland, *Phys. Rev. C* **24**, 1740 (1981).
- [Ble75] N. Bleistein and R. A. Handelsman, *Asymptotic Expansions of Integrals* (Dover Publications, New York, 1975).
- [Blu94] R. Blumel and B. Esser, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3658 (1994).
- [Cam98] G. Campolieti and P. Brumer, *J. Chem. Phys.* **109**, 2999 (1998).
- [Car76] N. D. Cartwright, *Physica A*, **83**, 210 (1976).
- [Cas90] A. H. Castro Neto and A. O. Caldeira, *Phys. Rev. A* **42**, 6884 (1990).
- [Cav81] C. M. Caves, *Phys. Rev. D* **23**, 1693 (1981).

- [Cav80] C. M. Caves, K. S. Thorne, R. W. D. Drever, V. D. Sandberg, and M. Zimmerman, *Rev. Mod. Phys.* **52**, 341 (1980).
- [Coh77] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Vol. I (John Wiley & Sons, 1977).
- [Coo86] F. Cooper, S. Y. Pi, and P. N. Stancioff, *Phys. Rev. D* **34**, 3831 (1986).
- [Coo94] F. Cooper, J. F. Dawson, D. Meredith, and H. Shepard, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1337 (1994).
- [Coo98] F. Cooper, J. Dawson, S. Habib, and R. D. Ryne, *Phys. Rev. E* **57**, 1489 (1998).
- [Cru00] G. Cruz-Pacheco, A. Minzoni, P. Padilla, A. Corichi, M. Rosenbaum, M. P. Ryan, and N. F. Smyth, *Phys. Rev. D* **61**, 105011 (2000).
- [Cvi] P. Cvitanović, R. Artuso, P. Dahlenqvist, R. Mainieri, G. Tanner, G. Vattay, N. Whelan, and A. Wirzba, *Chaos. Classical and Quantum* (www.nbi.dk/ChaosBook/).
- [Del02] E. Delabaere and C. J. Howls, *Duke Mathematical Journal* **112**, 199 (2002).
- [Del86] J. B. Delos, *Adv. Chem. Phys.* **65**, 161 (1986).
- [Dem63] Y. N. Demkov, *Variational Principles in the Theory of Collisions* (Pergamon, New York, 1963).
- [Dir30] P. A. M. Dirac, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **26**, 376 (1930).
- [Dro95] S. Drozd, J. Okolowicz, M. Płoszajczak, E. Caurier, and T. Srokowski, arXiv:chao-dyn/9502024 v1 2 Mar 1995.
- [Dru80] P. D. Drummond and C. W. Gardiner, *J. Phys. A* **13**, 2353 (1980).
- [Eck93] B. Eckhardt, *Periodic Orbit Theory*, arXiv:chao-dyn/9303015 v1 23 Mar 1993.
- [Eid86] J. Eidson and R. F. Fox, *Phys. Rev. A* **34**, 3288 (1986).
- [Fey48] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948).
- [Gal78] A. Galindo and P. Pascual, *Mecánica Cuántica* (Alhambra, Madrid, 1978).
- [Gil72] R. Gilmore, *Ann. Phys. (NY)* **74**, 391 (1972).
- [Gil74a] R. Gilmore, *J. Math. Phys.* **15**, 2090 (1974).
- [Gil94b] R. Gilmore, *Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications*, (John Wiley & Sons, New York, 1974).

- [Gil75] R. Gilmore, C. M. Bowden, and L. M. Narducci, *Phys. Rev. A*. **12**, 1019 (1975).
- [Gla63a] R. J. Glauber, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 84 (1963).
- [Gla63b] R. J. Glauber, *Phys. Rev.* **130**, 2529 (1963).
- [Gla63c] R. J. Glauber, *Phys. Rev.* **131**, 493 (1963).
- [Gla65] R. J. Glauber, en *Quantum Optics and Electronics*, editado por C. deWitt, A. Blandin y C. Cohen-Tannoudji (Gordon and Breach, New York, 1965).
- [Gol80] H. Goldstein, *Classical Mechanics* (Addison-Wesley, 2nd edition, 1980).
- [Gra94] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products* (Academic Press, Fifth Edition, 1994).
- [Gro98] F. Grossmann and A. L. Xavier Jr., *Phys. Lett. A*. **243**, 243 (1998).
- [Gro99] F. Grossmann, *Comments At. Mol. Phys.* **34**, 141 (1999).
- [Gut67] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **8**, 1979 (1967).
- [Gut69] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **10**, 1004 (1969).
- [Gut70] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **11**, 1791 (1970).
- [Gut71] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **12**, 343 (1971).
- [Gut82] M. C. Gutzwiller, *Physica D***5**, 183 (1982).
- [Har04] C. Harabati, J. M. Rost, and F. Grossmann, *J. Chem. Phys.* **120**, 26 (2004).
- [Hel75] E. J. Heller, *J. Chem. Phys.* **62**, 1544 (1975).
- [Hel76] E. J. Heller, *J. Chem. Phys.* **65**, 4979 (1976).
- [Hel77] E. J. Heller, *J. Chem. Phys.* **66**, 5777 (1977).
- [Hel81] E. J. Heller, *J. Chem. Phys.* **75**, 2923 (1981).
- [Hel91] E. J. Heller, en *Chaos and Quantum Physics*, ed. M. J. Giannoni, A. Voros and J. Zinn-Justin, Les Houches, Session LII, (North-Holland, Elsevier Science Publishers, 1991).
- [Hil84] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully, and E. P. Wigner, *Phys. Rep.* **106**, 121-167 (1984).
- [Her84] M. F. Herman and E. Kluk, *Chem. Phys.* **91**, 27 (1984).

- [Hol69] J. N. Hollenhorst, Phys. Rev. D **19**, 1669 (1979).
- [Hub88] D. Huber, E. J. Heller, and R. G. Littlejohn, J. Chem. Phys. **89**, 2003 (1988).
- [Hus40] K. Husimi, Proc. Phys. Math. Soc. Jpn. **22**, 264 (1940).
- [Imo85] N. Imoto, H. A. Haus, and Y. Yamamoto, Phys. Rev. A **32**, 2287 (1985).
- [Jac79] R. Jackiw and A. Kerman, Phys. Lett. **71A**, 158 (1979).
- [Jor34] O. M. Jordahl, Phys. Rev. **45**, 87 (1934).
- [Kan81] K-K. Kan, Phys. Rev. A **24**, 2831 (1981).
- [Kay94] K. G. Kay, J. Chem. Phys. **100**, 4377 (1994).
- [Kir33] J. G. Kirkwood, Phys. Rev. **44**, 31 (1933).
- [Kit86] M. Kitagawa and Y. Yamamoto, Phys. Rev. A **34**, 3974 (1986).
- [Kla60] J. R. Klauder, Ann. Phys. (N. Y.) **11**, 123 (1960).
- [Kla63] J. Klauder, J. Math. Phys. **4**, 1058 (1963).
- [Kla65] J. R. Klauder, J. Math. Phys. **6**, 734 (1965).
- [Kla79] J. R. Klauder, Phys. Rev. D **19**, 2349 (1979).
- [Kla86] J. R. Klauder, Phys. Rev. Lett. **56**, 897 (1986).
- [Kla87] J. R. Klauder, Ann. Phys. (N. Y.) **180**, 108 (1987).
- [Kov89] A. Kovner and B. Rosenstein, Phys. Rev. D **39**, 2332 (1989).
- [Kra81] P. Kramer and M. Saraceno, *Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1981).
- [Kur80] H. Kuratsuji and T. Suzuki, J. Math. Phys. **21**, 472 (1980).
- [Kur81a] H. Kuratsuji and Y. Mizobuchi, Phys. Lett. A **82**, 279 (1981).
- [Kur81b] H. Kuratsuji and Y. Mizobuchi, J. Math. Phys. **22**, 757 (1981).
- [Kur89] J. Kurchan, P. Leboeuf, and M. Saraceno, Phys. Rev. A **40**, 6800 (1989).
- [Lan37] R. E. Langer, Phys. Rev. **51**, 669 (1937).

- [Lee95] H-W. Lee, Phys. Rep. **259**, 147-211 (1995).
- [Lei98] D. Leibfried, T. Pfau, and C. Monroe, Phys. Today **51**, 22 (1998).
- [Leo97] U. Leonhardt, *Measuring the Quantum State of Light* (Cambridge University Press, 1997).
- [Lev77] S. Levit and U. Smilansky, Ann. Phys. (N. Y.) **108**, 165 (1977).
- [Lit85] R. G. Littlejohn, Phys. Rev. Lett. **54**, 1742 (1985).
- [Lit86a] R. G. Littlejohn, Phys. Rev. Lett. **56**, 2000 (1986).
- [Lit86b] R. G. Littlejohn, Phys. Rep. **138**, 193 (1986).
- [Lit88] R. G. Littlejohn, Phys. Rev. Lett. **61**, 2159 (1988).
- [Liu98a] J. Liu, B. Hu, and B. Li, Phys. Rev. Lett. **81**, 1749 (1998).
- [Liu98b] J. Liu, B. Hu, and B. Li, Phys. Rev. A **58**, 3448 (1998).
- [Lou90] W. H. Louisell, *Quantum Statistical Properties of Radiation* (Wiley, New York, 1990).
- [Mar04] E. Martín Fierro and J. M. Gómez Llorente (en preparación).
- [Mas81] V. P. Maslov and M. V. Fedoriuk, *Semi-Classical Approximation in Quantum Mechanics* (Reidel, Boston, 1981).
- [McD85] S. W. McDonald, Phys. Rev. Lett. **54**, 1211 (1985).
- [McL72] D. W. McLaughlin, J. Math. Phys. **13**, 1099 (1972).
- [Meh01] B. Mehlig and M. Wilkinson, Ann. Phys. (Lpz.) **10**, 541 (2001).
- [Meh64] C. L. Mehta, J. Math. Phys. **5**, 677 (1964).
- [Meh65] C. L. Mehta and E. C. G. Sudarshan, Phys. Rev. **138**, B274 (1965).
- [Mer70] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (Wiley International, second edition, 1970).
- [Mes83] A. Messiah, *Mecánica Cuántica*, Vol. I (Tecnos, Madrid, 1983).
- [Mil83] G. J. Milburn and D. F. Walls, Phys. Rev. A **28**, 2065 (1983).
- [Mil53] S. C. Miller and R. H. Good, Jr., Phys. Rev. **91**, 174 (1953).
- [Mil70] W. H. Miller, J. Chem. Phys. **53**, 3578 (1970).

- [Mil74] W. H. Miller, *Adv. Chem. Phys.* **25**, 69 (1974).
- [Mil75] W. H. Miller, *J. Chem. Phys.* **63**, 996 (1975).
- [Mil79] W. H. Miller, *J. Phys. Chem.* **83**, 960 (1979).
- [Mil83] P. W. Milonni, J. R. Ackerhalt, and H. W. Galbraith, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 966 (1983).
- [Min97] A. A. Minzoni, M. Rosenbaum, and M. P. Ryan, Jr., *Phys. Rev. D* **56**, 2144 (1997).
- [Mor53] P. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York, 1953).
- [Mur95] T. H. Murphrey and P. J. Rossky, *J. Chem. Phys.* **103**, 6665 (1995).
- [Nor80] J-M. Normand, *A Lie Group: Rotations in Quantum Mechanics*, (North-Holland, 1980).
- [Oco83] R. F. O'Connell, *Found. Phys.* **13**, 83 (1983).
- [Ozo88] A. M. Ozorio de Almeida, *Hamiltonian Systems. Chaos and quantization* (Cambridge University Press, Cambridge, 1988).
- [Pap82] D. Papoušek and M. R. Aliev, *Molecular vibrational-rotational spectra* (Elsevier, Amsterdam, 1982).
- [Pat94a] A. K. Pattanayak and W. C. Schieve, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2855 (1994).
- [Pat94b] A. K. Pattanayak and W. C. Schieve, *Phys. Rev. E* **50**, 3601 (1994).
- [Per72] A. M. Perelomov, *Commun. Math. Phys.* **26**, 222 (1972).
- [Pes94] U. Peskin, H. Reisler, and W. H. Miller, *J. Chem. Phys.* **101**, 9672 (1994).
- [Raj82] A. K. Rajagopal and J. T. Marshall, *Phys. Rev. A* **26**, 2977 (1982).
- [Raj83] A. K. Rajagopal, *Phys. Rev. A* **27**, 558 (1983).
- [Rih68] A. W. Rihaczek, *IEEE Trans. Inf. Theory* **14**, 369 (1968).
- [Sch26] E. Schrödinger, *Naturwissenschaften* **14**, 664 (1926).
- [Sch81] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York, 1981).
- [Scu97] M. O. Scully and M. Suhail Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, 1997).
- [Sei91] T. Seideman and W. H. Miller, *J. Chem. Phys.* **95**, 1768 (1991).

- [Sha39] W. Shaffer, H. H. Nielsen and L. H. Thomas, Phys. Rev. **56**, 895 (1939).
- [Sil85] H. J. Silverstone, Phys. Rev. Lett. **55**, 2523 (1985).
- [Sol86] H. G. Solari, J. Math. Phys. **27**, 1351 (1986).
- [Sto70] D. Stoler, Phys. Rev. D **1**, 3217 (1970).
- [Sud63] E. C. G. Sudarshan, Phys. Rev. Lett. **10**, 277 (1963).
- [Tak85] K. Takahashi and N. Saito, Phys. Rev. Lett. **55**, 645 (1985).
- [Tak86a] K. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 762 (1986).
- [Tak86b] K. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 1443 (1986).
- [Tak89] K. Takahashi, Prog. Theoret. Phys. Suppl. **98**, 109-156 (1989).
- [Tak95] K. Takatsuka and H. Ushiyama, Phys. Rev. A **51**, 4353 (1995).
- [Tom93] S. Tomsovic and E. J. Heller, Phys. Rev. E **47**, 282 (1993).
- [Van28] J. H. Van Vleck, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **14**, 178 (1928).
- [Van29] J. H. Van Vleck, Phys. Rev. **33**, 467 (1929).
- [Von31] J. von Neumann, Math. Ann. **104**, 570 (1931).
- [Vor89] A. Voros, Phys. Rev. A **40**, 6814 (1989).
- [Wal83] D. F. Walls, Nature **306**, 141 (1983).
- [Wal94] D. F. Walls and G. J. Milburn, *Quantum Optics* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1994).
- [Wei79] Y. Weissman and J. Jortner, J. Chem. Phys. **71**, 3880 (1979).
- [Wei82] Y. Weissman, J. Chem. Phys. **76**, 4067 (1982).
- [Wey27] H. Weyl, Z. Phys **46**, 1 (1927).
- [Whi74] G. Whitham, *Linear and Nonlinear Waves* (John Wiley & Sons, New York, 1974).
- [Wig32] E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
- [Wig71] E. P. Wigner, en *Perspectives in Quantum Theory*, editado por W. Yourgrau y A. van der Merwe (MIT, Cambridge, 1971).

- [Xav96] A. L. Xavier Jr. and M. A. M. de Aguiar, Phys. Rev. A **54**, 1808 (1996).
- [Yue76] H. P. Yuen, Phys. Rev. A **13**, 2226 (1976).
- [Yur86] B. Yurke and D. Stoler, Phys. Rev. Lett. **57**, 13 (1986).
- [Zha90] W-M. Zhang, D. H. Feng, and R. Gilmore, Rev. Mod. Phys. **62**, 867-927 (1990).
- [Zha93] W-M. Zhang and D. H. Feng, Mod. Phys. Lett. **A8**, 1417 (1993).
- [Zha95] W-M. Zhang and D. H. Feng, Phys. Rep. **252**, 1-100 (1995).
- [Zor96] D. Zor and K. G. Kay, Phys. Rev. Lett. **76**, 1990 (1996).