

# Modelos semiclásicos en la representación de estados coherentes

Imobach García Martín

Julio 2019

TRABAJO DE FIN DE GRADO  
Dirección a cargo del Dr. D. José M. Gómez Llorente



## ABSTRACT

---

We present a study of semiclassical approximations to quantum magnitudes in the *Bargmann representation*. Firstly, a description of the WKB model in the coordinate representation is given, including a quantitative validity condition for the approximation. Subsequently, we define the coherent states and their main properties, as well as the Bargmann states (non-normalized coherent states), which allows us to develop the semiclassical approximations in the new representation. Both stationary and time-dependent Schrödinger equations are solved, establishing a comparison with the results for the wavefunction coming from the coordinate representation formalism. The energy spectrum is also studied.

As we will prove, the intrinsic complex structure of Bargmann representation leads us to an extension to the complex plane, where the concept of *analyticity* plays a fundamental role. Finally, we illustrate some advantages of the formalism we have introduced through its application to a particular stationary system (the harmonic oscillator), achieving an integral expression for the Hermite polynomials.

---

# Contenidos

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Aproximaciones semiclásicas: la representación de la coordenada</b>	<b>3</b>
2.1	El caso estacionario: modelo WKB	3
2.1.1	El <i>ansatz</i> WKB	3
2.1.2	La condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld	5
2.2	El caso dependiente del tiempo: evolución semiclásica	7
2.2.1	La ecuación para la fase $R(\mathbf{q}, t)$	8
2.2.2	La ecuación para la amplitud $A(\mathbf{q}, t)$ . Función de onda	9
<b>3</b>	<b>Formalismo de los estados coherentes</b>	<b>11</b>
3.1	Estados coherentes	11
3.2	Características de los estados coherentes	14
3.3	Estructura algebraica	18
3.3.1	Propiedades geométricas. Desarrollos en el espacio de Hilbert	18
3.3.2	$\mathcal{D}$ -álgebra	20
<b>4</b>	<b>Aproximaciones semiclásicas: la representación de Bargmann</b>	<b>21</b>
4.1	La función de onda estacionaria	22
4.2	La función de onda dependiente del tiempo	27
<b>5</b>	<b>Ejemplo de aplicación: sistemas estacionarios</b>	<b>31</b>
<b>6</b>	<b>Conclusiones y perspectivas</b>	<b>36</b>
<b>7</b>	<b>Summaries in English</b>	<b>37</b>
7.1	Introduction	37
7.2	Semiclassical approximations: the coordinate representation	37
7.3	Coherent states formalism	37
7.4	Semiclassical approximations: the Bargmann representation	38
7.5	Application example: stationary systems	38
7.6	Conclusions and perspectives	38

# 1 Introducción

En los orígenes de la Teoría Cuántica, los primeros sistemas y fenómenos se comenzaron a estudiar mediante el establecimiento de analogías y reglas de asociación entre ellos y su homólogo clásico, siendo la mayoría de estos, en realidad, modelos semiclásicos.

El *principio de correspondencia de Bohr* (1923) establece que la Mecánica Cuántica debe reproducir los resultados de la Mecánica Clásica en el límite de grandes números cuánticos, lo que quiere decir que algunos números cuánticos están excitados a valores muy altos o que el sistema es descrito por un conjunto grande de números cuánticos, o ambas cosas. Hoy en día se suele formular de la siguiente manera: “en el límite  $\hbar \rightarrow 0$  los resultados cuánticos tienden a los clásicos”. Es precisamente en esta frontera en la que se desarrollará este trabajo, entendiendo por supuesto que se trata de un límite formal que debe interpretarse como “situaciones en las que el cociente adimensional entre una magnitud clásica con dimensiones de acción dividido por  $\hbar$  es muy grande”.

Si bien la antigua teoría cuántica fue un conjunto de procedimientos heurísticos que ahora se entienden como las primeras correcciones cuánticas a la mecánica clásica, en la actualidad los modelos semiclásicos (basados en su mayoría en desarrollos de magnitudes cuánticas en potencias de  $\hbar$ ) constituyen una manera de conseguir comprender los procesos cuánticos en sí mismos, proporcionando una descripción más intuitiva de los mismos. Una de las propiedades más destacables de estos tratamientos es la aproximación a magnitudes cuánticas en términos de parámetros clásicos, revelando conexiones entre la dinámica clásica de los sistemas y su comportamiento cuántico.

El objetivo prioritario ha sido obtener aproximaciones a la función de onda (tanto en el caso estacionario como en el dependiente del tiempo) en la representación de Bargmann, para comparar los resultados con los del formalismo asociado a la representación de la coordenada y discutir la conveniencia de emplear una u otra. Además, la búsqueda de expresiones para la cuantización del sistema (que proporcionan el espectro de energías) y el estudio de los rangos de validez de las aproximaciones planteadas han ocupado parte de nuestro tiempo. Este trabajo pretende ser autocontenido, y es por ello por lo que se dedica una parte importante del mismo a la obtención de los resultados para la representación de la coordenada, así como a la introducción y caracterización detallada de los estados coherentes.

Una gran parte de este trabajo tiene un carácter fundamentalmente bibliográfico, pues si bien existen aportaciones propias puntuales, el contenido del mismo puede encontrarse en la literatura, particularmente en las referencias citadas. Ha sido por tanto, en gran medida, un ejercicio de comprensión profunda, síntesis y estructuración de la información para exponer el contenido de una manera clara y rigurosa, adaptándolo en cada caso a conveniencia atendiendo a nuestros objetivos. En una última parte de aplicación del formalismo presentado sí que se hace un desarrollo propio para ejemplificar las ideas planteadas a lo largo del trabajo y mostrar la adecuación del método, así como para obtener algunas expresiones de interés como pueden ser la proyección de los estados de Bargmann sobre la base de coordenadas, o una expresión integral para los polinomios de Hermite.

## 2 Aproximaciones semiclásicas: la representación de la coordenada

En esta sección recogeremos los resultados fundamentales de los métodos semiclásicos en la representación de la coordenada. A pesar de que su demostración no es uno de los objetivos esenciales del trabajo, entraremos con cierto detalle en los cálculos para su obtención, dado que muchas de las ideas empleadas serán rescatadas en la sección 4.

Primero estudiaremos el caso estacionario, para el que obtendremos una aproximación a la función de onda, así como los límites de aplicabilidad de nuestro modelo y la cuantización de los niveles de energía a la que conduce. En una segunda parte abordaremos el caso no estacionario, proporcionando una expresión semiclásica para la función de onda.

### 2.1 El caso estacionario: modelo WKB

La aproximación WKB es un método que consiste en reescribir la función de onda como una función exponencial, cuya fase es lentamente variable en el tiempo, para desarrollarla en serie de potencias del parámetro  $\hbar$ . La referencia seguida para este desarrollo es el texto de *L. D. Landau & E. M. Lifshitz* [1].

#### 2.1.1 El *ansatz* WKB

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la representación de la coordenada, para una partícula de masa  $m$  sometida a un potencial  $V(\mathbf{q})$ , presenta la forma:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{q}) + (E - V(\mathbf{q}))\psi(\mathbf{q}) = 0 . \quad (2.1)$$

Ensayando un solución del tipo

$$\psi(\mathbf{q}) = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(\mathbf{q})} \quad (2.2)$$

se obtiene:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla(\nabla(e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(\mathbf{q})})) + (E - V(\mathbf{q}))e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(\mathbf{q})} = 0 . \quad (2.3)$$

Desarrollando un poco los cálculos y empleando la identidad vectorial  $\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A}(\nabla \cdot \mathbf{B}) + \mathbf{B}(\nabla \cdot \mathbf{A})$ , esta igualdad se puede expresar como

$$\frac{1}{2m} (\nabla \sigma(\mathbf{q}))^2 - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \sigma(\mathbf{q}) = E - V(\mathbf{q}) . \quad (2.4)$$

La solución  $\sigma(\mathbf{q})$  de la ecuación 2.4 depende del parámetro  $\hbar$ , que por norma general será pequeño en comparación con las acciones típicas del problema. Si admitimos un desarrollo formal en potencias de dicho parámetro:

$$\sigma(\mathbf{q}) = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n \sigma_n(\mathbf{q}) = \sigma_0(\mathbf{q}) + \hbar \sigma_1(\mathbf{q}) + \hbar^2 \sigma_2(\mathbf{q}) + \dots , \quad (2.5)$$

obtendremos una ecuación para cada orden en  $\hbar$  al sustituir 2.5 en 2.4. El método WKB nos va a permitir obtener los dos primeros términos de este desarrollo (esto es, un término

más que en la aproximación clásica) para el caso *monodimensional*. De esta manera, el desarrollo 2.5 queda expresado como

$$\sigma(q) = \sigma_0(q) + \hbar\sigma_1(q) + \dots, \quad (2.6)$$

y la ecuación 2.4 se reduce a

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{d\sigma(q)}{dq} \right)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2\sigma(q)}{dq^2} = E - V(q). \quad (2.7)$$

En primera aproximación consideremos el término de orden más bajo en 2.6, es decir,  $\sigma(q) = \sigma_0(q)$ , por lo que prescindimos del término en  $\hbar$  en la ecuación anterior:

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{d\sigma_0(q)}{dq} \right)^2 = E - V(q), \quad (2.8)$$

que integrada de forma inmediata proporciona la solución

$$\sigma_0(q) = \pm \int p(q) dq, \quad (2.9)$$

donde  $p(q) = \sqrt{2m(E - V(q))}$  es el momento clásico.

Efectivamente es lícito haber prescindido del término en  $\hbar$  en 2.7, siempre y cuando sea pequeño en comparación con el primero del miembro izquierdo de la ecuación. Esto impone limitaciones a nuestro desarrollo, que matemáticamente se traducen en la condición

$$\hbar \left| \ddot{\sigma}(q) / (\dot{\sigma}(q))^2 \right| = |d(\hbar/\dot{\sigma}(q))/dq| \ll 1. \quad (2.10)$$

Teniendo en cuenta que a orden cero en  $\hbar$ , según 2.9,  $\dot{\sigma}(q) = p(q)$ , podemos reescribirla como

$$|d(\lambda(q)/2\pi)/dq| \ll 1, \quad (2.11)$$

donde  $\lambda(q) = 2\pi\hbar/p(q)$  es la longitud de onda de Broglie. Luego la longitud de onda de la partícula debe variar poco a lo largo de distancias de su mismo orden de magnitud.

Hemos de observar también que esta aproximación semiclásica falla en los llamados *puntos de retroceso* ( $E = V(q) \Rightarrow p(q) = 0$ ), aquellos en los que clásicamente la partícula se pararía para luego cambiar el sentido de su movimiento. Precisamente será esta circunstancia la que, a la postre, fije la condición de cuantización de la energía, tal y como veremos en el apartado siguiente.

Atendamos ahora al siguiente término en 2.6. Los términos de primer orden en  $\hbar$  nos conducen a la ecuación

$$\frac{d\sigma_0(q)}{dq} \frac{d\sigma_1(q)}{dq} + \frac{1}{2} \frac{d^2\sigma_0(q)}{dq^2} = 0. \quad (2.12)$$

Introduciendo el valor hallado para  $\sigma_0(q)$  y calculando sus respectivas derivadas:

$$\frac{d\sigma_1(q)}{dq} = -\frac{1}{2} \frac{\ddot{\sigma}_0(q)}{\dot{\sigma}_0(q)} = -\frac{1}{2} \frac{1}{p(q)} \frac{dp(q)}{dq}, \quad (2.13)$$

y por lo tanto

$$\sigma_1(q) = -\frac{1}{2} \ln(q) + C_0 . \quad (2.14)$$

Finalmente, hemos conseguido las expresiones 2.9 y 2.14 para  $\sigma_0(q)$  y  $\sigma_1(q)$  respectivamente, que nos permiten expresar el *ansatz* 2.2 como la combinación lineal

$$\psi(q) = \frac{C_+}{\sqrt{p(q)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p(q) dq} + \frac{C_-}{\sqrt{p(q)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int p(q) dq} . \quad (2.15)$$

El factor  $1/\sqrt{p(q)}$  puede ser interpretado de la siguiente manera: la probabilidad de encontrar a la partícula entre  $q$  y  $q+dq$  es proporcional a  $1/p(q)$ . Es un resultado que cabría esperar para una “partícula semiclásica”, ya que sabemos que clásicamente el tiempo que pasa la partícula en el segmento  $dq$  es inversamente proporcional a su momento.

### 2.1.2 La condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld

Determinada la forma general de nuestra función de onda en la aproximación semiclásica, dada por 2.15, desconocemos las constantes  $C_+$  y  $C_-$ , y tampoco hemos abordado el problema de los puntos de retroceso. Nos encargaremos de ello a continuación, siguiendo una estrategia alternativa para obtener una forma compacta y normalizada de la función de onda fuera de dichos puntos, así como los estados estacionarios de la partícula.

Sea  $q = a$  un punto de retroceso ( $V(a) = E$ ) y supongamos que  $V(q) > E \forall q > a$ . Entonces, la región a la derecha es clásicamente prohibida y por tanto la función de onda ha de tender a cero en dicha región, lo que se consigue quedándonos con el segundo término en 2.15. Mientras, para la región izquierda la función de onda es directamente la que ya teníamos. Luego:

$$\psi(q) = \frac{C}{2\sqrt{|p(q)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^q p(q') dq' \right| \right) \quad q > a \quad (2.16)$$

$$\psi(q) = \frac{C_+}{\sqrt{p(q)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^q p(q') dq'\right) + \frac{C_-}{\sqrt{p(q)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^q p(q') dq'\right) \quad q < a . \quad (2.17)$$

Para obtener los coeficientes  $C$ ,  $C_-$  y  $C_+$  habría que seguir la marcha de la función desde la región derecha ( $q > a$ ) a la región izquierda ( $q < a$ ). Sin embargo, esto implicaría atravesar el valor  $x = a$ , para el que sabemos que nuestra aproximación semiclásica es inaplicable.

Es posible evitar este paso si consideramos formalmente  $\psi(q)$  como una función de la variable compleja  $q$ . En ese caso es posible cambiar de región bordeando el punto de retroceso por un camino lo suficientemente alejado del mismo como para que se cumpla la condición de carácter semiclásico 2.10.

Estudiemos el tránsito de la región derecha a la izquierda a lo largo de una semicircunferencia centrada en  $q = a$  de radio grande, inscrita en el semiplano superior de la variable compleja  $q$ . Al recorrer dicho camino, la función 2.16 debe transformarse en el segundo término de 2.17, que es el dominante ya que el primero tiende a cero

exponencialmente a medida que penetramos en el semiplano. En este proceso la fase de la diferencia  $V(q) - E$  aumenta en  $\pi$ , lo que se puede recoger en la igualdad  $C_- = \frac{1}{2}Ce^{-i\pi/4}$ . Análogamente, si viajamos de la región derecha a la izquierda a través de una semicircunferencia en el semiplano inferior, la función 2.16 debe transformarse en el primer término de 2.17 con la relación de coeficientes  $C_+ = \frac{1}{2}Ce^{i\pi/4}$ . Considerando esto, 2.17 queda de la forma:

$$\psi(q) = \frac{Ce^{i\pi/4}}{2\sqrt{p(q)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^q p(q') dq'\right) + \frac{Ce^{-i\pi/4}}{2\sqrt{p(q)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^q p(q') dq'\right) \quad q < a, \quad (2.18)$$

que podemos reescribir como una función trigonométrica:

$$\begin{aligned} \psi(q) &= \frac{C}{\sqrt{p(q)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^q p(q') dq' + \frac{\pi}{4}\right) \\ &= \frac{C}{\sqrt{p(q)}} \operatorname{sen}\left(\frac{1}{\hbar} \int_q^a p(q') dq' + \frac{\pi}{4}\right) \quad q < a. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Los resultados hallados, conocidos como *fórmulas de conexión*, nos conducen a una función de onda que ahora depende de una única constante, a fijar posteriormente por normalización. Asimismo, permiten deducir la condición que fija los niveles de energía. Para ello consideremos el movimiento unidimensional de la partícula en un pozo de potencial. Clásicamente el movimiento está confinado en el dominio  $a \leq x \leq b$ , y es de naturaleza periódica, con periodo  $T = 2m \int_a^b dq/p(q)$ . En virtud de 2.19 se tiene que

$$\psi(q) = \frac{C}{\sqrt{p(q)}} \operatorname{sen}\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^q p(q') dq' + \frac{\pi}{4}\right) \quad q > a \quad (2.20)$$

$$\psi(q) = \frac{C'}{\sqrt{p(q)}} \operatorname{sen}\left(\frac{1}{\hbar} \int_q^b p(q') dq' + \frac{\pi}{4}\right) \quad q < b. \quad (2.21)$$

Necesariamente las expresiones 2.20 y 2.21 deben coincidir en el intervalo  $a \leq x \leq b$ , por lo que la suma de las fases debe ser un múltiplo entero de  $\pi$ :

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(q) dq + \frac{\pi}{2} = (n+1)\pi \quad ; \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (2.22)$$

con  $C = (-1)^n C'$  para que la igualdad se cumpla para  $\forall q \in [a, b]$ . Resulta:

$$\oint p(q) dq = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (2.23)$$

donde la integral  $\oint p(q) dq = 2 \int_a^b p(q) dq$  se extiende al periodo completo del movimiento clásico de la partícula. La expresión 2.23 es conocida como la *regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld*.

Finalmente, para normalizar la función de onda, tenemos que integrar  $|\psi^2(q)|$  entre los puntos  $x = a$  y  $x = b$ , ya que fuera de ese intervalo disminuye exponencialmente. Sustituyendo el cuadrado del seno por su valor medio:

$$\int |\psi^2(q)| dq \simeq \frac{C^2}{2} \int_a^b \frac{dq}{p(q)} = \frac{\pi C^2}{2m\omega} = 1, \quad (2.24)$$

donde  $\omega = 2\pi/T$ . Concluimos que

$$\psi(q) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi p(q)}} \operatorname{sen} \left( \frac{1}{\hbar} \int_a^q p(q') dq' + \frac{\pi}{4} \right) . \quad (2.25)$$

Hemos conseguido una expresión para la función de onda cuántica que, en nuestra aproximación semiclásica, depende únicamente de ingredientes clásicos, a excepción del factor  $\hbar$ , cuya magnitud relativa en términos de las demás acciones del problema da cuenta del grado de cuantización del sistema.

## 2.2 El caso dependiente del tiempo: evolución semiclásica

En el caso estacionario limitamos la resolución al caso monodimensional, dada la complejidad de resolución de las ecuaciones diferenciales del desarrollo WKB extendido a varias dimensiones. Para el formalismo semiclásico dependiente del tiempo veremos que pasamos de la ecuación de Schrödinger a la ecuación de Hamilton-Jacobi, cuya resolución es factible para cualquier dimensión. Atenderemos a las ideas de *Cvitanović et al.* [2] en esta parte del trabajo.

Sea una partícula d-dimensional, con masa  $m$  y coordenadas  $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_d)$  moviéndose en un potencial externo  $V(\mathbf{q})$ . Su función de onda  $\psi(\mathbf{q}, t)$  es la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{q}, t) + \left( \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial q_i^2} - V(\mathbf{q}) \right) \psi(\mathbf{q}, t) = 0 , \quad (2.26)$$

en la que se ha explicitado el operador laplaciano. Propongamos un *ansatz* análogo al del caso estacionario, esto es:

$$\psi(\mathbf{q}, t) = A(\mathbf{q}, t) e^{\frac{i}{\hbar} R(\mathbf{q}, t)} , \quad (2.27)$$

en el que la amplitud  $A(\mathbf{q}, t)$  es lentamente variable y la fase  $R(\mathbf{q}, t)/\hbar$  rápidamente variable, ambas funciones reales. Asumimos que  $A(\mathbf{q}_0, t_0)$  y  $R(\mathbf{q}_0, t_0)$  son conocidas, y por tanto la función de onda  $\psi(\mathbf{q}_0, t_0)$  en el instante inicial está bien determinada.

Si  $A(\mathbf{q}, t) \neq 0$ , al introducir nuestra propuesta 2.27 en 2.26, podemos separarla en una ecuación para la parte real, que gobernará la evolución temporal de la fase:

$$\frac{\partial R(\mathbf{q}, t)}{\partial t} + \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^d \left( \frac{\partial R(\mathbf{q}, t)}{\partial q_i} \right)^2 + V(\mathbf{q}) - \frac{\hbar^2}{2mA(\mathbf{q}, t)} \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 A(\mathbf{q}, t)}{\partial q_i^2} = 0 , \quad (2.28)$$

y otra para la parte imaginaria, que describirá la evolución de la amplitud en el tiempo:

$$\frac{\partial A(\mathbf{q}, t)}{\partial t} + \frac{1}{m} \sum_{i=1}^d \frac{\partial A(\mathbf{q}, t)}{\partial q_i} \frac{\partial R(\mathbf{q}, t)}{\partial q_i} + \frac{A(\mathbf{q}, t)}{2m} \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 R(\mathbf{q}, t)}{\partial q_i^2} = 0 . \quad (2.29)$$

Observemos que hemos pasado de una EDP para la función de onda compleja a un par de EDP's acopladas no lineales para las funciones reales  $A(\mathbf{q}, t)$  y  $R(\mathbf{q}, t)$ . Nótese asimismo que el término de acoplamiento en 2.28 es de orden  $\hbar^2$ , y por consiguiente en nuestra

aproximación semiclásica ( $\hbar \rightarrow 0$ ) será despreciable. Considerando esto, la ecuación queda reducida a la bien conocida en mecánica clásica *ecuación de Hamilton-Jacobi*:

$$\frac{\partial R(\mathbf{q}, t)}{\partial t} + H\left(\mathbf{q}, \mathbf{p} = \frac{\partial R(\mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{q}}\right) = 0, \quad (2.30)$$

donde  $\mathbf{p}(\mathbf{q}, t)$  es el momento canónico conjugado y  $R(\mathbf{q}, t)$  juega el papel de acción o función principal de Hamilton (esto es, la función generatriz de la transformación canónica).

Nuestro nuevo objetivo es resolver las ecuaciones 2.29 y 2.30. Asumiremos, de aquí en adelante, que el Hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo, por lo que la energía del sistema se conserva.

### 2.2.1 La ecuación para la fase $R(\mathbf{q}, t)$

Comencemos por 2.30, que puede ser integrada empleando el *método de las características*. La fase  $R(\mathbf{q}, t)$  es, como vemos, función de la variable dinámica  $\mathbf{q}(t)$ . Se tiene que

$$\frac{dR(\mathbf{q}, t)}{dt} = \frac{\partial R(\mathbf{q}, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^d \frac{\partial R(\mathbf{q}, t)}{\partial q_i} \dot{q}_i = -H(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) + \mathbf{p}(t) \dot{\mathbf{q}}(t), \quad (2.31)$$

en la que para la segunda igualdad hemos usado 2.30. Para poder integrar ahora 2.31 necesitamos conocer cómo varía  $\mathbf{p}(\mathbf{q}, t)$ , una función bien definida de las variables  $\mathbf{q}(t)$  y  $t$ , a lo largo de la dirección  $\dot{\mathbf{q}}(t)$  (que por ahora es arbitraria). Esta variación viene dada por

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial R(\mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{q}} = \dot{\mathbf{p}}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = \frac{\partial^2 R(\mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{q} \partial t} + \frac{\partial^2 R(\mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{q}^2} \dot{\mathbf{q}} = -\frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{q}} + \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} \dot{\mathbf{q}}. \quad (2.32)$$

Desarrollando las derivadas parciales y agrupando términos:

$$\dot{\mathbf{p}}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) + \frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{q}} = \left( \dot{\mathbf{q}} - \frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \right) \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}}. \quad (2.33)$$

Para que esta evolución sea independiente de  $\partial^2 R / \partial \mathbf{q}^2 = \partial \mathbf{p} / \partial \mathbf{q}$ , podemos escoger  $\dot{\mathbf{q}}$  (que hasta ahora era arbitraria) de tal forma que el paréntesis del miembro derecho de 2.33 se anule. Así,  $R(\mathbf{q}, t)$  podrá ser calculada a lo largo de una trayectoria específica  $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$  integrando las ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{q}}, \end{cases} \quad (2.34)$$

que reconocemos como las ecuaciones clásicas de Hamilton. Estamos en disposición de integrar la ecuación 2.31 a lo largo de las características  $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ :

$$R(\mathbf{q}, t) = R(\mathbf{q}_0, t_0) + R(\mathbf{q}, t; \mathbf{q}_0, t_0), \quad (2.35)$$

donde

$$R(\mathbf{q}, t; \mathbf{q}_0, t_0) = \int_{t_0}^t [\dot{\mathbf{q}}(\tau) \mathbf{p}(\tau) - H(\mathbf{q}(\tau), \mathbf{p}(\tau))] d\tau. \quad (2.36)$$

Tenemos dos condiciones de contorno referidas al tiempo. La primera es que para el tiempo final  $t$ ,  $\mathbf{q}(t) = \mathbf{q}$ , lo que fija el valor de  $\mathbf{p}(t)$ . En segundo lugar, si fijamos el valor inicial  $t_0 = 0$ ,  $\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}_0$  y  $\mathbf{p}(0) = \partial R(\mathbf{q}_0, 0)/\partial \mathbf{q}_0 = \mathbf{p}_0$ . Conviene remarcar que no conocemos con exactitud  $\mathbf{q}_0$  ni  $\mathbf{p}_0$ , sino  $R(\mathbf{q}_0, 0)$ , que proporciona una relación entre ambas variables:  $\mathbf{p}_0 = f(\mathbf{q}_0) \Rightarrow F(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0) = 0$ .

Bajo estas condiciones, y dado que postulamos que la energía se conserva, esto es,  $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E$ , la integral  $\int_0^t H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) d\tau$  en 2.36 vale  $Et$ . Además, si para la primera integral en dicha expresión hacemos el cambio de variable  $d\tau = d\mathbf{q}/\dot{\mathbf{q}}$ , llegamos a que 2.35 puede expresarse finalmente como

$$R(\mathbf{q}, t) = R(\mathbf{q}_0, 0) + R(\mathbf{q}, \mathbf{q}_0, t) = R(\mathbf{q}_0, 0) + \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} d\mathbf{q}\mathbf{p}(\mathbf{q}) - Et . \quad (2.37)$$

### 2.2.2 La ecuación para la amplitud $A(\mathbf{q}, t)$ . Función de onda

Conocida la fase, abordamos ahora el cálculo de la amplitud  $A(\mathbf{q}, t)$ . Definamos  $\rho(\mathbf{q}, t) \equiv A^2 = \psi^*(\mathbf{q}, t)\psi(\mathbf{q}, t)$ . Si multiplicamos la ecuación 2.29 por  $2A(\mathbf{q}, t)$  y usamos la definición anterior, vemos que es posible expresarla como una ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{q}, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^d \frac{\partial}{\partial q_i} (\rho(\mathbf{q}, t)v_i(\mathbf{q}, t)) = 0 , \quad (2.38)$$

donde  $v_i(\mathbf{q}, t)$  denota la componente  $i$ -ésima del campo de velocidades:

$$v_i(\mathbf{q}, t) = \dot{q}_i = \frac{\dot{p}_i}{m} = \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial q_i} R(\mathbf{q}, t) . \quad (2.39)$$

Podemos entender  $\rho(\mathbf{q}, t)$  como la densidad de un flujo de partículas hipotéticas en el espacio fásico, cuyas trayectorias  $\mathbf{q}(t)$  son soluciones de las ecuaciones de Hamilton 2.34. Recordemos que  $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_d)$  y  $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_d)$ , por lo que cada grado de libertad  $(q_i, p_i)$  puede ser considerado como una “partícula”. Todas ellas contribuyen a construir  $A(\mathbf{q}, t)$  mediante las evoluciones  $q_{i,0} \rightarrow q_i(t)$  y  $p_{i,0} \rightarrow p_i(t)$ .

Si consideramos, en el espacio de fases, un volumen diferencial  $d\mathbf{q}$  alrededor del punto  $\mathbf{q}$  a tiempo  $t$ , el número de partículas en él es  $\rho(\mathbf{q}, t)d\mathbf{q}$ . Inicialmente, este conjunto de partículas ocupaba un volumen  $d\mathbf{q}_0$  en torno a  $\mathbf{q}_0$ . La conservación del número de partículas nos lleva a escribir que

$$\rho(\mathbf{q}, t)d\mathbf{q} = \rho(\mathbf{q}_0, 0)d\mathbf{q}_0 , \quad (2.40)$$

(véase la figura 1). En consecuencia, finalmente obtenemos:

$$\rho(\mathbf{q}, t) = \left( \det \frac{\partial \mathbf{q}_0}{\partial \mathbf{q}} \right) \rho(\mathbf{q}_0, 0) , \quad (2.41)$$

donde el determinante es el Jacobiano de la transformación  $\mathbf{q} = \mathbf{q}(\mathbf{q}_0, t)$ , que podemos computar al conocer las trayectorias  $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ .

Los resultados 2.37 y 2.41 permiten dar la siguiente expresión para la función de onda buscada en 2.27:

$$\psi(\mathbf{q}, t) = \sqrt{\det \frac{\partial \mathbf{q}_0}{\partial \mathbf{q}}} A(\mathbf{q}_0, 0) e^{\frac{i}{\hbar}(R(\mathbf{q}_0, 0) + R(\mathbf{q}, \mathbf{q}_0, t))} = \sqrt{\det \frac{\partial \mathbf{q}_0}{\partial \mathbf{q}}} e^{\frac{i}{\hbar}R(\mathbf{q}, \mathbf{q}_0, t)} \psi(\mathbf{q}_0, 0) . \quad (2.42)$$

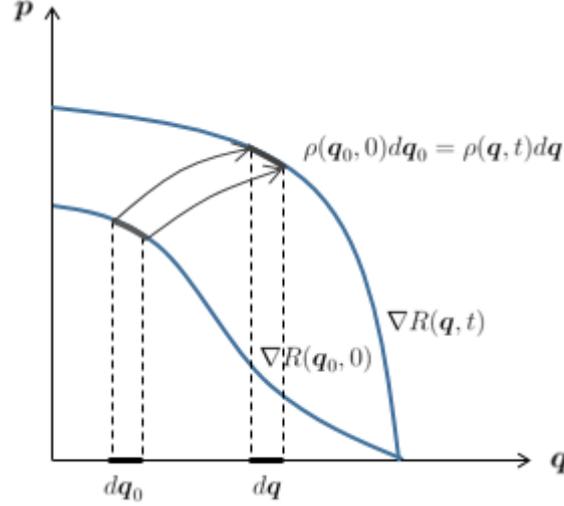


Figura 1: Evolución de la densidad de la hipersuperficie inicial ( $\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0 = \partial_{\mathbf{q}_0} R(\mathbf{q}_0, 0)$ ) a la hipersuperficie ( $\mathbf{q}, \mathbf{p}$ ) transcurrido un tiempo  $t$ , bosquejada en una dimensión.

Esta función de onda no es todavía la que buscamos. Debemos tener en cuenta aún algunas consideraciones. Hemos establecido que nuestra función de onda inicial puede ser escrita, según 2.42, en términos de las funciones univaluadas  $A(\mathbf{q}_0, 0)$  y  $R(\mathbf{q}_0, 0)$ , que asumimos conocidas de partida. A tiempos cortos esto será así, pero a medida que el tiempo avance el valor de la fase dejará de ser único. Es decir, existirá más de una trayectoria que conecte  $\mathbf{q}_0$  y  $\mathbf{q}$ , ya que estamos resolviendo un BVP (*Boundary Value Problem*).

Tenemos que recoger las contribuciones de cada trayectoria, con sus diferentes fases, a la función de onda. Para ello las identificaremos con el índice  $j$ :  $R_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}_0, t)$ . También haremos el siguiente cambio en el Jacobiano de 2.41:

$$\det \frac{\partial \mathbf{q}_0}{\partial \mathbf{q}} \Big|_j = e^{-i\pi\nu_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}_0, t)} \det \frac{\partial \mathbf{q}_0}{\partial \mathbf{q}} \Big|_j, \quad (2.43)$$

donde el índice topológico  $\nu_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}_0, t)$ , conocido como *índice de Maslov*, recoge el número de cambios de signo del determinante en la evolución de la trayectoria  $j$ -ésima en el tiempo desde 0 a  $t$ . Con todo ello, según el principio de superposición (consecuencia de la linealidad de la ecuación de Schrödinger 2.26), la función de onda será la suma sobre todas las posibles trayectorias, cada una ponderada en función de su correspondiente amplitud, fase e índice de Maslov:

$$\psi(\mathbf{q}, t) = \sum_j \left| \det \frac{\partial \mathbf{q}_0}{\partial \mathbf{q}} \Big|_j \right|^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}(R_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}_0, t) - \frac{\pi}{2} h\nu_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}_0, t))} \psi(\mathbf{q}_0, 0). \quad (2.44)$$

Por último, hacemos notar que esta expresión seguirá siendo válida si tenemos un Hamiltoniano dependiente del tiempo.

### 3 Formalismo de los estados coherentes

Introduciremos los estados coherentes considerando la posibilidad de construir estados cuánticos que, en el límite  $\hbar \rightarrow 0$ , nos conduzcan a los resultados clásicos para el oscilador armónico. Tomemos como punto de partida un oscilador armónico clásico, monodimensional, de masa  $m$  y frecuencia  $\omega$ , cuyo Hamiltoniano es

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \quad ; \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad , \quad (3.1)$$

y sus ecuaciones del movimiento vienen dadas por:

$$\dot{q}(t) = \frac{p(t)}{m} \quad ; \quad \dot{p}(t) = -m\omega^2 q(t) \quad . \quad (3.2)$$

Nos interesa escalar el Hamiltoniano, y para ello vamos a efectuar una transformación canónica  $(q, p) \rightarrow (Q, P)$  mediante la función generatriz  $F_2(q, P) = \sqrt{m\omega}qP$ . Las ecuaciones de transformación son

$$\begin{cases} p = \frac{\partial F_2}{\partial q} = \sqrt{m\omega}P \\ Q = \frac{\partial F_2}{\partial P} = \sqrt{m\omega}q \end{cases} \quad (3.3)$$

Comprobamos que efectivamente  $\partial(Q, P)/\partial(q, p) = 1$  y por tanto se trata de una transformación canónica. El Hamiltoniano transformado adquiere la forma

$$K(Q, P) = H(q(Q, P), p(Q, P)) = \frac{1}{2}\omega(P^2 + Q^2) \quad , \quad (3.4)$$

por los que las nuevas ecuaciones del movimiento se obtienen a partir de:

$$\dot{Q}(t) = \frac{\partial K}{\partial P} = \omega P(t) \quad ; \quad \dot{P}(t) = -\frac{\partial K}{\partial Q} = -\omega Q(t) \quad . \quad (3.5)$$

Nótese que ahora, posición y momento tienen las mismas dimensiones de  $\sqrt{\hbar}$ , mientras que  $K(Q, P)$  sigue teniendo dimensiones de energía.

#### 3.1 Estados coherentes

Vamos a seguir el planteamiento de *C. Cohen – Tannoujdi et al.* [3] para definir los estados coherentes. Utilizaremos para nuestro sistema clásico el Hamiltoniano escalado que acabamos de obtener, pero con la intención de trabajar de aquí en adelante con la notación usual, lo redenominamos como  $H$  y lo escribimos en términos de  $(q, p)$ :

$$H = \frac{1}{2}\omega(p^2 + q^2) \quad , \quad (3.6)$$

con lo que las ecuaciones del movimiento son:

$$\begin{cases} \dot{q}(t) = \omega p(t) \\ \dot{p}(t) = -\omega q(t) \end{cases} \quad (3.7)$$

Podemos definir una nueva cantidad adimensional compleja que incluya la información de la posición  $q(t)$  y el momento  $p(t)$ :

$$\tilde{\alpha}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}[q(t) + ip(t)] , \quad (3.8)$$

de tal forma que el par de ecuaciones 3.7 se reduce a una única ecuación:

$$\frac{d}{dt}\tilde{\alpha}(t) = -i\omega\tilde{\alpha}(t) , \quad (3.9)$$

cuya solución es trivialmente

$$\tilde{\alpha}(t) = \tilde{\alpha}_0 e^{-i\omega t} ; \quad \tilde{\alpha}_0 = \tilde{\alpha}(0) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}[q(0) + ip(0)] . \quad (3.10)$$

Así, de acuerdo con 3.8 y 3.10:

$$\begin{cases} q(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}[\tilde{\alpha}_0^* e^{i\omega t} + \tilde{\alpha}_0 e^{-i\omega t}] \\ p(t) = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}[\tilde{\alpha}_0^* e^{i\omega t} - \tilde{\alpha}_0 e^{-i\omega t}] , \end{cases} \quad (3.11)$$

y la energía  $\mathcal{H}$  del sistema es una constante del movimiento de valor

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\omega(p(0)^2 + q(0)^2) = \hbar\omega\tilde{\alpha}_0^*\tilde{\alpha}_0 = \hbar\omega|\tilde{\alpha}_0|^2 . \quad (3.12)$$

Buscamos un estado cuántico que verifique, para cualquier instante de tiempo, las relaciones  $\langle \hat{q} \rangle(t) = q(t)$ ,  $\langle \hat{p} \rangle(t) = p(t)$  y  $\langle \hat{H} \rangle(t) = \mathcal{H}$ . Para el cálculo de estos valores medios haremos uso de las conocidas expresiones

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a^\dagger + a) , \quad (3.13)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a^\dagger - a) , \quad (3.14)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) . \quad (3.15)$$

Aprovechamos para notar que, en este trabajo, todos los operadores serán denotados por acento circunflejo, a excepción de los operadores de creación y destrucción,  $a^\dagger$  y  $a$ . Para un estado arbitrario normalizado  $|\psi(t)\rangle$ , la evolución temporal del elemento de matriz  $\langle a \rangle = \langle \psi(t)|a|\psi(t)\rangle$  viene dada por el *teorema de Ehrenfest*:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle a \rangle(t) = \langle [a, \hat{H}] \rangle(t) , \quad (3.16)$$

donde si tenemos en cuenta que  $[a, \hat{H}] = \hbar\omega a$  resulta que

$$\langle a \rangle(t) = \langle a \rangle(0) e^{-i\omega t} \quad (3.17)$$

e inmediatamente se obtiene que la evolución de  $\langle a^\dagger \rangle = \langle \psi(t) | a^\dagger | \psi(t) \rangle$  se rige por la ecuación compleja conjugada:

$$\langle a^\dagger \rangle (t) = \langle a^\dagger \rangle (0) e^{i\omega t} (t) = \langle a \rangle^* (0) e^{i\omega t} (t) . \quad (3.18)$$

Las ecuaciones 3.17 y 3.18 son análogas a la ecuación clásica 3.10 y su compleja conjugada, respectivamente. Sustituyéndolas en las expresiones 3.13 y 3.14 resulta:

$$\begin{cases} \langle \hat{q} \rangle (t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} [\langle a \rangle^* (0) e^{i\omega t} + \langle a \rangle (0) e^{-i\omega t}] \\ \langle \hat{p} \rangle (t) = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} [\langle a \rangle^* (0) e^{i\omega t} - \langle a \rangle (0) e^{-i\omega t}] . \end{cases} \quad (3.19)$$

Para hacer coincidir estos valores esperados con las cantidades clásicas del par de ecuaciones 3.11 es condición necesaria y suficiente que en el instante inicial  $t = 0$  se cumpla:

$$\langle a \rangle (0) = \langle \psi(0) | a | \psi(0) \rangle = \tilde{\alpha}_0 . \quad (3.20)$$

Si nos atenemos ahora al valor medio del Hamiltoniano, se tiene que

$$\langle \hat{H} \rangle = \hbar\omega \langle a^\dagger a \rangle (0) + \frac{\hbar\omega}{2} , \quad (3.21)$$

en el que el término  $\hbar\omega/2$  es despreciable en el límite  $\hbar \rightarrow 0$  (o equivalentemente  $|\tilde{\alpha}_0| \gg 1$ ). La igualdad con la expresión 3.12 proporciona una segunda condición para nuestro vector de estado:

$$\langle a^\dagger a \rangle (0) = \langle \psi(0) | a^\dagger a | \psi(0) \rangle = |\tilde{\alpha}_0|^2 . \quad (3.22)$$

Nuestra hipótesis de partida nos ha conducido a las condiciones 3.20 y 3.22 que son, como veremos a continuación, suficientes para determinar el vector de estado normalizado  $|\psi(0)\rangle$ . Para ello definimos el operador  $\hat{b}(\tilde{\alpha}_0)$  como:

$$\hat{b}(\tilde{\alpha}_0) \equiv a - \tilde{\alpha}_0 . \quad (3.23)$$

De esta definición se tiene que

$$\hat{b}^\dagger(\tilde{\alpha}_0^*) \hat{b}(\tilde{\alpha}_0) = a^\dagger a - \tilde{\alpha}_0 a^\dagger - \tilde{\alpha}_0^* a + \tilde{\alpha}_0^* \tilde{\alpha}_0 , \quad (3.24)$$

lo que nos permite calcular el cuadrado de la norma del ket  $\hat{b}(\tilde{\alpha}_0) |\psi(0)\rangle$  como sigue:

$$\langle \psi(0) | \hat{b}^\dagger(\tilde{\alpha}_0^*) \hat{b}(\tilde{\alpha}_0) | \psi(0) \rangle = \langle a^\dagger a \rangle (0) - \alpha_0 \langle a^\dagger \rangle (0) - \alpha_0^* \langle a \rangle (0) + \tilde{\alpha}_0^* \tilde{\alpha}_0 . \quad (3.25)$$

Sustituyendo en la expresión anterior las relaciones 3.20 y 3.22 obtenemos:

$$\langle \psi(0) | \hat{b}^\dagger(\tilde{\alpha}_0^*) \hat{b}(\tilde{\alpha}_0) | \psi(0) \rangle = \tilde{\alpha}_0^* \tilde{\alpha}_0 - \tilde{\alpha}_0 \tilde{\alpha}_0^* - \tilde{\alpha}_0^* \tilde{\alpha}_0 + \tilde{\alpha}_0 \tilde{\alpha}_0^* = 0 . \quad (3.26)$$

Por tanto,  $\hat{b}(\tilde{\alpha}_0) |\psi(0)\rangle = (a - \tilde{\alpha}_0) |\psi(0)\rangle = 0$  y entonces

$$a |\psi(0)\rangle = \tilde{\alpha}_0 |\psi(0)\rangle . \quad (3.27)$$

Llegamos a la conclusión de que el estado buscado verifica una ecuación de valores propios, en la que  $|\psi(0)\rangle$  es un autovector del operador de destrucción  $a$  con autovalor  $\tilde{\alpha}_0$ , un parámetro complejo que recoge la información de la dinámica clásica del sistema. Podemos generalizar este resultado para el estado a cualquier valor de  $t$ ,  $|\psi(t)\rangle$ , sin mayor dificultad que tomar como autovalor  $\tilde{\alpha}$ . Por último, y en consonancia con lo dicho anteriormente, reescribimos 3.27 a cualquier tiempo de la forma:

$$a|\alpha\rangle = \tilde{\alpha}|\alpha\rangle, \quad (3.28)$$

con lo que a partir de ahora identificaremos como  $\{|\alpha\rangle\}$  a los estados coherentes del oscilador armónico.

### 3.2 Características de los estados coherentes

De aquí en adelante nos ceñiremos, en gran medida, a la obra de *E. Martín Fierro* [4]. La definición vista para los estados coherentes presenta el inconveniente de que, como refleja 3.12, la energía clásica depende del parámetro de origen cuántico  $\hbar$ . Podemos evitarlo redefiniendo  $\tilde{\alpha} = \hbar^{-1/2}\alpha$ , con lo que 3.28 queda de la forma:

$$a|\alpha\rangle = \hbar^{-1/2}\alpha|\alpha\rangle. \quad (3.29)$$

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

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2\hbar} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{\hbar^n n!}} |n\rangle \quad (3.30)$$

$$\langle\alpha| = e^{-|\alpha|^2/2\hbar} \sum_n \frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{\hbar^n n!}} \langle n|, \quad (3.31)$$

para lo que se ha establecido una relación de recurrencia a partir de las actuaciones de los operadores de creación y destrucción sobre dichos estados,  $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$  y  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ , respectivamente.

Vemos a continuación una serie de características de especial interés de los estados coherentes.

El operador desplazamiento  $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$

Los estados coherentes pueden construirse mediante la aplicación de un operador denominado *operador desplazamiento*,  $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$ , al estado fundamental del oscilador armónico  $|0\rangle$ . Se define:

$$\hat{D}(\alpha, \alpha^*) \equiv e^{\hbar^{-1/2}(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)} = e^{\tilde{\alpha} a^\dagger - \tilde{\alpha}^* a}, \quad (3.32)$$

de la que se comprueba que  $\hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*) = \hat{D}(-\alpha, -\alpha^*) = \hat{D}^{-1}(\alpha, \alpha^*)$  y por tanto se trata de un operador unitario.

La *relación Baker-Campbell-Hausdorff (BCH)* establece que para dos operadores  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$  que no conmutan y cumplen la relación  $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$  se verifica que

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} . \quad (3.33)$$

Esta identidad nos permite reescribir el producto de exponenciales de la ecuación 3.32 como:

$$\hat{D}(\alpha, \alpha^*) = e^{-|\tilde{\alpha}|^2/2} e^{\tilde{\alpha}^* a} e^{-\tilde{\alpha} a^\dagger} = e^{|\tilde{\alpha}|^2/2} e^{-\tilde{\alpha}^* a} e^{\tilde{\alpha} a^\dagger} . \quad (3.34)$$

Si tenemos en cuenta que un estado de Fock puede obtenerse por aplicación sucesiva del operador de creación  $a^\dagger$  al estado fundamental  $|0\rangle$  según

$$|n\rangle = \frac{a^{\dagger n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (3.35)$$

e introducimos esta expresión en 3.30, se comprueba que efectivamente:

$$|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha, \alpha^*) |0\rangle . \quad (3.36)$$

### El producto escalar. Relación de cierre

Los estados coherentes no son ortogonales. El producto escalar de dos de tales estados puede obtenerse de forma inmediata de las expresiones 3.30 y 3.31, habida cuenta de la ortonormalidad de los estados  $|n\rangle$ , y su valor es

$$\langle\alpha|\beta\rangle = e^{-\frac{1}{2\hbar}(|\alpha|^2+|\beta|^2)+\frac{1}{\hbar}\alpha^*\beta} . \quad (3.37)$$

El módulo de este producto escalar viene dado por  $|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 = e^{-\frac{1}{\hbar}|\alpha-\beta|^2}$ , lo que prueba que dos estados coherentes  $|\alpha\rangle$  y  $|\beta\rangle$  tienden a ser aproximadamente ortogonales en el límite  $|\alpha-\beta| \gg 1$ .

No obstante, los estados coherentes constituyen una *base sobrecompleta* del espacio de Hilbert, cumpliendo la relación de cierre

$$\int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \langle\alpha| = \mathbf{1} \quad ; \quad d^2\alpha \equiv d(Re \alpha)d(Im \alpha) , \quad (3.38)$$

para la que hemos definido el elemento de volumen (real). Este resultado que puede probarse sustituyendo  $|\alpha\rangle$  y  $\langle\alpha|$  por sus expresiones asociadas 3.30 y 3.31, respectivamente, y efectuando la integral en el plano complejo en coordenadas polares. Como consecuencia del mismo, cualquier estado coherente puede desarrollarse en términos de los otros:

$$|\alpha\rangle = \int \int \frac{d^2\alpha'}{\pi\hbar} |\alpha'\rangle \langle\alpha'|\alpha\rangle = \int \int \frac{d^2\alpha'}{\pi\hbar} |\alpha'\rangle e^{-\frac{1}{2\hbar}(|\alpha|^2+|\alpha'|^2)+\frac{1}{\hbar}\alpha'^*\alpha} . \quad (3.39)$$

### Valores medios y desviaciones cuadráticas

Calculemos los valores medios y las desviaciones cuadráticas medias de posición, momento y energía de nuestro sistema en un estado coherente  $|\alpha\rangle$  para el límite semiclásico  $\hbar \rightarrow 0$  ( $|\alpha| \gg 1$ ).

Comenzando por la energía, en virtud de 3.15 y considerando 3.29 es inmediato llegar a los resultados:

$$\langle\hat{H}\rangle_\alpha \equiv \langle\alpha|\hat{H}|\alpha\rangle = \omega \left( |\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right) \simeq \omega |\alpha|^2 \quad (3.40)$$

$$(\Delta\hat{H}_\alpha)^2 \equiv \langle\hat{H}^2\rangle_\alpha - \langle\hat{H}\rangle_\alpha^2 = \omega^2 |\alpha|^2 . \quad (3.41)$$

Nótese que que  $\frac{\Delta\hat{H}_\alpha}{\langle\hat{H}\rangle_\alpha} \simeq \frac{1}{|\alpha|} \ll 1$ , por lo que el valor relativo de la energía está muy bien definido. Si de la misma manera empleamos las relaciones 3.13 y 3.14 para la posición y el momento, respectivamente, concluimos que

$$(\Delta\hat{q}_\alpha)^2 \equiv \langle\hat{q}^2\rangle_\alpha - \langle\hat{q}\rangle_\alpha^2 = \frac{\hbar}{2} \quad (3.42)$$

$$(\Delta\hat{p}_\alpha)^2 \equiv \langle\hat{p}^2\rangle_\alpha - \langle\hat{p}\rangle_\alpha^2 = \frac{\hbar}{2}, \quad (3.43)$$

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  $|\alpha\rangle$ :

$$\langle\hat{q}\rangle_\alpha \equiv \langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle = q_\alpha ; \quad q_\alpha \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha^* + \alpha) \quad (3.44)$$

$$\langle\hat{p}\rangle_\alpha \equiv \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = p_\alpha ; \quad p_\alpha \equiv \frac{i}{\sqrt{2}}(\alpha^* - \alpha). \quad (3.45)$$

Entonces, el producto de las desviaciones cuadráticas medias de  $\hat{q}$  y  $\hat{p}$  resulta

$$\Delta\hat{q}_\alpha\Delta\hat{p}_\alpha = \frac{\hbar}{2}, \quad (3.46)$$

que es el mínimo valor permitido por el principio de indeterminación de Heisenberg. Es por ello por lo que los estados coherentes son conocidos también como *estados de mínima incertidumbre* (véase la figura 2).

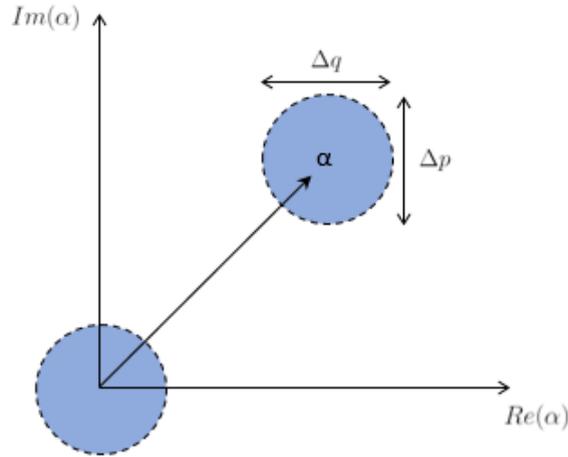


Figura 2: Círculo de incertidumbre para un estado coherente  $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)|0\rangle$ , obtenido desplazando el círculo de incertidumbre asociado al estado de vacío  $|0\rangle$  una magnitud  $\alpha$ .

La función de onda  $\Psi_\alpha(x,t)$

De acuerdo con 3.46, la función de onda asociada a un estado coherente  $|\alpha\rangle$  en la representación de coordenadas es un paquete gaussiano, que puede obtenerse a partir del estado fundamental  $\phi_0(x)$  del oscilador armónico:

$$\Psi_\alpha(x) = \langle x|\hat{D}(\alpha, \alpha^*)|0\rangle = \phi_0(q - \langle\hat{q}\rangle_\alpha)e^{\frac{i}{\hbar}\langle\hat{p}\rangle_\alpha x}e^{i\theta_\alpha}, \quad (3.47)$$

donde  $e^{i\theta_\alpha} = e^{(\alpha^{*2} - \alpha^2)/4} = e^{-\frac{i}{2\hbar} q_\alpha p_\alpha}$  es un factor de fase global. Nótese que simplemente hemos efectuado una traslación de la variable  $x$  una cantidad  $\langle \hat{q} \rangle_\alpha$  y un producto por la exponencial  $e^{\frac{i}{\hbar} \langle \hat{p} \rangle_\alpha x}$ . Explicitando  $\phi_0(x)$  obtenemos:

$$\Psi_\alpha(x) = \frac{1}{(2\pi(\Delta\hat{q}_\alpha)^2)^{1/4}} e^{-\left(\frac{x - \langle \hat{q} \rangle_\alpha}{2\Delta\hat{q}_\alpha}\right)^2 + \frac{i}{\hbar} \langle \hat{p} \rangle_\alpha x + i\theta_\alpha} = \frac{1}{(\pi\hbar)^{1/4}} e^{-\frac{1}{2\hbar}(x - q_\alpha)^2 + \frac{i}{\hbar} p_\alpha x - \frac{i}{2\hbar} q_\alpha p_\alpha}, \quad (3.48)$$

una función que se corresponde con un paquete gaussiano centrado en  $\langle \hat{q} \rangle_\alpha = q_\alpha$ , modulado por la onda plana  $e^{\frac{i}{\hbar} \langle \hat{p} \rangle_\alpha x} = e^{\frac{i}{\hbar} p_\alpha x}$ .

La evolución temporal de un estado coherente  $|\alpha_0\rangle$  del oscilador armónico 3.15 viene dada por

$$\begin{aligned} |\alpha(t)\rangle &= e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\alpha_0\rangle = e^{-|\alpha_0|^2/2\hbar} \sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{\hbar^n n!}} e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2} e^{-|\alpha_0|^2/2\hbar} \sum_n \frac{\alpha_0^n e^{-in\omega t}}{\sqrt{\hbar^n n!}} |n\rangle \equiv e^{-i\omega t/2} |\alpha_0 e^{-i\omega t}\rangle, \end{aligned} \quad (3.49)$$

para lo que se ha usado la ecuación 3.30. Vemos que la evolución temporal de un estado coherente sigue siendo otro estado coherente. Con ello, los valores medios de  $\hat{q}$  y  $\hat{p}$  en el estado  $|\alpha(t)\rangle$  son:

$$\langle \hat{q} \rangle_\alpha = \sqrt{2} \operatorname{Re} (\alpha_0 e^{-i\omega t}) = q_0 \cos(\omega t) + p_0 \operatorname{sen}(\omega t) \quad (3.50)$$

$$\langle \hat{p} \rangle_\alpha = \sqrt{2} \operatorname{Im} (\alpha_0 e^{-i\omega t}) = p_0 \cos(\omega t) - q_0 \operatorname{sen}(\omega t). \quad (3.51)$$

Estos resultados son claramente similares a los obtenidos al integrar las ecuaciones 3.7 para las variables clásicas de posición y momento. Por otro lado, las desviaciones cuadráticas medias de dichos observables son independientes del tiempo ( $\Delta\hat{q} = \Delta\hat{p} = \sqrt{\hbar/2}$ ), lo que se traduce en que la anchura del paquete gaussiano no varía. La función de onda en cualquier instante

$$\Psi_\alpha(x, t) = \frac{1}{(\pi\hbar)^{1/4}} e^{-i\omega t/2} e^{-\left(\frac{x - \langle \hat{q} \rangle_{\alpha t}}{2\Delta\hat{q}_\alpha}\right)^2 + \frac{i}{\hbar} \langle \hat{p} \rangle_{\alpha t} x + i\theta_{\alpha t}} \quad (3.52)$$

mantiene la forma gaussina, dado que

$$|\Psi_\alpha(x, t)|^2 = |\phi_\alpha(x - \langle \hat{q} \rangle_{\alpha t})|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x - \langle \hat{q} \rangle_{\alpha t}}{\Delta\hat{q}_\alpha}\right)^2}. \quad (3.53)$$

A modo de recopilación de lo visto en este apartado, recalamos que los estados coherentes son estados cuánticos de mínima incertidumbre cuya evolución sigue la dinámica clásica del oscilador armónico. Además, dada la igualdad y constancia de las desviaciones cuadráticas medias  $\Delta\hat{q}$  y  $\Delta\hat{p}$ , el paquete de ondas no se deforma a lo largo de dicha evolución. Por estos motivos los estados coherentes suelen ser llamados *estados cuasiclásicos*.

En nuestro límite  $\hbar \rightarrow 0$ , escogiendo un valor  $|\alpha| \gg 1$ , obtenemos una dinámica cuántica para la que energía, posición y momento están tan bien definidas como se quiera. Bajo esas circunstancias, un estado coherente  $|\alpha\rangle$  describe de forma bastante exacta la dinámica clásica del oscilador armónico macroscópico, para el que la energía, posición y momento pueden ser consideradas magnitudes clásicas.

### 3.3 Estructura algebraica

Presentamos a continuación propiedades geométricas de los estados coherentes que permiten, en el espacio de Hilbert, el desarrollo de cualquier estado u operador en función de ellos en la base de estados coherentes. Definiremos asimismo el  $\mathcal{D}$ -álgebra, una correspondencia entre operadores cuánticos y formas diferenciales. También justificaremos la introducción de los estados coherentes no normalizados o *estados de Bargmann*, que serán de vital importancia en la sección 4.

#### 3.3.1 Propiedades geométricas. Desarrollos en el espacio de Hilbert

La definición 3.36 establece una correspondencia biunívoca entre los estados coherentes  $|\alpha\rangle$  y los puntos del plano complejo  $\alpha$ . Esta aplicación es continua, esto es, para un  $\epsilon$  dado  $\exists \delta / ||\alpha\rangle - |\alpha'\rangle| < \delta$  si  $|\alpha - \alpha'| < \epsilon$ .

El espacio en el que actúa el operador  $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$  es un espacio complejo que presenta una *estructura simpléctica*, la cual proporciona un espacio de fases para un sistema mecánico hamiltoniano. Esto tiene consecuencias muy importantes, como la conservación del volumen en el espacio fásico (teorema de Liouville).

Las precedentes propiedades geométricas, junto con la propiedad de sobrecompletitud 3.38, permiten desarrollar cualquier estado  $|\Psi\rangle$  en función de los estados coherentes. En la base de estados de Fock se tiene que

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n c_n \frac{a^{\dagger n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad (3.54)$$

con  $\sum_n |c_n|^2 = 1$ , lo que permite definir una función compleja  $f(z)$ :

$$f(z) = \sum_n c_n \frac{z^n}{\sqrt{\hbar^n n!}}. \quad (3.55)$$

La condición de normalización para los coeficientes  $c_n$  garantiza que la función  $f(z)$  es analítica para todo el plano complejo  $z$ . Proyectando la ecuación 3.54 sobre la base de estados coherentes:

$$\langle \alpha | \Psi \rangle = \sum_n c_n \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{\hbar^n n!}} \langle \alpha | 0 \rangle \equiv e^{-|\alpha|^2/2\hbar} f(\alpha^*), \quad (3.56)$$

para lo que se ha usado la expresión 3.31. Considerando esto, el desarrollo del vector de estado en la base de estados coherentes resulta:

$$|\Psi\rangle = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} |\alpha\rangle \langle \alpha | \Psi \rangle \equiv \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{-|\alpha|^2/2\hbar} f(\alpha^*) |\alpha\rangle, \quad (3.57)$$

por lo que existe una correspondencia única entre las funciones  $f(\alpha^*)$ , que juegan el papel de amplitudes de desarrollo, y los vectores de estado  $|\Psi\rangle$ .

Sea  $\hat{A}$  un operador genérico, que en la base de estados de Fock puede expresarse en términos de sus elementos de matriz  $A_{nm} = \langle n | \hat{A} | m \rangle$ :

$$\hat{A} = \sum_{nm} |n\rangle \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | = \sum_{nm} A_{nm} \frac{1}{\sqrt{n!m!}} a^{\dagger n} |0\rangle \langle 0 | a^m. \quad (3.58)$$

Utilizando esta expresión para calcular el elemento de matriz que conecta los estados coherentes  $|\alpha\rangle$  y  $|\beta\rangle$  se tiene que

$$\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle = \sum_{nm} A_{nm} \frac{\alpha^{*n}\beta^m}{\sqrt{\hbar^{(n+m)}n!m!}} \langle\alpha|0\rangle \langle 0|\beta\rangle \equiv \mathcal{A}(\alpha^*, \beta) e^{-\frac{1}{2\hbar}(|\alpha|^2+|\beta|^2)} , \quad (3.59)$$

donde

$$\mathcal{A}(\alpha^*, \beta) = \sum_{nm} A_{nm} \frac{\alpha^{*n}\beta^m}{\sqrt{\hbar^{(n+m)}n!m!}} , \quad (3.60)$$

que converge en los planos complejos  $\alpha^*$  y  $\beta$  y por tanto es una función analítica de ambas variables. Esta función determina de forma completa el desarrollo buscado, que puede escribirse como

$$\hat{A} = \int \int \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} e^{-\frac{1}{2\hbar}(|\alpha|^2+|\beta|^2)} |\alpha\rangle \mathcal{A}(\alpha^*, \beta) \langle\beta| . \quad (3.61)$$

Reparemos ahora en la relación 3.36, según la cual, teniendo en cuenta que  $\hat{D}(\alpha, \alpha^*)$  es unitario,  $\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle 0|\hat{D}^\dagger(\alpha, \alpha^*)\hat{D}(\alpha, \alpha^*)|0\rangle = \langle 0|0\rangle = 1$  y por tanto los estados coherentes están normalizados. Esto da pie a introducir los estados coherentes no normalizados o *estados de Bargmann* mediante la definición

$$|\alpha\rangle \equiv e^{\frac{|\alpha|^2}{2\hbar}} |\alpha\rangle . \quad (3.62)$$

Teniendo en cuenta 3.62 y 3.36 se consigue la siguiente relación, que posibilita también su obtención a partir del estado fundamental del oscilador armónico:

$$|\alpha\rangle = e^{-\hbar^{-1/2}\alpha\alpha^\dagger} |0\rangle . \quad (3.63)$$

El producto escalar de dos de estos estados puede obtenerse a partir de 3.37 y resulta:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = e^{\frac{1}{\hbar}\alpha^*\beta} . \quad (3.64)$$

Podemos obtener desarrollos para un estado  $|\Psi\rangle$  o un operador  $\hat{A}$  en la base de estados de Bargmann, análogos a 3.57 y 3.61:

$$|\Psi\rangle = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{-\frac{1}{\hbar}|\alpha|^2} f(\alpha^*) |\alpha\rangle , \quad (3.65)$$

$$\hat{A} = \int \int \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} \frac{d^2\beta}{\pi\hbar} e^{-\frac{1}{\hbar}(|\alpha|^2+|\beta|^2)} |\alpha\rangle \mathcal{A}(\alpha^*, \beta) \langle\beta| ; \quad \mathcal{A}(\alpha^*, \beta) = \langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle . \quad (3.66)$$

Obsérvese que, según la definición 3.62, las amplitudes de desarrollo  $f(\alpha^*)$  y  $\mathcal{A}(\alpha^*, \beta)$  son exactamente las mismas que calculamos para los estados coherentes normalizados. Será la representación de estados de Bargmann  $\{|\alpha\rangle\}$  la que utilizaremos para obtener nuestras expresiones semiclásicas de las magnitudes cuánticas. Enseguida veremos por qué.

### 3.3.2 $\mathcal{D}$ -álgebra

Volvamos nuevamente a la expresión 3.36 y explicitemos en ella la expresión del operador desplazamiento 3.34:

$$|\alpha\rangle = e^{|\tilde{\alpha}|^2/2} e^{-\tilde{\alpha}^* a} e^{\tilde{\alpha} a^\dagger} |0\rangle = e^{|\tilde{\alpha}|^2/2} e^{\tilde{\alpha} a^\dagger} |0\rangle, \quad (3.67)$$

ya que  $e^{-\tilde{\alpha}^* a} |0\rangle = |0\rangle$ . Derivemos parcialmente esta expresión respecto del parámetro  $\alpha$ :

$$\frac{\partial |\alpha\rangle}{\partial \alpha} = \left( \frac{1}{2\hbar} \alpha^* + \frac{1}{\hbar^{-1/2}} a^\dagger \right) \Rightarrow a^\dagger |\alpha\rangle = \hbar^{-1/2} \left( \frac{\alpha^*}{2} + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) |\alpha\rangle, \quad (3.68)$$

de donde vemos que podemos asociar a  $a^\dagger$  una expresión diferencial. Precisamente este es uno de los aspectos más interesantes de los estados coherentes: la posibilidad de transformar las ecuaciones para operadores en ecuaciones diferenciales para números complejos. Según la ecuación de valores propios 3.29 y 3.68, la actuación de  $a$  y  $a^\dagger$  sobre los estados coherentes:

$$a |\alpha\rangle = \hbar^{-1/2} \alpha |\alpha\rangle \quad ; \quad \langle \alpha | a^\dagger = \hbar^{-1/2} \alpha^* \langle \alpha | \quad (3.69)$$

$$a^\dagger |\alpha\rangle = \hbar^{-1/2} \left( \frac{\alpha^*}{2} + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) |\alpha\rangle \quad ; \quad \langle \alpha | a = \hbar^{-1/2} \left( \frac{\alpha}{2} + \hbar \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) \langle \alpha |, \quad (3.70)$$

permite definir el llamado  $\mathcal{D}$ -álgebra, que establece la correspondencia entre observables cuánticos y formas diferenciales de la que hablábamos antes, de manera que éstos actúan como operadores diferenciales en el espacio de estados coherentes.

Estas formas diferenciales se simplifican para los estados no normalizados que definimos en 3.62:

$$a |\alpha\rangle = \hbar^{-1/2} \alpha |\alpha\rangle \quad ; \quad \langle \alpha | a^\dagger = \hbar^{-1/2} \alpha^* \langle \alpha | \quad (3.71)$$

$$a^\dagger |\alpha\rangle = \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial \alpha} |\alpha\rangle \quad ; \quad \langle \alpha | a = \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \langle \alpha |, \quad (3.72)$$

donde se observa que  $a$  y  $a^\dagger$  presentan una relación de conjugación a la manera usual de la coordenada y el momento en Mecánica Cuántica. De ahí la idoneidad de trabajar en la representación de estados Bargmann.

## 4 Aproximaciones semiclásicas: la representación de Bargmann

En la sección anterior introdujimos los estados coherentes no normalizados o estados de Bargmann  $\{|\alpha\rangle\}$ , destacando que proporcionaban un formalismo especialmente interesante para el desarrollo de aproximaciones semiclásicas a la función de onda cuántica. Una de las razones por las que es ventajoso se basa en las propiedades geométricas del espacio de los parámetros  $(\alpha, \alpha^*)$  que caracterizan a un estado coherente, pues presenta una estructura simpléctica que actúa como un espacio de fases para el sistema. No obstante, la principal ventaja de la representación de Bargmann radica en sus propiedades de *analiticidad*, que iremos desgranando a lo largo de las siguientes partes de la sección.

La forma de proceder será identificable con la seguida en la sección 2. Propondremos un *ansatz* que constará igualmente de una amplitud y una fase, aunque en este caso serán funciones complejas. Su desarrollo en potencias de  $\hbar$  y posterior sustitución en la ecuación de Schrödinger (estacionaria o dependiente del tiempo, según el caso) nos conducirá a una jerarquía de ecuaciones para los distintos órdenes en  $\hbar$ , de las que emplearemos las dos de orden inferior.

Antes de entrar en materia conviene realizar ciertas puntualizaciones que nos serán de gran ayuda posteriormente. Hasta ahora, en este trabajo hemos empleado para el Hamiltoniano del oscilador armónico cuántico la definición 3.15. Sin embargo, esta definición resulta no ser única. La no conmutatividad de los operadores impide asignar a un Hamiltoniano clásico  $H$  un único operador cuántico  $\hat{H}$ . Existe toda una familia de Hamiltonianos cuánticos asociados a esta función, si bien las diferencias entre ellos desaparecen en el límite  $\hbar \rightarrow 0$ . Recíprocamente, para un Hamiltoniano cuántico existe también un conjunto de funciones clásicas asociadas.

De todos los Hamiltonianos cuánticos posibles nuestro interés se centrará, atendiendo a la ordenación de los operadores, en los tres siguientes:

- *Ordenación normal o de Wick*: Todos los operadores de aniquilación  $a$  se sitúan a la derecha de los operadores de creación  $a^\dagger$ . Le corresponde una función clásica que denominaremos símbolo Q del Hamiltoniano.
- *Ordenación antinormal*: Los operadores de creación  $a^\dagger$  se sitúan a la derecha de los operadores de aniquilación  $a$ . Se le asocia una función clásica que llamaremos símbolo P del Hamiltoniano.
- *Ordenación simétrica o de Weyl*: Se efectúa una simetrización de operadores de creación  $a^\dagger$  y aniquilación  $a$ . La función clásica correspondiente la etiquetaremos como símbolo W del Hamiltoniano.

La expresión del Hamiltoniano cuántico de una forma u otra es un procedimiento tedioso pero trivial que consiste en emplear la relación de conmutación  $[a, a^\dagger] = 1$  cuantas veces sea preciso para reordenar los operadores  $a$  y  $a^\dagger$  entre ellos. Dependiendo del problema a tratar será más adecuada una u otra forma. Nótese que, de acuerdo con la relación de conmutación anterior, el Hamiltoniano cuántico 3.15 se puede expresar como  $\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(a^\dagger a + a a^\dagger)$ , por lo que hemos venido trabajando con la combinación simetrizada.

## 4.1 La función de onda estacionaria

Partamos de la expresión para la función de onda en la representación de Bargmann de una dimensión

$$\Psi(\alpha^*) \equiv (\alpha | \Psi) = A(\alpha^*) e^{\frac{i}{\hbar} S(\alpha^*)} , \quad (4.1)$$

análoga a la de la teoría WKB, con la excepción de que en este caso amplitud y fase son funciones complejas. Podemos conseguir un desarrollo completo de la función de onda  $\Psi(\alpha^*)$  en potencias de  $\hbar$  mediante un desarrollo de  $A(\alpha^*)$  y  $S(\alpha^*)$  en potencias pares de dicho parámetro:

$$A(\alpha^*) = A^{(0)}(\alpha^*) + \hbar^2 A^{(2)}(\alpha^*) + \hbar^4 A^{(4)}(\alpha^*) + \dots \quad (4.2)$$

$$S(\alpha^*) = S^{(0)}(\alpha^*) + \hbar^2 S^{(2)}(\alpha^*) + \hbar^4 S^{(4)}(\alpha^*) + \dots \quad (4.3)$$

La ecuación de Schrödinger estacionaria proyectada sobre la base  $\{|\alpha\rangle\}$  se escribe

$$(\alpha | \hat{H} | \Psi) = E(\alpha | \Psi) . \quad (4.4)$$

Consideremos inicialmente Hamiltonianos con *ordenación normal o de Wick*, que pueden expresarse de forma genérica como

$$\hat{H}^N = \sum_{n,m} c_{nm} \hbar^{(n+m)/2} a^{\dagger n} a^m ; \quad c_{nm} \in \mathbb{R} . \quad (4.5)$$

Para los otros dos esquemas de ordenación el procedimiento es idéntico, por lo que desarrollaremos este caso y daremos las expresiones resultantes para los dos restantes al final. Si introducimos 4.5 en 4.4 y utilizamos la correspondencia entre los operadores  $a$  y  $a^\dagger$  y los operadores diferenciales dada por el *álgebra* 3.71 y 3.72, dicha ecuación se puede reescribir de la forma:

$$\sum_{n,m} c_{nm} \hbar^m \alpha^{*n} \frac{d^m}{d\alpha^{*m}} \Psi(\alpha^*) = E \Psi(\alpha^*) . \quad (4.6)$$

Explicitando la propuesta 4.1 para  $\Psi(\alpha^*)$  resulta

$$\sum_{n,m} c_{nm} \hbar^m \alpha^{*n} \frac{d^m}{d\alpha^{*m}} \left[ A(\alpha^*) e^{\frac{i}{\hbar} S(\alpha^*)} \right] = E \left[ A(\alpha^*) e^{\frac{i}{\hbar} S(\alpha^*)} \right] , \quad (4.7)$$

y sustituyendo los desarrollos 4.2 y 4.3 obtenemos la jerarquía de ecuaciones que adelantábamos al comienzo de la sección, si identificamos los distintos términos de un mismo orden en  $\hbar$ .

A orden  $\hbar^0$  en 4.7 se tiene la igualdad

$$\sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} \left( i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right)^m = E . \quad (4.8)$$

Definiendo la función clásica

$$\mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha^*, \alpha') \equiv \frac{(\alpha | \hat{H}^N | \alpha')}{(\alpha | \alpha')} = \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} \alpha'^m , \quad (4.9)$$

la ecuación 4.8 puede escribirse de la forma

$$\mathcal{H}_{\mathcal{Q}}\left(\alpha^*, i\frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*}\right) = E, \quad (4.10)$$

que inmediatamente reconocemos como la *ecuación de Hamilton-Jacobi estacionaria* para la acción  $S^{(0)}(\alpha^*)$ . Si definimos la variable compleja  $\gamma$  como

$$\gamma \equiv i\frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*}, \quad (4.11)$$

la ecuación de Hamilton-Jacobi queda de la siguiente manera:

$$\sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} \gamma^m = E, \quad (4.12)$$

por lo que implícitamente  $\gamma$  está definida como una función (en general multivaluada) de la variable  $\alpha^*$  y la energía  $E$ . Tomando en cuenta 4.11 y 4.12,  $S^{(0)}(\alpha^*)$  puede obtenerse mediante la integral

$$S^{(0)}(\alpha^*) = -i \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha^{*'}) d\alpha^{*'} . \quad (4.13)$$

Si quisiéramos que la acción estuviera bien definida, la integral debería ser independiente del camino de integración escogido en el plano complejo para conectar un punto inicial arbitrario con el punto  $\alpha^*$ . Entonces, según el *teorema de Cauchy-Goursat* (véase *S. Ponnusamy & H. Silverman* [5]), la función  $\gamma_E(\alpha^*)$  tendría que ser analítica. Sin embargo, lo que haremos será imponer la condición de analiticidad al global de la función de onda, una vez hayamos calculado también el término de amplitud. De esta manera, puede darse el caso (habitual) de que  $\gamma_E(\alpha^*)$  sea multivaluada mientras que al conjunto de la función de onda se le exige que sea analítica y por tanto univaluada (como debe ser). Esta restricción determina las condiciones de cuantización de nuestro sistema, cuestión que trataremos posteriormente.

Abordemos a continuación la ecuación que resulta de identificar los términos de orden  $\hbar$  en 4.7:

$$\begin{aligned} & \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} \left\{ m \frac{dA^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \left( i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right)^{m-1} \right. \\ & \left. + \frac{m(m-1)}{2} A^{(0)}(\alpha^*) i \frac{d^2 S^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^{*2}} \left( i \frac{dS^{(0)}(\alpha^*)}{d\alpha^*} \right)^{m-2} \right\} = 0 . \end{aligned} \quad (4.14)$$

Si multiplicamos ambos miembros por  $2A^{(0)}(\alpha^*)$  y definimos

$$\rho(\alpha^*) \equiv A^{(0)2}(\alpha^*), \quad (4.15)$$

en virtud de las ecuaciones 4.9 y 4.11 se tiene:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} m \frac{d\rho(\alpha^*)}{d\alpha^*} \gamma^{m-1} + \sum_{n,m} c_{nm} \alpha^{*n} m(m-1) \rho(\alpha^*) \frac{d\gamma}{d\alpha^*} \gamma^{m-2} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \frac{d}{d\alpha^*} [m\gamma^{m-1} \alpha^{*n} \rho(\alpha^*)] - \sum_{n,m} c_{nm} m\gamma^{m-1} n \alpha^{*n-1} \rho(\alpha^*) \\ &= \frac{d}{d\alpha^*} \left[ \frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma} \Big|_{\alpha^*} \rho(\alpha^*) \right] - \frac{\partial^2 \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \alpha^{*2} \partial \gamma} \rho(\alpha^*) . \end{aligned} \quad (4.16)$$

Excepto por el último término de la derecha, se tiene la ecuación de continuidad para un fluido de densidad  $\rho(\alpha^*)$  en régimen estacionario. Si redefinimos la función  $\rho(\alpha^*)$  como

$$\rho(\alpha^*) \equiv \frac{c}{\frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}} e^{i\phi(\alpha^*)} ; \quad c \in \mathbb{C} \quad (4.17)$$

y la introducimos en 4.16 obtenemos una ecuación diferencial para la fase  $\phi(\alpha^*)$ :

$$\frac{d\phi(\alpha^*)}{d\alpha^*} = -i \frac{\partial^2 \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \alpha^* \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}}, \quad (4.18)$$

que al integrarla lleva a la expresión para  $\rho(\alpha^*)$  siguiente:

$$\rho(\alpha^*) = \frac{c'}{\frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}} e^{\int^{\alpha^*} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha', \gamma)}{\partial \alpha' \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha', \gamma)}{\partial \gamma}} d\alpha'}. \quad (4.19)$$

Por lo tanto, según 4.15, la amplitud de nuestra función de onda vendrá dada por

$$A^{(0)}(\alpha^*) = \frac{c''}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{2} \int^{\alpha^*} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha', \gamma)}{\partial \alpha' \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha', \gamma)}{\partial \gamma}} d\alpha'}. \quad (4.20)$$

Nótese que no hemos puesto especial atención a las distintas constantes de integración, dado que pueden ir siendo incorporadas a una constante genérica  $\mathcal{N}$  que será fijada normalizando la función de onda  $\Psi(\alpha^*)$ .

Las expresiones para la fase  $S^{(0)}(\alpha^*)$  y la amplitud  $A^{(0)}(\alpha^*)$  dadas por 4.13 y 4.20, respectivamente, permiten expresar la aproximación a la función de onda en la representación de Bargmann buscada:

$$\begin{aligned} \Psi(\alpha^*) &\simeq A^{(0)}(\alpha^*) e^{\frac{i}{\hbar} S^{(0)}(\alpha^*)} \\ &= \frac{\mathcal{N}}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{2} \int^{\alpha^*} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha', \gamma)}{\partial \alpha' \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\alpha', \gamma)}{\partial \gamma}} d\alpha'} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha') d\alpha'}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

con  $\mathcal{N}$  una constante de normalización. Observamos que fundamentalmente tenemos integrales en el plano complejo de funciones de un parámetro ( $\alpha^*$ ) que recoge la información de la dinámica clásica, mientras que el único rastro que queda de la Mecánica Cuántica es el factor  $\hbar$ , para el que trabajamos en el límite  $\hbar \rightarrow 0$ .

Para las otras dos ordenaciones del Hamiltoniano cuántico (antinormal y simétrica) el procedimiento para la obtención de la aproximación a la función de onda es totalmente análogo. Indicamos la forma genérica de estos dos operadores y sus funciones clásicas asociadas, para luego mostrar el resultado para la función de onda  $\Psi(\alpha^*)$  al que conducen en cada caso:

$$\hat{H}^A = \sum_{n,m} b_{nm} \hbar^{(n+m)/2} a^n a^{\dagger m} ; \quad b_{nm} \in \mathbb{R} \quad \rightarrow \quad \mathcal{H}_{\mathcal{P}}(\alpha^*, \alpha') = \frac{(\alpha | \hat{H}^A | \alpha')}{(\alpha | \alpha')} \quad (4.22)$$

$$\hat{H}^S = \sum_{n,m} d_{nm} \mathcal{S} \{ \hat{p}^n \hat{q}^m \} ; d_{nm} \in \mathbb{R} \quad \rightarrow \quad \mathcal{H}_W(\alpha^*, \alpha') = \frac{(\alpha | \hat{H}^S | \alpha')}{(\alpha | \alpha')} \quad (4.23)$$

donde  $\mathcal{S}$  denota la ordenación de Weyl (recuérdense las definiciones de los operadores de posición y momento en función de los operadores de creación y destrucción dadas por 3.13 y 3.14). La función de onda  $\Psi(\alpha^*)$  para los Hamiltonianos 4.5, 4.22 y 4.23 puede condensarse en una única expresión:

$$\Psi(\alpha^*) \simeq \frac{\mathcal{N}}{\left( \frac{\partial \mathcal{H}_x(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma} \right)^{1/2}} e^{\frac{\kappa}{2} \int^{\alpha^*} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_x(\alpha', \gamma)}{\partial \alpha'^2 \partial \gamma} \frac{1}{\frac{\partial \mathcal{H}_x(\alpha', \gamma)}{\partial \gamma}} d\alpha'} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha') d\alpha'} \quad (4.24)$$

donde el subíndice  $x$  denota los posibles símbolos  $\mathcal{Q}$ ,  $\mathcal{P}$  o  $\mathcal{W}$  asociados al operador Hamiltoniano, y la constante  $\kappa$  toma los valores:

$$\kappa = \begin{cases} 1 & \text{si } x = \mathcal{Q} \\ 0 & \text{si } x = \mathcal{W} \\ -1 & \text{si } x = \mathcal{P} . \end{cases} \quad (4.25)$$

La ecuación 4.24 es una expresión asintótica para la función de onda válida para los tres esquemas de ordenación vistos, siempre que se empleen adecuadamente los símbolos  $\mathcal{Q}$ ,  $\mathcal{P}$  y  $\mathcal{W}$ , con  $\kappa$  dada por 4.25.

Ahora lo que procede es discutir qué validez tienen las expresiones recién halladas, así como la problemática que pueden presentar. Iremos estableciendo también una comparativa con los resultados obtenidos en la sección 2 para la representación de la coordenada.

En primer lugar, es claro que esta función de onda debe ser diferenciable, y por tanto tiene que ser analítica. Atendamos ahora a la expresión 4.24. Los argumentos de las dos integrales que aparecen en dicha expresión pueden ser funciones multivaluadas, y así como el factor raíz cuadrada en la amplitud, pueden contribuir a dar una función de onda multivaluada. Por supuesto esto es físicamente inaceptable, y tendremos que exigir que sea univaluada. En ocasiones será suficiente con la condición de analiticidad, pero habrá otros casos en los que, dada la complejidad de las singularidades de las distintas funciones (polos, ramas, etc.) que aparecen en la expresión, requiramos procedimientos adicionales, a los que haremos referencia un poco más adelante. Para ilustrar esta discusión vamos a considerar la aproximación global para un Hamiltoniano simétrico, dada según 4.24 y 4.25 por

$$\Psi(\alpha^*) \simeq \frac{\mathcal{N}}{\left( \frac{\partial \mathcal{H}_W(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma} \right)^{1/2}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha') d\alpha'} , \quad (4.26)$$

en la que la desaparición del término integral central simplifica un poco las explicaciones. Para los otros esquemas de ordenación la idea es la misma, lo único que ocurrirá es que la función de onda tendrá una contribución más proveniente de dicho término.

Si la función  $\gamma_E(\alpha^*)$  es univaluada, entonces la función de onda queda bien definida con la condición de analiticidad. Esto pone de manifiesto la utilidad de emplear las ideas de la teoría WKB al formalismo de estados de Bargmann. Con la generalización al plano complejo, las aproximaciones a la función de onda  $\Psi(\alpha^*)$  son *globales y uniformes*, mientras que en la representación de la coordenada, según vimos en la parte 2.1 de la segunda sección, es preciso recurrir a procedimientos extra de ajuste en los puntos de retroceso (las denominadas fórmulas de conexión).

Sin embargo, lo más habitual es que la función  $\gamma_E(\alpha^*)$  sea multivaluada y presente singularidades, en particular ramas. La aproximación semiclásica falla en los puntos de rama, por lo que serán necesarios mecanismos de ajuste, que en todo caso aparecen de forma natural por el hecho de estar trabajando en el plano complejo, y no como extensiones heterodoxas según vimos para la representación de la coordenada.

Para un sistema ligado en el que  $\gamma_E(\alpha^*)$  presente singularidades limitadas, tales como un polo simple o dos puntos de rama, 4.26 debe ser univaluada con independencia del camino de integración elegido para evaluar la acción. Es decir, la función de onda  $\Psi(\alpha^*)$  resultante de efectuar dicha integral desde un punto inicial  $\alpha_0^*$  hasta  $\alpha^*$  a lo largo de un cierto camino  $\mathcal{C}_1$  debe ser idéntica a la obtenida al calcular la integral a lo largo de otro camino  $\mathcal{C}_2$ . Para que  $\Psi(\alpha^*)$  permanezca univaluada cuando se efectúa una vuelta a lo largo de la curva cerrada  $\mathcal{C}$  formada por  $\mathcal{C}_1$  y  $\mathcal{C}_2$ , es preciso que este circuito cerrado encierre las singularidades de  $\gamma_E(\alpha^*)$ . Además, deben considerarse los cambios de signo que puede sufrir el prefactor de amplitud (término de raíz cuadrada) a lo largo de este camino, de forma que la condición de analiticidad para la función 4.26 será:

$$\frac{1}{\hbar} \oint_{\mathcal{C}} \gamma_E(\alpha^*) d\alpha^* - i\nu\pi = 2\pi in \quad ; \quad n \in \mathbb{Z} . \quad (4.27)$$

El parámetro  $\nu$ , conocido como *winding number* (número de rotaciones o vueltas) es un parámetro topológico que da cuenta de los cambios de signo del gradiente  $\partial\mathcal{H}_W/\partial\gamma_E$  a lo largo de  $\mathcal{C}$ , y depende en cada caso de la geometría del sistema. La condición 4.27 puede escribirse como

$$S \equiv -i \oint_{\mathcal{C}} \gamma_{E_n}(\alpha^*) d\alpha^* = 2\pi\hbar \left( n + \frac{\nu}{2} \right) \quad ; \quad n \in \mathbb{Z} , \quad (4.28)$$

proporcionando los autovalores  $E_n$  siempre que la integral 4.28 pueda invertirse. Esta condición corresponde a la condición de cuantización WKB (que generaliza la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld 2.23) si identificamos el parámetro  $\nu$  con el índice de Maslov.

En conclusión, en sistemas ligados con singularidades limitadas la función de onda va a ser analítica sólo para determinados valores de la energía  $E$ . En 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 calculada será univaluada para cualquier valor de la energía  $E$ . En ambos casos, la función de onda  $\Psi(\alpha^*)$  estará definida unívocamente para todo el plano complejo de  $\alpha^*$ , excepto en los cortes de rama.

Para sistemas en los que  $\gamma_E(\alpha^*)$  posea una estructura de singularidades más compleja es imposible que la función de onda sea univaluada a partir de un único camino de integración.

En general, habrá que incluir una suma a las distintas ramas físicas del problema, de forma que la solución vendrá dada por una combinación lineal de soluciones tal que la función de onda  $\Psi(\alpha^*)$  resultante sea analítica. Las condiciones de contorno permitirán fijar los coeficientes de la combinación lineal, posibilitando recorrer las hojas de Riemann asociadas a las distintas ramas de la función. Con todo esto,

$$\Psi(\alpha^*) \simeq \sum_{\text{ramas}} \frac{\mathcal{N}}{\left(\frac{\partial \mathcal{H}_W(\alpha^*, \gamma)}{\partial \gamma}\right)^{1/2}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^{\alpha^*} \gamma_E(\alpha^{*'}) d\alpha^{*'}} . \quad (4.29)$$

La elección de todos estos caminos de integración posibles es difícil, por lo que la generalización de 4.26 para sistemas con mayor número de grados de libertad se complica considerablemente.

## 4.2 La función de onda dependiente del tiempo

Guiándonos por el artículo de *E. M. Fierro & J. M. Gómez Llorente* [6] estudiaremos el caso dependiente del tiempo para un sistema con  $d$  grados de libertad. La extensión del formalismo de estados coherentes y de Bargmann introducido en las subsecciones 3.2 y 3.3 a las  $d$ -dimensiones es totalmente directa, por lo que simplemente explicitaremos la adaptación de las definiciones que vayamos necesitando en nuestro desarrollo. Comencemos con la extensión de la expresión 3.63, que define los estados de Bargmann:

$$|\alpha\rangle = \prod_{n=1}^d e^{-\hbar^{-1/2} \alpha \mathbf{a}^\dagger} |0\rangle , \quad (4.30)$$

donde  $\alpha$  y su compleja conjugada  $\alpha^*$  son vectores con componentes complejas  $\alpha_n$  y  $\alpha_n^*$  respectivamente, y  $\mathbf{a}$  y  $\mathbf{a}^\dagger$  son vectores cuyas componentes son respectivamente los operadores  $a_n$  y  $a_n^\dagger$ .

La representación de Bargmann de un estado dado  $|\Psi\rangle$  perteneciente espacio de Hilbert viene definida por el producto escalar  $\Psi(\alpha^*) \equiv (\alpha |\Psi\rangle)$ , una función compleja analítica del conjunto de variables  $\{\alpha_n^*; n = 1, \dots, d\}$ .

Queremos obtener la solución a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (4.31)$$

para un estado de partida  $|\Psi(0)\rangle$  conocido. Al igual que en el caso estacionario, asumiremos primero que el Hamiltoniano cuántico  $\hat{H}(\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a})$  se obtiene como la forma normalmente ordenada del Hamiltoniano clásico  $H(\alpha^*, \alpha)$ , esto es:

$$\begin{aligned} \hat{H}^N(\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}) &= \widehat{\mathcal{N}}\{H(\alpha^*, \alpha)\} \\ &= \sum_{\{i_m, j_n; m, n=1, \dots, d\}} c_{\{i_m, j_n\}} \prod_{m=1}^d (\hbar^{1/2} a_m^\dagger)^{i_m} \prod_{n=1}^d (\hbar^{1/2} a_n)^{j_n} , \end{aligned} \quad (4.32)$$

donde  $\widehat{\mathcal{N}}$  es el *operador de ordenación normal*, que no definiremos de forma rigurosa pero cuya actuación consiste en reemplazar  $\alpha_n^*$  por  $\hbar^{1/2} a_n^\dagger$  y  $\alpha_n$  por  $\hbar^{1/2} a_n$ , con todos los

operadores  $a_n^\dagger$  a la izquierda de los operadores  $a_n$ . En este caso la función hamiltoniana clásica asociada (símbolo  $\mathcal{Q}$ ) se calcula de la forma:

$$\mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\alpha}) \equiv \frac{(\boldsymbol{\alpha} | \hat{H}^N | \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha} | \boldsymbol{\alpha})}. \quad (4.33)$$

Para proyectar la ecuación 4.31 sobre la representación  $\{|\boldsymbol{\alpha}\rangle\}$  necesitamos la extensión de las proyecciones a la izquierda del  $\mathcal{D}$ -álgebra 3.71 y 3.72, que proporciona una conexión entre operadores cuánticos y formas diferenciales a través de las nuevas relaciones

$$(\boldsymbol{\alpha} | a_n^\dagger = \hbar^{-1/2} \alpha_n^* (\boldsymbol{\alpha} | \ ; \ (\boldsymbol{\alpha} | a_n = \hbar^{1/2} \frac{\partial}{\partial \alpha_n^*} (\boldsymbol{\alpha} |. \quad (4.34)$$

Considerándolas, la proyección resulta:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\boldsymbol{\alpha}^*, t) &= \sum_{\{i_m, j_n; m, n=1, \dots, d\}} c_{\{i_m, j_n\}} \prod_{m=1}^d \alpha_m^{*i_m} \prod_{n=1}^d \hbar^{j_n} \frac{\partial}{\partial \alpha_n^{*j_n}} \Psi(\boldsymbol{\alpha}^*, t) \\ &\equiv \mathcal{H}_{\mathcal{Q}} \left( \boldsymbol{\alpha}^*, \hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\alpha}^*} \right) \Psi(\boldsymbol{\alpha}^*, t). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Para resolver esta ecuación diferencial utilizaremos un *ansatz* cuya forma, a estas alturas, nos resultará familiar:

$$\Psi(\boldsymbol{\alpha}^*, t) = A(\boldsymbol{\alpha}^*, t) e^{\frac{i}{\hbar} \Upsilon(\boldsymbol{\alpha}^*, t)}, \quad (4.36)$$

con  $A(\boldsymbol{\alpha}^*, t)$  y  $\Upsilon(\boldsymbol{\alpha}^*, t)$  funciones complejas que admiten expansiones en potencias pares de  $\hbar$ . Serán los términos de orden  $\mathcal{O}(1)$  de ambos desarrollos los que nos proporcionen la aproximación semiclásica a la función de onda  $\Psi(\boldsymbol{\alpha}^*, t)$ , como ocurría para la función de onda estacionaria. No obstante, para simplificar la notación, en este caso utilizaremos los mismos símbolos  $A$  y  $\Upsilon$  para referirnos a esos términos dominantes. Si identificamos los términos a orden más bajo en  $\hbar$  obtenemos la ecuación que permite determinar la fase:

$$\frac{\partial \Upsilon(\boldsymbol{\alpha}^*, t)}{\partial t} + \mathcal{H}_{\mathcal{Q}} \left( \boldsymbol{\alpha}^*, i \frac{\Upsilon(\boldsymbol{\alpha}^*, t)}{\partial \boldsymbol{\alpha}^*} \right) = 0. \quad (4.37)$$

Se trata de la ecuación de Hamilton-Jacobi, en la que la función  $\Upsilon(\boldsymbol{\alpha}^*, t)$  juega el papel de la acción clásica. Conocido el estado inicial  $\Psi(\boldsymbol{\alpha}^*, 0)$ , tenemos una expresión para  $\Upsilon(\boldsymbol{\alpha}^*, 0)$ . Por tanto, podemos encontrar la solución a la ecuación 4.37 que satisface esa condición de contorno mediante el método de las características, por integración a lo largo del camino  $\boldsymbol{\mu}_\tau^* = \boldsymbol{\mu}^*(\tau)$  desde el instante  $\tau = 0$  al instante  $\tau = t$ . Si definimos

$$\boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{\alpha}^*, \tau) = i \frac{\Upsilon(\boldsymbol{\alpha}^*, \tau)}{\partial \boldsymbol{\alpha}^*}, \quad (4.38)$$

este camino representa una trayectoria general compleja cuya solución es el sistema de ecuaciones diferenciales complejas de Hamilton

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\nu}}_\tau = -i \frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\boldsymbol{\mu}_\tau^*, \boldsymbol{\nu}_\tau)}{\partial \boldsymbol{\mu}_\tau^*} \\ \dot{\boldsymbol{\mu}}_\tau^* = i \frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{Q}}(\boldsymbol{\mu}_\tau^*, \boldsymbol{\nu}_\tau)}{\partial \boldsymbol{\nu}_\tau}, \end{cases} \quad (4.39)$$

donde  $\boldsymbol{\mu}^*$  y  $\boldsymbol{\nu}$  son consideradas como variables independientes. Las condiciones de contorno las obtenemos del valor de  $\boldsymbol{\alpha}^*$  en el que queremos calcular la función de onda a tiempo  $\tau = t$ , y de la acción inicial  $\Upsilon(\boldsymbol{\alpha}^*, 0)$ . En concreto estas dos condiciones están referidas al tiempo y vienen dadas por los dos conjuntos de ecuaciones siguientes:

$$\boldsymbol{\nu}_0 = i \frac{\Upsilon(\boldsymbol{\mu}_0^*, 0)}{\partial \boldsymbol{\mu}_0^*} \quad ; \quad \boldsymbol{\mu}_t^* = \boldsymbol{\alpha}^* . \quad (4.40)$$

A lo largo del conjunto de trayectorias  $(\boldsymbol{\mu}_\tau^*, \boldsymbol{\nu}_\tau)$  se tiene:

$$\frac{d\Upsilon(\boldsymbol{\mu}_\tau^*, \tau)}{d\tau} = \frac{\partial \Upsilon(\boldsymbol{\mu}_\tau^*, \tau)}{\partial \tau} + \frac{\partial \Upsilon(\boldsymbol{\mu}_\tau^*, \tau)}{\partial \boldsymbol{\mu}_\tau^*} \dot{\boldsymbol{\mu}}_\tau^* = -\mathcal{H}_Q(\boldsymbol{\mu}_\tau^*, \boldsymbol{\nu}_\tau) - i \boldsymbol{\nu}_\tau \dot{\boldsymbol{\mu}}_\tau^* , \quad (4.41)$$

para lo que hemos usado las ecuaciones 4.37 y 4.38. La ecuación anterior puede ser finalmente integrada, resultando que

$$\Upsilon(\boldsymbol{\mu}_\tau^*, t) = \Upsilon(\boldsymbol{\mu}_0^*, 0) - \int_0^t [\mathcal{H}_Q(\boldsymbol{\mu}_\tau^*, \boldsymbol{\nu}_\tau) + i \boldsymbol{\nu}_\tau \dot{\boldsymbol{\mu}}_\tau^*] d\tau . \quad (4.42)$$

Agrupando los términos proporcionales a  $\hbar$  en 4.35 tenemos la ecuación para la amplitud  $A(\boldsymbol{\alpha}^*, t)$ . Si definimos la densidad compleja  $\rho(\boldsymbol{\alpha}^*, t) \equiv A^2(\boldsymbol{\alpha}^*, t)$  llegamos a la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{\partial \rho(\boldsymbol{\alpha}^*, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\alpha}^*} [\rho(\boldsymbol{\alpha}^*, t) \mathbf{f}(\boldsymbol{\alpha}^*, t)] = i \rho(\boldsymbol{\alpha}^*, t) \frac{\partial^2 \mathcal{H}_Q(\boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\nu})}{\partial \boldsymbol{\alpha}^* \partial \boldsymbol{\nu}} , \quad (4.43)$$

con la notación  $\frac{\partial^2 \mathcal{H}_Q(\boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\nu})}{\partial \boldsymbol{\alpha}^* \partial \boldsymbol{\nu}} \equiv \sum_{n=1}^d \frac{\partial^2 \mathcal{H}_Q(\boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\nu})}{\partial \alpha_n^* \partial \nu_n}$  y donde

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\alpha}^*, t) = i \frac{\partial \mathcal{H}_Q[\boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\nu} = i \partial \Upsilon(\boldsymbol{\alpha}^*, t) / \partial \boldsymbol{\alpha}^*]}{\partial \boldsymbol{\nu}} \quad (4.44)$$

es el campo de velocidades complejo. La derivada segunda del último término de la derecha en 4.43 debe efectuarse considerando a  $\boldsymbol{\nu}$  y  $\boldsymbol{\alpha}^*$  variables independientes. Es precisamente este término el que nos impide tener una ecuación de continuidad. Sin embargo, si definimos una nueva función

$$\tilde{\rho}(\boldsymbol{\alpha}^*, t) \equiv \rho(\boldsymbol{\alpha}^*, t) e^{-iF(\boldsymbol{\alpha}^*, t)} \quad ; \quad F(\boldsymbol{\alpha}^*, t) = \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}_Q(\boldsymbol{\alpha}_\tau^*, \boldsymbol{\nu}_\tau)}{\partial \boldsymbol{\alpha}_\tau^* \partial \boldsymbol{\nu}_\tau} d\tau , \quad (4.45)$$

donde la integral se efectúa a lo largo de la trayectoria compleja clásica que satisface las condiciones de contorno 4.40, entonces  $\tilde{\rho}(\boldsymbol{\alpha}^*, t)$  sí satisface una ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}(\boldsymbol{\alpha}^*, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\alpha}^*} [\tilde{\rho}(\boldsymbol{\alpha}^*, t) \mathbf{f}(\boldsymbol{\alpha}^*, t)] = 0 . \quad (4.46)$$

La ecuación anterior, al ser una ecuación de conservación

$$\tilde{\rho}(\boldsymbol{\alpha}_i^*, t) \delta \boldsymbol{\mu}_i^* = \tilde{\rho}(\boldsymbol{\alpha}_i^*, 0) \delta \boldsymbol{\mu}_0^* , \quad (4.47)$$

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

$$\tilde{\rho}(\boldsymbol{\alpha}^*, t) = \tilde{\rho}(\boldsymbol{\mu}_i^*, t) = J_\Psi^{-1} \tilde{\rho}(\boldsymbol{\mu}_0^*, 0) , \quad (4.48)$$

donde el Jacobiano

$$J_\psi(\boldsymbol{\alpha}^*, t) = \det \left[ \frac{\partial(\boldsymbol{\mu}_t^*)}{\partial(\boldsymbol{\mu}_0^*)} \right] \quad (4.49)$$

está asociado a la transformación  $\boldsymbol{\mu}^* = \boldsymbol{\mu}^*(\boldsymbol{\mu}_0^*, t)$ , y es un número complejo cuya fase acumulada puede ser obtenida exigiendo que  $J_\Psi$  sea una función continua del tiempo  $\tau$  desde  $\tau = 0$  hasta  $\tau = t$  [nótese que  $J_\Psi(\boldsymbol{\alpha}^*, \tau = 0) = 1$ ].

Con el resultado 4.42 para la fase y la expresión 4.48 llevada a 4.45, que permite obtener el término de amplitud, podemos concluir que la solución semiclásica a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para nuestro Hamiltoniano con ordenación normal en la representación de Bargmann es

$$\Psi(\boldsymbol{\alpha}^*, t) \simeq \Psi(\boldsymbol{\mu}_0^*, t) [J_\psi(\boldsymbol{\alpha}^*, t)]^{-1/2} e^{iF(\boldsymbol{\alpha}^*, t)/2} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t [\mathcal{H}_Q(\boldsymbol{\mu}_\tau^*, \boldsymbol{\nu}_\tau) + i\boldsymbol{\nu}_\tau \dot{\boldsymbol{\mu}}_\tau^*] d\tau}, \quad (4.50)$$

con  $\Psi(\boldsymbol{\mu}_0^*, t) \simeq A(\boldsymbol{\mu}_0^*, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \Upsilon(\boldsymbol{\mu}_0^*, 0)}$ . Esta solución no es necesariamente única. Pueden aparecer múltiples ramas, algunas de ellas no necesariamente soluciones físicas, las cuales deben ser descartadas. La identificación de este tipo de ramas no es tarea sencilla, y no entraremos en ella.

Por último, vamos a dar cuenta de las otras dos ordenaciones que hemos venido trabajando para el Hamiltoniano cuántico (así como sus símbolos asociados):

$$\hat{H}^A(\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}) = \widehat{\mathcal{A}} \{H(\boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\alpha})\} \rightarrow \mathcal{H}_P(\boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\alpha}) \equiv \frac{(\boldsymbol{\alpha} | \hat{H}^A | \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha} | \boldsymbol{\alpha})} \quad (4.51)$$

$$\hat{H}^S(\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}) = \widehat{S} \{H(\boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\alpha})\} \rightarrow \mathcal{H}_W(\boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\alpha}) \equiv \frac{(\boldsymbol{\alpha} | \hat{H}^S | \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha} | \boldsymbol{\alpha})}. \quad (4.52)$$

Con todo, las funciones de onda asociadas a cada uno de ellos (4.32, 4.51 y 4.52) pueden condensarse en una única expresión de la forma

$$\boxed{\Psi(\boldsymbol{\alpha}^*, t) \simeq \Psi(\boldsymbol{\mu}_0^*, t) [J_\psi(\boldsymbol{\alpha}^*, t)]^{-1/2} e^{i\kappa F(\boldsymbol{\alpha}^*, t)/2} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t [\mathcal{H}_x(\boldsymbol{\mu}_\tau^*, \boldsymbol{\nu}_\tau) + i\boldsymbol{\nu}_\tau \dot{\boldsymbol{\mu}}_\tau^*] d\tau}} \quad (4.53)$$

donde  $\{\boldsymbol{\mu}_\tau^*, \boldsymbol{\nu}_\tau; 0 \leq \tau \leq t\}$  y  $J_\Psi$  son respectivamente la trayectoria clásica y el Jacobiano correspondiente a la función clásica hamiltoniana  $\mathcal{H}_x(\boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\alpha})$ . Se tiene que  $\kappa = 1$  si  $x = Q$ ,  $\kappa = -1$  si  $x = P$  y  $\kappa = 0$  si  $x = W$ .

## 5 Ejemplo de aplicación: sistemas estacionarios

Con la motivación de ver cómo funciona nuestro modelo, las virtudes y defectos que presenta, vamos a aplicarlo a un caso concreto: el oscilador armónico. Si consideramos una partícula de masa  $m$  que ejecuta un movimiento armónico simple de frecuencia  $\omega$ , su Hamiltoniano clásico es  $H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2$ . Nosotros, sin embargo, partiremos del Hamiltoniano clásico escalado que obtuvimos al comienzo de la sección 3:

$$H = \frac{1}{2}\omega(p^2 + q^2) = \omega\alpha\alpha^* , \quad (5.1)$$

donde las variables  $(p, q)$  y  $(\alpha, \alpha^*)$  recordamos que están relacionadas mediante las ecuaciones

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) \quad ; \quad \alpha^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip) . \quad (5.2)$$

Cuantizando nuestro sistema resulta que

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\omega(\hat{p}^2 + \hat{q}^2) , \quad (5.3)$$

que a conveniencia expresaremos con ordenación simetrizada, con lo que se tiene que

$$\hat{H}^S = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) , \quad (5.4)$$

para lo que se ha utilizado el conmutador  $[a, a^\dagger] = 1$  y las definiciones ya conocidas, y que volvemos a explicitar aquí,

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{q} + i\hat{p}) \quad ; \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{q} - i\hat{p}) . \quad (5.5)$$

La función clásica asociada a este Hamiltoniano simétrico (símbolo  $\mathcal{W}$ ) en el espacio de fases  $(q, p)$  del oscilador armónico (que puede identificarse con el plano complejo de la variable  $\alpha$  mediante las transformaciones 5.2) viene dada por

$$\mathcal{H}_{\mathcal{W}}(\alpha^*, \alpha) = \frac{(\alpha | \hat{H}^S | \alpha)}{(\alpha | \alpha)} = \omega\alpha\alpha^* , \quad (5.6)$$

que en este caso coincide con el Hamiltoniano clásico de partida. Puesto que no depende del parámetro  $\hbar$ , su valor en el límite semiclassical será exactamente el mismo.

Dado que los cálculos para la obtención de la aproximación a la función de onda no son especialmente extensos, revisaremos aquí los pasos principales. La proyección de la ecuación de Schrödinger estacionaria  $\hat{H}^S |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$  para nuestro Hamiltoniano en cuestión en la representación  $\{|\alpha\rangle\}$  resulta, en virtud del  $\mathcal{D}$ -álgebra 3.71 y 3.72:

$$\hbar\omega\alpha^* \frac{\partial}{\partial\alpha^*} \Psi(\alpha^*) + \frac{\hbar\omega}{2} \Psi(\alpha^*) = E \Psi(\alpha^*) . \quad (5.7)$$

Nuestro *ansatz* es  $\Psi(\alpha^*) = A(\alpha^*) e^{\frac{i}{\hbar} S(\alpha^*)}$ , en el que sabemos que tanto  $A(\alpha^*)$  como  $S(\alpha^*)$  admiten desarrollos en potencias pares de  $\hbar$ , siendo los términos relevantes en nuestro caso

los de orden  $\mathcal{O}(1)$ . Por simplificar la notación mantendremos los caracteres  $A$  y  $S$  para referirnos a dichos términos. Sustituyéndolo en 5.7 se tiene, a orden 0 en  $\hbar$ , que

$$i\omega\alpha^* \frac{dS(\alpha^*)}{d\alpha^*} = E \quad \Rightarrow \quad S(\alpha^*) = -i \frac{E}{\omega} \ln(\alpha^*) , \quad (5.8)$$

mientras que a orden 1 en  $\hbar$ , una vez multiplicada por el factor  $2A(\alpha^*)$  y hecho el cambio  $\rho(\alpha^*) \equiv A^2(\alpha^*)$ , resulta la ecuación

$$\frac{d\rho(\alpha^*)}{\rho(\alpha^*)} = -\frac{d\alpha}{\alpha} \quad \Rightarrow \quad \rho(\alpha^*) = \frac{1}{\alpha^*} . \quad (5.9)$$

Nótese en que no hemos dado cuenta de las constantes de integración porque simplemente pueden ser recogidas en un factor de fase global, cuya influencia en la determinación de la dinámica del sistema es nula.

Según los resultados 5.8 y 5.9 (tras restablecer el cambio para la amplitud), la expresión para la función de onda en aproximación semiclásica es

$$\Psi(\alpha^*) \simeq \mathcal{N}(\alpha^*)^{-1/2} e^{\frac{E}{\hbar\omega} \ln(\alpha^*)} = \mathcal{N}(\alpha^*)^{\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}} , \quad (5.10)$$

con  $\mathcal{N}$  una constante de normalización. Esta función será analítica únicamente si la potencia de  $\alpha^*$  es un número entero, lo que conduce a la condición de cuantización de la energía para el oscilador armónico:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) ; \quad n \in \mathbb{Z} . \quad (5.11)$$

La autofunción correspondiente tiene la forma

$$\Psi_n(\alpha^*) \simeq \mathcal{N} \alpha^{*n} , \quad (5.12)$$

que resulta ser un resultado exacto para la función de onda del oscilador armónico (puede comprobarse que, al sustituirlo en la ecuación 5.7 proporciona exactamente los autovalores 5.11). Por tanto, la utilización del formalismo de Bargmann es ventajosa en este sistema porque, más allá de que en este caso la solución coincide con la exacta, su obtención no precisa de ninguna fórmula de conexión. La condición de analiticidad es suficiente para conseguir una aproximación global y uniforme.

Normalicemos a continuación la función de onda. Para ello exigiremos que  $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ . De la relación de cierre para los estados coherentes 3.38 y la definición de los estados de Bargmann 3.62 se infiere que la relación de cierre en  $\{|\alpha\rangle\}$  viene dada por:

$$\int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{\hbar}} |\alpha\rangle \langle \alpha| = \mathbf{1} ; \quad d^2\alpha \equiv d(\text{Re } \alpha) d(\text{Im } \alpha) . \quad (5.13)$$

Si la introducimos en el producto escalar resulta

$$1 = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{\hbar}} \langle \Psi | \alpha \rangle \langle \alpha | \Psi \rangle = \mathcal{N} \mathcal{N}^* \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} (\alpha\alpha^*)^n e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{\hbar}} \equiv \mathcal{I} , \quad (5.14)$$

una integral en el campo complejo cuya resolución podemos evitar con un cambio de variables. Fijémonos en la definición del elemento de volumen que hemos empleado en 5.13:  $d^2\alpha \equiv d(\text{Re } \alpha)d(\text{Im } \alpha)$ . Según 5.2, podemos identificar dicho elemento de volumen en el espacio de fases  $(q, p)$ :

$$\frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} = \frac{dqdp}{2\pi\hbar} , \quad (5.15)$$

con lo que la integral  $\mathcal{I}$  se transforma en una integral real en el espacio fásico:

$$\mathcal{I} = \frac{1}{2}\mathcal{N}\mathcal{N}^* \int \int \frac{dqdp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{1}{2\hbar}(p^2+q^2)} (p^2 + q^2)^n . \quad (5.16)$$

Podemos simplificarla con un nuevo cambio a *variables de acción-ángulo*  $(J, \theta)$ , con  $J = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$ . Según el teorema de Liouville, que tal y como vimos en la subsección 3.3 se cumple, la conservación del volumen para una transformación canónica (el Jacobiano tiene valor unidad) reduce nuestro cambio a una sustitución de la medida, resultando

$$\mathcal{I} = \mathcal{N}\mathcal{N}^* \int \int \frac{dJd\theta}{2\pi\hbar} e^{-\frac{J}{\hbar}} J^n = \frac{\mathcal{N}\mathcal{N}^*}{2\pi\hbar} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty dJ e^{-\frac{J}{\hbar}} J^n = \mathcal{N}\mathcal{N}^* \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty dJ e^{-\frac{J}{\hbar}} J^n . \quad (5.17)$$

Si tenemos en cuenta la integral tabulada  $\int_0^\infty x^n e^{-\mu x} dx = \frac{\Gamma(n+1)}{\mu^{n+1}}$  [ $\text{Re}(\mu) > 0$ ] que se encuentra en *I. S. Gradshteyn & I. M. Ryzhik* [7], identificando en nuestro caso  $\mu = \hbar^{-1}$ :

$$\mathcal{I} = \frac{\mathcal{N}\mathcal{N}^*}{\hbar} \frac{\Gamma(n+1)}{(\hbar^{-1})^{n+1}} = \mathcal{N}\mathcal{N}^* \hbar^n n! . \quad (5.18)$$

Finalmente,  $\mathcal{I} = 1 \Rightarrow \mathcal{N} = (\hbar^n n!)^{-1/2}$  y la función de onda semiclásica adecuadamente normalizada es

$$\Psi_n(\alpha^*) = \frac{1}{\sqrt{\hbar^n n!}} (\alpha^*)^n . \quad (5.19)$$

A continuación, sabiendo que las funciones de onda del oscilador armónico en la representación de la coordenada son conocidas, y vienen dadas como producto de una Gaussiana por los polinomios de Hermite, intentaremos dar una expresión integral que permita el cálculo de los mismos. Se tiene que

$$\langle q | \Psi_n \rangle = (\pi\hbar)^{-1/4} \frac{1}{2^{n/2}} \sqrt{n!} e^{-\frac{q^2}{2\hbar}} H_n(\hbar^{-1/2}q) , \quad (5.20)$$

con  $H_n(\hbar^{-1/2}q)$  los polinomios de Hermite. La expresión anterior es una adaptación a nuestro sistema, definido por el Hamiltoniano 5.3, de la expresión para el Hamiltoniano  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{q}^2$  que usualmente se encuentra en la bibliografía (véase, por ejemplo, *L. D. Landau & E. M. Lifshitz* [1]). Introduzcamos ahora la relación de cierre para 5.13 en  $\langle q | \Psi_n \rangle$ :

$$\langle q | \Psi_n \rangle = \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{\hbar}} \langle q | \alpha \rangle (\alpha | \Psi_n \rangle . \quad (5.21)$$

El término  $(\alpha | \Psi_n \rangle$  es justamente la función de onda semiclásica que acabamos de calcular y normalizar, mientras que  $\langle q | \alpha \rangle$  es una proyección que desconocemos. Para calcularla proyectamos la ecuación de valores propios 3.71 para el operador de creación  $a$  sobre  $\{|q\rangle\}$ :

$$\langle q | a | \alpha \rangle = \hbar^{-1/2} \alpha \langle q | \alpha \rangle , \quad (5.22)$$

que usando la primera relación 5.5 toma la forma

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \langle q | \hat{q} + i\hat{p} | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \alpha \langle q | \alpha \rangle , \quad (5.23)$$

La actuación de los operadores  $\hat{q}$  y  $\hat{p}$  en la base  $\{|q\rangle\}$  es conocida, y viene dada por  $\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$  y  $\hat{p}|q\rangle = i\hbar \frac{d}{dq}|q\rangle$ . Considerando esto, la ecuación 5.23 se reescribe como

$$\left( \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} q + \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{d}{dq} \right) \langle q | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \alpha \langle q | \alpha \rangle , \quad (5.24)$$

por lo que se trata de una ecuación diferencial ordinaria de primer orden separable:

$$\frac{\partial_q \langle q | \alpha \rangle}{\langle q | \alpha \rangle} = \frac{\sqrt{2}}{\hbar} \alpha - \frac{1}{\hbar} q , \quad (5.25)$$

cuya integración en  $dq$  proporciona trivialmente la solución

$$\langle q | \alpha \rangle = \mathcal{N} e^{\frac{\sqrt{2}}{\hbar} \alpha q - \frac{q^2}{2\hbar}} , \quad (5.26)$$

donde  $\mathcal{N}$  es una constante de normalización genérica en la que hemos incluido la constante de integración. Esta nueva constante también tenemos que fijarla. Antes de eso, aprovechamos para hacer notar que a las distintas constantes de normalización que han ido apareciendo en esta sección y en el propio trabajo las hemos denominado de forma genérica  $\mathcal{N}$ , si bien no hay lugar a confusión o ambigüedad, pues para cada una de ellas ha quedado bien indicada a la función a la que se refiere y en los casos en los que se ha requerido su valor, ha sido calculado ordenadamente. Dicho esto, la estrategia para normalizar 5.26 será introducir la relación de cierre para la coordenada  $\int dq |q\rangle \langle q| = \mathbf{1}$  en el producto escalar de los estado de Bargmann definido en 3.64:

$$\int dq (\alpha | q) \langle q | \alpha \rangle = (\alpha | \alpha) = e^{\frac{\alpha \alpha^*}{\hbar}} . \quad (5.27)$$

Si sustituimos la expresión 5.26 y su hermítica conjugada tenemos que:

$$\mathcal{N} \mathcal{N}^* \int dq e^{\frac{\sqrt{2}}{\hbar} q (\alpha + \alpha^*)} e^{-\frac{q^2}{\hbar}} = e^{\frac{\alpha \alpha^*}{\hbar}} . \quad (5.28)$$

Utilizando la integral tabulada  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{ax} e^{-\frac{x^2}{b}} dx = \sqrt{\pi} \sqrt{b} e^{(a^2 b)/4}$  [ $b > 0$ ] proporcionada por la herramienta computacional *Wolfram Alpha*, en nuestro caso con los cambios  $a = \frac{\sqrt{2}}{\hbar}(\alpha + \alpha^*)$  y  $b = \hbar$ , 5.28 resulta:

$$\mathcal{N} \mathcal{N}^* \sqrt{\pi \hbar} e^{\frac{(\alpha + \alpha^*)^2}{2\hbar}} = e^{\frac{\alpha \alpha^*}{\hbar}} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{N} \mathcal{N}^* \sqrt{\pi \hbar} e^{\alpha^2} e^{\alpha^{*2}} = 1 . \quad (5.29)$$

Queda así determinada la constante de normalización, y por tanto el estado 5.26 escrito de forma completa es

$$\langle q | \alpha \rangle = (\pi \hbar)^{-1/4} e^{-\alpha^2} e^{\frac{\sqrt{2}}{\hbar} \alpha q - \frac{q^2}{2\hbar}} . \quad (5.30)$$

Insertando 5.30 en 5.21 y explicitando en esta expresión también 5.19, se tiene que

$$\langle q | \Psi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar^n n!}} (\pi \hbar)^{-1/4} e^{-\frac{q^2}{2\hbar}} \int \int \frac{d^2 \alpha}{\pi \hbar} e^{-\frac{\alpha \alpha^*}{\hbar}} \alpha^{*n} e^{\frac{\sqrt{2}}{\hbar} \alpha q - \alpha^2} . \quad (5.31)$$

Finalmente, igualando la ecuación 5.31 que acabamos de obtener con 5.20 y cancelando los términos que se repiten en ambas, la expresión que buscábamos para los polinomios de Hermite resulta ser

$$H_n(\hbar^{-1/2}q) = \left(\frac{2}{\hbar}\right)^{n/2} \int \int \frac{d^2\alpha}{\pi\hbar} e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{\hbar}} \alpha^{*n} e^{\frac{\sqrt{2}}{\hbar}\alpha q - \alpha^2} \quad (5.32)$$

Que sea una integral del producto de una potencia por exponenciales nos invita a pensar que debe tener solución exacta. Cambios a las variables  $(q, p)$  o  $(J, \theta)$  como los vistos en esta sección podrían ser tomados en cuenta como estrategia de resolución. No obstante nosotros paramos aquí, postulando como teorema que, en virtud del formalismo de Bargmann introducido, los polinomios de Hermite cumplen la igualdad anterior.

Como último detalle, no hemos hecho referencia a que el estado 5.31 está determinado salvo por una fase arbitraria. Sin embargo, como en la expresión 5.32 el término izquierdo es real y entonces el término derecho ha de serlo también, esto hace que la fase se anule, por lo que directamente se ha optado por no indicarla.

## 6 Conclusiones y perspectivas

En este trabajo hemos utilizado la aproximación WKB para la obtención de la función de onda, tanto en el caso estacionario ( $1\text{-dim}$ ) como dependiente del tiempo ( $d\text{-dim}$ ), en la representación de la coordenada. Hemos demostrado las limitaciones de la aproximación y la regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld tratando las divergencias en los puntos de retroceso para el caso estacionario. Para el caso dependiente del tiempo hemos observado que era preciso sumar las contribuciones de las distintas trayectorias.

A continuación hemos introducido los estados coherentes como “los estados cuánticos más clásicos posibles”, construyéndolos bajo la premisa de que los valores esperados de las magnitudes cuánticas coincidan con los valores clásicos en el límite  $\hbar \rightarrow 0$ . Entramos en detalle en sus características: obtención a partir del operador desplazamiento, producto escalar, relación de cierre, valores medios e incertidumbres y función de onda. También hemos estudiado la correspondencia entre los estados coherentes  $|\alpha\rangle$  y los puntos del plano complejo  $\alpha$ , cuya estructura simpléctica es idónea para los tratamientos semiclásicos, para acabar definiendo los estados de Bargmann y el  $\mathcal{D}$ -álgebra.

En la parte central del trabajo, propuestas inspiradas en el *ansatz* WKB han sido empleadas para la obtención de la función de onda semiclásica en la representación de Bargmann, en el caso estacionario ( $1\text{-dim}$ ) así como en el dependiente del tiempo ( $d\text{-dim}$ ). La bondad de estas funciones (esto es, la mayor o menor complejidad de sus singularidades) determina la necesidad de incluir, o no, condiciones adicionales a la de analiticidad, que siempre ha de cumplirse. La extensión al plano complejo se muestra como una ventaja frente a la representación coordenada, pues los puntos de retroceso dejan de suponer un problema y se consiguen aproximaciones globales y uniformes. A cambio, tenemos el problema de los puntos de rama, pero sin duda es un marco más natural para llevar a cabo las extensiones que garanticen la univaluación de la función de onda.

La resolución del problema del oscilador armónico ha puesto de manifiesto la aplicabilidad del modelo, consiguiendo una expresión para la función de onda que presenta una forma muy simple, a la que no es necesario hacerle ningún ajuste adicional. La condición de analiticidad ha fijado, efectivamente, el espectro de energías. También se ha utilizado el formalismo introducido en las distintas secciones del trabajo para dar la expresión integral para los polinomios de Hermite.

En definitiva, se han sentado sólidas bases para el estudio de los sistemas en el límite semiclásico y se ha comprobado, para el caso del oscilador armónico, que es una tarea útil. Por delante queda todo un panorama de posibilidades. Desde la obtención, haciendo uso del formalismo dependiente del tiempo, de la aproximación semiclásica al propagador en la representación de Bargmann y el estudio comparativo con el propagador de *Van-Vleck* para la representación de la coordenada, hasta el estudio de otros sistemas o problemas de *scattering* (estados no ligados), tanto en el caso estacionario como dependiente del tiempo. Terminamos destacando que el de las aproximaciones semiclásicas es un campo de absoluta vigencia en el panorama investigador, pues están siendo empleadas en temas punteros, como la cuantización de sistemas caóticos y el estudio de los *condensados de Bose-Einstein*.

## 7 Summaries in English

### 7.1 Introduction

In the origins of Quantum Theory, the study of first systems and phenomena was made by analogy with their classical counterparts, so they can be considered as semiclassical models. The *Bohr's correspondence principle* states that the behavior of systems described by the theory of Quantum Mechanics reproduces Classical Physics in the limit of large quantum numbers. This limit can also be expressed as the formal limit  $\hbar \rightarrow 0$ . Nowadays, semiclassical models are a way to get to understand the quantum processes in themselves, providing a more intuitive description of them. One of the most remarkable properties of these treatments is the approximation to quantum magnitudes in terms of classical parameters, revealing connections between the system's classical dynamics and their quantum behavior.

The main goal of this work is to get semiclassical approximations to the wavefunction (both in the stationary and the time dependent case) in the Bargmann representation, in order to make a comparison with the results coming from the coordinate representation. We also look for validity conditions of the semiclassical approximation and quantization rules. We intend to make this work self-contained, and that is the reason for that we go deep in details related to coordinate representation and coherent states characterization.

Most of this project is essentially a bibliographical review, except the application section where we show the formalism application to the harmonic oscillator problem, achieving interesting expressions for the Bargmann states projection over the coordinate basis and for the Hermite polynomials.

### 7.2 Semiclassical approximations: the coordinate representation

In this section we show the fundamental results of the semiclassical methods in the coordinate representation. Although its demonstration is not one of the essential objectives of the work, we go into some detail in the calculations, since many of the ideas used will be rescued in section 4. First we study the stationary case, for which we obtain an approximation to the wavefunction, as well as the limits of applicability of our model and the quantization of the energy levels to which it leads. In a second part we address the non-stationary case, providing a semiclassical expression for the wave function where the contribution of the different possible trajectories is taken into account.

### 7.3 Coherent states formalism

We introduce in detail the coherent states, defining them by imposing that, in the semiclassical limit, the expected values of the quantum operators coincide with the classical quantities. We study their main properties: obtaining through the displacement operator, scalar product and closure relation, expected values and root-mean-square, wavefunction. The algebraic structure of this states is also provided, defining the non-normalized coherent states or Bargmann states. Finally, we define the  $\mathcal{D}$ -*álgebra*, which gives us important relations between operators and differential forms.

## 7.4 Semiclassical approximations: the Bargmann representation

Using *ansatzs* inspired in the WKB model we obtain semiclassical expressions for the wavefunction in both stationary and time dependent cases. These expressions take different forms depending on the ordering scheme we choose for the quantum Hamiltonian. We find that now we have to deal with complex functions that must be analytic. This requirement fixes the quantization condition of the system, which is a generalization of the Bohr-Sommerfeld quantization condition achieved in section 2.

## 7.5 Application example: stationary systems

In this section we show the applicability of our model by the resolution of the harmonic oscillator problem, obtaining an expression for the wave function that presents a very simple form and is an exact result. The analyticity condition effectively fixes the spectrum of energies. The formalism introduced in the different sections of the work is also employed to give an interesting integral expression for the Hermite polynomials.

## 7.6 Conclusions and perspectives

Solid bases have been established for the study of the systems in the semiclassical limit  $\hbar \rightarrow 0$ , not only in the Bargmann representation but also in the coordinate representation, giving expressions for the semiclassical wavefunction in both two representations. We have explained in detail the algebraic structure of the Bargmann states, which justifies their utilization for the development of our approximations. It has also been studied how the condition that the wavefunctions to be square integrable in the coordinate representation is substituted by the analyticity condition for the wavefunctions given by the Bargmann representation, that guarantees the complex wavefunction to be single-valued, differentiable and without singularities. We finally remark that semiclassical approximations are currently important in frontier research topics as the quantization of chaotic systems or the Bose-Einstein condensation.

## References

- [1] L. LANDAU AND E. LIFSHITZ, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory. Vol. 3*, Barcelona: Reverté (1982)
- [2] P. CVITANOVIĆ, R. ARTUSO, R. MAINIERI, G. TANNER AND G. VATTAY, *Chaos: Classical and Quantum*, Niels Bohr Institute, Copenhagen (2016)
- [3] C. COHEN - TANNOUJDI, B. DIU AND F. LALOË, *Quantum Mechanics Vol. 1*, Niels Bohr Institute, Wiley (1977)
- [4] E. MARTÍN - FIERRO, *Los estados coherentes en la descripción semiclásica de la mecánica cuántica*, Tesis ULL (2004)
- [5] S. PONUSSAMY AND H. SILVERMAN, *Complex variables with applications*, Birkhäuser (2006)
- [6] E. MARTÍN - FIERRO AND JOSÉ M. GÓMEZ LLORENTE, *Derivation of the semiclassical asymptotic initial value representations of the quantum propagator*, Chemical Physics 322 (2006)
- [7] I. S. GRANDSTEYN AND I. M. RYZHIK, *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press (2007)

