CIENCIA Y SOCIEDAD
Volumen XXIX, Número 3
Julio-Septiembre 2004

ESTUDIO DE SIMETRÍA Y DE POSIBILIDADES DE LA RESOLUCIÓN EXACTA DE LAS ECUACIONES DE SCHRODINGER Y DE HAMILTON – JACOBI PARA UN SISTEMA AISLADO

2da parte: Resolución exacta de las ecuaciones de Schrodinger y de Hamilton – Jacobi

N. Sukhomlin

RESUMEN

Este artículo representa los resultados de la segunda parte de nuestras últimas investigaciones sobre el tema. La clasificación de los operadores de simetría nos permitió en la primera parte formular el Teorema 1. En este artículo construimos las soluciones exactas de las ecuaciones de Schrodinger para una particula libre y de Hamilton – Jacobi correspondiente para todos los operadores de simetría del primer y segundo orden. Todos los resultados conocidos en la literatura entran en nuestra clasificación y también encontramos nuevos casos de la resolución exacta de las ecuaciones. El principal resultado obtenido es que la enumeración de los casos de la resolución exacta es exhaustiva para los sistemas con la simetría mencionada.

PALABRAS CLAVES

Simetría, ecuaciones de Schrodinger y de Hamilton – Jacobi

Aquí continuamos la numeración de las secciones y de la bibliografía de la primera parte [7] lo que simplificará las referencias. La clasificación de los operadores de simetría y, en consecuencia, del conjunto de todas las soluciones exactas nos permitió formular el Teorema 1. En este artículo construimos las soluciones exactas de la ecuación de Schrodinger y de la ecuación de Hamilton - Jacobi para una particula libre usando todos los operadores de simetría del primer y segundo orden. Todos los resultados conocidos en la literatura entran en nuestra clasificación y también encontramos nuevos casos de la resolución exacta de dichas ecuaciones.

4. Resolución exacta de la ecuación de Schrödinger para una partícula aislada

El Teorema 1 comprobado en la sección 3 nos permite abordar el problema de la resolución exacta de la ecuación de Schrödinger (1). Algunas soluciones son muy conocidas: por ejemplo cuando se trata de las funciones de estado que son las funciones propias de los operadores de simetría del primer orden. Como mostramos en el Teorema 1, existe una sola clase de los operadores equivalentes de este tipo (contrariamente a lo que está mencionado en el artículo [3]). En el caso general la solución de la ecuación de Schrödinger (1) con un operador de simetría $\hat{B}$ del Teorema 1 se busca como la solución del sistema:

$$\begin{aligned} \hat{A}\psi &= 0, \\ \hat{B}\psi &= \lambda\psi . \end{aligned} \qquad (12)$$

Si ahora $\hat{B}$ es operador de simetría del primer orden, el entra en la única clase de equivalencia (11) con el operador más sencillo $\hat{B}_1 = -i\partial/\partial x$ [véase la formula (5b)]. La función propia de este operador, la que verifica la ecuación de Schrödinger es una onda plana:

$$\psi_\lambda\ (t, x) = \mathrm{C} \exp\{\ \imath\,\lambda\,\chi - i\,\omega\, t\}\ \text{con}\ \omega \equiv \lambda^2/2. \qquad (13)$$

Es interesante observar que la función de estado que es la función propia del operador $\hat{B}_2$ de la formula (5b) es la función de Green de la ecuación de Schrödinger:

$$\psi_\lambda(t, x) = \frac{C}{\sqrt{t}} \exp\left\{ i \frac{(x-\lambda)^2}{2t} \right\}. \qquad (14)$$

Los operadores $\hat{B}_1$ y $\hat{B}_2$ son equivalentes relacionados con el grupo N definido por la formula (4) como lo muestran las formulas (7a) y (7b). Así las funciones (13) y (14) son equivalentes: véase los detalles en nuestro articulo [4]. En este mismo artículo son también mencionadas algunas otras soluciones exactas de la ecuación (1), las que entran en esta misma clase de equivalencia.

El conjunto de las soluciones de la ecuación (1) que verifican el sistema (12) con los operadores de simetría de segundo orden se separa en cinco clases de equivalencia conforme al Teorema 1. Los operadores los más sencillos de cada una de las clases son enumerados en las formulas de (10a) hasta (10e). Pasemos ahora a la resolución del sistema (12) con los operadores de segundo orden:

a) Sea la clase de equivalencia definida por el operador . $\hat{B} = \hat{B}_2^2 + \hat{B}_1^2$ Es fácil verificar que la funcion siguiente cumple el sistema (12):

$$\psi_\lambda(t, x) = \frac{\Phi(\xi)}{(1+t^2)^{1/4}} \exp\left\{ -i\lambda\, arctg\, t + it\xi^2/2 \right\}, \qquad (15a)$$

$$\xi \equiv x(1+t^2)^{-1/2}. \qquad (15b)$$

La función $\Phi(\xi)$ verifica la ecuación diferencial ordinaria:

$$\Phi \; + (2\lambda - \xi^2)\Phi = 0 \qquad (15c)$$

Las soluciones que se anulan al infinito se expresan por los polinomios de Tchebyshev – Hermite $H_n(\xi)$;el espectro de los valores propios del operador mencionado es discreto:

$$\Phi_n(\xi) = H_n(\xi)\exp\{-\xi^2/2\}, \tag{16a}$$

$$\lambda_n = n + 1/2, \qquad n = 0, 1, \dots . \tag{16b}$$

Las funciones (15a) se conocen en la literatura como las soluciones coherentes de la partícula libre; ellas representan una base ortonormal. El movimiento es infinito (es "finito relacionado con la coordenada" ξ).

b) Sea la clase definida por $\hat{B} = \hat{B}_2^2 - \hat{B}_1^2$ En este caso la solución del sistema (12) se presente en la forma similar:

$$\psi_\lambda(t, x) = \frac{\Phi(\xi)}{\left|1 - t^2\right|^{1/4}} \exp\{-i\lambda\, arctht - it\xi^2/2\} \tag{17a}$$

$$\xi \equiv x\left|1 - t^2\right|^{-1/2}. \tag{17b}$$

La funcion $\Phi(\xi)$ verifica la ecuación siguiente:

$$\Phi'' + (2\lambda + \xi^2)\Phi = 0. \tag{17c}$$

cuyos soluciones son las funciones del cilindro parabólico.

c) Sea el operador $\hat{B} = \hat{B}_2\hat{B}_1 + \hat{B}_1\hat{B}_2$. La solución del sistema (12) se presenta así

$$\psi_\lambda(t, x) = \frac{\Phi(\xi)}{t^{1/4}} \exp\{-i\lambda \ln t + i\xi^2/4\}, \tag{18a}$$

$$\xi \equiv x\, t^{-1/2}, \tag{18b}$$

$$\Phi'' + (2\lambda + \xi^2/2)\Phi = 0. \quad (18c)$$

Las funciones $\Phi(\xi)$ de la última ecuación como en el caso anterior son las funciones del cilindro parabólico. Observamos que la integral de normalización no depende del tiempo en ningún de estos tres casos.

d) Sea el operador $\hat{B} = \hat{B}_1^2 + \hat{B}_2$. Este caso es particular y la solución del sistema (12) tiene propiedades que resultan muy interesantes:

$$\psi_\lambda(t, x) = \Phi(\xi)\exp\{-i\lambda t\}, \quad (19a)$$

$$\xi = x - t^2/2. \quad (19b)$$

La funcion $\Phi(\xi)$ verifica la ecuación de Airy:

$$\Phi'' + 2(\lambda - \xi)\Phi = 0. \quad (19c)$$

La particularidad de esta solución es que la densidad de probabilidad $|\Psi|^2 = |\Phi(\xi)|^2$ depende sólo de la combinación $\xi(t, x)$ definida por la formula (19b). En consecuencia, esta expresión no varia si $\xi = const$ lo que significa que el paquete de onda se propaga con una aceleración constante (igual a la unidad) sin deformación. Esta solución paradójica se conoce en la literatura [5] y está bien estudiada [8]. Observamos que en la literatura se usa el operador $\hat{B} = \hat{B}_1^2 + c\hat{B}_2$. Nosotros mostramos que es importante distinguir el caso cuando $c = 0$ (este es el caso (e) visto más abajo). Nuestro Teorema 1 dice que el caso para cualquier constante $c \neq 0$ es equivalente al caso con $c = 1$. Este resultado es nuevo.

e) La última clase de equivalencia de los operadores del segundo orden tiene como el operador más sencillo $\hat{B} = \hat{B}_1^2$ Esta clase es el caso particular de los operadores de tipo $\hat{B} = \hat{B}_1^2 + c\hat{B}_2$ con la condición complementaria $c = 0$.

Nuestro Teorema 1 precisa que los operadores de este tipo con $c = 0$ y con $c \neq 0$ no son equivalentes y por esta razón tenemos que estudiarlos separadamente. Las soluciones del sistema (12) con $\hat{B} = \hat{B}_1^2$ son también ondas planas:

$$\psi_\lambda(t, x) = A\exp\{ikx - i\omega t\} + C\exp\{-ikx - i\omega t\}, \quad \lambda \equiv k^2 \equiv 2\omega. \tag{20}$$

5. Resolución exacta de la ecuación de Hamilton – Jacobi para un sistema aislado

La teoría de Jacobi propone la resolución de la ecuación de movimiento de una partícula clásica (llamada ecuación de Hamilton – Jacobi):

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(t, x, \frac{\partial S}{\partial x}\right) = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 = 0. \tag{21}$$

aquí $H = p^2 / 2$es la funcion de Hamilton para una partícula libre y $p \equiv \partial S / \partial x$. La existencia de las integrales de movimiento ayuda a separar las variables en la ecuación (21). En general el problema clásico tiene la solución exacta, cada vez que el problema cuántico (la ecuación de Schrödinger) lo tiene. En este sentido vamos a seguir la estructura de la sección 4.

Empezamos por la resolución de la ecuación (21) para la sola clase de las integrales de movimiento lineales respectivamente con el momento lineal (los que corresponden a los operadores de simetría del primer orden) con la variable física más sencilla $B_1 = p$ (recordamos la correspondencia entre el momento lineal: p y el operador del momento lineal:$-\imath\, \partial / \partial x$). La solución de la ecuación (21) en este caso será:

$$S(t, x, p) = -\omega t + \lambda x; \quad \omega \equiv \lambda^2 / 2. \tag{22a}$$

Conforme a la teoría de Jacobi, la trayectoria de la partícula clásica se encuentra al igualar la derivada de la funcion acción $S(t, x, \lambda)$ relacionando con el parámetro λ a una constante cualquiera:

$$\partial S / \partial \lambda = -\lambda t + x = \beta \Rightarrow x(t, \lambda, \beta) = \lambda t + \beta . \quad (22b)$$

adonde la constante β tiene el sentido de la coordenada inicial y la constante λ tiene el sentido de la velocidad.

Es interesante observar que la otra integral de movimiento lineal relacionado con p: $B_2 = x - pt = \lambda = const$ nos lleva a otra función acción:

$$S = (x - \lambda)^2 / 2t . \quad (23a)$$

La nueva función acción define la misma trayectoria libre así:

$$\partial S / \partial \lambda = -(x - \lambda)/t = \beta \Rightarrow x(t, \lambda, \beta) = -\beta t + \lambda . \quad (23b)$$

Al comparar con la expresión de la trayectoria (22b) constatamos que se trata del mismo movimiento de la partícula libre, pero el sentido de las constantes es inverso: aquí β corresponde a la velocidad con el signo menos y λ ahora tiene el sentido de la coordenada inicial. La transformación del grupo N correspondiente, es la rotación en el espacio fásico en un ángulo de $-\pi / 2$

Esta observación manifiesta la no unicidad de la función acción: ella está definida por los integrales de movimiento: las diferentes funciones (22a) y (23a) llevan al mismo tipo de trayectoria. Notamos también que la función de onda en el caso cuasi-clásico se define por la función acción: $\Psi = C \exp \{ \imath S \}$, lo que corresponde a las formulas (13) y (22a) y de la misma manera a las formulas (14) y (23a) respectivamente.

Como en la sección anterior pasamos ahora a la resolución exacta de la ecuación de Hamilton – Jacobi para cada una de las cinco clases de las integrales de movimiento cuadráticas relacionado con el momento lineal. Como mencionamos arriba, usando la correspondencia $-\imath\,\partial/\partial x \quad p$ podemos presentar ahora las integrales de movimiento por:

$B_1 = p,\ B_2 = x - pt$

a) Sea la clase representada por la primera integral de movimiento cuadrático con p:

$$B = B_2^2 + B_1^2 = (x - pt)^2 + p^2 = \lambda = const \quad \Rightarrow$$

$$S(t, x, \lambda) = \frac{t}{2(t^2+1)}x^2 - \frac{\lambda}{2}\,arctg\,t \pm \frac{1}{t^2+1}\int\sqrt{\lambda(t^2+1) - x^2}\,dx.$$

Ahora la trayectoria la obtenemos de la relación:

$$\frac{\partial S(t, x, \lambda)}{\partial \lambda} = \beta = const. \tag{24}$$

Esta relación define el movimiento libre en la forma:

$$x(t, \lambda, \beta) = \left(\sqrt{\lambda}\cos 2\beta\right)t + \sqrt{\lambda}\,sen 2\beta\ .$$

b) Sea la clase representada por la integral de movimiento:

$$B = B_2^2 - B_1^2 = (x - pt)^2 - p^2 = \lambda = const \quad \Rightarrow$$

$$S(t, x, \lambda) = \frac{t}{2(t^2-1)}x^2 + \frac{\lambda}{2}\,arctht \pm \frac{1}{t^2-1}\int\sqrt{\lambda(t^2-1) + x^2}\,dx.$$

La formula (24) permite encontrar la trayectoria en este caso:

$$x(t, \lambda, \beta) = \left(-\sqrt{-\lambda}\,ch 2\beta\right)t + \sqrt{-\lambda}\,sh 2\beta$$

c) Sea la clase representada por la integral de movimiento:

$$B = B_2 B_1 + B_1 B_2 = 2(x - pt)p = \lambda = const \quad \Rightarrow$$
$$S(t, x, \lambda) = \frac{1}{4t} x^2 - \lambda \ln t \pm \frac{1}{2t} \int \sqrt{x^2 - 8\lambda t}\, dx.$$

La trayectoria del movimiento libre se encuentra también usando la formula (24):

$$x(t, \lambda, \beta) = \left[\sqrt{2\lambda} \exp(-\beta/2)\right] t + \sqrt{2\lambda} \exp(\beta/2).$$

d) Sea la clase representada por la integral de movimiento:

$$B = B_1^2 + B_2 = p^2 + x - pt = \lambda = const \quad \Rightarrow$$
$$S(t, x, \lambda) = \frac{t(x - \lambda)}{2} - \frac{t^3}{12} \pm \left(-\frac{1}{12}\right)\left[4(\lambda - x) + t^2\right]^{3/2}.$$

De la formula (24) encontramos la trayectoria de la partícula libre en este caso:

$$x(t, \lambda, \beta) = -\beta t + (\lambda - \beta^2).$$

e) Sea la clase representada por la última integral de movimiento de (10e):

$$B = B_1^2 = p^2 = \lambda = const \quad \Rightarrow \quad S(t, x, \lambda) = -\lambda t/2 \pm \sqrt{\lambda}\, x.$$

Esta trayectoria definida por la condición (24) es similar a la trayectoria de la clase con $B_1 = p$, véase la formula (22b): $x(t, \lambda, \beta) = \sqrt{\lambda} t + 2\beta\sqrt{\lambda}$. La correspondencia similar la vimos en el caso cuántico.

Así concluimos la búsqueda exhaustiva de las clases de las soluciones exactas de las ecuaciones de Schrödinger y de Hamilton – Jacobi definidas por los operadores de simetría (las integrales de movimiento) de primer y segundo orden. Las dificultades de la resolución exacta de las ecuaciones de movimiento cuántica y clásica son considerables para el caso de los operadores del tercer orden. Por ejemplo para las clases de equivalencia 13 y 14 de la formula (9) de la primera parte de nuestro artículo [7]: $\hat{B}_1^3 \pm \hat{B}_2$ la solución exacta se encuentra sólo en la forma de la serie de potencias con los coeficientes complejos: lo mostramos en nuestros artículos [9, 10].

Bibliografía

7. N. Sukhomlin, M. Arias, "Estudio de simetría y de posibilidades de la resolución exacta de las ecuaciones de Schrödinger y Hamilton – Jacobi para un sistema aislado, I. Clasificación de los operadores de simetría de tercer orden", *Ciencia y Sociedad* (en publicación).
8. Y. Danilov, G. Kuznetsov, Y. Smorodinski, "Symmetry of classical and quantum equations" *Journal of Nuclear Physics*, 1980, v. 32, n. 6, pp. 1547 - 1552.
9. N. Sukhomlin, J. R. Álvarez, D. Pérez, "Función de Green para una partícula cuasi relativista I. Partícula libre" (en publicación).
10. N. Sukhomlin, "Nuevo método de la resolución de un sistema diferencial lineal", *Ciencias Hoy* (en publicación).