El límite clásico de la ecuación de Schrödinger.

En el apartado anterior, hemos introducido la función de onda cuasiclásica, de modo que la fase de dicha función sea correcta en el límite clásico. Sin embargo, la función de onda cuasiclásica no tiene una amplitud correcta y como veremos ni siquiera puede ser una solución estacionaria. En el tema anterior vimos, tanto al principio del tema como al final al estudiar el límite clásico del oscilador armónico, que cuando varía la velocidad clásica de la partícula también varía la amplitud de la función de onda. En particular vimos que si en una región disminuye la velocidad clásica la amplitud de la función de onda aumenta y al contrario cuando aumenta la velocidad clásica. La función de onda cuasiclásica tiene la fase correcta en el límite clásico, de modo que lo que vamos a hacer es introducir un término de amplitud para obtener una función de onda aún más correcta en el límite clásico.

En el tema anterior vimos que clásicamente la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula, en un estado estacionario, debe variar como la inversa de la velocidad clásica, de modo que la siguiente función de onda podrá describir a una partícula correctamente en el límite clásico:

$$\varphi(x,t) = \frac{C}{\sqrt{v}} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\int^x p dx - Et\right)}$$

En muchas ocasiones (cuando el potencial no depende de la velocidad) el momento conjugado p de la partícula coincide con la cantidad de movimiento, de modo que podemos escribir la función de onda anterior como:

$$\varphi(x,t) = \frac{C}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\int^x p dx - Et\right)}$$

Esta función de onda constituye, como veremos, la aproximación WKB. Además de tener la fase correcta en el límite clásico, también se ha corregido el problema de la amplitud. Además esta función de onda, como vamos a comprobar, si que representa un estado estacionario. En un estado estacionario la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula no depende del tiempo, de modo que si consideramos la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$$

se debe verificar que la densidad de corriente debe ser constante. Si recordamos, la densidad de corriente viene dada por la expresión:

$$j = \frac{1}{m} \Re\left(\varphi^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \varphi\right)$$

En nuestro caso, para la función de onda que estamos considerando, la densidad de corriente vale:

$$\begin{aligned} j &= \frac{1}{m} \Re\left(\frac{C^*}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\int^x p dx - Et\right)} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \frac{C}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\int^x p dx - Et\right)}\right) = \\ &= \frac{1}{m} \Re\left(i\hbar \frac{|C|^2}{2p^2} \frac{dp}{dx} + |C|^2\right) = \frac{|C|^2}{m} \end{aligned}$$

de modo que efectivamente la densidad de corriente es constante y se verifica la ecuación de continuidad (por el contrario la función de onda cuasiclásica no verifica la ecuación de continuidad). De modo que hemos encontrado mediante argumentos intuitivos una función de onda que debe describir correctamente el movimiento de las partículas en el límite clásico. Lo que vamos a hacer a continuación es analizar el límite clásico de la ecuación de Schrödinger, es decir, en qué se convierte esta ecuación cuando podamos considerar la constante de Planck como pequeña. Como veremos, en este límite se recupera la mecánica clásica.

Vamos a analizar la ecuación de Schrödinger en una dimensión (aunque los resultados que vamos a obtener se generalizan muy fácilmente al caso de tres dimensiones) que recordamos que era:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)$$

Podemos considerar sin pérdida de generalidad la siguiente función de onda:

$$\psi(x,t) = A(x,t)e^{\frac{i}{\hbar}S(x,t)}$$

donde $A(x,t)$ y $S(x,t)$ son dos funciones reales (en principio la función $S(x,t)$ no se debe confundir con la acción clásica, aunque veremos que en el límite clásico coincide con la acción). Vamos a introducir esta función de onda genérica en la ecuación de Schrödinger.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}Ae^{\frac{i}{\hbar}S} &= \frac{\partial A}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}S} + \frac{i}{\hbar}A\frac{\partial S}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}S} \\
\frac{\partial}{\partial x}Ae^{\frac{i}{\hbar}S} &= \frac{\partial A}{\partial x}e^{\frac{i}{\hbar}S} + \frac{i}{\hbar}A\frac{\partial S}{\partial x}e^{\frac{i}{\hbar}S} \\
\frac{\partial^2}{\partial x^2}Ae^{\frac{i}{\hbar}S} &= \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}e^{\frac{i}{\hbar}S} + 2\frac{i}{\hbar}\frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial S}{\partial x}e^{\frac{i}{\hbar}S} + \frac{i}{\hbar}A\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}e^{\frac{i}{\hbar}S} - \frac{1}{\hbar^2}A\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 e^{\frac{i}{\hbar}S}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}S} - A\frac{\partial S}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}S} = \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}e^{\frac{i}{\hbar}S} - \frac{i\hbar}{m}\frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial S}{\partial x}e^{\frac{i}{\hbar}S} - \frac{i\hbar}{2m}A\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}e^{\frac{i}{\hbar}S} + \frac{1}{2m}A\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 e^{\frac{i}{\hbar}S} + V(x)Ae^{\frac{i}{\hbar}S}
\end{aligned}$$

Una vez que hemos eliminado el factor común $e^{\frac{i}{\hbar}S}$, la parte real e imaginaria de los dos términos deben ser iguales de forma independiente, de modo que, teniendo en cuenta que las funciones A y S son reales, se obtienen las siguientes dos ecuaciones:

$$\begin{aligned}
\hbar\frac{\partial A}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{m}\frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial S}{\partial x} - \frac{\hbar}{2m}A\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \\
-A\frac{\partial S}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{1}{2m}A\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V(x)A
\end{aligned}$$

Estas dos ecuaciones son equivalentes a la ecuación de Schrödinger, ya que hasta el momento no hemos hecho ninguna aproximación. Vamos a analizar cada una de estas ecuaciones por separado. La primera ecuación la podemos escribir como:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{m}\frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial S}{\partial x} + \frac{1}{2m}A\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0$$

multiplicando por $2A$ queda:

$$2A\frac{\partial A}{\partial t} + 2\frac{1}{m}A\frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial S}{\partial x} + \frac{1}{m}A^2\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0$$

o bien:

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(A^2\frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}\right) = 0$$

Es decir, que la primera ecuación no es otra que la ecuación de continuidad para la densidad de probabilidad de la posición. Por tanto, la densidad de corriente de probabilidad viene dada por:

$$j = A^2\frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}$$

Si hacemos la analogía con un fluido, la densidad de probabilidad en cada punto del espacio se mueve con una velocidad:

$$v = \frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}$$

Vamos a analizar a continuación la segunda ecuación, que se puede escribir como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{1}{2m}A\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V(x)A + A\frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

Ahora si que vamos a tomar el límite clásico. Si consideramos el caso límite $\hbar \to 0$ podemos despreciar el primer término, de modo que la ecuación queda:

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V(x) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

Esta ecuación no es otra que la ecuación de Hamilton-Jacobi para la acción clásica de la partícula. Si recordamos la mecánica clásica, el gradiente de S es precisamente el momento, de modo que:

$$v = \frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}$$

(lógicamente, en el caso en que el potencial no dependa de la velocidad), De modo que lo que hemos encontrado es que en el límite en que $\hbar \to 0$, los puntos de la densidad de probabilidad se mueven siguiendo las trayectorias clásicas. En este límite desaparece el principio de indeterminación, ya que los operadores $\hat{x}$ y $\hat{p}$ conmutan y se puede determinar simultáneamente la posición y el momento de una partícula, por tanto hemos recuperado la mecánica clásica. Lo que no queda claro es que la interpretación probabilística de la mecánica cuántica tienda al determinismo de la mecánica clásica, pero este es un tema que no trataremos aún ya que constituye hoy en día un tema de investigación. Podemos ver que la ecuación de Hamilton-Jacobi es equivalente a la ecuación de Newton de la siguiente forma. Si tomamos la derivada parcial respecto a x de la ecuación de Hamilton-Jacobi obtenemos el siguiente resultado:

$$\frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{dV(x)}{dx}+\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial S}{\partial x}=0$$

si consideramos que $\partial S/\partial x = mv$ y reordenando términos, obtenemos que:

$$m\frac{\partial v}{\partial t}+mv\frac{\partial v}{\partial x}=-\frac{dV(x)}{dx}$$

El término que aparece a la izquierda es precisamente una derivada total respecto del tiempo, ya que

$$\frac{d}{dt}=\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x}$$

de modo que la ecuación de Hamilton-Jacobi nos ha conducido a la siguiente ecuación:

$$m\frac{dv}{dt}=-\frac{dV(x)}{dx}$$

que es la ecuación de Newton de la mecánica clásica.

A lo largo de este apartado hemos analizado cómo la teoría cuántica tiende a la clásica en el límite $\hbar \to 0$. En este límite no sólo la descripción de las partículas tiende a la teoría clásica, sino que también la descripción de la radiación tiende también a la teoría ondulatoria clásica dada por el electromagnetismo.

Por último, podemos ver que la función de onda que propusimos intuitivamente al principio del tema es la que se obtiene en el límite en que la constante de Planck se hace pequeña. La ecuación de continuidad nos ha quedado:

$$\frac{\partial A^2}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}\left(A^2\frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}\right)=0$$

Para una solución estacionaria el primer término es nulo, de modo que:

$$A^2\frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}=C^2 \quad \text{(constante)}$$

En el límite $\hbar \to 0$, $\frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}=v$ (la velocidad clásica), de modo que $A = C/\sqrt{v}$ y las soluciones estacionarias son de la forma:

$$\frac{C}{\sqrt{v}}e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

donde S es la acción clásica, de modo que se recupera la función de onda cuasiclásica.

En el siguiente apartado vamos a analizar formalmente la aproximación WKB y vamos a ver cómo podemos utilizar la solución clásica para obtener el compotamiento cuántico de las partículas.