La función de onda cuasiclásica.

En un tema anterior vimos que las ecuaciones de evolución de los valores medios de los operadores en mecánica cuántica son muy similares a las ecuaciones de la mecánica clásica. Son precisamente los valores medios de los operadores los que deben tender a la teoría clásica y no los operadores en sí, ya que en mecánica clásica no aparece ningún operador sino única y exclusivamente funciones (variables) dinánicas. En particular, en un problema unidimensional, los valores medios de la posición y el momento de una partícula evolucionan de acuerdo con las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle[\hat{x},\hat{H}]\right\rangle = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m} \\
\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{p},\hat{H}\right]\right\rangle = -\left\langle\frac{dV(\hat{x})}{d\hat{x}}\right\rangle
\end{aligned}$$

En el caso en que el potencial, como una función de x, varíe lentamente en el espacio, de modo que un paquete de ondas tenga una extensión pequeña en comparación con la distancia característica de variación del potencial, el centro del paquete de ondas evolucionará de acuerdo con las ecuaciones de la mecánica clásica. Como vimos, la razón consiste en que en ese caso se verifica la igualdad

$$\left\langle\frac{dV(\hat{x})}{d\hat{x}}\right\rangle \simeq \frac{dV\left(\langle\hat{x}\rangle\right)}{d\langle\hat{x}\rangle}$$

de modo que los valores medios de $\hat{x}$ y $\hat{p}$ verifican las ecuaciones de Hamilton. Para el caso de una partícula libre, o sometida a una fuerza constante, o una fuerza proporcional a x, como en el oscilador armónico, la igualdad anterior siempre se verifica. Por tanto, en esos casos particulares los valores medios de $\hat{x}$ y $\hat{p}$ evolucionan rigurosamente de acuerdo con la mecánica clásica.

Vamos a estudiar un poco más la partícula libre. Cómo es posible que dos teorías tan distintas como la mecánica cuántica y la mecánica clásica logren predecir resultados parecidos. Para una partícula libre vimos que la solución de la ecuación de Schrödinger es de la forma:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\tilde{\psi}(k)\right]_{t=0} e^{i(kx-\omega t)}dk$$

Vamos a utilizar la función de onda en la representación de momentos en lugar de la transformada de Fourier de la función de onda, para lo cual vamos a usaremos la notación de Dirac que hemos aprendido. Para el caso en que el Hamiltoniano no depende del tiempo podemos obtener el estado de la partícula en el instante t utilizando el operador evolución como sigue:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(0)\rangle$$

donde $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$. Introducimos ahora la relación de cierre para la representación de momentos:

$$|\psi(t)\rangle = \int dp\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|p\rangle\langle p|\psi(0)\rangle = \int dp\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}|p\rangle\langle p|\psi(0)\rangle = \int dp\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|p\rangle\langle p|\psi(0)\rangle$$

donde $E = p^2/2m$. Por último, proyectamos sobre el bra $\langle x|$ para obtener la función de onda:

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \psi(x,t) = \int dp\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,\langle x|p\rangle\,\bar{\psi}(p,0) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\int dp\,\bar{\psi}(p,0)e^{\frac{i}{\hbar}(px-Er)}$$

que es el mismo resultado que hemos escrito anteriormente. Sabemos que el máximo del paquete de ondas en este caso describe la trayectoria clásica, pero por qué. La razón es la siguiente: el término que aparece en la exponencial no es otra cosa que la acción clásica de una partícula libre $S = px - Et$. Sabemos que la acción se hace mínima para la trayectoria clásica, de modo que alrededor de dicha trayectoria se producirá una interferencia constructiva, lo que produce que la trayectoria cuántica coincida con la trayectoria clásica. Las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger para la partícula libre son por tanto de la forma:

$$\varphi(x,t) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} = (2\pi\hbar)^{-1/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

Podemos extender esta ecuación al caso en que la partícula esté sometida a fuerzas. Como hemos dicho, en el caso en que el potencial varíe lentamente en el espacio, la trayectoria debe coincidir con la trayectoria clásica. Esto se verificará si las soluciones estacionarias son de la forma:

$$\varphi(x,t) = Ce^{\frac{i}{\hbar}S}$$

Esta función de onda se denomina la función de onda cuasiclásica y es el punto de partida de la mecánica cuántica en algunos libros de texto. Vamos a dar otra interpretación de esta función de onda en el caso en que el hamiltoniano clásico no dependa explícitamente del tiempo, de modo que la energía se conserva. Si la partícula se mueve en un potencial $V(x)$, para un valor fijo de la energía E, su momento vale:

$$p = \sqrt{2m\,(E - V(x))}$$

es decir, que depende de la posición. Podemos calcular la longitud de onda de de Broglie asociada a la partícula como $\lambda = h/p$, de modo que:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\,(E - V(x))}}$$

por tanto, la longitud de onda asociada a la partícula también depende de la posición. En una onda plana que viaja a lo largo del eje x, cuando nos desplazamos una distancia λ la fase de la función de onda varía en 2π. En el caso que estamos considerando la longitud de onda, como hemos visto, depende de la posición. Si nos desplazamos una distancia dx la variación que debe sufrir la fase de la función de onda será $2\pi dx/\lambda$. Por otro lado, si nos desplazamos una distancia finita la variación que debe sufrir la fase será:

$$\int^x \frac{2\pi}{\lambda}dx = \int^x k dx = \frac{1}{\hbar}\int^x p dx$$

Lo mismo ocurrirá si nos desplazamos en el tiempo, salvo que en este caso como hemos fijado la energía la frecuencia también es fija $\omega = E/\hbar$. Por tanto, si nos desplazamos en el tiempo el cambio que debe sufrir la fase será:

$$\omega t = \frac{1}{\hbar}Et$$

Por último, si queremos que la función de onda tenga la fase correcta en el punto x, t debe ser de la forma:

$$\varphi(x,t) = Ce^{\frac{i}{\hbar}\left(\int^x pdx - Et\right)}$$

El termino que hay entre paréntesis no es otra cosa que la acción clásica de la partícula. Podemos calcular ya la condición que se debe verificar para que la función de onda anterior pueda ser una solución aproximadamente correcta de la ecuación de Schrödinger. Como hemos dicho ya en varias ocasiones, el potencial debe variar lentamente en el espacio, de modo que la variación espacial de la longitud de onda asociada a la partícula debe ser pequeña, es decir, que se debe verificar la siguiente condición:

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1$$

Si se verifica la condición anterior, la trayectoria de la partícula en mecánica cuántica coincidirá con la trayectoria clásica. Vamos a analizar con un poco más de detalle esta condición. Si tenemos en cuenta la relación que existe entre λ y p, podemos expresar la condición anterior como:

$$\frac{h}{p^2}\left|\frac{dp}{dx}\right| \ll 1$$

o bien

$$\left|\frac{dp}{dx}\right| \ll \frac{p}{\lambda}$$

Es decir, que la variación espacial del momento debe ser pequeña comparada con p/λ. Por otro lado, si tenemos en cuenta la variación espacial de p y λ, podemos expresar la condición anterior de la siguiente forma:

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| = \left|\frac{d}{dx}\frac{h}{\sqrt{2m\left(E - V(x)\right)}}\right| = \frac{mh}{\left(2m\left(E - V(x)\right)\right)^{3/2}}\left|\frac{dV}{dx}\right|$$

$$\frac{\left|\frac{dV}{dx}\right|}{2\left(E - V(x)\right)} \ll \frac{1}{\lambda}$$

Esta ecuación nos dice cómo de lento debe variar el potencial para que la partícula se mueva clásicamente. En el límite que la constante de Planck tienda a cero (es decir, que se pueda considerar pequeña) la longitud de onda asociada a una partícula tiene a cero, de modo que el potencial, aunque varíe rápido siempre variará lo suficientemente lento como para que en dicho límite la partícula se mueva clásicamente. Es decir, que en el límite en que la constante de Planck tiende a cero se recupera la teoría clásica (este hecho lo analizaremos posteriormente con mayor detalle). Sin embargo, hay una excepción y es que cuando la partícula alcanza un punto de retorno clásico, el denominador de la desigualdad anterior se anula, de modo que deja de ser válida la aproximación clásica. Sabemos que en los puntos de retorno clásicos las partículas se comportan de forma muy distinta a la descripción clásica ya que pueden penetrar en las regiones clásicamente prohibidas. Por último, en muchas ocasiones diremos que cuando se pueda considerar la constante de

Planck pequeña la descripción clásica será correcta, pero pequeña comparada con qué. Anteriormente vimos que la descripción clásica será correcta si $dp/dx \ll p/\lambda$, es decir que $dp/dx \ll p^2/h$ y

$$h \ll \frac{p^2}{|dp/dx|}$$

cuando se verifique la condición anterior la mecánica clásica será correcta.

Por último, podíamos haber obtenido todas estas desigualdades a partir de la ecuación de Schrödinger de la siguiente forma. Si consideramos la función de onda cuasiclásica $\varphi(x,t) = Ce^{\frac{i}{\hbar}\left(\int^x p dx - Et\right)}$, podemos ver cuando esta función de onda es una solución de la ecuación de Schrödinger. Esta ecuación, teniendo en cuenta la dependencia temporal de la función de onda cuasiclásica que corresponde a una solución estacionaria, se puede escribir de la siguiente forma:

$$\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x,t) + p^2\varphi(x,t) = 0$$

Si derivamos la función de onda cuasiclásica obtenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}\varphi(x,t) &= \frac{i}{\hbar} p C e^{\frac{i}{\hbar}\left(\int^x p dx - Et\right)} \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x,t) &= \left(\frac{i}{\hbar}\frac{dp}{dx} - \frac{p^2}{\hbar^2}\right) C e^{\frac{i}{\hbar}\left(\int^x p dx - Et\right)} \end{aligned}$$

de modo que si introducimos la función de onda cuasiclásica en la ecuación de Schrödinger queda:

$$\left(i\hbar\frac{dp}{dx} - p^2\right) C e^{\frac{i}{\hbar}\left(\int^x p dx - Et\right)} + p^2 C e^{\frac{i}{\hbar}\left(\int^x p dx - Et\right)} = 0$$

Si queremos que la función de onda cuasiclásica sea una solución de la ecuación de Schrödinger el primer término del paréntesis debe ser mucho menor que el segundo, de modo que:

$$\hbar \left|\frac{dp}{dx}\right| \ll p^2$$

que es la desigualdad que hemos estado considerando anteriormente.