

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA
METROPOLITANA IZTAPALAPA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS
INGENIERÍA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

FUNCIÓN DE WIGNER DE LA
PARTÍCULA LIBRE NO RELATIVISTA EN
CUANTIZACIÓN POLIMÉRICA

TESIS QUE PRESENTA:

FIS. KAREN SUSANA VILLA AGUIRRE

PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRA EN CIENCIAS (FÍSICA)

ASESOR:

DR. HUGO AURELIO MORALES TÉCOTL

Quantum Mechanics: Real black magic calculus.
-Albert Einstein

Agradecimientos

A la Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Iztapalapa, por abrirme las puertas de su casa de estudios. Por su nueva forma de aprender y educar que me ha mostrado y he adquirido.

Al Dr. Hugo Morales, un gran profesor. Por permitirme ser parte de su grupo de investigación. Por su atención e instruirme de la mejor forma. Por enseñarme tanto y contribuir de gran manera en mi formación académica.

A los sinodales...

A mis padres: Carlos Villa y Gloria Aguirre, por proporcionarme la dicha de vivir, por ser una fuente constante de motivación; por su gran amor. Esto es por ustedes y para ustedes.

A mis hermanos: Carolina, Estefani y Quetzalcóatl, por ser mi compañía y crecer juntos, lo cual ha sido lo mejor. A mi cuñado Luis Madariaga, un hermano más. A mis sobrinos: Emiliano, Iyari y Ahavá, por mantener mi esperanza en el mundo.

En general, a todas las personas con las cuales interactué y de una u otra forma compartimos un espacio, un tiempo; profesores, compañeros y alumnos.

A la fortaleza que se hizo presente en mi camino para seguir adelante. A la templanza que me permite siempre ver la luz.

La difusión de los avances y resultados de esta tesis fue parcialmente apoyada por el proyecto CONACyT 237351 “Implicaciones Físicas de la Estructura del Espacio-tiempo”.

El desarrollo de esta tesis fue posible gracias al apoyo de beca CONACyT con número de becario 697096.

Resumen

Esta tesis está motivada por la necesidad de investigar el límite clásico de la gravitación cuántica por lazos que se basa en una representación discreta de un álgebra no canónica de observables gravitacionales. Los estados gravitacionales involucran gráficos que asemejan polímeros y dan lugar a una geometría discreta. Aquí damos un paso en la dirección de entender el límite clásico usando un modelo mecánico con un grado de libertad. Específicamente, calculamos la función de Wigner de una partícula libre no relativista en una dimensión espacial en cuantización polimérica. Para tal fin partimos de un desarrollo previo de H. A. Kastrup basado en el grupo euclidiano $E(2)$, que da una forma integral de la función de Wigner de un rotor plano en cuantización de Schrödinger, junto con su forma explícita para eigenestados de energía, y una ecuación para la energía que satisface la forma integral de la función de Wigner. Ésta es importante porque la función de Wigner obtenida a través del producto \star para espacio fase plano no resulta consistente con los eigenvalores de energía. Nosotros probamos que la función de Wigner explícita satisface la ecuación para la energía de manera consistente con el espectro. Para la partícula polimérica usamos su correspondencia cinemática con el rotor plano, ambos sistemas tienen el mismo espacio de Hilbert pero diferentes Hamiltonianos. A través de la forma integral calculamos la función de Wigner para eigenestados de energía de la partícula explícitamente. Hemos determinado también su correspondiente ecuación para la energía y mostramos que su solución coincide con la forma obtenida por integración. Finalmente discutimos algunas perspectivas sobre trabajo futuro incluyendo el límite clásico, estados semiclásicos, cuantización por deformación y simetría de Galileo.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	V
Lista de figuras	IX
1. Introducción	1
1.1. Cuantización polimérica de sistemas mecánicos unidimensionales	3
1.1.1. Cinemática	4
1.1.2. Representación de posición	5
1.1.3. Representación de momento	7
1.1.4. Dinámica	9
1.2. Función de distribución de Wigner	10
1.2.1. Función de Wigner	10
1.2.2. Teoría de grupos y la función de Wigner	13
1.2.3. Cuantización por deformación	14
2. Partícula libre en cuantización de Schrödinger	17
2.1. Cuantización de Schrödinger	17
2.1.1. Representación de posición	17
2.1.2. Representación de momento	18
2.2. Función de Wigner de la partícula libre	20
2.3. Cuantización por deformación y función de Wigner	22
3. El rotor cuántico en el plano	25
3.1. Cuantización usando el grupo $E(2)$	25
3.2. Función de Wigner del rotor plano	30
3.3. Ecuación de \star -genvalores	34
3.4. Ecuación para la energía	35

4. Función de Wigner de la partícula libre en cuantización polimérica	39
4.1. Partícula libre en cuantización polimérica	39
4.2. Correspondencia rotor-partícula polimérica	43
4.3. Forma integral de la función de Wigner	46
4.4. Ecuación de la energía y función de Wigner	48
5. Conclusiones y perspectivas	51

Índice de figuras

1.1. Gráfica γ_{μ_0} usada en la definición del espacio de Hilbert separable \mathcal{H}_{x_0}	6
3.1. Rotor plano clásico.	26
3.2. \mathbb{R} como cubierta universal de S^1	27
4.1. Gráfica de las eigenfunciones de energía $\psi_E(x_n)$, correspondientes a (4.8). Las curvas segmentadas corresponden a las eigenfunciones de onda si x_n fuese continuo, que no es el caso, y solo se incluyen para comparación. Las eigenfunciones que corresponden a exponenciales crecientes o decrecientes, no son admisibles, ya que como eigenfunciones de \hat{V}_μ no tienen eigenvalores dados por una fase pura.	41
4.2. Correspondencia rotor plano-partícula libre polimérica en términos de los espacios fases correspondientes.	45

Capítulo 1

Introducción

Al día de hoy los fenómenos físicos conocidos pueden explicarse como asociados fundamentalmente a cuatro interacciones: electromagnética, débil, fuerte y gravitacional. Mientras la primera y la última son evidentes en la cotidianeidad, las otras dos más bien se manifiestan a nivel microscópico. La tecnología de las comunicaciones hace uso de ondas electromagnéticas, mientras que la dinámica del sistema solar, las galaxias y el Universo es esencialmente gravitacional. Por otro lado la radioactividad puede ser descrita por medio de la fuerza débil en tanto que las reacciones nucleares atómicas lo son por medio de la fuerza fuerte. Notablemente la teoría gravitacional más sencilla compatible con las observaciones es la Teoría de la Relatividad General de A. Einstein, sin embargo, a diferencia de las otras tres interacciones fundamentales, carece de una formulación cuántica completa. Esto constituye un problema abierto en la Física Teórica debido a las limitaciones de la teoría clásica, a saber, la imposibilidad de extender la descripción de sistemas como el Cosmos o los agujeros negros a través de ciertas regiones del espacio-tiempo conocidas como singularidades. Así mismo la descripción del espacio-tiempo continuo como elemento de la teoría de la Relatividad General implica un comportamiento peculiar de los campos de materia dando lugar a cantidades físicas divergentes. Existe la expectativa de que una teoría cuántica de la gravitación podría aliviar estos problemas en un sentido similar a cómo un átomo clásico es inestable mientras que su versión cuántica es aceptable.

Una de las propuestas recientes de cuantización de la Relatividad General es la denominada Gravedad Cuántica por Lazos [1]. En ésta se hace uso de variables relacionadas con las canónicas del espacio fase de la teoría con conmutadores que admiten representaciones discretas caracterizadas por gráficas que asemejan un material polimérico por lo que también a esta propuesta se le llama cuantización polimérica de la gravedad. Las dificultades

conceptuales y técnicas han llevado a considerar este formalismo aplicado a modelos gravitacionales más sencillos o inclusive modelos mecánicos. En este último caso el marco teórico se refiere como mecánica cuántica polimérica [2].

Entre los problemas abiertos en la teoría de gravitación cuántica por lazos se encuentra una descripción adecuada del límite clásico. Es deseable que en este límite recuperemos la relatividad general clásica. Sin embargo, esto se ha explorado de manera limitada con base en modelos gravitacionales simétricos como son modelos cosmológicos ó interiores de agujeros negros. Esencialmente se ha considerado estados coherentes y modelos efectivos que surgen de un esquema de integral de trayectoria. Una alternativa poco explorada en este contexto es el uso de la función de distribución de Wigner [3, 4], cuyas propiedades permiten un planteamiento natural del límite clásico. A la fecha existen algunos estudios en esta dirección.

Entre los esfuerzos por utilizar la función de Wigner en la cuantización polimérica encontramos las siguientes. Un estudio del límite semiclásico de la cosmología cuántica de lazos, en el que un parámetro conocido como Barbero-Immirzi controla la discretitud del espacio-tiempo de forma que el modelo cosmológico clásico se recupera cuando dicho parámetro se vuelve pequeño y el volumen se vuelve grande es estudiado en [5]. El papel de los estados congruentes con los sistemas cuánticos unidimensionales definidos en un espacio de coordenadas cíclicas fue considerado en [6] para obtener una variante de la distribución de Wigner conocida como distribución de Husimi y un propagador de estado coherente semiclásico en el espacio fase. Una propuesta de la función de Wigner para la cosmología cuántica de lazos se presentó en [7] basada en la compactificación de Bohr de la recta real y la transformada de Weyl se utilizó para obtener un operador correspondiente a una tríada inversa que aparece en el modelo. Sobre la base de un límite de distribución de la representación de Schrödinger para el álgebra de Weyl en una medida ponderada Gaussiana se obtiene una función de Wigner y un producto \star que coincide con la de [7]. Se obtiene un principio de correspondencia de Bohr y un principio de incertidumbre generalizado. Una familia de distribuciones de cuasi-probabilidad parametrizadas en el espacio de fase y sus correspondientes mapas de cuantización de Weyl fue desarrollada para cosmología cuántica de lazos en [8] de modo que son invariantes bajo prescripciones de orden. Una representación integral del producto estrella en cosmología cuántica de lazos fue estudiada en [9]. También se consideró una representación polimérica de un campo escalar dentro de la cuantización por deformación en [10] para obtener un funcional polimérico de Wigner como límite de las medidas Gaussianas en la representación de Schrödinger.

La estructura de la tesis es la siguiente. En el capítulo 1 presentamos una

descripción general de la mecánica cuántica polimérica para sistemas mecánicos en una dimensión y las ideas básicas de la función de Wigner. El capítulo 2 presenta la descripción en cuantización de Schrödinger, para la partícula libre. Se describe las representaciones de posición y de momento. Usando la forma integral se obtiene la función de Wigner en representación de Schrödinger. El capítulo 3 contiene una síntesis de la cuantización basada en grupos de un rotor plano [11, 12, 13] que resulta de interés por su correspondencia con la cuantización polimérica de una partícula libre no relativista. Usando la correspondencia entre el rotor plano y la partícula libre polimérica se obtiene la función de Wigner de la partícula libre en representación de posición y de momento. Finalmente, en el capítulo 5 damos nuestras conclusiones y planteamos perspectivas.

En este capítulo presentamos los conceptos básicos de la cuantización polimérica de sistemas mecánicos en una dimensión, incluyendo sus respectivas representaciones de posición y de momento. El caso de la partícula libre no relativista se discute en el capítulo cuatro. Incluimos una breve descripción y algunos elementos de la formulación de la función de Wigner, basada en teoría de grupos y finalmente una descripción de cuantización por deformación, en representación de Schrödinger, para el caso de sistemas con espacio fase clásico dado por un plano euclidiano.

1.1. Cuantización polimérica de sistemas mecánicos unidimensionales

La mecánica cuántica polimérica se basa en una propuesta para cuantizar la gravedad [2]. Corresponde a una representación singular, en el sentido de que la cinemática y la dinámica del sistema se ven representados de forma inequivalente a la usual, la de Schrödinger; esto en lugar de ser una desventaja, representa la posibilidad de resolver limitaciones y dificultades que surgen en modelos gravitacionales como son las singularidades de agujeros negros y modelos cósmicos.

La discusión se divide en cuatro partes: Cinemática, Representación de posición, Representación de momento y Dinámica. En la primera se plantea el formalismo que permite definir los operadores básicos en términos de los cuales los demás pueden expresarse, junto con el espacio de estados correspondiente. En las segunda y tercera partes se incluyen la representación de posición y la de momento en cuantización polimérica. En la última sección, el Hamiltoniano de una partícula se estudia en la representación desarrollada en la primera parte.

1.1.1. Cinemática

Álgebra de Heisenberg

Una forma de construir una teoría cuántica a partir de su formulación clásica es asociando observables básicos que aparecen en las funciones suaves del corchete de Poisson

$$\begin{aligned}\{x, p\} &= 1 \\ \{x, 1\} &= 0 \\ \{p, 1\} &= 0\end{aligned}\tag{1.1}$$

con el conmutador entre los correspondientes operadores del sistema cuántico definidos sobre un espacio vectorial adecuado [14],

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\hat{\mathbb{1}}, [\hat{x}, \hat{\mathbb{1}}] = 0, [\hat{p}, \hat{\mathbb{1}}] = 0.\tag{1.2}$$

Esta álgebra se conoce como álgebra de Heisenberg.

En lugar de los anteriores es ventajoso introducir los operadores de Weyl

$$\hat{U}_\lambda = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (i\lambda\hat{x})^n =: e^{i\lambda\hat{x}}\tag{1.3}$$

$$\hat{V}_\mu = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (i\mu\hat{p})^n =: e^{i\mu\hat{p}/\hbar}\tag{1.4}$$

satisfaciendo las relaciones de Weyl

$$\hat{U}_\lambda \hat{V}_\mu = e^{i\lambda\mu/\hbar} \hat{V}_\mu \hat{U}_\lambda,\tag{1.5}$$

que son consistentes con el álgebra de Heisenberg (1.2).

En la representación de posición, por ejemplo,

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)\tag{1.6}$$

$$\hat{p}\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\partial_x\psi(x),\tag{1.7}$$

implementan las relaciones de conmutación canónicas (1.2).

En esta representación las relaciones de Weyl (1.5) hacen uso de

$$\hat{U}_\lambda\psi(x) = e^{i\lambda x}\psi(x),\tag{1.8}$$

$$\hat{V}_\mu\psi(x) = \psi(x + \mu).\tag{1.9}$$

$$(1.10)$$

El espacio de Hilbert $\mathcal{H}_{Sch} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$, formado por las funciones complejas de cuadrado integrable, permite implementar a los operadores de Weyl como acotados [14].

De acuerdo con el teorema de Stone-von Neumann [14], toda representación irreducible débilmente continua de los operadores de Weyl es unitariamente equivalente a la representación de Schrödinger (1.6) - (1.7). De esta manera la descripción física del sistema es esencialmente única. Sin embargo, como veremos enseguida, pueden existir representaciones interesantes inequivalentes a la de Schrödinger.

Representación polimérica

Para establecer la cuantización polimérica conviene definir el espacio de Hilbert polimérico

$$\mathcal{H}_{Pol} = \{\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \sum'_{x \in \mathbb{R}} |\psi(x)|^2 < \infty\}, \quad (1.11)$$

formado por las funciones de cuadrado sumable. Esta suma debe interpretarse sobre conjuntos numerables de \mathbb{R} aquí indicado por una prima.

El operador \hat{V}_μ no puede ser débilmente continuo aunque \hat{U}_λ si lo es, es decir, existe un operador auto-adjunto \hat{x} con $\hat{U}_\lambda = e^{i\lambda\hat{x}}$ pero no existe \hat{p} tal que $\hat{V}_\mu = e^{i\frac{\mu}{\hbar}\hat{p}}$. Es así que elegimos como base de esta representación de operadores a la posición \hat{x} y el operador de traslación \hat{V}_μ , los cuales obedecen la relación de conmutación

$$[\hat{x}, \hat{V}_\mu] = -\mu\hat{V}_\mu. \quad (1.12)$$

1.1.2. Representación de posición

En representación de posición, una base de \mathcal{H}_{Pol} se conforma por los kets $|x\rangle$ tal que $\langle x|x'\rangle = \delta_{xx'}$. En este caso

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad (1.13)$$

$$\hat{V}_\mu|x\rangle = |x - \mu\rangle. \quad (1.14)$$

Para un estado general $\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle$ los operadores de Weyl actúan como sigue

$$\hat{U}_\lambda\psi_\alpha(x) = e^{i\lambda x}\psi_\alpha(x), \quad (1.15)$$

$$\hat{V}_\mu\psi_\alpha(x) = \psi_\alpha(x + \mu). \quad (1.16)$$

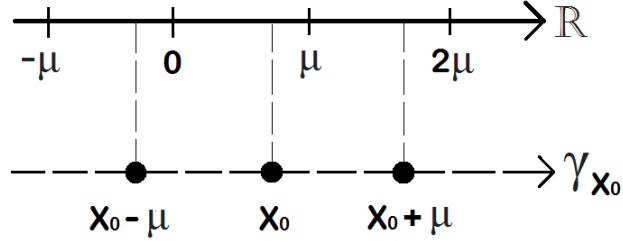


Figura 1.1: Gráfica γ_{μ_0} usada en la definición del espacio de Hilbert separable \mathcal{H}_{x_0} .

Estos cumplen la relación de Weyl

$$\hat{U}_\lambda \hat{V}_\mu \psi_\alpha(x) = e^{i\lambda\mu/\hbar} \hat{V}_\mu \hat{U}_\lambda \psi_\alpha(x). \quad (1.17)$$

Para un valor fijo de μ el operador \hat{V}_μ traslada un estado $|x_0 + n\mu\rangle$ al estado $\hat{V}_\mu |x_0 + n\mu\rangle = |x_0 + (n+1)\mu\rangle$, todos asociados a una red regular con punto base x_0 dado y paso de la red μ . La recta real puede considerarse formada por un continuo de redes con punto base $x_0 \in [0, \mu)$, dando lugar a sectores superselectos $\mathcal{H}_{Pol} = \bigoplus_{x_0 \in [0, \mu)} \mathcal{H}_{x_0}$, donde

$$\mathcal{H}_{x_0} = \left\{ \psi : \gamma_{x_0} \rightarrow \mathbb{C}, \sum_{x \in \gamma_{x_0}} |\psi(x)|^2 < \infty \right\}. \quad (1.18)$$

Aquí $\gamma_{x_0} = \{x_0 + n\mu, n \in \mathbb{Z}\}$ (ver figura 1).

A partir de los observables (1.14) y su representación de posición (1.15) y (1.16) podemos construir los observables cuánticos requeridos que estarán definidos en el espacio de Hilbert polimérico \mathcal{H}_{Pol} o en un sector superselecto \mathcal{H}_{x_0} . Mientras que \mathcal{H}_{Pol} es no separable al tener una base no numerable etiquetada por el parámetro continuo x_0 , \mathcal{H}_{x_0} sí lo es: su base numerable es $\{|x_j = x_0 + j\mu\rangle, j \in \mathbb{Z}\}$.

Por la completez de la base $|x_n\rangle$ se puede expresar cualquier estado ψ de la forma

$$|\psi\rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} a_n |x_n\rangle, \quad (1.19)$$

$$a_n = \langle x_n | \psi \rangle, \quad (1.20)$$

de donde surge la relación de completéz

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} |x_n\rangle \langle x_n| = \hat{\mathbb{I}}. \quad (1.21)$$

1.1.3. Representación de momento

Para la representación de momento, la representación del álgebra (1.12) en \mathcal{H}_{Pol} es no débilmente continua y por lo tanto el teorema de Stone von Neumann no se satisface para asegurar la existencia de un generador que de lugar a traslaciones infinitesimales. Por lo tanto no hay operador de momento. Aun así, se puede introducir una representación de “momento” aludiendo a la existencia de una base $|p\rangle$ de \mathcal{H}_{Pol} en la que los operadores básicos actúan de la forma

$$\hat{x}|p\rangle = i\hbar\partial_p|p\rangle, \quad (1.22)$$

$$\hat{V}_\mu|p\rangle = e^{ip\mu/\hbar}|p\rangle, \quad (1.23)$$

que, de nuevo, es consistente con el álgebra (1.12). Para obtener las propiedades de la base $|p\rangle$ es conveniente considerar el problema de eigenvalores para el operador de traslación, a saber (1.23), en la base de coordenadas. Esto nos lleva a la ecuación

$$\phi_p(x_n + \mu) = e^{ip\mu/\hbar}\phi_p(x_n), \quad (1.24)$$

$$\phi_p(x_n) = \langle x_n|p\rangle, \quad (1.25)$$

con solución

$$\phi_p(x_n) = Ae^{ipx_n/\hbar}. \quad (1.26)$$

Aquí A es una constante de normalización. $\phi_p(x_n)$ es periódica en p con período $2\pi\hbar/\mu$, lo que permite restringir los valores de p a, digamos, $-\pi\hbar/\mu \leq p \leq \pi\hbar/\mu$. La completéz de la base $|p\rangle$ permite expresar cualquier estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_0$ como

$$|\psi\rangle = \int_{-\pi\hbar/\mu}^{\pi\hbar/\mu} dp a(p)|p\rangle, \quad (1.27)$$

$$a(p) = \langle p|\psi\rangle, \quad (1.28)$$

que a su vez conduce a la relación de completéz en base de momento

$$\int_{-\pi\hbar/\mu}^{\pi\hbar/\mu} dp |p\rangle \langle p| = \hat{I}. \quad (1.29)$$

Dado que el problema de eigenvalores del operador de traslación (1.23) implica que la variable continua p en la base $|p\rangle$ está sujeta a la normalización de la delta de Dirac que es periódica en su argumento

$$\langle p|p'\rangle = \delta_P(p - p'). \quad (1.30)$$

Insertando (1.21) en (1.29) y el uso de las funciones propias de traslaciones (1.26) como la relación $\sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{in\theta} = 2\pi\delta_p(\theta)$, donde $\delta_p(\theta)$ es periódica con período 2π , se fija la constante de normalización a $A = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi\hbar}}$.

Cambio de representación

El cambio de una base a la otra, esto es, las representaciones de posición y momento, para un estado $|\psi\rangle$ de \mathcal{H}_0 se pueden realizar usando una combinación de las relaciones de completéz anteriores, (1.21) y (1.29). Se obtiene

$$\psi(x_n) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi\hbar}} \int_{-\pi\hbar/\mu}^{\pi\hbar/\mu} dp e^{ipx_n/\hbar} \tilde{\psi}(p), \quad (1.31)$$

$$\tilde{\psi}(p) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi\hbar}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-ipx_n/\hbar} \psi(x_n), \quad (1.32)$$

con $\psi(x_n) = \langle x_n|\psi\rangle$ y $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$. Por ejemplo, las eigenfunciones de el operador de traslación en representación de momento se convierten bajo la siguiente transformación

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_{p'}(p) &= \sqrt{\frac{\mu}{2\pi\hbar}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-ipx_n/\hbar} \varphi_{p'}(x_n) \\ &= \sqrt{\frac{\mu}{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\mu}{2\pi\hbar}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-i(p-p')x_n/\hbar} \varphi_{p'}(x_n) \\ &= \frac{\mu}{2\pi\hbar} \delta_P\left(\frac{\mu}{\hbar}(p - p')\right) \\ &= \delta_P(p - p'), \end{aligned} \quad (1.33)$$

donde en la tercera igualdad se ha usado la propiedad de la función delta para agumentos exponenciales.

1.1.4. Dinámica

El operador central en la dinámica cuántica es el Hamiltoniano. La falta de un generador de traslaciones espaciales nos lleva a la necesidad de modificar el término cinético del Hamiltoniano en representación de Schödinger

$$\hat{H}^{Sch} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{T}(\hat{x}) \quad (1.34)$$

en la siguiente expresión, $\hat{T}(\hat{x})$ siendo un potencial que representa la interacción de la partícula con un agente externo, por una con la forma

$$\hat{H}_{\mu_0} = \hat{K}_{\mu_0} + \hat{T}(\hat{x}). \quad (1.35)$$

La necesidad de sustituir el operador de momento por uno polimérico nos lleva a considerar una escala μ_0 . Para proponer una forma de \hat{K}_{μ_0} podemos considerar la forma clásica $e^{ip\mu_0/\hbar}$ con la siguiente aproximación

$$\cos\left(\frac{p\mu_0}{\hbar}\right) \approx 1 - \frac{p^2\mu_0^2}{2\hbar^2} \quad (1.36)$$

$$\Rightarrow p^2 \approx \frac{\hbar^2}{\mu_0^2}(2 - e^{ip\mu_0/\hbar} - e^{-ip\mu_0/\hbar}). \quad (1.37)$$

Esto sugiere considerar

$$\hat{K}_{\mu_0} := \frac{\hbar^2}{2m\mu_0^2}(2 - \hat{V}_{-\mu_0} - \hat{V}_{\mu_0}). \quad (1.38)$$

Así se propone el Hamiltoniano

$$\hat{H}_{\mu_0} = \frac{\hbar^2}{2m\mu_0^2}[2 - \hat{V}_{\mu_0} - \hat{V}_{-\mu_0}] + \hat{T}(\hat{x}). \quad (1.39)$$

A partir de este Hamiltoniano polimérico podemos calcular el espectro de energía al resolver el problema de eigenvalores

$$\hat{H}_{\mu_0}\psi_E(x) = E\psi_E(x). \quad (1.40)$$

Así mismo se puede definir el operador de evolución polimérico como

$$\mathcal{U}_{Pol}(t; t_0) = e^{-i\hat{H}_{\mu_0}(t-t_0)/\hbar}. \quad (1.41)$$

Podemos vislumbrar de la forma de los operadores básicos (1.12)-(1.14) que la solución del problema de eigenvalores de energía (1.24) y del propagador basado en (1.25) involucrará resolver ecuaciones en diferencias. El primero se revisará en el último capítulo. El segundo se estudió en [15, 16, 17].

1.2. Función de distribución de Wigner

Comenzando con las ideas de cuantización dadas por Weyl, Wigner y Moyal [18], entre otros, se introdujo la noción de cuantización por deformación por Bayen, Flato, Fronsdal, Lichnerowicz y Sterhneimer [19], quienes sugieren una deformación no tanto en la naturaleza de los observables, sino más bien una deformación en el álgebra de observables. En cuantización por deformación los observables se describen como las funciones suaves de la mecánica clásica pero su álgebra se deforma por un producto denominado producto \star , con el parámetro de deformación la constante de Planck \hbar .

En esta sección primeramente se da la discusión de la función de Wigner como aquella asociada al operador de densidad cuyo interés radica en la posibilidad de explorar propiedades cuánticas en el marco del espacio fase clásico. En seguida recordamos la relación que existe entre un sistema con estructura de grupo de Lie y su función de Wigner. Finalmente recordaremos superficialmente la asociación de observables clásicos con operadores definidos en un espacio de Hilbert mediante la aplicación de Weyl y el cuantizador de Stratonovich-Weyl.

1.2.1. Función de Wigner

En 1932, Wigner estudiando en inicio correcciones cuánticas en la mecánica estadística, se da a la tarea de dar una formulación de un estado cuántico en el espacio fase, por medio de la función de Wigner y la transformada de Weyl [4]. Las principales razones de tomar en cuenta la formulación de Wigner-Weyl en lugar de la de Schrödinger (las cuales resultan equivalentes), son debidas a la naturaleza de incluir de forma natural estados mixtos en la primera, a diferencia de la segunda formulación; otra razón puede ser proveer un límite clásico de la mecánica cuántica, bien controlado y esto es posible debido a que ambas descripciones se encuentran en el espacio fase. A su vez la función de Wigner obtiene el valor esperado de algún observable físico, definido no siempre positivo, por lo que la función de Wigner representa una peculiar distribución de probabilidad, llamada de *cuasiprobabilidad*.

Construcción de la función de Wigner

A nivel cuántico un operador muy importante es el operador de densidad $\hat{\rho}$. Para estados puros $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ corresponde a la función de Wigner, como veremos en seguida.

Es sugestivo interpretar la función de Wigner como una extensión de la dis-

tribución de probabilidad en el espacio fase, que sin embargo resulta no ser positiva definida.

Una densidad de probabilidad clásica \mathcal{P} puede expresarse usando un producto de deltas de Dirac $\delta(X - x)$ y $\delta(P - p)$ como sigue

$$\mathcal{P}(x, p) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} dXdP \mathcal{P}(X, P) \delta(X - x) \delta(P - p). \quad (1.42)$$

Usando la forma integral de las deltas

$$\delta(X - x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} du e^{iu(X-x)}, \quad \delta(P - p) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dv e^{iv(P-p)} \quad (1.43)$$

se tiene

$$\mathcal{P}(x, p) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} dudv e^{-iux} e^{ivp} \left[\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} dXdP e^{-ivP+iuX} \mathcal{P}(p, x) \right] \quad (1.44)$$

siendo la expresión dentro del corchete el promedio estadístico de la función $e^{-ivP+iuX}$, es decir,

$$\mathcal{P}(x, p) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} dudv e^{-iux} e^{ivp} \langle e^{-ivP+iuX} \rangle. \quad (1.45)$$

Esto sugiere que en el caso cuántico podemos considerar

$$W(x, p) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} dudv e^{-iux} e^{ivp} \langle e^{-iv\hat{p}+iu\hat{x}} \rangle, \quad (1.46)$$

con $W(x, p)$ la función de distribución cuántica, mejor conocida como función de Wigner. Para encontrar la forma usual analicemos este promedio cuántico

$$\begin{aligned} \langle e^{-iv\hat{p}+iu\hat{x}} \rangle &= Tr(\hat{\rho} e^{-iv\hat{p}+iu\hat{x}}) &= \\ \int_{\mathbb{R}} dx \langle x | \hat{\rho} e^{-iv\hat{p}+iu\hat{x}} | x \rangle & &= \\ &= e^{-iuv/2} \int_{\mathbb{R}} dx e^{iux} \langle x | \hat{\rho} e^{-iv\hat{p}} | x \rangle \\ &= e^{iu(x-\frac{u}{2})} \int_{\mathbb{R}} dx \langle x | \hat{\rho} | x - v \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx' e^{iux'} \langle x' - v/2 | \hat{\rho} | x' - v/2 \rangle, \quad (1.47) \end{aligned}$$

así, en términos del valor esperado y haciendo uso de los operadores de posición y momento, tenemos

$$\begin{aligned}
W(x, p) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} dudv e^{-iux} e^{ivp} \left[\int_{\mathbb{R}} dx' e^{iux'} \langle x' + v/2 | \hat{\rho} | x' - v/2 \rangle \right] \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} dx' dv \left(\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} du e^{-iu(x-x')} \right) e^{ivp} \langle x' + v/2 | \hat{\rho} | x' - v/2 \rangle \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} dx' dv \delta(x - x') e^{ivp} \langle x' + v/2 | \hat{\rho} | x' - v/2 \rangle. \quad (1.48)
\end{aligned}$$

Finalmente podemos escribir para la función de Wigner

$$W(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dv e^{ivp} \langle x + v/2 | \hat{\rho} | x - v/2 \rangle. \quad (1.49)$$

Usando $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$ para un estado genérico lleva a una forma general de $f(x, p) = Tr(\hat{\Omega}(x, p)\hat{F})$ y ésta última se obtiene para $|\psi\rangle = |\psi_E\rangle \rightarrow H|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle$, un eigenestado de energía. $\hat{\omega}(x, p)$ cuantizador de Stratonovich-Weyl que se define mas adelante, en la sección de cuantización por deformación. El valor esperado de un observable se encuentra calculando

$$\langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle = \frac{\int_{\mathbb{R}^2} f(p, x) W_{\psi}(p, x) dp dx}{\int_{\mathbb{R}^2} W_{\psi}(p, x) dp dx}. \quad (1.50)$$

Por otro lado la ecuación de evolución para la función de Wigner dependiente del tiempo está dada por

$$\frac{dW}{dt} = \{H, W\}_M \quad (1.51)$$

con H el hamiltoniano clásico y M indicando el paréntesis de Moyal. Es de observar que mientras que en la formulación de Schrödinger lo que nos proporciona la dinámica del sistema es la ecuación de onda, lo que nos proporcionara aquí la dinámica del sistema será la ecuación de Liouville.

Propiedades de la función de Wigner

Las propiedades de la distribución de Wigner $W_{\psi}(x, p)$ que se consideran de mayor interés para un estado puro [3] son la siguientes:

(i) $W_{\psi}(x, p)$ debería ser una forma hermítica del estado $\psi(x)$, es decir

$$W_{\psi}(x, p) = \langle\psi|\hat{M}(x, p)|\psi\rangle, \quad (1.52)$$

donde $\hat{M}(x, p)$ es un operador autoadjunto que depende de x y p . Según vimos en la ecuación (1.45)

$$\hat{M}(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dv \left| x - \frac{v}{2} \right\rangle e^{ivp} \left\langle x + \frac{v}{2} \right|, \quad (1.53)$$

que es en efecto autoadjunto.

(ii) Densidades de probabilidad marginales. Se obtienen como sigue

$$\int_{\mathbb{R}} dp W_{\psi}(x, p) = |\psi(x)|^2 = \langle x | \hat{\rho} | x \rangle \quad (1.54)$$

$$\int_{\mathbb{R}} dx W_{\psi}(x, p) = |\psi(p)|^2 = \langle p | \hat{\rho} | p \rangle \quad (1.55)$$

$$\int_{\mathbb{R}} dp \int_{\mathbb{R}} dx W_{\psi}(x, p) = \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1. \quad (1.56)$$

(iii) $W_{\psi}(x, p)$ debería ser covariante Galileana

- $\psi(x) \rightarrow \psi(x + a) \Rightarrow W_{\psi}(x, p) \rightarrow W_{\psi}(x + a, p)$
- $\psi(x) \rightarrow e^{ip'x/\hbar} \psi(x) \rightarrow W_{\psi}(x, p) \rightarrow W_{\psi}(x, p - p')$.

(iv) En el caso sin interacción la ecuación de movimiento es la clásica

$$\frac{\partial W_{\psi}}{\partial t} = -\frac{p}{m} \frac{\partial W_{\psi}}{\partial x}. \quad (1.57)$$

(v) Si $W_{\psi_1}(x, p)$ y $W_{\psi_2}(x, p)$ son las funciones de Wigner correspondientes a los estados ψ_1 y ψ_2 , respectivamente, entonces

$$\left| \int_{\mathbb{R}} dx \psi_1^*(x) \psi_2(x) \right|^2 = 2\pi\hbar \int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} dp W_{\psi_1}(x, p) W_{\psi_2}(x, p) \quad (1.58)$$

En particular tenemos

- para $\psi_1 = \psi_2 = \psi(x) : \int_{\mathbb{R}} dp \int_{\mathbb{R}} dx [W_{\psi}(x, p)]^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$.
- $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$, estados ortogonales, $\int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} dp W_{\psi_1}(x, p) W_{\psi_2}(x, p) = 0$, de modo que $W_{\psi}(x, p)$ no puede ser positiva definida.

En los siguientes capítulos serán empleadas algunas de estas propiedades.

1.2.2. Teoría de grupos y la función de Wigner

Es posible construir la función de Wigner vía teoría de grupos, ver [20]. Para nuestro caso, el grupo euclideo $E(2)$ de traslaciones y rotaciones en el plano \mathbb{R}^2 [11, 13], nos será útil para construir tanto la función de Wigner para el rotor y, por dualidad, la función de Wigner para la partícula libre no relativista en representación polimérica.

Operador de Wigner

El operador de Wigner puede interpretarse intuitivamente, como la transformada de Fourier de la representación en un espacio de Hilbert de los elementos de un grupo.

Sea G un grupo de Lie con N generadores Y_n , $n = 1, \dots, N$. Denotando la identidad del grupo como $g[0]$, γ un conjunto de N parámetros en una región $R_G \in \mathbb{R}^N$, los elementos del grupo se expresan como

$$g[\gamma] = e^{i \sum_{n=1}^N \gamma_n Y_n} \quad (1.59)$$

y se dicen parametrizados en coordenadas polares. Para $x \in \mathbb{R}^N$, el operador de Wigner se define como

$$\mathcal{W}^G(x) = \int_{R_G} dg[\gamma] e^{i\gamma^T y} g[\gamma] = \int_{R_G} dg[\gamma] e^{i \sum_{n=1}^N \gamma_n (Y_n - y_n)} \quad (1.60)$$

con $\int_{R_G} \dots$ la integral de Haar del grupo G .

Sean φ, ψ funciones en $\mathcal{H} \subset \mathcal{L}^2(G)$ espacio de Hilbert, con producto interno $(\varphi, \psi)_{\mathcal{H}}$. La acción del grupo G sobre \mathcal{H} es $g\psi(h) = \psi(hg)$.

La función de Wigner sobre G se define por medio de un funcional sesquilineal de $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$, que a su vez es una función sobre $y \in \mathbb{R}^N$

$$W^G(\varphi, \psi|x) = (\varphi, \mathcal{W}^G(x)\psi)_{\mathcal{H}}. \quad (1.61)$$

Muchos modelos usan espacios que son espacios cocientes de los grupos de modo que $\psi(hg) = \psi(g)$ es una función de menos variables que la dimensión N del grupo. Estudiaremos ahora el caso del grupo de Heisenberg y $E(2)$ en el capítulo 3 para el rotor plano.

1.2.3. Cuantización por deformación

Aquí seguimos [19] para estudiar la cuantización por deformación en un espacio fase \mathbb{R}^2 .

Consideremos un sistema $1D$ con variables canónicas x, p y un paréntesis de Poisson no trivial

$$\{x, p\} = 1, \quad (x, p) \in \mathbb{R}^2. \quad (1.62)$$

Sea $f = f(x, p)$ una función con transformada de Fourier $\tilde{f} = \tilde{f}(\lambda, \mu)$ bien definida

$$\tilde{f} = \tilde{f}(\lambda, \mu) = \int_{\mathbb{R}^2} f(x, p) e^{-i(\lambda p + \mu x)} dx dp. \quad (1.63)$$

Según la regla de Weyl, el operador cuántico correspondiente a f se define como

$$\hat{f} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}^2} \tilde{f}(\lambda, \mu) \hat{U}(\mu, \lambda) d\lambda d\mu \quad (1.64)$$

$$\hat{U}(\mu, \lambda) = e^{-i(\lambda\hat{p} + \mu\hat{x})}, \quad (\lambda, \mu) \in \mathbb{R}^2. \quad (1.65)$$

Los operadores unitarios $\hat{U}(\mu, \lambda)$ permiten escribir

$$\hat{f} = \int_{\mathbb{R}^2} f(x, p) \hat{\Omega}(p, x) \frac{dp dx}{2\pi\hbar} \quad (1.66)$$

con

$$\hat{\Omega} = \frac{\hbar}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-i(\lambda p + \mu x)} \hat{U}(\mu, \lambda) d\lambda d\mu, \quad (1.67)$$

el cuantizador de Stratonovich-Weyl. De este modo podemos establecer

$$f(x, p) = Tr(\hat{\Omega}(p, x) \hat{f}). \quad (1.68)$$

Ahora bien, considerando que $f_1(x, p)$ y $f_2(x, p)$ son las funciones que corresponden a los operadores \hat{f}_1 y \hat{f}_2 , respectivamente, se encuentra que el producto de operadores ésta en correspondencia con el producto estrella \star

$$(f_1 \star f_2)(p, x) = Tr(\hat{\Omega}(p, x) \hat{f}_1 \hat{f}_2) = f_1 e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{p}}} f_2 \quad (1.69)$$

con

$$\overleftrightarrow{\mathbf{p}} := \overleftarrow{\partial_x} \overrightarrow{\partial_p} - \overleftarrow{\partial_p} \overrightarrow{\partial_x} \quad (1.70)$$

el operador de Poisson. La doble flecha " \leftrightarrow " indica una combinación de operadores que actúan a la izquierda " \leftarrow " y a la derecha " \rightarrow ". Es importante observar que (1.33) es una serie en general, para f_1 y f_2 arbitrarias, en potencias de \hbar .

El corchete de Moyal se define como

$$\{f, g\}_\star = f \star g - g \star f, \quad (1.71)$$

y satisface $\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{i\hbar} \{f, g\}_\star = \{f, g\}$.

Una ecuación central a nivel cuántico en este esquema es la ecuación de \star -genvalores

$$H \star W_E(p, x) = E W_E(p, x) \quad (1.72)$$

donde H representa el Hamiltoniano clásico y $W_E(p, x)$ la función de Wigner que contiene la información cuántica del sistema y se puede obtener

resolviendo la ecuación anterior. La relación entre la función de Wigner y el eigenestado de energía ψ_E es

$$W_E(p, x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dy e^{-ipy/\hbar} \psi_E\left(x + \frac{y}{2}\right) \psi_E^*\left(x - \frac{y}{2}\right), \quad (1.73)$$

cuya forma específica se derivó en la segunda sección. A su vez, la función de Wigner dependiente del tiempo tiene la forma

$$W_E(p, x, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dy e^{-ipy/\hbar} \psi_E\left(x + \frac{y}{2}, t\right) \psi_E^*\left(x - \frac{y}{2}, t\right). \quad (1.74)$$

Capítulo 2

Partícula libre en cuantización de Schrödinger

En este capítulo recordamos el modelo de partícula libre no relativista $1D$ en cuantización de Schrödinger, en el esquema Hamiltoniano. Se presentan las representaciones de posición y momento. Las eigenfunciones de energía y el espectro correspondiente se discuten de manera concisa. El caso de Schrödinger se usa para analizar la función de Wigner de estos eigenestados haciendo uso de la forma integral así como cuantización por deformación.

2.1. Cuantización de Schrödinger

La cuantización estándar de una partícula libre en la recta real se basa en el álgebra canónica de los operadores de posición y momento

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\hat{\mathbb{1}}, \quad (2.1)$$

definido en el espacio de Hilbert $\mathcal{H}_{Scr} = \psi : \mathbb{R} \Rightarrow \mathbb{C} \int_{\mathbb{R}} dx |\psi|^2 < \infty$. Aunque en estricto sentido estos operadores sólo están densamente definidos [14] en un tratamiento formal, es suficiente para nuestra discusión aquí.

2.1.1. Representación de posición

En la representación de posición el álgebra (2.1) puede basarse en la forma explícita

$$\hat{x}\psi^{(S)}(x) = x\psi^{(S)}(x), \quad (2.2)$$

$$\hat{p}\psi^{(S)}(x) = \frac{\hbar}{i}\partial_x\psi^{(S)}(x). \quad (2.3)$$

Dado el rango continuo de posición y momento, se puede introducir una base de eigenestados de posición $|x'\rangle_S$ con normalización a la delta de Dirac

$$\hat{x}|x'\rangle_S = x'|x'\rangle_S, \quad x \in \mathbb{R}_S \langle x''|x'\rangle_S = \delta(x'' - x'). \quad (2.4)$$

Un estado se escribe en esta base como

$$|\psi\rangle_S = \int_{\mathbb{R}} dx' \psi^{(S)}(x') |x'\rangle_S, \quad \psi^{(S)}(x') = {}_S\langle x'|\psi\rangle_S, \quad (2.5)$$

y de la relación de completitud se sigue

$$\int_{\mathbb{R}} dx' |x'\rangle_S {}_S\langle x'| = \hat{\mathbb{I}}. \quad (2.6)$$

2.1.2. Representación de momento

En este caso los operadores que cumplen con el álgebra (2.1) pueden asociarse con

$$\hat{x}\psi^{(S)}(p) = i\hbar\partial_p\tilde{\psi}^{(S)}(p), \quad (2.7)$$

$$\hat{p}\psi^{(S)}(p) = p\psi^{(S)}(p). \quad (2.8)$$

Una base de estados de momento $|p\rangle$ puede establecerse con las propiedades

$$\hat{p}|p\rangle_S = p|p\rangle_S, \quad p \in \mathbb{R} \quad (2.9)$$

$$\langle p|p'\rangle_S = \delta(p - p'). \quad (2.10)$$

La completitud de la base nos lleva a la siguiente expresión para cualquier estado $|\psi\rangle_S$

$$|\psi\rangle_S = \int_{\mathbb{R}} dp \tilde{\psi}^{(S)}(p) |p\rangle_S, \quad \tilde{\psi}^{(S)}(p) = {}_S\langle p|\psi\rangle_S, \quad (2.11)$$

junto con la relación de completez en la base de momento

$$\int dp |p\rangle_S {}_S\langle p| = \hat{\mathbb{I}}. \quad (2.12)$$

Las eigenfunciones de momento en la representación de coordenadas satisfacen

$$\hat{p}\varphi_p^{(S)}(x) = p\varphi_p^{(S)}(x), \quad (2.13)$$

$$\varphi_p^{(S)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}, \quad (2.14)$$

donde la constante de normalización es fijada por la relación de dispersión $E = \frac{p^2}{2m}$.

Cambio de representación de posición a momento

El uso de las relaciones de completitud nos permite establecer la relación entre un estado en representación de posición y su representación de momento, por medio de

$$\psi^S(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp e^{i\frac{px}{\hbar}} \tilde{\psi}^S(p) \quad (2.15)$$

$$\tilde{\psi}^S(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx' e^{-i\frac{p'x}{\hbar}} \psi^S(x'). \quad (2.16)$$

Esto muestra una completa simetría (salvo un signo) entre ambas representaciones.

Problema de eigenvalores para la energía

El problema de eigenvalores para el Hamiltoniano de partícula libre se lee

$$\hat{H}_{Schr} \psi_E^{(S)}(x) = E \psi_E^{(S)}(x) \quad (2.17)$$

$$\hat{H}_{Schr} = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (2.18)$$

Ya que \hat{H}_{Schr} conmuta con \hat{p} estos operadores deben tener eigenfunciones comunes; esto se utilizará a continuación para seleccionar los estados de energía físicamente permitidos. En la representación de posición la ecuación para eigenvalores de energía se convierte en una ecuación diferencial de segundo orden

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{xx} \psi_E^{(S)}(x) - E \psi_E^{(S)}(x) = 0, \quad (2.19)$$

que puede resolverse con la propuesta

$$\psi_E^{(S)}(x) = D e^{\sigma x} \quad (2.20)$$

dando lugar a la ecuación característica

$$\sigma^2 + \xi = 0, \quad \xi = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (2.21)$$

Tenemos dos posibilidades, según el signo de la energía,

$$\sigma = \begin{cases} \pm\sqrt{-\xi}, & E \leq 0, \\ ik = \pm i\sqrt{-\xi}, & E \geq 0. \end{cases} \quad (2.22)$$

20CAPÍTULO 2. PARTÍCULA LIBRE EN CUANTIZACIÓN DE SCHRÖDINGER

Estos pueden estar asociados a los siguientes eigenestados para los posibles valores de E

$$\psi_E^{(S)}(x) = \begin{cases} De^{\sigma x/\hbar}, & E \leq 0, \\ De^{ikx/\mu}, & E \geq 0. \end{cases} \quad (2.23)$$

Como para partícula libre \hat{H}_{Schr} y \hat{p} deben tener eigenfunciones comunes, sólo las soluciones con $E \geq 0$ están permitidas: las soluciones de energía negativa conducen a un momento imaginario de acuerdo con (2.3), (2.14) y (2.15). El continuo de la energía nos lleva a una normalización a la delta de Dirac produciendo la constante de normalización, a saber

$${}_S\langle E|E'\rangle_S = \delta(E - E'). \quad (2.24)$$

Usando (2.23) para el caso de energía positiva se obtiene el valor $D = (\frac{2mE}{\pi^2\hbar^2})^{1/4}$, una constante de normalización que depende del eigenvalor de energía. Para concluir, observemos que las funciones propias de la energía están doblemente degeneradas en el momento, como puede ser el escenario, sustituyendo (2.14) en (2.19) para dar

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad (2.25)$$

la relación de dispersión no relativista es la misma para ambos $p = \pm|p|$ eigenvalores que se asocian con la misma energía E . Recordemos $|p\rangle_S$ y $|-p\rangle_S$ son estados linealmente independientes.

2.2. Función de Wigner de la partícula libre

En la recta real, la partícula libre obedece la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar\partial_t\psi^S(x,t) = \hat{H}_0^S\psi^S(x,t) \quad (2.26)$$

$$\hat{H}_0^S = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx}, \quad (2.27)$$

con soluciones de energía definida que pueden expresarse en términos de eigenestados de momento $\hat{p}\varphi_p^S(x) = p\varphi_p^S(x)$, ecs. (2.14) y (2.15), que son también eigenestados de energía, con la forma

$$\psi_E^S(x,t) = \varphi_{pE}^S(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (2.28)$$

$$\varphi_{pE}^S(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip_E^{(S)}x/\hbar}, \quad p_E^{(S)} = \pm\sqrt{2mE}, \quad E \geq 0, \quad (2.29)$$

y normalización ${}_S\langle p_E^{(S)} | p_E'^{(S)} \rangle_S = \delta(p_E^{(S)} - p_E'^{(S)})$, $\varphi_p^S(x) = {}_S\langle x | p \rangle_S$.

Un estado general es solución de (2.26), ó paquete de onda, que puede expresarse usando una base de eigenestados de momento y un estado inicial $\psi^S(x, 0)$,

$$\psi^S(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp \tilde{\psi}^S(p) e^{i(px-Et)/\hbar}, \quad E = \frac{p^2}{2m}, \quad (2.30)$$

$$\tilde{\psi}^S(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx \psi^S(x, 0) e^{-ipx/\hbar}, \quad (2.31)$$

donde se observa que la dependencia en la ψ en t desaparece al tomar el estado inicial. El paquete de onda se reduce a un eigenestado de energía definida para el caso $\tilde{\psi}^S(p) = \delta(p - p_E^{(S)})$. El promedio en la energía y el momento para paquetes de onda son

$${}_S\langle \psi | \hat{H}_0^S | \psi \rangle_S = \int_{\mathbb{R}} dp \frac{p^2}{2m} |\tilde{\psi}^S(p)|^2 \quad (2.32)$$

$${}_S\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle_S = \int_{\mathbb{R}} dp p |\tilde{\psi}^S(p)|^2, \quad (2.33)$$

donde podemos ver que aparece la densidad de probabilidad $|\psi^{(S)}(p)|^2$.

Función de Wigner para eigenestados de energía

Una sustitución directa de los eigenestados de energía (2.28) en (1.74) nos lleva a

$$\begin{aligned} W_E(x, p, t) &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dy e^{ipy/\hbar} e^{ix/\hbar(P_E^S - y/2)} e^{-ix/\hbar(P_E^S + y/2)} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{\mathbb{R}} dy e^{ipy/\hbar} e^{-ip_E^{(S)}y/\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \delta(p - p_E^{(S)}). \end{aligned} \quad (2.34)$$

Notemos que mientras que el momento del estado $p_E^{(S)}$ aparece en el resultado final debido al cambio opuesto en $\frac{y}{2}$ en (1.74), la dependencia en la posición y el tiempo se cancelan, respectivamente.

Podemos notar inmediatamente que, dada la independencia en la posición x de la función de Wigner, su integral lleva a una distribución uniforme, como corresponde al carácter de onda plana de la eigenfunción de energía. Al integrar en el momento obtenemos esta constante. Por otro lado, al integrar en posición, si bien la integral espacial no existe, la dependencia restante

en el momento nos indica que la densidad de probabilidad en momento está centrada en $p = p_E^{(S)} = \sqrt{2mE}$, es decir, consistente con el valor de energía. Las peculiaridades resultantes de las ondas planas pueden resolverse con el uso de paquetes de onda.

Función de Wigner de paquetes de onda

Insertando (2.30) en (1.74) da lugar a $W_\psi = W_\psi(x, p, t)$

$$\begin{aligned} W_\psi &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{\mathbb{R}} dy \int_{\mathbb{R}} dp' \int_{\mathbb{R}} dp'' e^{ipy/\hbar} e^{-i(p'-p'')x/\hbar} e^{-i(p'+p'')y/2\hbar} e^{-i(E'-E'')t/\hbar} \tilde{\psi}^{S*}(p') \tilde{\psi}^S(p'') \\ &= \int_{\mathbb{R}} dp' \int_{\mathbb{R}} dp'' e^{-i(p'-p'')x/\hbar} e^{-i(E'-E'')t/\hbar} \tilde{\psi}^{S*}(p') \tilde{\psi}^S(p'') \delta\left(p - \frac{p'+p''}{2}\right). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Evidentemente que la dependencia en posición y tiempo puede aparecer en la función de Wigner para paquetes de ondas generales como resultado de la contribución de diferentes eigenestados de energía definidos. Es sencillo ver que para eigenestados de energía definida (2.35) se reduce a (2.34). Es ilustrativo considerar la función de Wigner estacionaria para paquetes de onda. Eligiendo $t = 0$ en (2.30) y realizando el cambio de variables $u = \frac{p'+p''}{2}$, $v = \frac{p'-p''}{2}$ así como la integración de la función delta, el lado izquierdo de (2.36) se convierte en la expresión bien conocida que proporciona su forma integral sólo en representación de momento de las funciones de onda, es decir

$$W_\psi(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} du e^{ixu/\hbar} \tilde{\psi}^{S*}\left(p + \frac{u}{2}\right) \tilde{\psi}^S\left(p - \frac{u}{2}\right). \quad (2.36)$$

El estudio de la función de Wigner para diferentes paquetes de ondas es interesante y útil, sin embargo, no lo discutiremos en esta tesis.

2.3. Cuantización por deformación y función de Wigner

Para corroborar la forma de la función de Wigner de la partícula libre que hemos obtenido podemos hacer uso del formalismo de cuantización por deformación. En esta sección nos basamos en [21]. Usando el producto estrella (1.69) del capítulo 1

$$f(x.p) \star g(x, p) = f(x, p) e^{\frac{i\hbar}{2} (\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x)} g(x, p) \quad (2.37)$$

2.3. CUANTIZACIÓN POR DEFORMACIÓN Y FUNCIÓN DE WIGNER 23

apropiada para el espacio fase \mathbb{R}^2 de partícula libre en $1D$, tenemos que la ecuación de \star -genvalores, toma la forma

$$H \star W_E = EW_E; \quad H = \frac{p^2}{2m} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow H \star W_E &= \frac{p^2}{2m} \star W_E(x, p) = \left(\frac{p^2}{2m}\right) e^{\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x)}(x, p) \\ &= \left(\frac{p^2}{2m}\right) W_E + \left(\frac{p^2}{2m}\right) \left(\frac{i\hbar}{2}\right) (\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x) W_E + \\ &+ \left(\frac{p^2}{2m}\right) \frac{1}{2!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 (\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x)^2 W_E + \dots \\ &= \left(\frac{p^2}{2m}\right) W_E + \left(\frac{p^2}{2m}\right) \left(-\frac{p}{m}\right) \overrightarrow{\partial}_x W_E + \\ &+ \frac{1}{2!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 \left(-\frac{p}{m}\right) \overrightarrow{\partial}_x [\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x] + \dots \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\Rightarrow H \star W_E = \frac{p^2}{2m} W_E + \left(\frac{i\hbar}{2}\right) \left(-\frac{p}{m}\right) \partial_x W_E + \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 \frac{1}{2!} \left[\frac{1}{m} \partial_{xx}^2 W_E\right] \quad (2.40)$$

$$= \frac{p^2}{2m} W_E - \frac{i\hbar p}{2m} \partial_x W_E - \frac{\hbar^2}{8m} \partial_{xx}^2 W_E = EW_E \quad (2.41)$$

por lo tanto

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{i\hbar p}{2m} \partial_x - \frac{\hbar^2}{4m} \partial_{xx}^2\right) W_E = EW_E. \quad (2.42)$$

Separando parte real e imaginaria de la ecuación anterior

$$\left(\frac{p\hbar}{2m} \partial_x\right) W_E = 0 \quad (2.43)$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar}{8m} \partial_x^2\right) W_E = EW_E. \quad (2.44)$$

La ecuación (2.42) sugiere la propuesta

$$W_E(x, p) = f(p) + \delta(p)g(x) \quad (2.45)$$

donde para $p \neq 0$, el primer término surge del carácter de la derivada espacial en (2.42), mientras que para $p = 0$ se admite el segundo término, es decir, $p\delta(p)\partial_x g(x) = 0$.

De la propuesta (2.44) que se sustituye en el lado izquierdo de (2.43) produce

$$\begin{aligned} \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar}{8m} \partial_x^2\right) W_E &= \frac{p^2}{2m} f(p) + \frac{p^2}{2m} \delta(p)g(x) - \delta(p) \frac{\hbar^2}{8m} \partial_x^2 f(p) - \delta(p) \frac{\hbar^2}{8m} \partial_x^2 g(x) \\ &= \frac{p^2}{2m} f(p) - \delta(p) \frac{\hbar^2}{8m} \partial_x^2 g(x). \end{aligned} \quad (2.46)$$

De esta forma (2.43) se convierte en la siguiente ecuación

$$\frac{p^2}{2m}f(p) - \delta(p)\frac{\hbar^2}{8m}\partial_x^2g(x) = Ef(p) + E\delta(p)g(x). \quad (2.47)$$

Considerando primero el caso $p \neq 0$ en (2.46), donde se eliminan los términos $\delta(p)$ y se tiene

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)f(p) = 0, \quad p \neq 0 \quad (2.48)$$

cuya solución puede escribirse como

$$f(p) = a_+\delta(p - \sqrt{2mE}) + a_-\delta(p + \sqrt{2mE}). \quad (2.49)$$

Para el segundo caso, es decir, $p = 0$ en (2.46), los términos que prevalecen aquí son los que contienen $\delta(p)$, si se satisface lo siguiente

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)f(p) = 0 \Leftrightarrow E = \frac{p^2}{2m} = 0. \quad (2.50)$$

De donde resulta la siguiente ecuación

$$-\delta(p)\left[\frac{\hbar^2}{8m}\partial_x^2g(x) + Eg(x)\right] = 0, \quad E = 0. \quad (2.51)$$

Considerando intencionalmente el límite de energía cero de la solución para el caso $E \neq 0$, las soluciones correspondientes son

$$g(x) = be^{\pm i\sqrt{8mEx}/\hbar}|_{E=0} = b. \quad (2.52)$$

Finalmente llegamos a la expresión de la función de Wigner que se ve de la forma

$$W_E(x, p) = A\delta(p - p_E), \quad p_E^{(S)} = \pm\sqrt{2mE}, \quad E \geq 0. \quad (2.53)$$

Este resultado puede contrastarse con el obtenido en [21], donde no se considera adecuadamente el caso de energía cero. Por otra parte, mientras ellos consideran un estado con energía definida y momento indefinido, nosotros consideramos estados de partícula libre con energía y momentos definidos.

Capítulo 3

El rotor cuántico en el plano

La descripción de un rotor cuántico en el plano en cuantización de Schrödinger resulta estar relacionada con la cuantización polimérica de una partícula en una dimensión espacial. A nivel cinemático, es decir de los espacios de Hilbert, estos sistemas son equivalentes. No así a nivel dinámico, pues los hamiltonianos son distintos.

En este capítulo describimos la cuantización del rotor plano en la representación de Schrödinger usando el enfoque de grupos, en este caso el Euclidiano en dos dimensiones $E(2)$ de acuerdo a la referencia [11]. Usando el promedio sobre el grupo $E(2)$ se calcula el operador de Wigner correspondiente. Este se reduce por integración cuando actúa sobre eigenestados de energía llevando a la función de Wigner de los mismos. Analizamos la propuesta dada en [13, 22] de uso del producto \star de caso plano y mostramos que no es compatible. Para discernir entre estas dos opciones, se deriva la ecuación para la energía que debe satisfacer esta función siguiendo [13] y se verifica explícitamente que este es el caso.

3.1. Cuantización usando el grupo $E(2)$

A nivel clásico una versión concreta del rotor plano es una cuenta que puede deslizarse sin fricción a lo largo de un alambre con forma de circunferencia de radio r_0 (ver fig. 3.1). El espacio fase correspondiente tiene la estructura topológica del cilindro $S^1 \times \mathbb{R}$. La posición de la cuenta sobre el alambre está dada por el ángulo $\varphi \in \mathbb{R} \text{ mod } 2\pi$ y su momento angular L puede tener cualquier valor real $L \in \mathbb{R}$, positivo o negativo, dependiendo de si la cuenta se mueve en sentido horario o antihorario. El Hamiltoniano y las

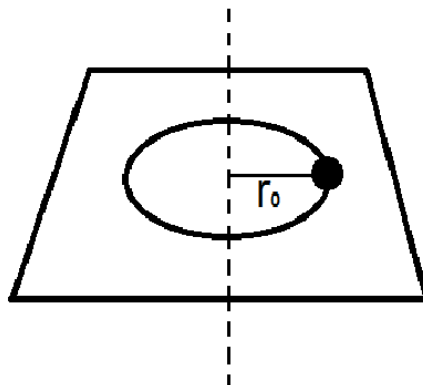


Figura 3.1: Rotor plano clásico.

variables canónicas en este caso son

$$H = \frac{L^2}{2mr_0^2}, \quad \{\varphi, L\} = 1. \quad (3.1)$$

De este modo las ecuaciones de movimiento resultan ser

$$\dot{L} = \{L, H\} = 0 \quad (3.2)$$

$$\dot{\varphi} = \{\varphi, H\} = \frac{L}{mr_0^2} =: \omega. \quad (3.3)$$

Las soluciones de estas ecuaciones indican que mientras que el momento angular es una constante de movimiento cuyo valor depende de las condiciones iniciales, el ángulo φ tiene la forma explícita

$$\varphi(t) = \omega t + \varphi_0. \quad (3.4)$$

La forma del ángulo $\varphi(t)$ juega un papel esencial en la discusión de la cuantización de este modelo. La posición espacial de la cuenta puede describirse por un valor dado $\varphi \in [0, 2\pi)$, sin embargo, la cuenta puede dar múltiples vueltas y puede pasar un número de veces $n = \mathbb{E}\left(\frac{\omega t - \varphi_0}{2\pi}\right)$, donde $\mathbb{E}(x)$ representa la parte entera de x , por un punto específico dado después de un tiempo t . Si uno considera la historia del movimiento, la circunferencia se desenrolla sobre la recta \mathbb{R} que representa el tiempo t (ver fig. 3.2). En lenguaje matemático la recta \mathbb{R} es la cubierta universal¹ de la circunferencia S^1 .

¹Un grupo cubriente universal de un grupo topológico conexo G es un grupo topológico simplemente conexo junto con un isomorfismo continuo ρ en el dual \hat{G} de G que sea uno a uno localmente; $\exists!$ para cualquier grupo, en particular un grupo de Lie.

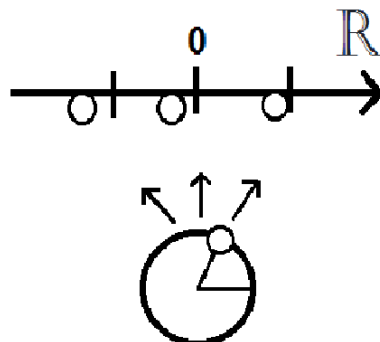


Figura 3.2: \mathbb{R} como cubierta universal de S^1 .

Para proceder con la cuantización del rotor haremos uso de la estructura algebraica del grupo $E(2)$ que contiene las rotaciones y traslaciones en el plano \mathbb{R}^2 .

Considerando \mathbb{R}^2 como el plano complejo \mathbb{C} las transformaciones de $E(2)$ pueden implementarse como sigue

$$(x, y) \in \mathbb{R}^2, x + iy =: z \in \mathbb{C}, \quad (3.5)$$

$$R(\alpha) : z \mapsto ze^{i\alpha}, \alpha \in [0, 2\pi), \quad (3.6)$$

$$T_2(t) : z \mapsto z + t, t = a + ib, a, b \in \mathbb{R}. \quad (3.7)$$

Aquí (3.6) corresponde a rotaciones mientras que (3.7) lo es a traslaciones. Implementaremos las transformaciones generales de $E(2)$ usando la representación matricial

$$g(\alpha, t) = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \alpha \in [0, 2\pi), t \in \mathbb{C}, \quad (3.8)$$

que actúan sobre los vectores

$$v = \begin{pmatrix} z \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{C} \otimes \{1 \in \mathbb{R}\}, \quad (3.9)$$

en la forma

$$g(\alpha, t)v = \begin{pmatrix} e^{i\alpha}z + t \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Para establecer el álgebra de $E(2)$ analizamos ahora los conmutadores de transformaciones infinitesimales. Con este fin truncaremos a segundo orden en los parámetros de las transformaciones. Así obtenemos

$$[g(\alpha, 0), g(0, t)] = g(\alpha, \tilde{t}) - \mathbb{I}, \quad \tilde{t} = i\alpha t, \quad (3.11)$$

$$[g(\alpha_1, 0), g(\alpha_2, 0)] = 0, \quad (3.12)$$

$$[g(0, t_1), g(0, t_2)] = 0. \quad (3.13)$$

A nivel cuántico los generadores de las transformaciones de $E(2)$ se introducen a través de

$$\hat{U}(\alpha, 0) = e^{-i\alpha\hat{L}/\hbar}, \quad \hat{U}(0, t) = e^{-i(a\hat{X}_1 + b\hat{X}_2)/\hbar\lambda_0}, \quad t = a + ib, \quad \lambda_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}. \quad (3.14)$$

La versión infinitesimal de las transformaciones cuánticas correspondientes a (3.11) dan lugar a las relaciones de conmutación siguientes

$$[\hat{L}, \hat{X}_1] = i\hbar\hat{X}_2, \quad (3.15)$$

$$[\hat{L}, \hat{X}_2] = -i\hbar\hat{X}_1. \quad (3.16)$$

La versión cuántica de (3.12) es trivial y sólo indica que L conmuta consigo mismo. Finalmente (3.13) se traduce a nivel cuántico como

$$[\hat{X}_1, \hat{X}_2] = 0. \quad (3.17)$$

Para interpretar (3.15)-(3.16) conviene considerar ciertos observables, del espacio fase clásico. Tomemos las siguientes funciones $\tilde{h}_i(\varphi, L) = 1, 2, 3$,

$$\tilde{h}_1 = \cos\varphi, \quad \tilde{h}_2 = \sin\varphi, \quad \tilde{h}_3 = L, \quad (3.18)$$

en el espacio fase

$$\Gamma = \{(\varphi, L); \varphi \in \mathbb{R} \text{ mod } 2\pi, L \in \mathbb{R}\}, \quad (3.19)$$

que generan el álgebra de Lie $\mathfrak{e}(2)$ del grupo Euclideo en el plano $E(2)$, es decir,

$$\{\tilde{h}_3, \tilde{h}_1\}_{\varphi, L} = \tilde{h}_2, \quad \{\tilde{h}_3, \tilde{h}_2\}_{\varphi, L} = -\tilde{h}_1, \quad \{\tilde{h}_1, \tilde{h}_2\}_{\varphi, L} = 0. \quad (3.20)$$

Esta álgebra corresponde con la forma cuántica (3.14)-(3.17), de este modo podemos proceder con la cuantización siguiendo esta ruta.

Es conveniente reconsiderar las transformaciones de $E(2)$ sobre el plano

por medio de una representación de matrices 3×3 que nos facilitarán su implementación a nivel cuántico.

Clásicamente el álgebra de Lie del grupo $E(2)$ en el plano consta de tres parámetros que quedan determinados por los elementos $g(\vartheta, \vec{a})$ donde $\hat{x} \mapsto R(\vartheta) \cdot x + \vec{a}$

$$g(\vartheta, \vec{a}) \cdot \vec{x} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & -\text{sen}\vartheta \\ \text{sen}\vartheta & \cos\vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

$$\vec{x}_\vartheta \equiv R(\vartheta)\vec{x} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & -\text{sen}\vartheta \\ \text{sen}\vartheta & \cos\vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

junto con los generadores del álgebra de Lie. En la forma de matrices 3×3 tenemos

$$g(\vartheta, \vec{a}) \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & -\text{sen}\vartheta & a_1 \\ \text{sen}\vartheta & \cos\vartheta & a_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

que dan lugar a los siguientes generadores

$$\tilde{L} = \left. \frac{dg(\vartheta, \vec{a})}{d\vartheta} \right|_{\vartheta=0, \vec{a}=\vec{0}}, \quad \tilde{K}_1 = \left. \frac{dg(\vartheta, \vec{a})}{da_1} \right|_{\vartheta=0, \vec{a}=\vec{0}}, \quad \tilde{K}_2 = \left. \frac{dg(\vartheta, \vec{a})}{da_2} \right|_{\vartheta=0, \vec{a}=\vec{0}}, \quad (3.24)$$

$$\tilde{L} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{K}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{K}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

y conmutadores

$$[\tilde{L}, \tilde{K}_1] = \tilde{K}_2, \quad [\tilde{L}, \tilde{K}_2] = -\tilde{K}_1, \quad [\tilde{K}_1, \tilde{K}_2] = 0. \quad (3.26)$$

Considerando el desarrollo en serie de potencias para las exponenciales de matrices 3×3 , hemos probado que

$$g(\vartheta, \vec{a} = \vec{0}) = g(\vartheta) = e^{\vartheta\tilde{L}} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & -\text{sen}\vartheta & 0 \\ \text{sen}\vartheta & \cos\vartheta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

$$g(\vartheta = 0, a_1, a_2 = 0) = g(a_1) = e^{a_1\tilde{K}_1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & a_1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

$$g(\vartheta = 0, a_1 = 0, a_2) = g(a_2) = e^{a_2\tilde{K}_2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & a_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.29)$$

así se puede escribir

$$g(\vartheta, \vec{a}) = g(a_2) \cdot g(a_1) \cdot g(\vartheta) \quad (3.30)$$

para este caso un elemento especial del grupo de Weyl-Heisenberg se escribe como

$$g_0(\vartheta, \vec{b}) = e^{b_1 \hat{K}_1 + b_2 \hat{K}_2 + \vartheta \hat{L}}. \quad (3.31)$$

Ahora las traslaciones son parametrizadas por $\vec{a} = \text{sinc}(\vartheta/2)R(\vartheta/2)\vec{b}$, donde $\text{sinc}(\alpha)$ denota $\frac{\text{sen}(\alpha)}{\alpha}$. Los elementos serán representados por [12]

$$g_0(\vartheta, \vec{b}) = e^{(\vartheta/2)\hat{L}} \cdot e^{\text{sinc}(\vartheta/2)\vec{b} \cdot \hat{K}} \cdot e^{(\vartheta/2)\hat{L}} \quad (3.32)$$

$$\Rightarrow g_0(\vartheta, \vec{a}) = e^{(\vartheta/2)\hat{L}} \cdot e^{R(-\vartheta/2)\vec{a} \cdot \hat{K}} \cdot e^{(\vartheta/2)\hat{L}} \quad (3.33)$$

este último elemento del grupo se promueve al operador que actúa en el espacio de Hilbert adecuado donde $E(2)$ es representado unitariamente por

$$U_0(\vartheta, \vec{a}) = e^{i(\vartheta/2)\hat{L}/\hbar} \cdot e^{i\vec{a}_{(-\vartheta/2)} \cdot \hat{K} \cdot e^{(\vartheta/2)\hat{L}/\hbar}}, \quad (3.34)$$

de este modo el factor $\text{sinc}(\vartheta/2)$ se elimina.

Notemos que

$$\vec{a}_{-\vartheta/2} := R(-\vartheta/2)\vec{a} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta/2 & -\text{sen}\vartheta/2 \\ \text{sen}\vartheta/2 & \cos\vartheta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (3.35)$$

3.2. Función de Wigner del rotor plano

Para construir la función de Wigner en el espacio fase Γ con topología $\mathbb{S}^1 \times \mathbb{R}$ se propone un operador de Wigner combinando U_0 con las variables clásicas $\vec{\chi}(\theta) = \chi(\cos\theta, \text{sen}\theta)$ y L dado por

$$\hat{W}[\vec{\chi}(\theta), L] = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} d\vartheta \int_{-\infty}^{\infty} da_1 da_2 \hat{U}_0, \quad (3.36)$$

en donde

$$\hat{U}_0 = e^{i(\hat{L}-L)(\vartheta/2)} \cdot e^{i(\hat{K}-\vec{\chi}(\theta)) \cdot \vec{a}_{(-\vartheta/2)}} \cdot e^{i(\hat{L}-L)(\vartheta/2)}, \quad (3.37)$$

y con la medida de Haar $dg(\vartheta, \vec{a}) = d\vartheta da_1 da_2$. La ecuación (3.37) representa un tipo de promedio en el grupo. Estas representaciones unitarias irreducibles de $E(2)$ son implementadas en el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{S}^1, \phi/2\pi; \delta)$ con el producto escalar

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \psi_2^*(\varphi) \psi_1(\varphi) \quad (3.38)$$

y la base $e_{n,\delta} = e^{i(n+\delta)\varphi}$, $\delta \in [0, 1)$ y $(e_{m,\delta}, e_{n,\delta}) = \delta_{mn}$, delta de Kronecker, donde $m, n \in \mathbb{Z}$ y

$$\psi^{(\delta)}(\varphi) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} C_n e_{n,\delta}(\varphi), \quad (3.39)$$

$$C_n = (e_{n,\delta}, \psi^{(\delta)}), \quad (3.40)$$

$$\psi^{(\delta)}(\varphi + 2\pi) = e^{i2\pi\delta} \psi^{(\delta)}(\varphi), \quad (3.41)$$

con la acción de los operadores auto-adjuntos

$$\hat{K}\psi(\varphi) = k(\cos\phi, \sin\phi)\psi(\varphi), \quad (3.42)$$

$$\hat{L}\psi(\varphi) = \frac{1}{i}\partial_\varphi\psi(\varphi), \quad (3.43)$$

$$e^{i\vec{a}_{(-\vartheta/2)} \cdot \hat{K}}\psi(\varphi) = e^{i\vec{a}_{(-\vartheta/2)} \cdot \vec{K}(\phi)}\psi(\varphi), \quad (3.44)$$

$$e^{i\vartheta\hat{L}}\psi(\varphi) = \psi(\varphi + \vartheta). \quad (3.45)$$

Diferentes representaciones irreducibles están asociadas con diferentes valores de k . La medida de Plancherel para transformadas de Fourier en $E(2)$ es kdk . Los elementos de matriz están dados por

$$\begin{aligned} W_{\psi_2\psi_1}^{(k)}[\vec{\chi}(\theta), L] &= (\psi_2, \hat{W}[\vec{\chi}(\theta), L]\psi_1) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int dg(\vartheta, \vec{a}) d\varphi e^{-i\omega + \vec{k}(\varphi) \cdot \vec{a}_{(-\vartheta/2)}} \\ &\times \psi_2^*(\varphi - \vartheta/2)\psi_1(\varphi + \vartheta/2) \end{aligned} \quad (3.46)$$

con

$$\begin{aligned} \omega &= \vec{\chi}(\theta) \cdot \vec{a}_{-\vartheta/2} + L\vartheta \\ &= a\chi(\cos\theta\cos(\alpha - \vartheta/2) + \sin\theta\sin(\alpha - \vartheta/2)) \\ &= \chi(\cos\theta, \sin\theta) \begin{pmatrix} a_1\cos\vartheta/2 + a_2\sin\vartheta/2 \\ -a_1\sin\vartheta/2 + a_2\cos\vartheta/2 \end{pmatrix} \\ &= a\chi\cos(\theta - \alpha + \vartheta/2) + a\chi\sin(\theta - \alpha + \vartheta/2). \end{aligned} \quad (3.47)$$

De manera explícita tenemos entonces

$$\begin{aligned} W_{\psi_1\psi_2}^{(k)} &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\pi}^{\pi} d\vartheta \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \int_0^\infty daa \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi \psi_2^*(\theta - \vartheta/2)\psi_1(\theta + \vartheta/2) \\ &\times e^{-i[\vec{a}\chi(\cos\alpha\cos\theta + \sin\alpha\sin\theta) + p\vartheta] + i[\vec{a}k(\cos\alpha\cos\varphi + \sin\alpha\sin\varphi)]} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\vartheta d\alpha da d\varphi e^{-ip\vartheta} \\ &\times e^{-ia\chi\cos(\theta - \alpha + \vartheta/2)} e^{iak\cos(\varphi - \alpha + \vartheta/2)} \\ &\times \psi_2^*(\theta - \vartheta/2)\psi_1(\theta + \vartheta/2) \end{aligned} \quad (3.48)$$

que incluyen dos integrales una para α y otra para φ . Usando las relaciones

$$\cos[-\alpha + (\theta + \vartheta/2)] = \text{sen}(\alpha + \varphi/2 - \theta - \vartheta/2), \quad (3.49)$$

$$\cos[-\alpha + (\varphi + \vartheta/2)] = \text{sen}(\varphi/2 - \varphi - \alpha + \vartheta/2), \quad (3.50)$$

tenemos los siguientes resultados en cada caso

$$\begin{aligned} \alpha &: \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{-i\alpha\chi\cos(\theta-\alpha+\vartheta/2)} e^{i(n-m)\alpha} = \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{-i[a\chi\text{sen}(\alpha+\varphi/2-\theta-\vartheta/2)-(n-m)\alpha]} \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i[a\chi\text{sen}(-\alpha-\varphi/2+\theta+\vartheta/2)+(n-m)\alpha]}, \quad z = -\alpha - \pi/2 + \theta + \vartheta/2 \\ &= - \int_{-(\pi)+\pi/2+\theta+\vartheta/2}^{-(\pi)+\pi/2+\theta+\vartheta/2} dz e^{ia\chi\text{sen}z+(n-m)z} e^{i(n-m)(\pi/2+\theta+\vartheta/2)} \\ &= -J_{m-n}(a\chi) e^{i(n-m)(\pi/2+\theta+\vartheta/2)}, \end{aligned} \quad (3.51)$$

y

$$\begin{aligned} \varphi &: \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi e^{iak\cos(\varphi-\alpha+\vartheta/2)} e^{i(n-m)\varphi} \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi e^{i[a\text{ksen}(-\varphi+\varphi/2+\alpha-\vartheta/2)+(n-m)\varphi]}, \quad y = -\varphi + \varphi/2 + \alpha - \vartheta/2 \\ &= - \int_{-(\pi)+\pi/2+\alpha-\vartheta/2}^{-(\pi)+\pi/2+\alpha-\vartheta/2} dy e^{iak\text{sen}y-(n-m)y} e^{i(n-m)(\pi/2+\alpha-\vartheta/2)} \\ &= -J_{m-n}(ak) e^{i(n-m)(\pi/2+\alpha-\vartheta/2)}, \end{aligned} \quad (3.52)$$

donde se ha utilizado la siguiente representación de las funciones Bessel y su relación de completitud

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\beta e^{i(x\text{sen}\beta-n\beta)}, \quad \beta \in \mathbb{Z}, \quad (3.53)$$

$$\int_0^{\infty} da a J_m(xa) J_m(ya) = \frac{1}{x} \delta(x-y). \quad (3.54)$$

Los elementos de matriz del operador de Wigner (3.36) toman la forma

$$\begin{aligned} W_{mn}^{(k)}(\theta, L) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\vartheta \int_0^{\infty} da a e^{i(n-m)\vartheta/2} e^{-iL\vartheta} \\ &\times J_{n-m}(a\chi) (-)^{m-n} J_{m-n}(ak) e^{i(n-m)(\pi-\theta)} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\vartheta e^{i(n-m)\vartheta/2} e^{i(n-m)(\pi-\theta)} e^{-iL\vartheta} \frac{\delta(k-\chi)}{k}, \end{aligned} \quad (3.55)$$

donde la dependencia en χ se elimina al ser una variable redundante realizando la integral en la medida de Plancherel kk . La función de Wigner-Moyal resultante es

$$\begin{aligned} W_{mn}(\theta, L) &= \int_0^\infty dk k V_{mn}^{(k)}(\theta, L) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} e^{i(n-m)\theta} \int_{-\pi}^\pi d\vartheta e^{i[(n-m)/2 - \frac{L}{\hbar}]\vartheta} \\ &= \frac{1}{2\pi} e^{i(n-m)\theta} \text{sinc} \pi \left[\frac{L}{\hbar} - (m+n)/2 \right]. \end{aligned} \quad (3.56)$$

En el caso $n = m$,

$$W_n(\theta, L) = \frac{1}{2\pi} \text{sinc} \pi \left[\frac{L}{\hbar} - n \right]. \quad (3.57)$$

Esta es la función de Wigner de eigenestados de energía del rotor plano basada en el operador de Wigner y el grupo $E(2)$. Las propiedades de la función de Wigner-Moyal, que involucran dos estados, y construida con base en el operador de Wigner y el grupo $E(2)$ del rotor se pueden resumir como sigue

$$\psi_j(\varphi) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} c_n^{(j)} e_n(\varphi),$$

$$j = 1, 2; \quad c_n^{(j)} = (e_n, \psi_j) \quad (3.58)$$

$$\begin{aligned} W_{\psi_2 \psi_1}(\theta, L) &= \sum_{m, n \in \mathbb{Z}} c_m^{(2)*} W_{mn}(\theta, L) c_n^{(1)} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^\pi d\vartheta e^{-iL\vartheta} \psi_2^*(\theta - \vartheta/2) \psi_1(\theta + \vartheta/2) \\ &= (\psi_2, V(\theta, L) \psi_1) \end{aligned} \quad (3.59)$$

$$\int_{-\infty}^\infty dL W_{\psi_2 \psi_1}(\theta, L) = \frac{1}{2\pi} \psi_2^*(\theta) \psi_1(\theta) \quad (3.60)$$

$$\int_{-\pi}^\pi d\theta W_{\psi_2 \psi_1}(\theta, L) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} c_m^{(2)*} \text{sinc} \pi \left(\frac{L}{\hbar} - m \right) c_m^{(1)} \quad (3.61)$$

$$\int_{-\infty}^\infty dL \int_{-\pi}^\pi d\theta W_{\psi_2 \psi_1}(\theta, L) = (\psi_2, \psi_1) \quad (3.62)$$

$$\int_{-\infty}^\infty dL \int_{-\pi}^\pi d\theta W_{\psi_2 \psi_1}^*(\theta, L) W_{\phi_2 \phi_1}^*(\theta, \frac{L}{\hbar}) = \frac{1}{2\pi} (\psi_1, \phi_1) (\psi_2, \phi_2). \quad (3.63)$$

Ahora, las propiedades de la función de Wigner se siguen de las de Wigner-Moyal anteriores. Sea $\psi_2 = \psi_1 = \psi$ en (3.57), entonces

$$W_\psi(\theta, L) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\vartheta e^{-i p \vartheta} \psi^*(\theta - \vartheta/2) \psi(\theta + \vartheta/2)$$

$$\sum_{m,n \in \mathbb{Z}} c_m^* V_{mn}(\theta, L) c_n = (\psi, V(\theta, L) \psi) \quad (3.64)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dL W_\psi(\theta, L) = \frac{1}{2\pi} |\psi(\theta)|^2 \quad (3.65)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta W_\psi(\theta, L) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} |c_n|^2 \text{sinc} \pi \left(\frac{L}{\hbar} - n \right) \equiv \omega_\psi(L) \quad (3.66)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dL \omega_\psi(L) \text{sinc} \pi \left(\frac{L}{\hbar} - m \right) = |c_m|^2 \quad (3.67)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dL \int_{-\pi}^{\pi} d\theta W_\psi(\theta, L) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} |c_n|^2 \quad (3.68)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dL \int_{-\pi}^{\pi} d\theta W_{\psi_2}(\theta, L) W_{\psi_1}(\theta, L) = \frac{1}{2\pi} |(\psi_1, \psi_2)|^2 \quad (3.69)$$

$$|W_\psi(\theta, L)| \leq 1/\pi. \quad (3.70)$$

3.3. Ecuación de \star -genvalores

Nuestro estudio puede enriquecerse con el análisis de la ecuación de \star -genvalores que debe satisfacer la función de Wigner de eigenestados de energía, es decir,

$$H_{rot} \star W_E = E W_E, \quad (3.71)$$

Es importante subrayar que (3.66) nos da la densidad de probabilidad cuántica angular mientras que (3.67)-(3.68) proporcionan la densidad de probabilidad cuántica en momento angular, esto es las densidades de probabilidad marginales. Finalmente, para un estado normalizado (3.69) es 1 en tanto que (3.70) nos da la probabilidad de transición entre estados y (3.71) muestra que la función de Wigner está acotada para estados normalizables. El producto

\star , de acuerdo con [13, 23] es el mismo que el del caso plano que discutimos en el capítulo 1. Usando el producto de Moyal

$$\begin{aligned} H_{rot} \star W_E &= \left(\frac{L^2}{2mr_0^2} \right) e^{\frac{\hbar}{2i} (\overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_\theta - \overleftarrow{\partial}_\theta \overrightarrow{\partial}_L)} W_E(\theta, L) \\ &= \frac{L^2}{2mr_0^2} W_E - \frac{\hbar i L}{2mr_0^2} \partial_\theta W_E - \frac{\hbar^2}{8mr_0^2} \partial_{\theta\theta}^2 W_E \\ &= E W_E \end{aligned} \quad (3.72)$$

Separamos parte real de parte imaginaria

$$\left(\frac{L^2}{2mr_0^2} - \frac{\hbar^2}{8mr_0^2} \partial_\theta^2 \right) W_E - \frac{\hbar i L}{2mr_0^2} \partial_\theta W_E = E W_E \quad (3.73)$$

con $L \in \mathbb{R}$; $\theta \in [-\pi, \pi]$.

Nos resultan dos ecuaciones

$$-\frac{\hbar^2}{8mr_0^2} \partial_\theta^2 W_E + \left(\frac{L^2}{2mr_0^2} - E \right) W_E = 0 \quad (3.74)$$

$$\frac{\hbar L}{2mr_0^2} \partial_\theta W_E = 0 \quad (3.75)$$

La misma estrategia usada en el capítulo 2 para la partícula libre y su ecuación de \star -genvalores con los debidos cambios $(x, p) \rightarrow (\theta, L)$ nos llevan a la solución

$$W_E(\theta, L) = A \delta(L - L_E), \quad L_E = \pm \sqrt{2mr_0^2 E}, \quad (3.76)$$

evidentemente inconsistente con el resultado (3.57). A este punto requerimos un criterio para discernir entre (3.55) y (3.76). En la siguiente sección se muestra que existe una ecuación para la energía del rotor plano que debe satisfacer la función de Wigner. Con este criterio se mantiene (3.57) y (3.55) no.

3.4. Ecuación para la energía

Es posible establecer una ecuación para la función de Wigner de los eigenestados de energía [13]. Partimos de

$$(E_1 + E_2) W_{\psi_2 \psi_1} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-iL\vartheta/\hbar} [(H\psi_2^*)\psi_1 + \psi_2^*(H\psi_1)] \quad (3.77)$$

con $H = -\epsilon \frac{d^2}{d\theta^2}$, $\epsilon \equiv \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}$ y las relaciones

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_1}{d\theta} &= 2 \frac{d\psi_1}{d\vartheta}, \quad \frac{d\psi_2}{d\theta} = -2 \frac{d\psi_2}{d\vartheta} & (3.78) \\ \Rightarrow (E_1 + E_2)W_{\psi_2\psi_1} &= -\frac{4\epsilon}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-iL\vartheta/\hbar} \left[\left(\frac{d^2\psi_2^*}{d\vartheta^2} \right) \psi_1 + \psi_2^* \left(\frac{d^2\psi_1}{d\vartheta^2} \right) \right] \\ \frac{d^2}{d\vartheta^2}(\psi_2^*\psi_1) &= \left(\frac{d^2\psi_2^*}{d\vartheta^2} \right) \psi_1 + 2 \left(\frac{d\psi_2^*}{d\vartheta} \right) \left(\frac{d\psi_1}{d\vartheta} \right) + \psi_2^* \left(\frac{d^2\psi_1}{d\vartheta^2} \right) & (3.79) \end{aligned}$$

se sustituye en la ecuación original

$$\begin{aligned} (E_1 + E_2)W_{\psi_2\psi_1} &= -\frac{4\epsilon}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-iL\vartheta/\hbar} \left[\frac{d^2\psi_2^*\psi_1}{d\vartheta^2} - 2 \left(\frac{d\psi_2^*}{d\vartheta} \right) \left(\frac{d\psi_1}{d\vartheta} \right) \right] & (3.80) \\ &= -\frac{4\epsilon}{2\pi} \frac{1}{2\pi} - \frac{iL}{\hbar} e^{-iL\vartheta/\hbar} \psi_2^*\psi_1 \Big|_{-\pi}^{\pi} + \frac{1}{2\pi} (e^{-iL\vartheta/\hbar} \frac{d\psi_2^*\psi_1}{d\vartheta}) \Big|_{-\pi}^{\pi} - \\ &\quad - \frac{L^2}{\hbar^2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-iL\vartheta/\hbar} \psi_2^*\psi_1 - \frac{4\epsilon(-2)}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-iL\vartheta/\hbar} \frac{d\psi_2^*}{d\vartheta} \frac{d\psi_1}{d\vartheta} \end{aligned}$$

para el último término vemos que

$$\partial_{\theta}^2 W_{\psi_2^*\psi_1} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-iL\vartheta/\hbar} \left[\left(\frac{d^2\psi_2^*}{d\vartheta^2} \right) \psi_1 - 2 \frac{d\psi_2^*}{d\vartheta} \frac{d\psi_1}{d\vartheta} + \psi_2^* \left(\frac{d^2\psi_1}{d\vartheta^2} \right) \right] & (3.81)$$

despejando el término en cuestión y sustituyendo en la ecuación original

$$\begin{aligned} (E_1 + E_2)W_{\psi_2\psi_1} &= -\epsilon \frac{d^2}{d\theta^2} W_{\psi_2\psi_1} - \frac{\epsilon iL}{2\pi^2 \hbar} e^{-iL\vartheta/\hbar} \psi_2^*\psi_1 \Big|_{-\pi}^{\pi} - & (3.82) \\ &\quad - \frac{\epsilon}{2\pi^2} e^{-iL\vartheta/\hbar} \frac{d}{d\vartheta} \psi_2^*\psi_1 \Big|_{-\pi}^{\pi} + \frac{\epsilon L^2}{\pi^2 \hbar^2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-iL\vartheta/\hbar} \psi_2^*\psi_1 \end{aligned}$$

Finalmente considerando $\psi_1 = \psi_2 = \psi$, $E_1 = E_2 = E$ tenemos

$$\frac{L^2}{2mr_0^2 \hbar^2} - \frac{\hbar^2}{8mr_0^2} \partial_{\theta}^2 W_{\psi}(\theta, \frac{L}{\hbar}) & (3.83)$$

$$+ \frac{\hbar}{2i} \left[e^{-i\vartheta/\hbar} \frac{L}{\hbar mr_0^2} \rho(\theta; \vartheta) + j(\theta; \vartheta) + j(\theta; \vartheta) \right]_{\vartheta=-\pi}^{\vartheta=\pi} = EV_{\psi}(\theta, \frac{L}{\hbar})$$

$$\rho(\theta; \vartheta) = \psi^*(\theta - \vartheta/2)\psi(\theta + \vartheta/2) & (3.84)$$

$$\begin{aligned} j(\theta; \vartheta) &= \frac{\hbar}{2imr_0^2} \{ \psi^*(\theta - \vartheta/2) \partial_{\theta} \psi(\theta + \vartheta/2) - \\ &\quad - (\partial_{\theta} \psi^*(\theta - \vartheta/2) \psi(\theta - \vartheta/2)) \}. & (3.85) \end{aligned}$$

Es ilustrativo verificar que la función de Wigner de eigenestados de energía es solución de la ecuación de energía (3.57) con el espectro correcto.

Usando las expresiones (3.85) y (3.86) para $\rho(\theta, \vartheta)$ y $j(\theta; \vartheta)$ respectivamente y con las eigenfunciones del rotor $\psi_n(\theta) = \frac{1}{2\pi} e^{in\theta}$ se obtiene

$$\begin{aligned}
EW_\psi(\theta, L) &= \frac{\hbar}{2i} \left[e^{-iL\vartheta/\hbar} \left(\frac{L}{mr_0^2} \rho(\theta; \vartheta) + j(\theta; \vartheta) \right) \right]_{\vartheta=-\pi}^{\vartheta=\pi} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\hbar}{2i} \left[e^{-iL\vartheta} \left[\frac{L}{mr_0^2} e^{-in(\theta-\vartheta/2)} e^{in(\theta+\vartheta/2)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{\hbar}{2imr_0^2} (ine^{-in(\theta-\vartheta/2)} e^{in(\theta+\vartheta/2)} + ine^{-in(\theta-\vartheta/2)} e^{in(\theta+\vartheta/2)}) \right] \right]_{\vartheta=-\pi}^{\vartheta=\pi}
\end{aligned} \tag{3.87}$$

sustituyendo los valores para $\vartheta = \pm\pi$

$$\begin{aligned}
EW_\psi(\theta, L) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\hbar}{2imr_0^2} (p + n\hbar) [e^{-i(p/\hbar-n)\pi} e^{i(p/\hbar-n)\pi}] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\hbar}{2imr_0^2} (p + n\hbar) [-2isen[(p/\hbar - n\pi)]] \\
&= -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\hbar}{imr_0^2} (p + n\hbar) [(p/\hbar - n)\pi] \left[\frac{sen[(p/\hbar - n)\pi]}{[(p/\hbar - n)\pi]} \right] \\
&= -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\pi}{mr_0^2} (p^2 - n^2\hbar^2) sinc[(p/\hbar - n)\pi] \\
&= -\frac{1}{2mr_0^2} (p^2 - n^2\hbar^2) W_n(\theta, L)
\end{aligned} \tag{3.88}$$

por lo que se obtiene el espectro del rotor cuántico libre

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2}{2mr_0^2}, \quad n = 0, \pm 1, \dots \tag{3.89}$$

Este resultado se obtiene gracias a los términos de frontera en la eq. (3.84) que cancelan el primer término de esa misma ecuación. Mientras que el término de segunda derivada en θ de esa ecuación da un valor cero para la función de Wigner de eigenestados de energía (3.83). El criterio de la ecuación de la energía para la función de Wigner basada en el grupo $E(2)$ nos indica que (3.57) es la forma correcta y no (3.77) que está basada en el producto \star del espacio fase plano. Conclusión que indica que el producto \star apropiado para el espacio fase $S^1 \times \mathbb{R}$ requiere consideración.

Capítulo 4

Función de Wigner de la partícula libre en cuantización polimérica

Este capítulo se dedica al cálculo de la función de Wigner del modelo polimérico de la partícula libre. Iniciamos con la descripción de la partícula libre en cuantización polimérica y su respectivo problema de eigenvalores para la energía. Se establece la relación entre la cuantización de Schrödinger para el rotor plano y la partícula libre en cuantización polimérica. Usando la forma integral de la función de Wigner del rotor plano se construye la función de Wigner para la partícula libre en cuantización polimérica. Esto tanto en representación de posición como en representación de momento.

4.1. Partícula libre en cuantización polimérica

La falta de un generador de traslaciones espaciales infinitesimales en la cuantización polimérica nos lleva a la consideración del Hamiltoniano de una partícula en términos de operadores uno de posición y otro de traslaciones infinitesimales. Motivado por las correspondientes expresiones clásicas para estos operadores la propuesta para el problema de eigenvalores de la energía para la partícula libre es

$$\hat{H}_{Poli}^{\mu}|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle, \quad (4.1)$$

$$\hat{H}_{Poli}^{\mu} = \frac{\hbar^2}{2m\mu^2}[2\hat{I} - \hat{V}_{\mu} - \hat{V}_{-\mu}]. \quad (4.2)$$

Observemos que el operador de traslación conmuta con el Hamiltoniano de partícula libre y por lo tanto tiene autoestados comunes, es decir, deben ser de la forma (2.14). En representación de posición usamos (1.13)-(1.14) y nos limitamos al espacio de Hilbert superselecto \mathcal{H}_0 (1.18), que actúa sobre la base $|x_n\rangle$ para obtener

$$\frac{\hbar^2}{2m\mu^2}[2\psi_E(x_n) - \psi_E(x_n - \mu) - \psi_E(x_n + \mu)] = E\psi_E(x_n). \quad (4.3)$$

Esta es una ecuación en diferencias de segundo orden cuyas soluciones se han discutido en detalle en [15], aquí solo parafraseamos esos resultados. Usemos la propuesta de solución

$$\psi_E(x_n) = Ce^{\alpha x_n/\mu}. \quad (4.4)$$

Sustituyendo (4.4) en (4.3) produce, factorizando $\psi_E(x_n)$,

$$e^{2\alpha} - 2(1 - \gamma)e^\alpha + 1 = 0, \quad \gamma = \frac{m\mu^2 E}{\hbar^2}. \quad (4.5)$$

Esto se puede expresar usando un coseno hiperbólico como

$$\cosh\alpha = (1 - \gamma), \quad (4.6)$$

y γ puede ser real o imaginario dependiendo del intervalo en el que se encuentre γ : $(-\infty, 0]$, $[0, 1]$, $[1, \infty)$. Específicamente

$$\alpha = \begin{cases} \cosh^{-1}(1 - \gamma), & \gamma \in (-\infty, 0], \\ -\cosh^{-1}(\gamma - 1), & \gamma \in [1, \infty), \\ i\beta := \pm i\cos^{-1}(1 - \gamma), & \gamma \in [0, 1]. \end{cases} \quad (4.7)$$

Por lo tanto la propuesta (4.4) se convierte en, al traducir la condiciones en γ para la energía (ver Figura 4.1),

$$\psi_E(x_n) = \begin{cases} Ce^{\alpha x_n/\mu}, & E \in (-\infty, 0], \\ Ce^{i\beta x_n/\mu}, & E \in [0, \frac{\hbar^2}{m\mu^2}], \\ Ce^{-|\alpha|x_n/\mu}, & E \in [\frac{\hbar^2}{m\mu^2}, \infty). \end{cases} \quad (4.8)$$

Para seleccionar las soluciones admisibles usamos la propiedad de unitariedad de \hat{V}_μ : sus eigenvalores deben ser fase pura (ver (1.23)) y sus eigenfunciones deben serlo también de \hat{H}_{Poli}^μ . Por lo tanto, las soluciones exponenciales reales de (4.8) no son admisibles. Para fijar una constante de normalización

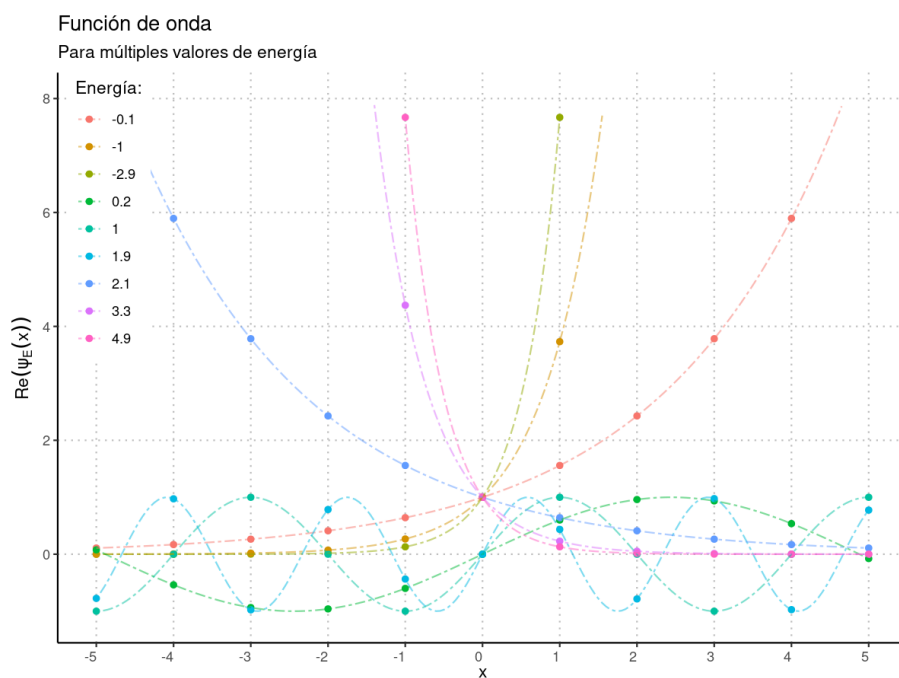


Figura 4.1: Gráfica de las eigenfunciones de energía $\psi_E(x_n)$, correspondientes a (4.8). Las curvas segmentadas corresponden a las eigenfunciones de onda si x_n fuese continuo, que no es el caso, y solo se incluyen para comparación. Las eigenfunciones que corresponden a exponenciales crecientes o decrecientes, no son admisibles, ya que como eigenfunciones de \hat{V}_μ no tienen eigenvalores dados por una fase pura.

consideramos el carácter continuo del espectro de energía que nos lleva a una normalización de los eigenestados a la delta de Dirac

$$\begin{aligned}
\langle E|E'\rangle &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \langle E|x_n\rangle \langle x_n|E'\rangle \\
&= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \psi_E^*(x_n) \psi_{E'}(x_n) \\
&= \sum_{n \in \mathbb{Z}} |C|^2 e^{-i(\beta-\beta')n} \\
&= |C|^2 \frac{\hbar^2}{m\mu^2} 2\pi \sqrt{1 - (1-\gamma')^2} \delta_P(E - E'). \\
&= |C|^2 \frac{\hbar^2}{m\mu^2} 2\pi \text{sen}\beta \delta_P(E - E') \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Esto conduce a la constante de normalización $C = \sqrt{\frac{m\mu^2}{2\pi\hbar^2 \text{sen}\beta}}$.

Los eigenestados de energía en representación de momento pueden obtenerse usando (1.32). Se tiene

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}_E(p) &= \sqrt{\frac{\mu}{2\pi\hbar}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-ipx_n/\hbar} \psi_E(x_n) \\
&= \sqrt{\frac{\mu}{2\pi\hbar}} C \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-i(p\mu/\hbar - \beta)n} \\
&= \sqrt{\frac{\mu}{2\pi\hbar}} C 2\pi \delta_P(p\mu/\hbar - \beta) \\
&= \sqrt{\frac{\mu}{2\pi\hbar}} C 2\pi \frac{\hbar}{\mu} \delta_P(p - p_E) \\
&= \sqrt{\frac{m\mu}{\hbar \text{sen}(p_E\mu/\mu)}} \delta_P(p - p_E). \tag{4.10}
\end{aligned}$$

Notemos que los eigenestados de momento $\phi_p(x_n)$, ecuación (1.26), son degenerados en energía, como se puede ver fácilmente comparando con (4.8), obteniendo la siguiente relación de dispersión, con la identificación $\beta/\mu = p/\hbar$,

$$E = \frac{\hbar^2}{m\mu^2} \left(1 - \cos\left(\frac{p\mu}{\hbar}\right) \right), \quad -\frac{\pi\hbar}{\mu} \leq p \leq \frac{\pi\hbar}{\mu}. \tag{4.11}$$

En el régimen de escala de longitud pequeña $|\frac{p\mu}{\hbar}| \ll 1$, la relación de dispersión se convierte en $E \approx \frac{p^2}{2m} + \mathcal{O}(\mu^2)$, que es su forma clásica usual en el continuo.

Es ilustrativo traducir la normalización de los eigenestados de momento a una delta de Dirac en la energía. Esto es

$$\begin{aligned}\langle p|p'\rangle &= \frac{\mu}{\hbar} \frac{\hbar^2}{m\mu^2} \sqrt{1 - (1 - \gamma)^2} \delta_P(E - E') \\ &= \frac{\hbar}{m\mu} \text{sen}(p'_E \mu / \hbar) \delta_P(E - E'),\end{aligned}\quad (4.12)$$

donde en la primera igualdad se ha usado $p'_E = \frac{\hbar}{\mu} \cos^{-1}[1 - \gamma^2]$ para transformar la delta de Dirac de momento a una de energía y en la segunda igualdad se ha utilizado (4.11). Observemos que hay un factor que depende del valor propio de la energía de los estados involucrados, sin embargo, son ortonormales en términos de la delta de Dirac de energía.

De aquí en adelante haremos uso de las eigenfunciones de momento $\phi_p^E(x_n)$ como eigenfunciones de energía por simplicidad, a menos que digamos lo contrario. En la siguiente sección abordamos una correspondencia entre el rotor plano del capítulo 3 y la partícula libre polimérica del presente capítulo.

4.2. Correspondencia rotor-partícula polimérica

Con el fin de obtener la función de Wigner de la partícula libre polimérica en su forma integral haremos uso de la correspondencia de este sistema con el rotor plano. En la siguiente sección, la obtendremos explícitamente. Aquí planteamos tal correspondencia.

Rotor plano

Como vimos en el capítulo 3, el Hamiltoniano del rotor en el plano tiene la forma

$$H = \frac{L^2}{2I}, \quad I = mr_0^2. \quad (4.13)$$

Cuánticamente el operador Hamiltoniano se expresa como

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}, \quad (4.14)$$

donde el operador de momento angular \hat{L} satisface la siguiente álgebra de conmutadores

$$[\hat{L}, e^{i\theta}] = -\hbar e^{i\theta}. \quad (4.15)$$

Estos operadores pueden representarse de manera consistente con esta álgebra en el espacio de Hilbert $\mathcal{H}_{rot} = L^2(d\phi, S^1)$, de funciones de cuadrado integrable sobre la circunferencia, de la siguiente manera

$$\hat{L}\psi(\phi) = \frac{\hbar}{i}\partial_\phi\psi(\phi), \quad (4.16)$$

$$\widehat{e^{i\phi}}\psi(\phi) = e^{i\phi}\psi(\phi). \quad (4.17)$$

En este espacio de Hilbert usamos la base $e_n(\phi) = \frac{e^{in\phi}}{\sqrt{2\pi}}$ y el producto interno

$$(e_n, e_m) = \delta_{mn}, \quad (4.18)$$

$$(\psi_1, \psi_2) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \psi_1^*(\theta) \psi_2(\theta). \quad (4.19)$$

Destacamos ahora que el espectro de momento angular es discreto y está dado por la siguiente ecuación de eigenvalores

$$\hat{L}e_n(\theta) = \ell_n e_n(\theta), \quad \ell_n = n\hbar, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (4.20)$$

Correspondencia

Comparando el espectro del rotor cuántico (4.21) con el de posición de partícula libre polimérica

$$\hat{x}|x_n\rangle = n\mu_0|x_n\rangle, \quad (4.21)$$

podemos ver que $\mathcal{H}_{Poli} \approx \mathcal{H}_{Rotor}$.

La siguiente tabla ilustra la correspondencia entre estos dos sistemas

	Rotor Cuántico	Partícula libre polimérica
Variables conjugadas	$\theta \in [-\pi, \pi)$ $\ell_n = n\hbar$	$\frac{p\mu}{\hbar} \in [-\pi, \pi)$ $x_n = n\mu$
Correspondencia	$\theta \leftrightarrow \frac{p\mu}{\hbar}$	$\frac{\ell_n}{\hbar} \leftrightarrow \frac{x_n}{\mu}$

Por otro lado tales sistemas difieren en su dinámica como puede apreciarse en la siguiente tabla

	Rotor Cuántico	Partícula libre polimérica
Hamiltoniano	$\hat{H}_{rot} = \frac{\hat{L}^2}{2mr_0^2}$	$\hat{H}_{plp} = \frac{\hbar^2}{2m\mu_0^2} (1 - \cos(\widehat{p\mu_0/\hbar}))$
Energía	$E_{nrot} = \frac{n^2\hbar^2}{2mr_0^2}$	$E_{plp} = \frac{\hbar^2}{2m\mu_0^2} (1 - \cos(p\mu_0/\hbar))$

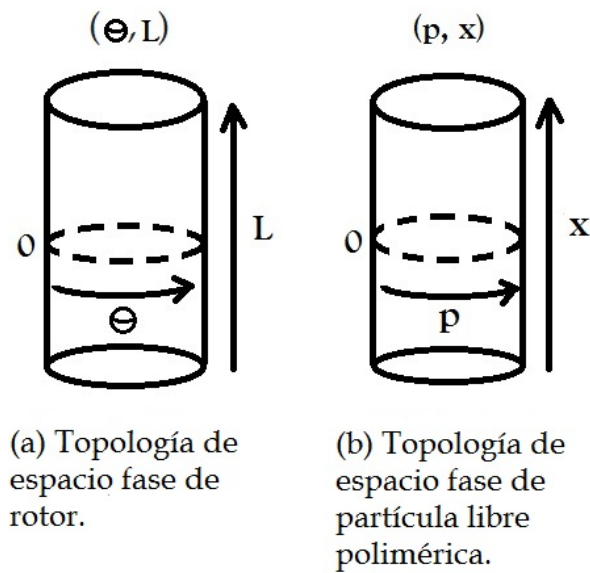


Figura 4.2: Correspondencia rotor plano-partícula libre polimérica en términos de los espacios fases correspondientes.

4.3. Forma integral de la función de Wigner

En esta sección calcularemos la función de Wigner de la partícula libre polimérica para eigenestados de momento/energía tanto en representación de momento como en representación de posición. Esto con el fin de ilustrar las propiedades características del sistema en estas representaciones.

Representación de momento

En este caso partimos de la función de Wigner del rotor expresada en su forma integral con estados en la representación de ángulo, ec. (3.101). Usando la correspondencia de la sección anterior tenemos

$$\begin{aligned}
W_{E_1 E_2}(p, x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{ix\vartheta/\hbar} \psi_{E_1}^*(P - \vartheta/2) \psi_{E_2}(P + \vartheta/2) \\
&= \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{\mu_0^2}{\hbar^2} \right) \int_{-\pi}^{\pi} d\vartheta e^{-ix\vartheta/\mu_0} \delta(P - P_2 - \vartheta/2) \delta(P - P_1 + \vartheta/2) \\
&= \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{\mu_0^2}{\hbar^2} \right) e^{\frac{-2ix}{\mu_0}(p_1 - p)} \delta(P - P_2 - (P_1 - P)) \\
&= \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{\mu_0^2}{\hbar^2} \right) e^{\frac{-2ix}{\mu_0}(p_1 - p)} \delta(2P - (P_1 + P_2)) \tag{4.22}
\end{aligned}$$

con $P = \frac{p\mu}{\hbar}$, para eigenestados de energía $\psi_{E_2} = \psi_{E_1} = \psi$ dados por (1.26)

$$\begin{aligned}
W_E(x, p) &= \frac{1}{8\pi^2} \left(\frac{\mu_0^2}{\hbar^2} \right) e^{\frac{-2ix}{\mu_0}(p - p_E)} \delta(P - P_E) \\
&= \frac{1}{8\pi^2} \frac{\mu_0^2}{\hbar^2} \frac{\hbar}{\mu_0} \delta(p - p_E) \\
&= \frac{1}{8\pi^2} \frac{\mu_0}{\hbar} \delta(p - p_E). \tag{4.23}
\end{aligned}$$

Representación de posición

Para operar en la representación de posición tenemos que expresar la función de Wigner del rotor en representación de momento angular y usar la correspondencia de la sección anterior.

$$\begin{aligned}
W_\psi(p, x) &= \sum_{u,v \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-ix\vartheta/\mu_0} \langle P + \vartheta/2 | x_u \rangle \langle x_u | \hat{\rho}_\psi | x_v \rangle \langle x_v | P - \vartheta/2 \rangle \\
&= \frac{\mu_0}{2\pi\hbar} \sum_{u,v \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-ix\vartheta/\mu_0} e^{iu(\frac{p\mu_0}{\hbar} + \vartheta/2)} \langle x_u | \hat{\rho}_\psi | x_v \rangle e^{-iv(\frac{p\mu_0}{\hbar} - \vartheta/2)} \\
&= \frac{\mu_0}{2\pi\hbar} \sum_{u,v \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-i[\frac{x}{\mu_0} - \frac{v+u}{2}]\vartheta} e^{i(u-v)p\mu_0/\hbar} \langle x_u | \psi \rangle \langle \psi | x_v \rangle \\
&= \frac{\mu_0}{2\pi\hbar} \sum_{u,v \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2\pi} \text{sinc}\pi \left[\frac{x}{\mu_0} - \frac{u+v}{2} \right] e^{i(u-v)P} \langle x_u | \psi \rangle \langle \psi | x_v \rangle \quad (4.24)
\end{aligned}$$

ahora utilizando eigenestados de momento/energía $\psi_E(x_v) = \sqrt{\frac{\mu_0}{2\pi\hbar}} e^{-ivp_E\mu_0/\hbar}$ se obtiene

$$\begin{aligned}
W_{\psi_E}(p, x) &= \frac{\mu_0}{2\pi\hbar} \sum_{u,v \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2\pi} \text{sinc}\pi \left[\frac{x}{\mu_0} - \frac{u+v}{2} \right] e^{i(u-v)P} \langle x_u | \psi_E \rangle \langle \psi_E | x_v \rangle \\
&= \left(\frac{\mu_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \sum_{u,v \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2\pi} \text{sinc}\pi \left[\frac{x}{\mu_0} - \frac{u+v}{2} \right] e^{i(u-v)P} e^{ivp_E} e^{-iuP_E} \\
&= \left(\frac{\mu_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \sum_{u,v \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2\pi} \text{sinc}\pi \left[\frac{x}{\mu_0} - \frac{u+v}{2} \right] e^{i(u-v)(P-P_E)} \\
&= \left(\frac{\mu_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \sum_{r,s \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2\pi} \text{sinc}\pi \left[\frac{x}{\mu_0} - r \right] e^{2is(P-P_E)} \\
&= \left(\frac{\mu_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{2\pi} \left(\sum_{r \in \mathbb{Z}} \text{sinc}\pi \left[\frac{x}{\mu_0} - r \right] \right) \left(\sum_{s \in \mathbb{Z}} e^{2is(P-P_E)} \right) \\
&= \left(\frac{\mu_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \frac{2\pi}{2\pi} (1) (\delta(2(P-P_E))) \\
&= \left(\frac{\mu_0^2}{8\pi^2\hbar^2} \right) \frac{\hbar}{\mu_0} \delta(p-p_E) \\
&= \left(\frac{\mu_0}{8\pi^2\hbar} \right) \delta(p-p_E). \quad (4.25)
\end{aligned}$$

Como era de esperarse (4.24) y (4.26) coinciden. Adicionalmente como corresponde a eigenestados normalizados a la delta de Dirac la función de Wigner correspondiente debe interpretarse cuidadosamente. Integrada en posición lleva a una integral divergente pero su dependencia con el momento es lo esperado para la relación de dispersión polimérica. Por otro lado, integrando en momento, lleva a una distribución uniforme en posición, como corresponde a estados del tipo onda plana.

4.4. Ecuación de la energía y función de Wigner

A este punto contamos con una función de Wigner para la partícula polimérica basada en la correspondencia con el rotor plano y el operador de Wigner del grupo $E(2)$. Como vimos en el caso del rotor el uso del producto \star de Moyal (espacio fase \mathbb{R}^2) en la correspondiente ecuación de \star -genvalores no lleva a la función de Wigner consistente con el espectro de energía del sistema. Sin embargo el criterio de la ecuación para la energía que debe satisfacer la función de Wigner de eigenestados de energía es consistente con el formalismo del operador de Wigner basada en grupos. Aquí presentamos la ecuación para la energía del caso de partícula polimérica. Iniciamos con la función de Wigner

$$W_{\psi_2\psi_1}(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{ix\vartheta} \psi_2^*(P - \vartheta/2) \psi_1(P + \vartheta/2), \quad (4.26)$$

y la forma del Hamiltoniano de la partícula polimérica

$$\hat{H}_{Poli} = \frac{\hbar^2}{m\mu^2} (1 - \widehat{\cos}(P)) \quad (4.27)$$

$$\widehat{\cos}(P)\psi(P) = \cos P\psi(P) \quad (4.28)$$

$$\widehat{\cos}(P)\psi(P \pm \vartheta/2) = \cos(P \pm \vartheta/2)\psi(P \pm \vartheta/2) \quad (4.29)$$

por lo que la ecuación (4.27) toma la forma siguiente, entre dos estados ψ_1, ψ_2

$$\begin{aligned}
(E_2 + E_1)W_{\psi_2\psi_1}(x, p) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-ix\vartheta/\mu_0} [(E_2\psi_2^*(P - \vartheta/2))\psi_1(P + \vartheta/2) + \\
&+ \psi_2^*(P - \vartheta/2)(E_1\psi_1(P + \vartheta/2))] \\
&= \left[\frac{\hbar^2}{m\mu_0^2}\right] \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-ix\vartheta/\mu_0} [2\psi_{E_2}^* \psi_{E_1} \\
&- (\cos(P_2 - \vartheta/2) - \cos(P_1 + \vartheta/2))\psi_{E_2}^* \psi_{E_1}] \\
&= \left[\frac{\hbar^2}{m\mu_0^2}\right] \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-ix\vartheta/\mu_0} [2\psi_2^*(P - \vartheta/2)\psi_1(P + \vartheta/2) \\
&- \frac{1}{2}[e^{i(P_2 - \vartheta/2)} + e^{-i(P_2 - \vartheta/2)} + e^{i(P_1 + \vartheta/2)} + e^{-i(P_1 + \vartheta/2)}]\psi_{E_2}^* \psi_{E_1}] \\
&= \left[\frac{\hbar^2}{m\mu_0^2}\right] [W_{\psi_2\psi_1} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-ix\vartheta/\mu_0} [e^{-i\vartheta/2}(e^{-iP_2} + e^{iP_1})/2 \\
&+ e^{i\vartheta/2}(e^{iP_2} + e^{-iP_1})/2]\psi_{E_2}^* \psi_{E_1}] \\
&= \left[\frac{\hbar^2}{m\mu_0^2}\right] [W_{\psi_2\psi_1} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-i\vartheta(x/\mu_0 + 1/2)} (e^{iP_1} + e^{-iP_2}) 2\psi_{E_2}^* \psi_{E_1} \\
&- \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{i\vartheta(x/\mu_0 - 1/2)} (e^{-iP_1} + e^{iP_2})/2 \psi_{E_2}^* \psi_{E_1}]. \tag{4.30}
\end{aligned}$$

Esta ecuación puede reescribirse de manera más simple como

$$\begin{aligned}
(E_2 + E_1)W_{\psi_2\psi_1}(x, p) &= \left[\frac{\hbar^2}{m\mu_0^2}\right] [W_{\psi_2\psi_1} - W_{\psi_2\psi_1}(x + \mu_0/2, P)\cos P \\
&- W_{\psi_2\psi_1}(x - \mu/2, P)\cos P]. \tag{4.31}
\end{aligned}$$

Para eigenestados de energía iguales, $E_2 = E_1 = E$ y $\psi_2 = \psi_1 = \psi$ tenemos

$$\begin{aligned}
2EW_{\psi}(x, p) &= \left[\frac{\hbar^2}{m\mu^2}\right] [2W_{\psi} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{i\vartheta(x/\mu + 1/2)} \cos(P - \vartheta/2) \psi^* \psi \\
&- \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{i\vartheta x/\mu} \cos(P + \vartheta/2) \psi^* \psi] \\
&= \left[\frac{\hbar^2}{m\mu^2}\right] [2W_{\psi} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{-i\vartheta(x/\mu + 1/2)} (e^{-ip} + e^{ip})/2 \\
&- \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{i\vartheta(x/\mu - 1/2)} (e^{-ip} + e^{ip})/2 \psi^* \psi] \\
&= \left[\frac{\hbar^2}{m\mu^2}\right] [2W_{\psi} - W_{\psi}(x + \mu, P)\cos(P) - W_{\psi}(x - \mu/2)\cos(P)]. \tag{4.32}
\end{aligned}$$

Para resolver esta ecuación usamos la propuesta de solución separable

$$W_\psi = R(x)Z(P). \quad (4.33)$$

$$(4.34)$$

La sustitución de (4.34) en (4.33) da lugar a

$$\frac{2EZ}{\cos P} = \left[\frac{\hbar^2}{m\mu^2} \right] \left[\frac{2Z}{\cos P} - Z \left(\frac{R_+}{R} + \frac{R_-}{R} \right) \right], \quad (4.35)$$

donde $R_\pm = R(x \pm \mu)$. La separabilidad se obtiene con la condición

$$\frac{R_+}{R} + \frac{R_-}{R} = C. \quad (4.36)$$

La ecuación resultante para $Z(p)$ es

$$\left(2E - \frac{2\hbar^2}{m\mu_0^2} + \frac{\hbar^2}{m\mu_0^2} C \cos P \right) Z(P) = 0, \quad (4.37)$$

cuya solución puede expresarse como

$$Z(p) = \frac{2\pi\hbar}{\mu_0} \delta(P - P_E), \quad (4.38)$$

donde el factor de normalización se elige tal que

$$P = P_E = 0 \Rightarrow E = 0 \Rightarrow C = 2. \quad (4.39)$$

Ahora, para resolver (4.37) la reexpresamos como

$$R_+(x + \mu_0/2) - 2R(x) + R_-(x - \mu_0/2) = 0. \quad (4.40)$$

La solución general de (4.36) es de la forma

$$R(x) = A + Bx \quad (4.41)$$

con A y B constantes. Claramente $B \neq 0$ llevaría a una solución aún más divergente que lo que producen los eigenestados de partícula libre pues

$$\int_{\mathbb{R}} W_{\psi_E}(x, p) = \infty. \quad (4.42)$$

Esto nos deja con la solución constante $R(x) = A = \frac{\mu^2}{2\pi\hbar^2}$ y por tanto la función de Wigner de eigenestados de energía de partícula libre polimérica debe ser

$$W_E(x, p) = \frac{\mu}{\hbar} \delta(P, P_E), \quad (4.43)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{m\mu^2} (1 - \cos(P_E)). \quad (4.44)$$

Resultado consistente en forma y con el espectro correcto de la solución obtenida con el operador de Wigner de $E(2)$ para el rotor, ecs. (4.24) ó (4.26).

Capítulo 5

Conclusiones y perspectivas

En esta tesis hemos calculado la función de Wigner para la partícula libre no relativista en cuantización polimérica.

Comenzamos en el capítulo 1 recordando la cuantización polimérica de sistemas mecánicos unidimensionales, tanto en representación de posición como de momento. El espacio de Hilbert polimérico de funciones de cuadrado sumable es no separable pero se puede expresar en términos de subespacios de Hilbert separables cada uno basado en una red regular con una escala característica auxiliar. Esta escala de longitud nos permite implementar el carácter discreto de los modelos poliméricos. Los observables básicos satisfacen un álgebra que está inspirada en el álgebra de flujos y holonomías de la gravedad cuántica por lazos. En nuestro caso estos observables son los operadores de posición y traslaciones espaciales finitas. La dinámica del sistema mecánico se implementa usando un Hamiltoniano concordante con esta representación discreta. También en este capítulo consideramos la función de Wigner en tres contextos. Primero con una perspectiva heurística la función de distribución a nivel cuántico en el espacio fase se estableció como una generalización de un promedio estadístico para una función de distribución clásica. Después hicimos uso de la transformada de Fourier en grupos para identificar el operador de Wigner cuyos valores de expectación corresponden a la función de Wigner. Por último la cuantización por deformación, que es una modificación del producto entre funciones en el espacio fase por medio de un producto \star que permite codificar la información cuántica del sistema. En este caso la función de Wigner de eigenestados de energía satisface la ecuación de \star -genvalores.

En el capítulo 2 discutimos la cuantización de Schrödinger de la partícula libre, tanto en representación de posición como de momento. El espacio de Hilbert es el de funciones de cuadrado integrable en la recta real con la medida usual. La dinámica dada por la ecuación de Schrödinger se define por un

Hamiltoniano que contiene a los operadores básicos de posición y momento satisfaciendo un álgebra canónica. Los estados propios de energía corresponden a un espectro continuo dado por los reales positivos como consecuencia de que los operadores de energía y momento conmutan en el caso libre por lo que deben tener eigenestados comunes respectivamente aceptables, lo que elimina estados de energía negativa que corresponden a eigenvalores de momento imaginario. La normalización de los eigenestados de energía se realiza usando la delta de Dirac por lo que no forman parte del espacio de Hilbert, sin embargo el uso de paquetes de ondas permite resolver esta dificultad. Hemos calculado la función de Wigner de los eigenestados de energía usando la forma integral correspondiente a un espacio fase plano bidimensional. Ésta está caracterizada por la relación de energía momento no relativista a través de una delta de Dirac. Requiere interpretación adecuada debido a la normalización de los eigenestados de energía pero es consistente. La distribución marginal de probabilidad en posición es uniforme como corresponde a una onda plana mientras que en momento está centrada en un valor característico. Evidentemente no está acotada, pero esto se puede resolver usando paquetes de ondas. Hemos incluido el cálculo de la solución de la ecuación de \star -eigenvalores usando el producto \star de espacio fase plano obteniendo el mismo resultado del método por integración.

En el capítulo 3 analizamos la cuantización de Schrödinger del rotor plano usando el álgebra del grupo $E(2)$. Esta opción surge de la necesidad de resolver el problema de definir operadores asociados a las variables básicas canónicas de momento angular y ángulo. En lugar de ellas se adoptan funciones del espacio fase cilíndrico para este sistema que corresponden a los generadores de rotaciones y traslaciones sobre un plano euclidiano. El espacio de Hilbert es el de funciones de cuadrado integrable sobre la circunferencia. El espectro de energías es discreto y las eigenfunciones pertenecen a este espacio de Hilbert. Para calcular la función de Wigner de este modelo utilizamos el operador de Wigner asociado al grupo $E(2)$. Su valor de expectación para eigenestados de energía lleva a la función de Wigner en forma explícita, al incluir una integral adicional en la medida de Plancherel de $E(2)$ que efectivamente reduce la información del grupo euclidiano solamente a rotaciones. Ahora las propiedades de la función de Wigner como densidades de probabilidad marginales y normalización están bien definidas para los eigenestados de energía gracias a que estos forman parte del espacio de Hilbert, es decir son normalizables. Para verificar esta función de Wigner usamos la ecuación de \star -eigenvalores con producto \star el del espacio fase plano como se sugiere en la literatura reciente. Esta ecuación tiene la misma forma del caso de partícula libre en cuantización de Schrödinger del capítulo 2 por lo que el espectro de energía son los reales positivos en flagrante contradicción con el espectro

discreto conocido del rotor. Para discernir entre estas opciones usamos la ecuación para la energía que debe satisfacer la forma integral de la función de Wigner correspondiente a eigenestados de energía. Hemos demostrado que la forma integral derivada con base en el grupo $E(2)$ satisface esta ecuación con el espectro discreto correcto.

En el capítulo 4 hemos estudiado la cuantización polimérica de la partícula libre no relativista definiendo el hamiltoniano con base en operadores de traslación que actúan sobre el espacio de Hilbert superselecto correspondiente a una red regular que pasa por el origen y con paso μ . Este hamiltoniano conmuta con el operador de traslaciones espaciales por lo que deben de tener eigenfunciones comunes. Con este criterio las soluciones a la ecuación de eigenvalores de la energía se seleccionan como aquellas asociadas a energías definidas en un intervalo finito de reales positivos, es decir se excluyen energías negativas y por arriba de un valor específico. Esto es necesario para excluir eigenvalores del operador de traslación que no son una fase. Debido al espectro continuo las eigenfunciones se normalizan a la delta de Dirac. Los operadores básicos de la partícula libre polimérica resultan estar en correspondencia con los operadores básicos de la cuantización con $E(2)$ del rotor. En este sentido el espacio de Hilbert del rotor plano y de la partícula polimérica es el mismo. No obstante la dinámica es distinta pues los hamiltonianos lo son. Usando la correspondencia aludida hemos calculado la función de Wigner de la partícula polimérica para sus estados propios de energía. Tiene la forma de una delta de Dirac con argumento dado por la relación de energía momento polimérica. Su interpretación nuevamente requiere cuidado pues los eigenestados de energía son normalizables a la delta de Dirac. La distribución marginal de probabilidad en posición es uniforme, como corresponde a soluciones tipo onda plana, mientras que la distribución marginal de probabilidad de momento está centrada en un valor específico consistente con la relación de energía momento polimérica. La función de Wigner no es acotada pero lo puede ser si usamos paquetes de ondas. El resultado incorrecto para el rotor con el uso de la cuantización por deformación con producto \star en el espacio fase plano nos indica que para la partícula polimérica esta estrategia tampoco es apropiada. La opción de la ecuación para la energía a satisfacer por la función de Wigner en forma integral nuevamente nos sirve aquí como criterio de aceptabilidad de nuestra función de Wigner.

Como conclusiones de este trabajo tenemos las siguientes:

1. La cuantización polimérica implementada en sistemas mecánicos como una representación discreta de un álgebra no canónica de observables básicos aporta modelos análogos a la gravedad cuántica por lazos que permiten explorar algunos aspectos abiertos de esta última al limitar

algunas dificultades técnicas propias de sistemas con un número infinito de grados de libertad así como de la dinámica complicada de los modelos gravitacionales. No está de más enfatizar que las conclusiones obtenidas con los modelos mecánicos deben aplicarse con cautela en los modelos gravitacionales.

2. La función de Wigner como formulación alternativa equivalente a la cuantización de Schrödinger se puede extender a la cuantización polimérica de modelos mecánicos.
3. Para sistemas con espacio fase plano (de dos dimensiones en nuestro caso), el resultado del cálculo de función de Wigner por integración (o vía el grupo de Heisenberg) y aquel basado en cuantización por deformación, coinciden.
4. En el problema del rotor plano en cuantización de Schrödinger el espacio fase es cilíndrico y la función de Wigner definida por integración (vía el grupo $E(2)$) [12] no coincide con la obtenida vía ecuación de \star -eigenvalores con el producto \star del espacio fase plano. Esta última es inconsistente con el espectro energético del rotor.
5. En el problema del rotor plano es posible definir una ecuación para la energía [12] que debe satisfacer la función de Wigner de eigenestados de energía en forma integral que es consistente con la versión integral basada en grupos. Ambas llevan al mismo espectro de energía.
6. Existe una correspondencia entre el rotor plano y la partícula polimérica que indica que tienen el mismo espacio de Hilbert. Sin embargo, estos sistemas tienen dinámicas cuánticas diferentes.
7. La función de Wigner de partícula polimérica basada en la correspondencia con el rotor plano es consistente con la relación de energía momento polimérica derivada de la solución de la ecuación de eigenvalores para la energía. Coincide con la obtenida a través de la ecuación para la energía del mismo sistema.

Entre las perspectivas para continuar el trabajo que hemos desarrollado aquí podemos encontrar las listadas a continuación:

1. Límite clásico y estados semiclásicos poliméricos. Como indicamos en el objetivo de este trabajo la función de Wigner es uno de los esquemas más aceptados para entender el límite clásico de una teoría cuántica.

Cualitativamente en el límite clásico la función de Wigner debería estar concentrada en la trayectoria clásica en el espacio fase. Para este fin podríamos utilizar paquetes de onda. Con esta estrategia también podríamos analizar desviaciones del comportamiento clásico con base en estados coherentes o el equivalente del gaussiano en la cuantización usual de Schrödinger, ahora extendido a la cuantización polimérica.

2. Producto \star para la cuantización del rotor plano y la partícula polimérica. Es deseable revisar la formulación del producto \star para el caso de espacios fase no planos con el fin de obtener uno natural para el caso del rotor con topología cilíndrica. Alternativamente usar la formulación de la función de Wigner en teoría de grupos para definir el producto \star del grupo $E(2)$ que se reduzca al problema del rotor. Nuevamente explotando la correspondencia rotor plano partícula polimérica para tratar el caso de esta última.
3. Simetría de Galileo. Una de las propiedades de la función de Wigner de partícula libre en cuantización de Schrödinger es su invariancia galileana bajo traslaciones espaciales, temporales, rotaciones y cambios en marco de referencia. En el caso de la partícula polimérica se sabe que esta no es una de sus simetrías. Sin embargo, el trabajo reciente indica que podría presentar una simetría deformada. Esta línea es de interés primordial.
4. Modelos gravitacionales simétricos. Modelos cosmológicos espacialmente homogéneos así como el interior del agujero negro de Schwarzschild se describen como modelos con un número finito de grados de libertad con una dinámica dictada por la relatividad general. En el caso de cuantización polimérica se han estudiado estados semiclásicos en el enfoque Hamiltoniano y sería de interés estudiar el comportamiento de la función de Wigner correspondiente.

Bibliografía

- [1] T. Thiemann, *Modern Canonical Quantum General Relativity*, Cambridge Monographs on Mathematical Physics (Cambridge University Press, 2007).
- [2] A. Ashtekar, S. Fairhurst and J. Willis, *Quantum Gravity, shadow states, and quantum mechanics*, Class. Quant. Grav. 20 1031-1062 (2003).
- [3] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully, E. P. Wigner, *Distribution functions in Physics : Fundamentals*, Phys. Rep., 106, 121 (1984).
- [4] W. Case, *Wigner functions and Weyl transforms for pedestrians*, Am. J. Phys. 76, 937 (2008).
- [5] T. Bojowald, *The semiclassical limit of loop quantum cosmology*, Class. Quant. Grav. 18, L109-L116 (2001).
- [6] B. Bahr and H. J. Korsch, *Quantum mechanics on a circle : Husimi phase space distributions and semiclassical coherent state propagators*, J. Phys. A 40, 3959-3985 (2007).
- [7] C. J. Fewster, H. Sahlmann, *Polymeric quantum mechanics quantization and loop quantum cosmology : a Wigner function for the Bohr compactified real line*, Class. Quantum Grav. 25 225015 (2008).
- [8] J. Berra and A. Molgado, *Quasi – probability distributions in Loop Quantum Cosmology*, Class. Quant. Grav. 37, 215003 (2020).
- [9] J. Berra and A. Molgado, *Integral representation of the star product in Loop Quantum Cosmology*, [gr-qc] 2010.08711 (2020).
- [10] J. Berra and A. Molgado, *The Polymer representation for the scalar field : A Wigner functional approach*, Class. Quant. Grav. 37, 025006 (2020).

- [11] H. A. Kastrup, *Quantization of the canonically conjugate pair angle and orbital angular momentum*, Phys. Rev. A 73, 052104 (2006).
- [12] H. A. Kastrup, *Wigner functions for the pair angle and orbital angular momentum*, Phys. Rev. A 94 062113 (2016).
- [13] H. A. Kastrup, *Wigner functions for angle and orbital angular momentum : Operators and dynamics* Phys. Rev. A 95 052111 (2017).
- [14] M. Reed and B. Simon, *Methods of modern mathematical physics : Functional analysis*, vol. 1., Academic Press London, (1980).
- [15] E. Flores, H. Morales-Técotl and J. D. Reyes, *Propagators in polymer quantum mechanics*, Annals of Physics 336 394 (2013).
- [16] E. Flores-González, Hugo A. Morales-Técotl and Juan D. Reyes, *Free Particle Propagator in Polymer Quantum Mechanics*, AIP Conf. Proc. 1473, 148-152 (2012).
- [17] H. A. Morales-Técotl, S. Rastgoo and J. C. Ruelas, *Path integral polymer propagator of relativistic and non – relativistic particles*, Phys Rev D 95, 065026 (2017).
- [18] E. P. Wigner, *On the quantum correction for thermodynamic equilibrium*, Phys. Rev. 40, 749 (1932).
- [19] J. F. Plebański, M. Przanowski, J. Tosiek and F. J. Turrubiates, *Remarks on deformation quantization on the cylinder*, Acta Physica Polonica B, No. 3, Vol. 31 561 (2000).
- [20] K. B. Wolf, *Wigner distribution function for paraxial polychromatic optics*, Opt. Commun. 132, 343-52, (1997).
- [21] S. Kryukov, M. A. Walton, *On infinite walls in deformation quantization*, Annals of Physics 317 474-491 (2005).
- [22] G. M. Hossain , V. Husain and S. S. Seahra, *The propagator in polymer quantum field theory*, Phys. Rev. D 82 124032 (2010).
- [23] C. J. Berra, A. Molgado, *Polymeric quantum mechanics as a deformation quantization*, Class. Quantum Grav. 36 025001 (2019).

