Pro Mathematica Vol. XVII, N° 34, 2003

ACERCA DE ECUACIONES ESTOCÁSTICAS EN LA TEORÍA CUÁNTICA NO RELATIVISTA

Juvenal ***Castromonte Salinas***

Resumen

La teoría cuántica puede ser generada a partir de un conjunto de ecuaciones estocásticas. Estas ecuaciones se obtienen a partir del hecho de que las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger y Bloch están relacionadas entre sí por extensión analítica en el tiempo. En el presente trabajo, las ecuaciones estocásticas se construyen a partir de variables cuánticas, a diferencia del método de Feynman. Como resultado del análisis de estas ecuaciones, se muestra que solo una de sus soluciones esta definida positivamente, todas las demás soluciones necesariamente cambian de signo y no pueden ser interpretadas como densidad de probabilidades.

Dpto. de Física, Informática y Matemática, Univ. Peruana Cayetano Heredia.

Introducción

El método de la ecuaciones estocásticas en la física teórica actual cumple un rol importante [7], [5]. Estas ecuaciones se presentan por vez primera en la teoría del movimiento browniano (ecuaciones de Langevine). Posteriormente, se estableció que estas ecuaciones son equivalentes a las ecuaciones de Fokker-Planck. Además, presentan la ventaja de que permiten darles interpretación física como ecuaciones de la dinámica clásica perturbadas aleatoriamente.

En 1948 Feynman publica su trabajo [4], donde propone una nueva formulación de la mecánica cuántica a través de la amplitud de probabilidades de transición de un sistema cuántico desde un estado inicial x_0 a otro final x en el intervalo de tiempo $0 \leq \tau \leq t$, la que se calcula como la suma de todas las trayectorias entre ambos estados, es decir

$$\psi(x_0, t_0; x, t) = \int_{C\{(x_0,t_0)\to(x,t)\}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V[x(\tau)]d\tau}\, d_F x(\tau), \tag{1}$$

donde $d_F x(\tau)$ es la medida de Feynman, $\hbar$ -constante de Planck y $V[x(\tau)]$ -funcional potencial.

Esta estructura de cuasiprobabilidad de estado es solución fundamental de la ecuación de Schrödinger

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

Pese a que esta integral por trayectorias no es definida correctamente, el método propuesto por Feynman tiene la ventaja de que puede ser utilizada solamente para la cuantización de construcciones clásicas.

Por otro lado, la ecuación de Bloch

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{4}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - V(x)\psi \tag{3}$$

tiene como solución fundamental a la expresión [6]

$$\psi(x_0, t_0; x, t) = \int_{C\{(x_0,t_0)\to(x,t)\}} e^{-\int_{t_0}^{t} V[x(\tau)]d\tau}\, d_W x(\tau), \tag{4}$$

donde $d_W x(\tau)$ es la medida de Wiener.

Se puede observar que (1) puede obtenerse a partir de (4) por extensión analítica en el tiempo sobre el semiplano complejo para $t \geq 0$, haciendo $t \to it$. De manera análoga se obtiene la ecuación (2) a partir de la ecuación (3).

En [1], [2], [3] se muestra que el movimiento browniano y la mecánica cuántica son realizaciones diferentes de una misma estructura matemática. La base de esta estructura son ecuaciones estocásticas del tipo

$$\dot{\varphi} = \dot{x} - \frac{\partial S}{\partial x}, \tag{5}$$

donde x es coordenada, e^{2S} -función de estado básico del operador de Hamilton para la ecuación de Schrödinger, $\dot{x}$ -velocidad y $\varphi(t)$ -proceso de Wiener. Estos resultados, que han sido obtenidos solo para estados básicos, muestran que el movimiento browniano y la mecánica cuántica no relativista son manifestaciones diferentes del problema de perturbación aleatoria en tiempo complejo, cuya componente real corresponde al movimiento browniano y la componente imaginaria a la mecánica cuántica. En el presente trabajo, a partir de los resultados mencionados, se analizan ecuaciones estocásticas que corresponden a funciones propias superiores del operador de Hamilton.

1 Teorema de Factorización para el Estado Básico

Para un mejor entendimiento de nuestros resultados, inicialmente se presentan los resultados obtenidos en [1], [2], [3].

A partir de la ecuación estocástica (5) siempre es posible construir su solución como una probabilidad de transición $W(x_0, t_0; x, t)$, que satisface la ecuación de Fokker-Planck [1].

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(W \frac{\partial S}{\partial x}\right) = \frac{1}{4}\frac{\partial^2 W}{\partial x^2}. \tag{6}$$

Esta probabilidad de transición se puede construir por cambio de variable en la integral funcional de Wiener. En efecto, la ecuación (5) puede ser representado en forma integral, como una ecuación integral de Fredholm del tipo Volterra

$$\varphi(\tau) = x(\tau) - \int_{t_0}^{\tau} \frac{\partial S(\xi)}{\partial x} d\xi. \tag{7}$$

Como resultado del cambio funcional de variables la medida de Wiener para la trayectoria $\varphi(\tau)$ es

$$\begin{aligned} d_W\varphi(\tau) &= e^{-\int_{t_0 t}^{t} \dot{\varphi}^2 d\tau} \prod_{\tau=t_0}^{t} \frac{d\varphi(\tau)}{\sqrt{\pi d\tau}} \\ &= e^{-\int_{t_0}^{t}\left[\left(\dot{x}-\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right]d\tau} \prod_{\tau=t_0}^{t} \frac{d\varphi(\tau)}{\sqrt{\pi d\tau}}, \end{aligned} \tag{8}$$

donde $J = e^{-\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} d\tau}$ es el Jacobiano de la tranformada (7).

Finalmente, la densidad de probabilidades de transición del proceso $x(\tau)$ será

$$W(x_0, t_0; x, t) = \frac{e^{2S(x)}}{e^{2S(x_0)}} \psi(x_0, t_0; x, t). \tag{9}$$

Así es como se obtiene [2], [3] el teorema de factorización, donde además para la fórmula de Feynman-Kac con hamiltoniano $\hat{H}(x) = -\frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$, se obtiene el potencial como $V(x) = \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}$.

Si se asume que $\frac{\partial S}{\partial \tau} = 0$, entonces de (6) y (9) se obtiene

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\hat{H}\psi, \tag{10}$$

$$\hat{H}e^{2S(x)} = 0. \tag{11}$$

Suponiendo que el operador de Hamilton tiene espectro discreto de manera que se satisface el problema de valores propios y funciones propias

$$\hat{H}\psi_n = \lambda_n \psi_n,$$

donde $\psi_n \in \mathcal{L}_2$; entonces la solución de la ecuación de Fokker-Planck genera la distribución invariante de Boltzman.

La solución general de la ecuación de Bloch se puede representar como

$$\psi(x_0, t_0; x, t) = \sum_{(n)} \psi_n(x_0) e^{-\lambda_n t} \psi_n(x). \tag{12}$$

Y como

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W(x_0, t_0; x, t) dx = 1, \tag{13}$$

entonces de (9) y (12) se tiene

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{2S(x)} \sum_{(n)} \psi_n(x_0) e^{-\lambda_n t} \psi_n(x) dx = e^{2S(x_0)}. \tag{14}$$

De la simetría de la estructura de (12), para todo $t \geq 0$ se cumple

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{2S(x_0)} \sum_{(n)} \psi_n(x_0) e^{-\lambda_n t} \psi_n(x) dx = e^{2S(x)}. \tag{15}$$

Lo que significa que el estado inicial $\psi(x_0) = e^{2S(x_0)}$ no cambia en el tiempo, de manera que $\hat{H} e^{2S(x)} = 0$.

Además, de la suposición de que la ecuación de Fokker-Planck para $t \to \infty$ genera la distribución de Boltzman, se obtiene que siempre $\lambda \geq 0$. Y como el estado inicial invariante satisface (11), entonces $\min_{(n)}\{\lambda_n\} = 0$, es decir $e^{2S(x)}$ es función del estado básico del operador de Hamilton y la distribución de Boltzman es $e^{4S(x)}$.

2 Teorema de factorización para funciones propias superiores

Para generalizar los resultados presentados se considera una ecuación estocástica de manera mas completa, esto es

$$\dot{\varphi} = \dot{x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(S + \frac{1}{2}\ln f_n^*\right), \tag{16}$$

donde $\varphi(t)$ es un proceso de Wiener y $f_n^*(x)e^{2s(x)}$ -cualquier función propia del operador de Hamilton, entonces $\hat{H}\left(f_n^*(x)e^{2S(x)}\right) = \lambda_n f_n^*(x)$ $e^{2S(x)}$. En otras palabras, aquí se consideran problemas estocásticos relaciones con cualquier función propia $\psi_n(x) = f_n^*(x)e^{2S(x)}$ del hamiltoniano

Se construye la densidad de probabilidades de transición para (16) de manera similar que para (5)

$$W_n(x_0, 0; x, t) =$$

$$\int_{C\{(x_0,t_0)\to(x,t)\}} e^{-\int_{t_0}^{t}\left\{\left[\dot{x}-\frac{\partial}{\partial x}\left(S+\frac{1}{2}\ln f_n^*\right)\right]^2+\frac{1}{2}\frac{\partial^2\left(S+\frac{1}{2}\ln f_n^*\right)}{\partial x^2}\right\}d\tau} \prod_{\tau=t_0}^{t} \frac{dx(\tau)}{\sqrt{\pi d\tau}}, \tag{17}$$

donde $J = e^{-\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} \frac{\partial^2\left(S+\frac{1}{2}\ln f_n^*\right)}{\partial x^2} d\tau}$ es el Jacobiano de transformación.

De donde finalmente se obtiene

$$W_n(x_0, t_0; x, t) = \frac{f_n^*(x)e^{2S(x)}}{f_n^*(x_0)e^{2S(x_0)}} e^{\lambda_n t}\psi(x_0, t_0; x, t). \tag{18}$$

Esta expresión para la densidad de probabilidades de transición tiene las mismas propiedades que (9), es decir satisface a la ecuación de Fokker-Planck

$$\frac{\partial W_n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left[W_n \frac{\partial\left(S+\frac{1}{2}\ln f_n^*\right)}{\partial x}\right] = \frac{1}{4}\frac{\partial^2 W_n}{\partial x^2}, \tag{19}$$

de manera que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W_n(x_0, t_0; x, t)dx = 1. \tag{20}$$

Además, en (18) se tiene una importante particularidad, debido al término $f_n^*(x)$, que representa a un polinomio. Es evidente que $W_n(x_0, t_0;$ $x, t)$ no esta definida positivamente para n impar, como corresponde a toda densidad de probabilidades.

Para ilustrar los resultados obtenidos consideremos el caso del oscilador armónico. En este caso la función $f_n^*(x)$ es el polinomio de Hermite. Entonces, del problema de Sturm-Louville

$$\hat{H}(f_n^* e^{2S(x)}) = \lambda_n (f_n^* e^{2S(x)}),$$

se obtiene $\lambda_0 = 0, \lambda_1 = \omega, \lambda_2 = \frac{4\omega x^2 - 1}{2x^2 - 1}$, etc.

Por otro lado, la función del estado básico ($n = 0$) para el oscilador armónico es $\psi_0(x) = e^{-\omega x^2}$. De donde, $S = -\frac{1}{2}\omega x^2$, entonces $V(x) = \omega^2 x^2 - \frac{\omega}{2}$. Así que para (9) se tiene

$$W(x_0, t_0; x, t) = e^{-\omega(x^2 - x_0^2)} \int_{C\{(x_0,t_0)\to(x,t)\}} e^{-\int\left[\left(\omega^2 x^2 - \frac{\omega}{2}\right) + \dot{x}^2\right] d\tau} \prod_{\tau=t_0}^{t} \frac{d\tau}{\sqrt{\pi d\tau}}.$$

Finalmente

$$W(x_0, t_0; x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi \frac{1-e^{-2\omega t}}{2\omega}}} e^{-2\omega \frac{\left(x - x_0 e^{-\omega t}\right)^2}{1 - e^{-2\omega t}}}. \tag{21}$$

De (21) y (9) se obtiene

$$\psi(x_0, t_0; x, t) = e^{\omega(x^2 - x_0^2)} \frac{1}{\sqrt{\pi \frac{1-e^{-2\omega t}}{2\omega}}} e^{-2\omega \frac{\left(x - x_0 e^{-\omega t}\right)^2}{1 - e^{-2\omega t}}}. \tag{22}$$

Para $n = 1$ se tiene

$$W_1(x_0, t_0; x, t) = \frac{x e^{\omega t}}{x_0} \frac{1}{\sqrt{\pi \frac{1-e^{-2\omega t}}{2\omega}}} e^{-2\omega \frac{\left(x - x_0 e^{-\omega t}\right)^2}{1 - e^{-2\omega t}}}. \tag{23}$$

Aquí es evidente de que el signo de $W_1(x_0, t_0; x, t)$ coincide en signo con la variable x, así que W_1 puede cambiar de signo. Además, W_1 satisface la ecuación de Fokker-Planck

$$\frac{\partial W_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left[W_1 \left(\frac{1}{2x} - \omega x\right)\right] = \frac{1}{4}\frac{\partial^2 W_1}{\partial x^2}. \tag{24}$$

También se puede observar que se tiene una singularidad en $x = 0$. Esto conduce, como ya mencione anteriormente, que en este punto W_1 cambia de signo.

El cambio de signo de $W_n(x_0, t_0; x, t)$ para $n \geq 1$ no permite interpretarla como densidad de probabilidades.

Referencias

[1] BEYLINSON, A.A. (1959). *Application the Functional Integration Methods to Find the Fundamental Solution Fokker-Planck-Kolmogorov´s equation.* DAN USSR, V128, 5, pp. 121-27.

[2] BEYLINSON, A.A. (1979). *About Relation between solutions of Fokker-Planck and Block-Schrödinger´s equations and the Feynman-Kac Formula.* VINITI AN USRR, 348-79.

[3] BEYLINSON, A.A. (1983). *About Proc. International Congres of Mathematics.* Warsaw, August.

[4] FEYNMAN, R.P. (1948). *Space-Time Approach to Non Relativistic Quantum Mechanics.* Rev. Mod. Phys., 20, 367-87.

[5] GLIMM, J. & JAFFE, A. (1992). *Quantum Physics: a Functional Integral Point of View.* Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. KG.

[6] KAC, M. (1951). *On Some Connections between Probability Theory and Differential and Integral Equations.* Proc. Second Berkeley Symp., Univ. California Press, Berkeley, 189-215.

[7] VAN KAMPEN, N.G. (1981). *Stochastic Processes in Physics and Chemistry.*– (Hardcover - North-Holland Pub. Co.

Juvenal Castromonte Salinas
Departamento de Física, Informática y Matemáticas,
Universidad Peruana Cayetano Heredia.
juvenal@upch.edu.pe