UTILIZACIÓN DE LA TEORÍA DE LAS TRANSFORMACIONES CANÓNICAS EN LA SOLUCIÓN DEL PROBLEMA DE DISPERSIÓN DE LAS PARTÍCULAS

R. González
Estudiante de la Universidad Estatal de Moscú, URSS.
Dr. Y. G. Pavlenko, Cátedra de Física Teórica,
Universidad Estatal de Moscú, URSS.

RESUMEN

En el trabajo se utiliza el formalismo de Hamilton en la teoría de transformaciones canónicas para buscar soluciones aproximadas de la Ec. de Schrödinger. Los resultados que se obtienen son mejores que los obtenidos por vía de la teoría de perturbaciones. Por el método de medias se plantea y analiza la solución de un problema de dispersión de partículas. Esta solución resulta más exacta que la obtenida por otros métodos.

ABSTRACT

In the work it is used Hamilton's formalism in the theory of Canonical Transformations in the investigation of approximate solutions of Schrödinger's equation. The obtained results are better than those obtained using perturbation theory. Using the method of averages it is analyzed the solution of a particle scattering problem. The solution obtained by this method is more exact, than solutions obtained by other methods.

INTRODUCCIÓN

Como es conocido, muchos problemas con los cuales chocan hoy en día los físicos, los ingenieros y especialistas de matemática aplicada, no tienen solución exacta. Dentro de las causas que conllevan a esto podemos señalar las ecuaciones no lineales del movimiento, la presencia de coeficientes variables y de condiciones no lineales del problema, etc.

Por eso, en estos casos, nos vemos obligados a utilizar diferentes métodos de aproximación, como por ejemplo, los métodos de la teoría de las perturbaciones o el método de medias.

Sin embargo, las posibilidades de estos métodos están

subutilizadas. Esto está dado porque, por lo general, estos métodos parten de ecuaciones no lineales de segundo orden, las cuales no tienen un método general de solución. En realidad, las ideas reflejadas por estos métodos se realizan completamente en el formalismo de Hamilton.

Por primera vez el formalismo de Hamilton fue utilizado por Bogoliubov en la solución del problema de la superfluidez y superconductividad.

Sin embargo, el método de las transformaciones canónicas formulado por Bogoliubov no fue ampliamente utilizado por estar basado en la teoría de la cuantificación secundaria, y muchos de los problemas de la física teórica están formulados en términos de ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales.

En realidad, la utilización de los métodos de las transformaciones canónicas permite salir de los límites de la teoría de las perturbaciones y obtener, en principio, la solución exacta de ecuaciones diferenciales complicadas.

A continuación, nosotros analizaremos la utilización de esta teoría en la solución del problema de dispersión de las partículas.

Consideremos el movimiento unidimensional de una partícula en el campo $V(x)$, el cual se hace cero en el infinito, o sea,

$$V(\pm\infty) = 0$$

Supongamos que la partícula se mueve de izquierda a derecha, de modo tal que la función de onda no perturbada es igual a $\exp(ikx)$. Para grandes valores positivos de x la función de onda debe describir una partícula que ha pasado a través de la barrera de potencial y que se mueve en el sentido positivo del eje x, es decir

$$\psi(+\infty) = f_d \cdot e^{ikx} \tag{1}$$

Cuando $x \to -\infty$ la expresión asintótica es una combinación lineal de las dos soluciones de la ecuación del movimiento libre, es decir, tiene la forma:

$$\psi(-\infty) = e^{ikx} + f_r \cdot e^{-ikx} \tag{2}$$

Suponemos que ψ está normalizada de tal modo que el

coeficiente delante de $\exp(ikx)$ sea igual a la unidad. Las constantes f_d y f_r determinan los coeficientes de transmisión D y reflexión R.

$$D = |f_d|^2$$

$$R = |f_r|^2$$

La función de onda ψ satisface la ecuación de Schrödinger

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [k^2 - V(x)]\,\psi(x) = 0 \quad ,$$

donde $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, E es la energía total, y puede ser representada en la forma de una ecuación integral

$$\psi(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{+\infty} G(x,x')\,V(x')\,\psi(x')\,dx' \tag{3}$$

donde $G(x,x')$ es la función de Green, que cumple la condición asintótica:

$$G(x,x') = \frac{1}{2ki}\exp(ik|x-x'|) \tag{4}$$

Considerando el comportamiento asintótico de la función de onda, de las condiciones (1), (2), (3) y (4) encontramos:

$$f_r = \frac{1}{2ki}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx'}\,V(x')\,\psi(x')\,dx' \tag{5}$$

$$f_d = 1 + \frac{1}{2ki}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx'} V(x')\psi(x')\,dx' \tag{6}$$

De esta forma, para determinar los coeficientes de transmición y reflexión es necesario obtener la solución de la ecuación de Schrödinger, o sea, resolver la ecuación integral (3).

Para cualquier potencial este problema se puede resolver solamente con la ayuda de métodos de aproximación. Escogiendo el primer término de (3) como la aproximación de orden cero, se puede, apoyándose en el procedimiento de iteración, obtener la solución del problema en la forma de una serie perturbativa. Otra posibilidad consiste en la utilización del método variacional de Schwinger /1/, el cual permite obtener la solución en la forma de una serie superconvergente. Señalemos también el método de separación del núcleo integral /1/.

En este trabajo veremos dos nuevos métodos para hallar la solución del problema de contorno para la ecuación de Schrödinger. La base de estos métodos es la teoría de las transformaciones canónicas en el formalismo de Hamilton /3/. La ventaja de este enfoque es que se hace posible construir un algoritmo para calcular cualquier variable dinámica, que presente interés experimental.

FORMA DE HAMILTON DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

Como es conocido, el funcional que conduce a la ecuación estacionaria de Schrödinger tiene la forma:

$$S[\psi,\psi^*] = \int L\,dx$$

donde

$$L = \partial_x\psi^*\,\partial_x\psi - (K^2 - V(x))\psi^*\psi$$

Las ecuaciones variacionales de Euler-Lagrange coinciden con la ecuación de Schrödinger. Para pasar a las ecuaciones de primer orden se pueden utilizar las transformaciones de Legendre o el método de Schwinger de duplicación de las variables /3/. En este último caso construiremos la función de Lagrange en un espacio con un número doble de variables:

$$q_1 = \psi,\ q_2 = \psi^*,\ \pi_1\ ,\ \pi_2$$

$$L_m = L - (\pi_1 - \partial_x q_2)(\pi_2 - \partial_x q_1) = \sum \pi_i \partial_x q_i - H$$

donde

$$H = \pi_1\pi_2 + (K^2 - V(x))\,q_1 q_2 \tag{7}$$

es el hamiltoniano.

Las ecuaciones de Euler-Lagrange ahora tendrán la forma:

$$\partial_x q_i = [q_i H]$$
$$\partial_x \pi_i = [\pi_i H] \qquad (8)$$

donde $[FG]$ es el corchete de Poisson.

$$[FG] = \frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial \pi_i} - \frac{\partial F}{\partial \pi_i}\frac{\partial G}{\partial q_i}$$

Cualquier variable dinámica $A = A(q, \pi)$ satisface la ecuación

$$\partial_x A = [AH]$$

Hagamos la transformación canónica

$$q_\alpha, \pi_\alpha \longrightarrow a_\alpha, \; i a_\alpha^*$$

a las nuevas coordenadas y momenta, para lo cual realizaremos un cambio de variables:

$$q_1 = \frac{1}{\sqrt{2K}}(a_1 e^{-ikx} + a_2^* e^{ikx})$$
$$q_2 = \frac{1}{\sqrt{2k}}(a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx}) \qquad (9)$$
$$\pi_1 = i\sqrt{\frac{K}{2}}(a_1^* e^{ikx} - a_2 \; e^{-ikx})$$
$$\pi_2 = -i\sqrt{\frac{K}{2}}(a_1 \; e^{-ikx} - a_2^* e^{ikx})$$

En estas nuevas variables los corchetes fundamentales de Poisson tienen la forma:

$$[a_\alpha, a_\beta] = -i\delta_{\alpha\beta}$$

y el hamiltoniano:

$$h(a^*, a, x) = -\frac{V(x)}{2K}\left\{a_1^* a_1 + a_2^* a_2 + a_1 \; a_2 e^{-2kix} + a_1^* a_2^* \; e^{2ikx}\right\} \qquad (10)$$

Las ecuaciones canónicas conservan su forma anterior:

$$\partial_x a_k = [a_k, h]$$
$$\partial_x a_k^* = [a_k^*, h] \qquad (11)$$

SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

Utilizando los resultados obtenidos en el trabajo /4/ la solución de la ecuación de Schrödinger para la función de onda se puede escribir en la forma de una serie:

$$q_1(a, a^*, x) = \sum_{n=0}^{\infty}\int_{x_0}^{x} dx_1 \int_{x_0}^{x_1} dx_2 \ldots \int_{x_0}^{x_{n-1}} dx_n [\ldots[q_1(x_0), h(x_1)] h(x_2)]\ldots] h(x_n)] \qquad (12)$$

donde

$$h(x_k) \equiv h(a(x_k), a^*(x_k), x_k)$$

Calculando sucesivamente los corchetes de Poisson en (12), encontramos:

$$q_1 = \bar{q}_1 + \frac{i}{2K\sqrt{2K}}\left\{\bar{q}_1 [e^{-ikx}\int_{x_0}^{x} V(x_1)dx_1 - e^{ikx}\int_{x_0}^{x} V(x_1) e^{-2ikx_1} dx_1] + \right. \qquad (13)$$

$$\bar{a}_2^* \left\{ e^{-ikx} \cdot \int_{xo}^{x} e^{2ikx_1} V(x_1) dx_1 - e^{ikx} \int_{xo}^{x} V(x_1) dx_1 \right\}$$

donde

$$\bar{q}_1 = q_1(xo)$$

$$\bar{a}_\alpha = a_\alpha(xo)$$

La expresión (12) es la solución general de la ecuación de Schrödinger. Para obtener la solución del problema de contorno. considerando las condiciones (1) y (2), podemos encontrar la relación entre los coeficientes $\bar{a}_1$ y $\bar{a}_2^*$

De la condición (2):

$$\bar{a}_2^* = \sqrt{2k}$$

De la condición (1) obtenemos:

$$\bar{a}_1 + \frac{i}{2k} \bar{a}_1 \int_{xo}^{\infty} V(x_1) dx_1 - \frac{i}{2k} \bar{a}_2^* \int_{xo}^{\infty} V(x_1) e^{2ikx_1} dx_1 = 0$$

o sea,

$$\bar{a}_1 = -\frac{i}{2k} \frac{\bar{a}_2^* \int_{x_0}^{+\infty} V(x_1) e^{2ikx_1} dx_1}{1 + \frac{i}{2k} \int_{x_0}^{+\infty} V(x_1) dx_1} \qquad (14)$$

Si hacemos $x_0 \longrightarrow -\infty$ obtenemos para los coeficientes f_r y f_d las siguientes expresiones:

$$f_r = -\frac{1}{2k} \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} V(x_1) e^{2ikx_1} dx_1}{1 + \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x_1) dx_1} \qquad (15)$$

$$f_d = 1 - \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x_1) dx_1 - \frac{1}{4k^2} \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} V(x_1) e^{2ikx_1} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} V(x_1) e^{-2ikx_1} dx_1}{1 + \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x_1) dx_1} \qquad (16)$$

Las expresiones obtenidas por nosotros para los coeficientes f_r y f_d son más exactas que las correspondientes al método de perturbaciones. Efectivamente, en la primera aproximación de la teoría de las perturbaciones la función de onda

$$\psi = e^{ikx}$$

De las expresiones (5) y (6) encontramos.

$$f_r = \frac{1}{2ki} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x') e^{2kix'} dx'$$

$$f_d = 1 + \frac{1}{2ki} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x') dx'$$

Comparando estas fórmulas con (15) y (16), vemos que si despreciamos en (16) el último término, entonces nuestros resultados completamente coinciden con los de la teoría de perturbaciones.

La estructura de los primeros términos de la serie permite llegar a la conclusión de que la solución de la ecuación de Schrödinger tiene la forma de descomposición de la función de onda en una fracción en cadena (continua). El cálculo de aproximaciones de orden superior permite verificar este resultado. Esta circunstancia es muy importante porque, como es conocido, la descomposición de una función en fracciones continuas tiene la propiedad de superconvergencia.

Además, debemos señalar que, como la descomposición que obtenemos presenta términos en el denominador, se hace posible analizar los polos de la función de onda, lo que permite examinar los valores posibles de energía de la partícula en el campo dado.

SOLUCIÓN DEL PROBLEMA DE DISPERSIÓN DE LAS PARTÍCULAS POR EL MÉTODO DE MEDIAS

El método de medias es uno de los métodos fundamentales para resolver ecuaciones diferenciales complicadas. En la base del método se encuentra la idea de Bogoliubov sobre el cambio de variables que permite obtener una solución que no contiene términos seculares que dificultan la convergencia.

Nosotros utilizaremos para resolver la ecuación de Schrödinger la forma canónica del método de medias, expuesta en el trabajo /8/. Esta consiste en que la ecuación canónica escrita en la forma:

$$\dot{Z} = [Z, \varepsilon H(Z, t, \varepsilon)]$$

después del cambio de variables $Z = Z(Z', t, \varepsilon)$

se transforma en la ecuación:

$$\dot{Z}' = [Z', \varepsilon h'(Z', \varepsilon)]$$

donde h' es el hamiltoniano promediado, que ahora no depende en forma explícita del tiempo.

Por tanto, para hallar la solución por el método de medias en la forma canónica tenemos que hallar el correspondiente cambio de variables y el hamiltoniano promediado.

Son posibles dos casos:

1) El hamiltoniano εH se puede descomponer en una serie de Fourier:

$$\varepsilon H = \sum_{(n\omega)} V_n e^{i(n\omega)t}$$

En este caso, el problema se puede resolver fácilmente.

2) El hamiltoniano tiene la forma:

$$\varepsilon H = \sum V_n(t) e^{i\omega n\tau}$$

donde $V_n(t)$ son funciones que varían adiabáticamente con el tiempo, es decir,

$$|V' \cdot \lambda| \ll |V| \qquad \lambda = 2\pi/a$$

Nosotros analizaremos este último caso.

Designaremos con el símbolo Mf la operación de mediar la función f, el operador V actúa por la regla

$$Vf = f - Mf$$

y por $\tilde{V}h$ designaremos la integración por la variable x y lo escribiremos en la forma equivalente:

$$\tilde{V}h = \tilde{V}_1 h + Rh$$

donde $\tilde{V}_1 h$ significa la operación de integrar n veces por partes. Esto conduce a una solución en la forma del desarrollo en serie respecto a las potencias inversas de k, análogamente al método para calcular la asíntota de las ondas cortas en la teoría de difracción /7/.

De acuerdo con el método de medias, en la forma canónica, hagamos el cambio de variables

$$a_\alpha,\ i a_\alpha^* \longrightarrow b_\alpha,\ i b_\alpha^*$$

$$a_\alpha = b_\alpha + [b_\alpha, \tilde{V}h] + \cdots$$

a las variables promediadas que cumplen con las ecuaciones canónicas

$$\partial_x b_\alpha = [b_\alpha, h'] \tag{18}$$

donde h' es el hamiltoniano promediado

$$h' = M\left(h + \frac{1}{2}\left[Vh, \tilde{V}_1 h\right] + \left[\left[\frac{1}{3} Vh + \frac{1}{2} Mh, \tilde{V}_1 h\right] \tilde{V}_1 h\right] + \cdots\right. \tag{19}$$

En nuestro caso, el hamiltoniano tiene la forma (10). Calculemos los primeros corchetes de Poisson en (19). Con este objetivo encontramos:

$$Mh = -\frac{V(x)}{2k}\left\{a_1^* a_1 + a_2^* a_2\right\}$$

$$Vh = -\frac{V(x)}{2k}\left\{a_1 a_2 e^{-2ikx} + a_1^* a_2^* e^{2ikx}\right\} \tag{20}$$

De (19) y (20) obtenemos:

$$h' = \left(-\frac{V}{2k} - \frac{i}{8k^2} f(x) + \frac{1}{4k^3} g(x) + \cdots\right)(b_1^* b_1 + b_2^* b_2) \tag{21}$$

donde

$$f(x) = \frac{V}{ik} \sum_{j=0}^{n} \frac{V^{(j)}}{(2ki)^j}$$

$$g(x) = V\left(\sum_{j=0}^{n} \frac{V^{(j)}}{(2ik)^{j+1}}\right)\left(\sum_{j=0}^{n} \frac{(-1)^j V^{(j)}}{(2ki)^{j+1}}\right) \tag{22}$$

Escribamos algunos términos de la descomposición para h'.

$$h' = \left(-\frac{V}{2k} - \frac{V^2}{8k^3} + \frac{V''V}{32k^5} - \frac{V^3}{16k^5} + \cdots\right)(b_1^* b_1 + b_2^* b_2)$$

Como se puede ver, el hamiltoniano tiene forma diagonal, por lo que las ecuaciones canónicas (18) se integran trivialmente. Como resultado obtenemos:

$$b_\alpha = C \exp\left[-i \int^x \left(-\frac{V}{2k} - \frac{V}{8k^3} + \frac{V V'' - 2V^3}{32k^5}\right) dx\right] \tag{23}$$

Sustituyendo esta expresión en (17), podemos hallar los coeficientes a_α.

Para determinar el coeficiente C es necesario considerar las condiciones asintóticas

CONCLUSIONES

hagamos unas cuantas observaciones:

1.- Una vez hallada la función de onda por el método de medias, podemos hallar la expresión para los coeficientes de transmisión y reflexión

2.- La solución de los problemas de contorno, expresada en la forma de Hamilton, es un método de construcción de la descomposición de una función en fracciones en cadena.

3.- En los casos mas generales la solución obtenida por el método de medias es más exacta que la que se obtiene en la forma de se ie (12), por cuanto no contiene términos seculares.

BIBLIOGRAFÍA

/1/ A.L. Zubariev
El principio variacional de Schwinger en la Mecánica Cuántica- Moscú- "Energoizdat"-1981.

/2/ N.N. Bogoliubov, Yu. A. Mitropolski
"Métodos asintóticos en la teoría de las oscilaciones no lineales" - Moscú - "Nauka" - 1974

/3/ H. Goldstein
Mecánica Clásica - La Habana, Edición Revolucionaria 1967

/4/ Yu. G. Pavlenko
"Teoría Covariante de Perturbaciones en la Electrodinámica Clásica". Moscú-Univ. Estatal de Moscú - 1981.

/5/ V.V. Babikov
"Método de las funciones de fase en la Mecánica Cuántica", Moscú, "Nauka", 1976.

/6/ V.E. Zajarov, C.V. Manakov y otros.
Teoría de los Solitones. Método del problema inverso. Moscú, "Nauka", 1971.

/7/ V.M. Babich, V.C. Buldiriev,
"Métodos asintóticos en los problemas de difracción de ondas cortas. Método de los problemas modelos." Moscú, "Nauka", 1980.

/8/ Yu. G. Pavlenko
"Nuevo método para la investigación de los desarrollos asintóticos", Viestnik MGU, serie 3, Vol. 23, No. 2, pag. 61, 1982.