

Aplicaciones de la teoría de Hamilton–Jacobi en mecánica cuántica

Andr  Oliva, Universidad de Costa Rica
Mec nica Cl sica de Posgrado

I-2014

1 Separabilidad de la ecuaci n de Hamilton–Jacobi

Supongamos que el hamiltoniano no depende expl citamente del tiempo. Entonces, la ecuaci n de Hamilton–Jacobi queda

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q_1, \dots, q_n; \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_n}\right) = 0$$

donde S es la funci n principal de Hamilton–Jacobi. En lo que resta de la secci n, \mathbf{q} significa $\{q_1, \dots, q_n\}$, etc. Podemos separar la variable tiempo con la suma $S \rightarrow S(\mathbf{q}, \mathbf{P}) - \beta t$, donde la constante β usualmente coincide con la energ a.

A continuaci n, suponemos que el hamiltoniano puede tambi n separarse de forma que

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H_1(q_1, p_1) + \dots + H_n(q_n, p_n)$$

Dicha separaci n implica que el sistema tiene grados independientes de libertad. Esta condici n no es necesaria, pero s  suficiente para conseguir la separaci n. Hay sistemas que cumplen con la separaci n para ciertos sistemas de coordenadas generalizadas.

Con esto, podemos separar

$$S(\mathbf{q}, \mathbf{P}) = S_1(q_1, P_1) + \dots + S_n(q_n, P_n)$$

Recordamos que las P_i son constantes en Hamilton–Jacobi, con lo que la funci n S en realidad solo depende de \mathbf{q} . Entonces, podemos separar

$$H_1\left(q_1, \frac{\partial S}{\partial q_1}\right) + \dots + H_n\left(q_n, \frac{\partial S}{\partial q_n}\right) = E$$

pero cada t rmino debe ser igual a una constante, puesto que dependen de diferentes variables:

$$H_i\left(q_i, \frac{\partial S_i}{\partial q_i}\right) = \beta_i$$

con lo que

$$\beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_n = E$$

2 Integral de fase: *teoría cuántica* antigua

2.1 Definición de la integral de fase

Las ecuaciones obtenidas son de 1.^{er} orden y de 2.^o grado, puesto que $T \propto p_i^2$. Las soluciones que se encontrarían serían $S_i = S_i(q_i, \beta_i)$. Como las β_i son constantes, esto implica que S_i solo depende de q_i . Este hecho lleva a que $p_i = \frac{dS_i}{dq_i}$, con el par ordenado (q_i, p_i) *independiente* de otras coordenadas. Entonces, tiene sentido definir

$$J_i = \oint p_i dq_i$$

como la *integral de fase* para un par ordenado, si el movimiento es periódico, para tomarla en un ciclo completo. En este momento, esta integral de fase tiene dos aplicaciones de las que hablaremos.

2.2 Frecuencia sin resolver ecuaciones del movimiento

La primera es que uno puede hacer

$$J_i = \oint \frac{dS_i}{dq_i} dq_i = J_i(\beta_i)$$

con lo que, de ser posible, se puede invertir $\beta_i = \beta_i(J_i)$ y con esto la energía queda como $E = H = \sum_{i=1}^n \beta_i(J_i)$, que equivale a hacer una transformación canónica $S_i(q_i, \beta_i) \rightarrow S_i(\phi_i, J_i)$, con $\phi_i = \partial S(q_j, J_j) / \partial J_i$, que se llama *variable angular*, y $\partial H / \partial J_i = \dot{\phi}_i = \text{const.}$ Es posible demostrar que $\dot{\phi}$ es la frecuencia del movimiento periódico. Por ejemplo, para el oscilador armónico simple, podemos escribir el hamiltoniano (que coincide con la energía), en la siguiente forma:

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{q^2}{2E/k} = 1$$

que describe una elipse en el espacio de fase, con los denominadores los semiejes menor y mayor, respectivamente, al cuadrado. Ahora, la integral de fase queda

$$J = \oint pdq = \pi ab = 2\pi E \sqrt{\frac{m}{k}} \implies H = E = \frac{J}{2m} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

y entonces,

$$\frac{\partial H}{\partial J} = \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

que en efecto es la frecuencia. Esto es útil para determinar frecuencias para movimientos complicados, analítica o numéricamente.

2.3 Cuantización de Bohr–Sommerfeld

La segunda aplicación es histórica: la cuantización de Bohr–Sommerfeld. La hipótesis cuántica de Sommerfeld era que la integral de fase solo toma valores discretos para cada par de variables conjugadas (en el sentido definido anteriormente), de modo que

$$J = \oint pdq = nh; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

donde h es la constante de Planck (*Planck's quantum action*). Por ejemplo, para el oscilador armónico calculado anteriormente tendríamos

$$J = 2\pi E \sqrt{\frac{m}{k}} = nh; \quad \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\implies E_n = nh\nu$$

que predice correctamente los valores de la energía cuantizada del oscilador armónico cuántico. Con esta hipótesis, además, se predice que al ser h un número pequeño, la cuantización de la integral de fase solo tiene relevancia en el mundo microscópico. A escalas macroscópicas, el espacio de fase puede considerarse como un continuo (principio de correspondencia). Esta técnica puede utilizarse todavía, justificando la existencia de la regla de cuantización de Sommerfeld, para calcular analítica o numéricamente los valores de energía para un sistema más complejo sin tener que averiguar las funciones de onda.

Como ejemplo resumido, presentamos el átomo de Bohr–Sommerfeld. El hamiltoniano de este sistema es

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\phi^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}$$

Las constantes del movimiento son: (i) $H = E$, pues H no depende explícitamente del tiempo; (ii) $p_\phi = mr^2\dot{\phi}^2 = \mathcal{L}$ pues ϕ es variable cíclica.

Obsérvese que este hamiltoniano no se puede separar como lo propusimos anteriormente en $H(r, p_r) + H(\phi, p_\phi)$, pero al proponer que $p_i = dS_i/dq_i$ sí se logra obtener los pares de variables conjugadas porque p_ϕ es una constante.

Condiciones de cuantización: para el par ϕ, p_ϕ :

$$lh = \oint p_\phi d\phi = \int_0^{2\pi} \mathcal{L} d\phi = 2\pi\mathcal{L} \implies \mathcal{L} = lh; \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Para el otro par, como \mathcal{L} es una constante,

$$kh = \oint p_r dr = 2 \int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{2m(E + \frac{e^2}{r}) - \frac{\mathcal{L}^2}{r}} dr; \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

resolviendo los límites de integración e integrando, se llega a que

$$\sqrt{\frac{2\pi^2 m e^4}{-E}} - 2\pi\mathcal{L} = kh$$

y definiendo $n = l + k = 0, 1, 2, \dots$ queda finalmente

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}$$

3 Ecuación de Hamilton–Jacobi cuántica no relativista

El hecho de proponer hamiltonianos para la solución de problemas de mecánica cuántica (moderna) implica que también podemos utilizar (definiéndolo de forma apropiada) el formalismo de Hamilton–Jacobi, y explotarlo. De hecho, al aplicar las ecuaciones canónicas del movimiento a un hamiltoniano cuántico se obtienen las ecuaciones del movimiento en la visión de Heisenberg.

3.1 Construcción de la ecuación de Hamilton–Jacobi cuántica

Consideremos un hamiltoniano

$$H(\hat{q}_1, \hat{p}_1, t) = \frac{1}{2m} \hat{p}_1^2 + V(\hat{q}_1)$$

Ahora, definimos las transformaciones canónicas cuánticas de la misma forma en la que definimos una transformación canónica clásica, pero con el cuidado de que ahora tenemos operadores y no simplemente variables. Puede definirse una función generatriz a una transformación canónica que deje el hamiltoniano transformado como nulo, con lo que definimos la ecuación de Hamilton–Jacobi cuántica como la que debe cumplir la función generatriz:

$$H\left(\hat{q}, \frac{\partial W(\hat{q}, \hat{Q}, t)}{\partial \hat{q}}, t\right) + \frac{\partial W(\hat{q}, \hat{Q}, t)}{\partial t} = 0$$

donde $\hat{\cdot}$ significa operador, y son vectores si no llevan el subíndice, que indica una componente.

Como en toda transformación canónica,

$$\hat{p}_i = \frac{\partial W(\hat{q}, \hat{Q}, t)}{\partial \hat{q}_i}$$

$$\hat{P}_i = -\frac{\partial W(\hat{q}, \hat{Q}, t)}{\partial \hat{Q}_i}$$

Abreviamos $\hat{W} = W(\hat{q}, \hat{Q}, t)$. Entonces, para nuestro hamiltoniano, la ecuación de Hamilton–Jacobi queda:

$$\frac{1}{2m} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_1} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_1} + V(\hat{q}_1) + \frac{\partial \hat{W}}{\partial t} = 0$$

A continuación vamos a proyectar esta ecuación para aplicar todos los operadores sobre funciones; *em-bra-ket-ando* la ecuación con $\langle q|Q\rangle$:

$$\frac{1}{2m} \left\langle q \left| \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_i} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_i} \right| Q \right\rangle + \langle q|V(\hat{q}_1)|Q\rangle + \langle q|\frac{\partial \hat{W}}{\partial t}|Q\rangle = 0$$

Ahora bien,

$$\begin{aligned} \langle q|\hat{W}|Q\rangle &= W\langle q|Q\rangle \\ \langle q|\frac{\partial \hat{W}}{\partial t}|Q\rangle &= \frac{\partial W}{\partial t}\langle q|Q\rangle \\ \langle q|\frac{\partial \hat{W}}{\partial q_i}|Q\rangle &= \frac{\partial W}{\partial q_i}\langle q|Q\rangle \end{aligned}$$

pero $\left\langle q \left| \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_i} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_j} \right| Q \right\rangle$, en general, no es simplemente $\frac{\partial W}{\partial \hat{q}_i} \frac{\partial W}{\partial \hat{q}_j} \rightarrow \left(\frac{\partial W}{\partial q_1} \right)^2$ porque estamos trabajando con operadores no conmutantes, lo que al final provocará una diferencia entre la ecuación de Hamilton–Jacobi clásica y la versión cuántica. Para manejar esto, debemos exigir la condición de *well-ordering* ("buen ordenamiento"), que dice que los operadores con letras mayúsculas deben estar a la derecha de aquellos con letras minúsculas. Esto implica que es posible definir una función principal (con operadores) de la siguiente forma:

$$W(\hat{q}, \hat{Q}, t) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\hat{q}, t), g_{\alpha}(\hat{Q}, t)$$

entonces,

$$\left\langle q \left| \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_i} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_j} \right| Q \right\rangle = \sum_{\alpha, \beta} \left\langle q \left| \frac{\partial f_{\alpha}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i} g_{\alpha}(\hat{Q}, t) \frac{\partial f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_j} g_{\beta}(\hat{Q}, t) \right| Q \right\rangle$$

hay que seguir la convención y "ordenarlo bien". Para ello, hay que utilizar las relaciones de conmutación para una función arbitraria,

$$[G(\hat{q}), \hat{p}_i] = i\hbar \frac{\partial G(\hat{q})}{\partial \hat{q}_i}$$

pero

$$\hat{p}_i = \frac{\partial W(\hat{q}, \hat{Q}, t)}{\partial \hat{q}_i}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_i} G(\hat{q}) = G(\hat{q}) \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_i} - i\hbar \frac{\partial G(\hat{q})}{\partial \hat{q}_i}$$

Si tomamos $G(\hat{q}) = \partial f_{\beta}(\hat{q}, t)/\partial \hat{q}_j$

$$\Rightarrow \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_i} \frac{\partial f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_j} = \frac{\partial f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_j} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_i} - i\hbar \frac{\partial^2 f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i \partial \hat{q}_j}$$

Sustituyendo nuestra definición de W con la sumatoria,

$$\sum_{\alpha} \frac{\partial f_{\alpha}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i} g_{\alpha}(\hat{Q}, t) \frac{\partial f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i} = \frac{\partial f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_j} \sum_{\alpha} \frac{\partial f_{\alpha}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i} g_{\alpha}(\hat{Q}, t) - i\hbar \frac{\partial^2 f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i \partial \hat{q}_j}$$

multiplicando por la derecha por $g_{\beta}(\hat{Q}, t)$ y sumando sobre β ,

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial f_{\alpha}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i} g_{\alpha}(\hat{Q}, t) \frac{\partial f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i} g_{\beta}(\hat{Q}, t) \\ &= \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_j} \frac{\partial f_{\alpha}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i} g_{\alpha}(\hat{Q}, t) g_{\beta}(\hat{Q}, t) - \sum_{\beta} i\hbar \frac{\partial^2 f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i \partial \hat{q}_j} g_{\beta}(\hat{Q}, t) \end{aligned}$$

con lo que

$$\begin{aligned} & \left\langle q \left| \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_i} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}_j} \right| Q \right\rangle \\ &= \left(\sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_j} \frac{\partial f_{\alpha}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i} g_{\alpha}(\hat{Q}, t) g_{\beta}(\hat{Q}, t) - \sum_{\beta} i\hbar \frac{\partial^2 f_{\beta}(\hat{q}, t)}{\partial \hat{q}_i \partial \hat{q}_j} g_{\beta}(\hat{Q}, t) \right) \langle q | Q \rangle \end{aligned}$$

por lo que en nuestro hamiltoniano sencillo queda,

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial q_1} \right)^2 - i\hbar \frac{\partial^2 W}{\partial q_1} \right] = E - V(q_1)$$

donde, como siempre, hemos hecho $W(q, Q, t) \rightarrow W(q) - Et$. Esta es la *ecuación de Hamilton–Jacobi cuántica*.

3.2 Conexión con la ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger, como fue justificada por él mismo, se construye considerando el hamiltoniano como $H = \hat{H}\psi$. Entonces, la ecuación de Hamilton–Jacobi queda escrita como

$$H \left(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i} \right) = E$$

Schrödinger consideró un *ansatz* para la función principal de la forma

$$W = k \ln \psi \implies \psi = e^{S/K}$$

y encontró $k = i/\hbar$. Esa transformación es, por tanto, la que genera la ecuación de Hamilton–Jacobi a partir de la ecuación de Schrödinger.

4 El método WKB

El método WKB, que sirve para aproximar la función de onda en la ecuación de Schrödinger, consiste en resolver con una expansión en serie la ecuación de Hamilton–Jacobi, para luego ser insertada en la función de onda. La aproximación de orden cero se obtiene al hacer $\hbar \rightarrow 0$ en la ec. de Hamilton–Jacobi, obteniendo la misma ecuación pero clásica, que puede resolverse integrando.

Hamiltoniano y ec. de Schrödinger:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

Al sustituir $\psi = e^{\frac{i}{\hbar}W(x)}$, se obtiene la Ecuación de Hamilton–Jacobi

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 - i\hbar \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} \right] = E - V(x)$$

La aproximación de orden cero: $\hbar \rightarrow 0$

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W_0}{\partial x} \right)^2 = E - V(x) \implies W_0 = \pm \int \sqrt{2m(E - V(x))} dx$$

Se hace una expansión en serie de potencias en (\hbar/i) , y con ello se sustituye el desarrollo en la ecuación de Hamilton–Jacobi y se encuentran las ecuaciones diferenciales que hay que resolver para el siguiente orden de aproximación. Las expansiones pueden hacerse asintóticas, dependiendo si se espera un comportamiento oscilatorio o exponencial de la función de onda; para ello se usa $W(x) = X(x) + iY(x)$, manteniendo o eliminando los términos según convenga para la expansión asintótica.

Referencias

- Greiner, W. (2010). *Classical Mechanics*. Sec. 20, 20.2. ISBN 978-3-642-03434-3
- Roncadelli, M.; Schulman, L.S. (2007). "Quantum Hamilton–Jacobi Theory", arXiv:0712.0307v1
- Girard, M. F. (2014). "Numerical Solutions of the Quantum Hamilton–Jacobi Equation and WKB-like Representations for One-Dimensional Wavefunctions", arXiv:1403.0825v1 [quant-ph]
- Bhalla, R.S.; Kapoor, A.K.; Panigrahi, P.K. (1996) "Quantum Hamilton–Jacobi formalism and the bound state spectra", arXiv:quant-ph/9512018v2
- Field, J.H. (2012). "Derivation of the Schrödinger equation from the Hamilton–Jacobi equation in Feynman's path integral formulation of quantum mechanics", arXiv:1204.0653v1