Universidad Central de Venezuela
Facultad de Ciencias
Escuela de Física
Departamento de Física

Algunos Resultados Asociados a Problemas Modélicos en la Mecánica Cuántica Unidimensional

(Trabajo de ascenso para optar a la categoría de Profesor Titular)

Salvatore De Vincenzo

Escuela de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Central de Venezuela,
A.P. 47145, Caracas 1041-A, Venezuela
URL: http://fisica.ciens.ucv.ve/∼svincenz/svincenz.html
E-mail: salvatore.devincenzo@ucv.ve

1. Resultados clasico-cuánticos versus resultados cuánticos exactos para una partícula en una caja

2. La partícula en un pozo infinito versus la partícula en una caja

3. Sobre el cálculo formal de $d\langle\hat{x}\rangle/dt$ y $d\langle\hat{p}\rangle/dt$ para la partícula en una caja

4. La partícula en un salto infinito versus la partícula en una semi-línea

5. La trayectoria clásica a partir del movimiento cuántico para la partícula en una caja (transparente)

1. Resultados clasico-cuánticos versus resultados cuánticos exactos para una partícula en una caja

---

1.1) Resultados clásicos

- Partícula en una caja (paredes impenetrables):

$$\blacktriangleright \quad x(t) = \sum_{\tau=0}^{\infty} a_\tau \cos(\omega_\tau t)\,; \quad a_\tau = \frac{vT}{4}\,, \quad \tau = 0\,; \quad a_\tau = -\frac{2vT}{\pi^2\tau^2}\,, \quad \tau = 1,3,5,\ldots\,; \quad a_\tau = 0\,, \quad \tau = 2,4,6,\ldots\,; \quad \omega_\tau = \tau\omega\,, \quad \omega = \frac{2\pi}{T}\,. \quad \blacktriangleleft$$

[Posición en función del tiempo $= x(t) \in [\,0, L\,]$ (FIG. 1); Amplitud de Fourier $= a_\tau$; $L = vT/2\,.$]

- Partícula en una caja (paredes transparentes):

$$\blacktriangleright \quad x(t) = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} c_\tau \exp(i\omega_\tau t)\,; \quad c_\tau = \frac{vT}{2}\,, \quad \tau = 0\,; \quad c_\tau = i\frac{vT}{2\pi\tau}\,, \quad \tau = \pm1, \pm2, \pm3, \ldots\,; \quad \omega_\tau = \tau\omega\,, \quad \omega = \frac{2\pi}{T}\,. \quad \blacktriangleleft$$

[Posición en función del tiempo $= x(t) \in [\,0, L\,]$ (FIG. 2); Amplitud de Fourier $= c_\tau$; $L = vT\,.$]

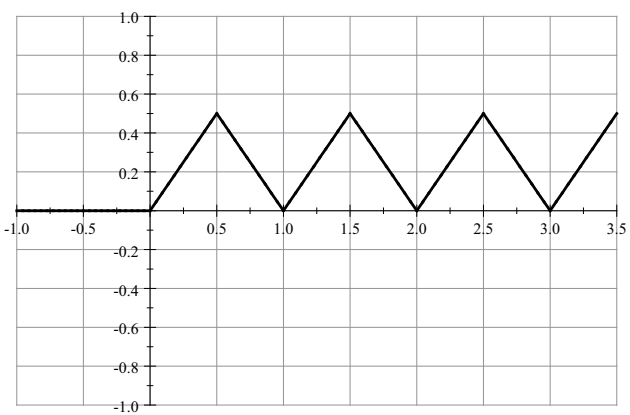


FIG. 1

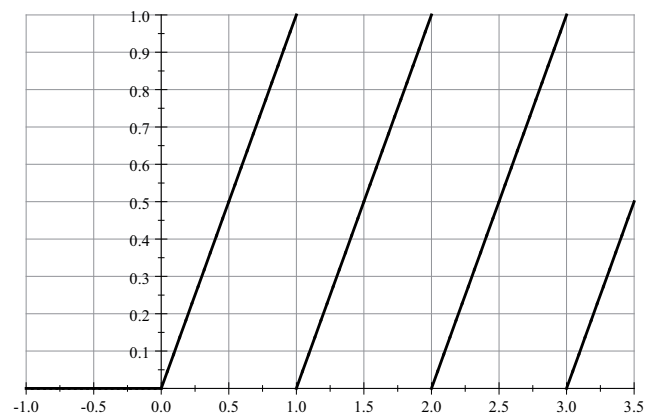


FIG. 2

1.2) Resultados clasico-cuánticos

- Use la regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld-Wilson (BSW) para sistemas unidimensionales periódicos:

$$\frac{1}{2\pi}\oint dx\, mv(x) = n\hbar\,.$$

- Partícula en una caja (paredes impenetrables):

$$v \equiv v(n) = \frac{\pi\hbar}{mL}n \;\Rightarrow\; E \equiv E(n) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\,, \quad n = 1, 2, 3, \ldots\,.$$

$$\blacktriangleright \quad a_\tau = a_\tau(n) = \frac{L}{2}\,, \quad \tau = 0\,; \quad a_\tau = a_\tau(n) = -\frac{4L}{\pi^2\tau^2}\,, \quad \tau = 1, 3, 5, \ldots\,; \quad a_\tau = a_\tau(n) = 0\,, \quad \tau = 2, 4, 6, \ldots\,. \quad \blacktriangleleft$$

$$\blacktriangleright \quad \omega_\tau = \tau\omega \Leftrightarrow \omega_\tau(n) = \tau\omega(n) = \tau 2\pi\frac{v(n)}{2L} \;\Rightarrow\; \omega_\tau(n) = \tau\frac{\pi^2\hbar}{mL^2}n\,. \quad \blacktriangleleft$$

[Posición en función del tiempo y del estado cuántico $\equiv x(t,n) = \sum_{\tau=0}^{\infty} a_\tau(n)\cos(\omega_\tau(n)t)$.]

- Partícula en una caja (paredes transparentes):

$$v \equiv v(n) = \frac{2\pi\hbar}{mL}n \;\Rightarrow\; E \equiv E(n) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2n\pi}{L}\right)^2\,, \quad n = 0, 1, 2, \ldots\,.$$

$$\blacktriangleright \quad c_\tau = c_\tau(n) = \frac{L}{2}\,, \quad \tau = 0\,; \quad c_\tau = c_\tau(n) = i\frac{L}{2\pi\tau}\,, \quad \tau = \pm1, \pm2, \pm3, \ldots\,. \quad \blacktriangleleft$$

$$\blacktriangleright \quad \omega_\tau = \tau\omega \Leftrightarrow \omega_\tau(n) = \tau\omega(n) = \tau 2\pi\frac{v(n)}{L} \;\Rightarrow\; \omega_\tau(n) = \tau\frac{4\pi^2\hbar}{mL^2}n\,. \quad \blacktriangleleft$$

[Posición en función del tiempo y del estado cuántico $\equiv x(t,n) = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} c_\tau(n)\exp(i\omega_\tau(n)t)$.]

1.3) Resultados cuánticos

- Heisenberg (1925) asigna a x una matrix de armónicos $x_{n,m} \equiv c_{n,m} \exp(i\omega_{n,m}t)$ (asociada a la transición $n \to m$):

$$x_{n,m} = \langle \Psi_n \mid x \mid \Psi_m \rangle \,; \quad c_{n,m} = \langle \psi_n \mid x \mid \psi_m \rangle \,; \quad \Psi_n = \psi_n \exp(-iE_n t/\hbar); \quad \omega_{n,m} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \,.$$

- Partícula en una caja (paredes impenetrables):

$$\blacktriangleright \quad a_{n,n-\tau} = c_{n,n-\tau} = \frac{L}{2} \,, \quad \tau = 0 \,; \quad a_{n,n-\tau} = \frac{1}{2} c_{n,n-\tau} = -\frac{4L}{\pi^2 \tau^2} \frac{1 - \frac{\tau}{n}}{\left(1 - \frac{\tau}{2n}\right)^2} \,, \quad \tau = 1, 3, 5, \ldots \,; \quad a_{n,n-\tau} = \frac{1}{2} c_{n,n-\tau} = 0 \,, \quad \tau = 2, 4, 6, \ldots \,. \quad \blacktriangleleft$$

$$\blacktriangleright \quad \omega_{n,n-\tau} = \tau \frac{\pi^2 \hbar}{mL^2} n \left(1 - \frac{\tau}{2n}\right) . \quad \blacktriangleleft$$

- Se verifica el siguiente resultado:

$$\blacktriangleright \quad a_{n,n-\tau} \underset{n \gg \tau}{\to} a_\tau(n) \,; \quad \omega_{n,n-\tau} \underset{n \gg \tau}{\to} \omega_\tau(n) = \tau \omega(n) \,. \quad \blacktriangleleft$$

[Amplitud de Heisenberg $= a_{n,n-\tau}$; $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$, $E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$, $n = 1, 2, 3, \ldots$; $\psi_n(0) = \psi_n(L) = 0$.]

- Partícula en una caja (paredes transparentes):

$$\blacktriangleright \quad c_{n,n-\tau} = \frac{L}{2} \,, \quad \tau = 0 \,; \quad c_{n,n-\tau} = i \frac{L}{2\pi\tau} \,, \quad \tau = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \,. \quad \blacktriangleleft$$

$$\blacktriangleright \quad \omega_{n,n-\tau} = \tau \frac{4\pi^2 \hbar}{mL^2} n \left(1 - \frac{\tau}{2n}\right) . \quad \blacktriangleleft$$

- Se verifica el siguiente resultado:

$$\blacktriangleright \quad c_{n,n-\tau} = c_\tau(n) \,; \quad \omega_{n,n-\tau} \underset{n \gg \tau}{\to} \omega_\tau(n) = \tau \omega(n) \,. \quad \blacktriangleleft$$

[Amplitud de Heisenberg $= c_{n,n-\tau}$; $\psi_n = \sqrt{\frac{1}{L}} \exp\left(+i \frac{2n\pi}{L} x\right)$, $E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2n\pi}{L}\right)^2$, $n = 0, 1, 2, \ldots$; $\psi_n(0) = \psi_n(L), \psi'_n(0) = \psi'_n(L)$.]

<u>Conclusión</u>: En la aproximación $n \gg \tau$ los resultados clásico-cuánticos coinciden con los resultados cuánticos exactos.

2. La partícula en un pozo infinito versus la partícula en una caja

2.1) Partícula en un pozo infinito

- Se considera el siguiente estado general en $x \in (-\infty, +\infty)$:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \psi_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n u_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)(\Theta(x) - \Theta(x-a)) \ ; \quad u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \ , \quad n = 1, 2, 3, \ldots \ .$$

- El potencial tiene la forma:

$$V(x) = \lim_{V_0 \to \infty} V_0 \left(\Theta(-x) + \Theta(x-a)\right) \ .$$

- Los valores medios de la posición, el momentum y la fuerza son (se usa $n = a\sqrt{2ME_n}/\pi\hbar$ y $m = a\sqrt{2ME_m}/\pi\hbar$):

$$\blacktriangleright \quad \langle \hat{X} \rangle_\Psi = \langle \Psi \mid x \mid \Psi \rangle = \frac{a}{2} + \frac{2\hbar^2}{Ma} \sum_{\substack{n=1 \\ (n \neq m)}}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{A}_n A_m \frac{\sqrt{E_n E_m}}{(E_n - E_m)^2} \left((-1)^{n+m} - 1\right) \exp\left(i\frac{(E_n - E_m)}{\hbar}t\right) \ , \quad \blacktriangleleft$$

$$\blacktriangleright \quad \langle \hat{P} \rangle_\Psi = \langle \Psi \mid -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \mid \Psi \rangle = i\frac{2\hbar}{a} \sum_{\substack{n=1 \\ (n \neq m)}}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{A}_n A_m \frac{\sqrt{E_n E_m}}{E_n - E_m} \left((-1)^{n+m} - 1\right) \exp\left(i\frac{(E_n - E_m)}{\hbar}t\right) \ , \quad \blacktriangleleft$$

$$\langle \hat{F} \rangle_\Psi = \langle \Psi \mid -\frac{d}{dx}V(x) \mid \Psi \rangle = \lim_{V_0 \to \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \bar{\Psi}(x,t) V_0 \left(\delta(x) - \delta(x-a)\right) \Psi(x,t) = -\lim_{V_0 \to \infty} V_0 \left(\bar{\Psi}(a,t)\Psi(a,t) - \bar{\Psi}(0,t)\Psi(0,t)\right)$$

$$= -\lim_{V_0 \to \infty} V_0 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{A}_n A_m \left(\bar{\phi}_n(a)\phi_m(a) - \bar{\phi}_n(0)\phi_m(0)\right) \exp\left(i\frac{(E_n - E_m)}{\hbar}t\right) \qquad \left[\psi_n(0 \text{ ó } a) = \lim_{V_0 \to \infty} \phi_n(0 \text{ ó } a)\right]$$

$$= -\lim_{V_0 \to \infty} V_0 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{A}_n A_m \left((-1)^{n+m}\frac{2}{a}\frac{\sqrt{E_n E_m}}{V_0} - \frac{2}{a}\frac{\sqrt{E_n E_m}}{V_0}\right) \exp\left(i\frac{(E_n - E_m)}{\hbar}t\right)$$

$$\blacktriangleright \quad \Rightarrow \langle \hat{F} \rangle_\Psi = -\frac{2}{a} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{A}_n A_m \sqrt{E_n E_m} \left((-1)^{n+m} - 1\right) \exp\left(i\frac{(E_n - E_m)}{\hbar}t\right) \ . \quad \blacktriangleleft$$

-Se verifica el teorema de Ehrenfest:

$$\blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{X}\rangle_\Psi = \frac{1}{M}\langle \hat{P}\rangle_\Psi\,, \quad \blacktriangleleft \quad \blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{P}\rangle_\Psi = \langle \hat{F}\rangle_\Psi\,. \quad \blacktriangleleft$$

2.2) Partícula en una caja

- Se considera el siguiente estado general en $x \in [0, a]$:

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n u_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)\,; \quad u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\,, \quad n = 1, 2, 3, \ldots\,; \quad u(0,t) = u(a,t) = 0. \leftarrow \text{Condición de frontera de Dirichlet}$$

- El potencial en el interior de la caja es nulo:

$$v(x) = 0\,.$$

<u>Procedimiento general</u>

- Los valores medios de la posición, el momentum y la fuerza son:

$$\langle \hat{x}\rangle_u = \langle\, u \mid x \mid u\,\rangle\,, \quad \langle \hat{p}\rangle_u = \langle\, u \mid -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \mid u\,\rangle\,, \quad \langle \hat{f}\rangle_u = \langle\, u \mid -\frac{d}{dx}v(x) \mid u\,\rangle\,.$$

- El Hamiltoniano es $\hat{h}$ y $u(x,t)$ satisface la ecuación de Schrödinger:

$$\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + v(x)\,, \quad \hat{h}u(x,t) = i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}u(x,t)\,.$$

- En general:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{o}\rangle_u = \frac{d}{dt}\langle\, u \mid \hat{o} \mid u\,\rangle = \langle\, u_t \mid \hat{o} \mid u\,\rangle + \langle\, u \mid \hat{o} \mid u_t\,\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\, \hat{h}u \mid \hat{o} \mid u\,\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\, u \mid \hat{o} \mid \hat{h}u\,\rangle$$
$$= \frac{i}{\hbar}\langle\, \hat{h}u \mid \hat{o} \mid u\,\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\, u \mid \hat{h} \mid \hat{o}u\,\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle\, u \mid [\,\hat{h}, \hat{o}\,] \mid u\,\rangle\,.$$

- Se obtienen los siguientes resultados:

$$\blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{x}\rangle_u = -\frac{i\hbar}{2M}\left[x\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}u - \bar{u}\,\frac{\partial u}{\partial x}\right) - \bar{u}\,u\right]\Bigg|_0^a + \frac{1}{M}\langle \hat{p}\rangle_u\,, \quad \blacktriangleleft \quad \blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{p}\rangle_u = -\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x} - \bar{u}\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]\Bigg|_0^a + \langle \hat{f}\rangle_u\,. \quad \blacktriangleleft$$

- En nuestro caso, los resultados son:

$$\blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle_u = \frac{1}{M}\langle\hat{p}\rangle_u\,, \quad \blacktriangleleft \quad \blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle_u = -\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{\partial\bar{u}}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x}\right]\Bigg|_0^a \equiv \langle f_B\rangle_u\,. \quad \blacktriangleleft$$

- f_B es una fuerza que depende del estado ($\langle f_B\rangle_u$ es un término de frontera):

$$f_B(x,t) \equiv -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{|u|^2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x}\right)\,.$$

Conclusión

- Al comparar los resultados en los dos problemas, se tiene que:

$$\langle\hat{X}\rangle_\Psi = \langle\hat{x}\rangle_u\,, \quad \langle\hat{P}\rangle_\Psi = \langle\hat{p}\rangle_u\,, \quad \langle\hat{F}\rangle_\Psi = \langle f_B\rangle_u\,.$$

- En cada uno de los problemas se tiene un teorema de Ehrenfest que tiene sentido:

Partícula en un pozo infinito $\swarrow$ $\qquad\qquad$ $\searrow$ Partícula en una caja

$$\blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{X}\rangle_\Psi = \frac{1}{M}\langle\hat{P}\rangle_\Psi\,, \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{P}\rangle_\Psi = \langle\hat{F}\rangle_\Psi \quad \blacktriangleleft \quad \blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle_u = \frac{1}{M}\langle\hat{p}\rangle_u\,, \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle_u = \langle f_B\rangle_u \quad \blacktriangleleft$$

Comentarios

- Estos resultados ratifican la consistencia interna del formalismo de la mecánica cuántica.
- En ambos casos, la partícula solo se puede mover entre las barreras impenetrables en $x = 0$ y $x = a$.
- En una caja se tiene una familia de cuatro parámetros de condiciones de frontera (impenetrables y no impenetrables) para $\hat{h} = \hat{h}^\dagger$. Por ejemplo:

$$\begin{bmatrix} u(a) - i\lambda u'(a) \\ u(0) + i\lambda u'(0) \end{bmatrix} = \hat{U}\begin{bmatrix} u(a) + i\lambda u'(a) \\ u(0) - i\lambda u'(0) \end{bmatrix}\,, \quad \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}\,.$$

- Asimismo, en una caja se tiene una familia de solo dos parámetros de condiciones de frontera impenetrables para $\hat{h} = \hat{h}^\dagger$. Por ejemplo:

$$u'(a) + \eta_+ u(a) = 0\,, \quad u'(0) + \eta_- u(0) = 0\,, \quad \eta_\pm \in \mathbb{R}\cup\{\infty\}\,.$$

- Sin embargo, el límite $V_0 \to \infty$ solo conduce a la condición de frontera de Dirichlet, $u(a) = u(0) = 0$.

3. Sobre el cálculo formal de $d\langle\hat{x}\rangle/dt$ y $d\langle\hat{p}\rangle/dt$ para la partícula en una caja

3.1) Derivadas con respecto al tiempo de $\langle\hat{x}\rangle$

- Cálculo formal:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = \frac{d}{dt}\langle\,\Psi,\hat{x}\Psi\,\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\,\hat{H}\Psi,\hat{x}\Psi\,\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\,\Psi,\hat{H}\hat{x}\Psi\,\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle\,\Psi\mid[\,\hat{H},\hat{x}\,]\mid\Psi\,\rangle\,,$$

$$\langle\,\hat{H}\Psi,\hat{x}\Psi\,\rangle - \langle\,\Psi,\hat{H}\hat{x}\Psi\,\rangle = \left[i\hbar\,xj + \frac{\hbar^2}{2m}\varrho\right]\Bigg|_a^b\,,\quad \langle\,\Psi\mid[\,\hat{H},\hat{x}\,]\mid\Psi\,\rangle = -\frac{i\hbar}{m}\langle\hat{p}\rangle,$$

- j es la densidad de corriente de probabilidad y ϱ es la densidad de probabilidad:

$$j = j(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}\Psi - \bar{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)\,,\quad \varrho = \varrho(x,t) = \bar{\Psi}\Psi.$$

- Resultado:

$$\blacktriangleright\quad \frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = \left[-xj + \frac{i\hbar}{2m}\varrho\right]\Bigg|_a^b + \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle\quad\blacktriangleleft$$

- $\hat{x} = x$, $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ y $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V$ satisfacen las siguientes relaciones:

$$\langle\Psi,\hat{x}\Phi\rangle - \langle\hat{x}\Psi,\Phi\rangle = 0\,,\quad \langle\Psi,\hat{p}\Phi\rangle - \langle\hat{p}\Psi,\Phi\rangle = -i\hbar\,\left[\,\bar{\Psi}\Phi\,\right]\Big|_a^b\,,\quad \langle\Psi,\hat{H}\Phi\rangle - \langle\hat{H}\Psi,\Phi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\bar{\Psi}\frac{\partial\Phi}{\partial x} - \frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}\Phi\right]\Bigg|_a^b.$$

- Si $\langle\Psi,\hat{x}\hat{H}\Psi\rangle = \langle\hat{x}\Psi,\hat{H}\Psi\rangle$ (ya que $\hat{x}$ es hermítico), entonces $\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle \in \mathbb{R}$, y por lo tanto $\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = -\frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}\langle\,\hat{H}\Psi,\hat{x}\Psi\,\rangle = [\,-x\varrho v\,]\big|_a^b + \langle\hat{v}\rangle$, donde $j \equiv \varrho v$ y $\langle\hat{v}\rangle = \langle\hat{p}\rangle/m \in \mathbb{R}$.
- Si $\hat{p}$ es hermítico, entonces $[\,\varrho\,]\big|_a^b = 0$ y $\langle\hat{p}\rangle \in \mathbb{R}$. Además, $\left[\,\frac{\partial\varrho}{\partial t}\,\right]\Big|_a^b = 0 \Rightarrow \left[\,\frac{\partial j}{\partial x}\,\right]\Big|_a^b$, ya que $\frac{\partial\varrho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$.
- Si $\hat{H}$ es hermítico, entonces $[\,j\,]\big|_a^b = 0$ y $\langle\hat{H}\rangle \in \mathbb{R}$.
- Ejemplos:

$$\text{(i) } \Psi(a,t) = \Psi(b,t) = 0 \quad\Rightarrow\quad \frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle.$$

$$\text{(ii) } \Psi(-\infty,t) = \Psi(+\infty,t) \to 0 \quad\Rightarrow\quad \frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle.$$

$$\text{(iii) } \Psi(a,t) = \Psi(b,t)\,,\ \Psi_x(a,t) = \Psi_x(b,t) \quad\Rightarrow\quad \frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = (b-a)j(a,t) + \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle.$$

3.2) Derivadas con respecto al tiempo de $\langle\hat{p}\rangle$

- Cálculo formal:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = \frac{d}{dt}\langle\,\Psi,\hat{p}\Psi\,\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\,\hat{H}\Psi,\hat{p}\Psi\,\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\,\Psi,\hat{H}\hat{p}\Psi\,\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle\,\Psi\mid[\,\hat{H},\hat{p}\,]\mid\Psi\,\rangle\,,$$

$$\langle\,\hat{H}\Psi,\hat{p}\Psi\,\rangle - \langle\,\Psi,\hat{H}\hat{p}\Psi\,\rangle = i\hbar\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \bar{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right]\Bigg|_a^b, \quad \langle\,\Psi\mid[\,\hat{H},\hat{p}\,]\mid\Psi\,\rangle = -i\hbar\left\langle -\frac{dV}{dx}\right\rangle \equiv -i\hbar\langle\hat{f}\rangle,$$

- $\hat{f} = f(x) = -dV/dx$ es el operador fuerza externa clásica.
- Resultado:

$$\blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \bar{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right]\Bigg|_a^b + \langle\hat{f}\rangle \quad \blacktriangleleft$$

- Si $\langle\Psi,\hat{p}\hat{H}\Psi\rangle = \langle\hat{p}\Psi,\hat{H}\Psi\rangle$ (ya que $\hat{p}$ es hermítico), entonces $\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle \in \mathbb{R}$, y por lo tanto $\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}\langle\,\hat{H}\Psi,\hat{p}\Psi\,\rangle = -\varrho\left[\,\frac{m}{2}v^2 - V - Q\,\right]\Big|_a^b + \langle\hat{f}\rangle + \left\langle -\frac{\partial Q}{\partial x}\right\rangle$, donde $j \equiv \varrho v$ y $Q = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{|\Psi|}\frac{\partial^2|\Psi|}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{\varrho}}\frac{\partial^2\sqrt{\varrho}}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2}{4m}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\varrho}\frac{\partial\varrho}{\partial x}\right)^2 - \frac{1}{\varrho}\frac{\partial^2\varrho}{\partial x^2}\right] \in \mathbb{R}$ es el potencial cuántico de Bohm.
- De hecho, $\frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}\langle\,\hat{H}\Psi,\hat{p}\Psi\,\rangle - [\bar{\Psi}\hat{H}\Psi]_a^b$ $(\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t})$.
- Ejemplos:

$$\text{(i) } \Psi(a,t) = \Psi(b,t) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right]\Bigg|_a^b + \langle\hat{f}\rangle.$$

$$\text{(ii) } \Psi(\pm\infty,t) = \lim_{x\to\pm\infty}\frac{1}{|x|^{\frac{1}{2}+\epsilon}} \to 0\ (\epsilon > 0) \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = \langle\hat{f}\rangle.$$

$$\text{(iii) } \Psi(a,t) = \Psi(b,t)\,,\ \Psi_x(a,t) = \Psi_x(b,t) \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = \langle\hat{f}\rangle.$$

- Otros resultados:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right]\Bigg|_a^b = \varrho Q\,\Big|_a^b + \left\langle -\frac{\partial Q}{\partial x}\right\rangle - \varrho\frac{m}{2}v^2\,\Big|_a^b = -\frac{\hbar^2}{8m}\,\frac{1}{\varrho}\left(\frac{\partial\varrho}{\partial x}\right)^2\Bigg|_a^b - \varrho\frac{m}{2}v^2\,\Big|_a^b,$$

$$+\frac{\hbar^2}{2m}\left[\bar{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right]\Bigg|_a^b = \left[-\varrho Q - \varrho\frac{m}{2}v^2 + i\frac{\hbar}{2}\frac{\partial j}{\partial x}\right]\Bigg|_a^b = \left[\,-\varrho Q - \varrho\frac{m}{2}v^2\,\right]\Big|_a^b.$$

$$\blacktriangleright \quad \Rightarrow \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = \left[\,-\varrho m v^2\,\right]\Big|_a^b + \left\langle -\frac{\partial Q}{\partial x}\right\rangle + \langle\hat{f}\rangle \quad \blacktriangleleft$$

- Otras maneras de expresar $\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle$:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}\langle\, \hat{H}\Psi, \hat{p}\Psi\,\rangle - \left[\,\bar{\Psi}\hat{H}\Psi\,\right]\Big|_a^b.$$

- Si $\left[\,\bar{\Psi}\hat{H}\Psi\,\right]\Big|_a^b = 0$ (lo cual ocurre si $\hat{p}$ es hermítico), entonces

$$\varrho V\,|_a^b = \left[\,-\varrho Q - \varrho\frac{m}{2}v^2\,\right]\Big|_a^b.$$

- Resultado:

$$\blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}\langle\, \hat{H}\Psi, \hat{p}\Psi\,\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{\varrho}\left(\frac{\partial\varrho}{\partial x}\right)^2 - \varrho\frac{m}{2}v^2 + \varrho V\right]\Bigg|_a^b + \langle\hat{f}\rangle \quad \blacktriangleleft$$

- Ejemplos:

$$\text{(i) } \Psi(a,t) = \Psi(b,t) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\frac{\hbar^2}{8m}\,\frac{1}{\varrho}\left(\frac{\partial\varrho}{\partial x}\right)^2\Bigg|_a^b + \langle\hat{f}\rangle = \left\langle -\frac{\partial Q}{\partial x}\right\rangle + \langle\hat{f}\rangle = \langle f_Q\rangle + \langle\hat{f}\rangle.$$

$$\text{(ii) } \Psi(\pm\infty,t) = \lim_{x\to\pm\infty}\frac{1}{|x|^{\frac{1}{2}+\epsilon}} \to 0\ (\epsilon > 0) \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = \langle\hat{f}\rangle.$$

$$\text{(iii) } \Psi(a,t) = \Psi(b,t)\,,\ \Psi_x(a,t) = \Psi_x(b,t) \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = \langle\hat{f}\rangle.$$

- La fuerza cuántica es:

$$\blacktriangleright \quad f_Q \equiv -\frac{\partial Q}{\partial x} = \frac{1}{\varrho}\frac{\partial}{\partial x}\left[-\varrho Q - \frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{\varrho}\left(\frac{\partial\varrho}{\partial x}\right)^2\right] = \frac{1}{\varrho}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar^2}{4m}\varrho\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\ln(\varrho)\right] \quad \blacktriangleleft$$

- Así que, $\langle f_Q\rangle$ es siempre un término de frontera. Es decir,

$$\langle f_Q\rangle = \int_a^b dx\,\varrho\,f_Q = \varrho Q\,|_a^b - \frac{\hbar^2}{8m}\,\frac{1}{\varrho}\left(\frac{\partial\varrho}{\partial x}\right)^2\Bigg|_a^b = \frac{\hbar^2}{4m}\,\varrho\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\ln(\varrho)\Bigg|_a^b.$$

4.1) Partícula en un salto infinito

- Se considera el siguiente estado general en $x \in (-\infty, +\infty)$:

$$\Psi(x,t) = \int_0^\infty \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\, A(k)\, \psi_k(x) \exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) = \Theta(-x) \int_0^\infty \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\, A(k)\, u_k(x) \exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) \; ; \quad u_k(x) = 2i \sin(kx) \; .$$

- El potencial tiene la forma:

$$V(x) = \lim_{V_0\to\infty} V_0\, \Theta(x)\, .$$

- Los valores medios de la posición, el momentum y la fuerza son (se usa $k = \sqrt{2ME_k}/\hbar$ y $k' = \sqrt{2ME_{k'}}/\hbar$):

$$\blacktriangleright \quad \langle \hat{X} \rangle_\Psi = \langle \Psi \mid x \mid \Psi \rangle = \frac{4\hbar^2}{M} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dkdk'}{2\pi}\, \bar{A}(k) A(k') \frac{\sqrt{E_k E_{k'}}}{(E_k - E_{k'})^2} \exp\left(i\frac{(E_k - E_{k'})}{\hbar}t\right) , \quad \blacktriangleleft$$

$$\blacktriangleright \quad \langle \hat{P} \rangle_\Psi = \langle \Psi \mid -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \mid \Psi \rangle = i\hbar\, 4 \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dkdk'}{2\pi}\, \bar{A}(k) A(k') \frac{\sqrt{E_k E_{k'}}}{E_k - E_{k'}} \exp\left(i\frac{(E_k - E_{k'})}{\hbar}t\right) , \quad \blacktriangleleft$$

$$\langle \hat{F} \rangle_\Psi = \langle \Psi \mid -\frac{d}{dx}V(x) \mid \Psi \rangle = -\lim_{V_0\to\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \bar{\Psi}(x,t) V_0\, \delta(x)\, \Psi(x,t) = -\lim_{V_0\to\infty} V_0 \bar{\Psi}(0,t)\Psi(0,t)$$

$$= -\lim_{V_0\to\infty} V_0 \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dkdk'}{2\pi}\, \bar{A}(k) A(k') \bar{\phi}_k(0) \phi_{k'}(0) \exp\left(i\frac{(E_k - E_{k'})}{\hbar}t\right) \qquad \left[\psi_k(0) = \lim_{V_0\to\infty} \phi_k(0)\right]$$

$$= -\lim_{V_0\to\infty} V_0 \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dkdk'}{2\pi}\, \bar{A}(k) A(k') 2i \sqrt{\frac{E_k}{V_0}} (-2i) \sqrt{\frac{E_{k'}}{V_0}} \exp\left(i\frac{(E_k - E_{k'})}{\hbar}t\right)$$

$$\blacktriangleright \quad \Rightarrow \langle \hat{F} \rangle_\Psi = -4 \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dkdk'}{2\pi}\, \bar{A}(k) A(k') \sqrt{E_k E_{k'}} \exp\left(i\frac{(E_k - E_{k'})}{\hbar}t\right) . \quad \blacktriangleleft$$

-Se verifica el teorema de Ehrenfest:

$$\blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{X} \rangle_\Psi = \frac{1}{M}\langle \hat{P} \rangle_\Psi \, , \quad \blacktriangleleft \quad \blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{P} \rangle_\Psi = \langle \hat{F} \rangle_\Psi \, . \quad \blacktriangleleft$$

4.2) Partícula en una semi-línea

- Se considera el siguiente estado general en $x \in (-\infty, 0]$:

$$u(x,t) = \int_0^\infty \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} A(k) u_k(x) \exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) \; ; \quad u_k(x) = 2i\sin(kx) \; ; \quad u(0,t) = 0. \leftarrow \text{Condición de frontera de Dirichlet}$$

- El potencial en el interior de la semi-línea es nulo:

$$\varphi(x) = 0\,.$$

Procedimiento general

- Los valores medios de la posición, el momentum y la fuerza son:

$$\langle \hat{x} \rangle_u = \langle\, u \mid x \mid u \,\rangle\,, \quad \langle \hat{p} \rangle_u = \langle\, u \mid -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \mid u \,\rangle\,, \quad \langle \hat{f} \rangle_u = \langle\, u \mid -\frac{d}{dx}\varphi(x) \mid u \,\rangle\,.$$

- El Hamiltoniano es $\hat{h}$ y $u(x,t)$ satisface la ecuación de Schrödinger:

$$\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \varphi(x)\,, \quad \hat{h}u(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u(x,t)\,.$$

- Se obtienen los siguientes resultados:

$$\blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle_u = -\frac{i\hbar}{2M}\left[x\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}u - \bar{u}\frac{\partial u}{\partial x}\right) - \bar{u}\,u\right]\Bigg|_{-\infty}^{0} + \frac{1}{M}\langle \hat{p} \rangle_u\,, \quad \blacktriangleleft \quad \blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle_u = -\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x} - \bar{u}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]\Bigg|_{-\infty}^{0} + \langle \hat{f} \rangle_u\,. \quad \blacktriangleleft$$

- En nuestro caso, los resultados son (se supone que $u(-\infty,t) \to 0$):

$$\blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle_u = \frac{1}{M}\langle \hat{p} \rangle_u\,, \quad \blacktriangleleft \quad \blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle_u = -\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x}\right]\Bigg|_{(x=0)} \equiv \langle f_B \rangle_u\,. \quad \blacktriangleleft$$

- f_B es una fuerza que depende del estado ($\langle f_B \rangle_u$ es un término de frontera):

$$f_B(x,t) \equiv -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{|u|^2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x}\right)\,.$$

Conclusión

- Al comparar los resultados en los dos problemas, se tiene que:

$$\langle \hat{X} \rangle_\Psi = \langle \hat{x} \rangle_u \,, \quad \langle \hat{P} \rangle_\Psi = \langle \hat{p} \rangle_u \,, \quad \langle \hat{F} \rangle_\Psi = \langle f_B \rangle_u \,.$$

- En cada uno de los problemas se tiene un teorema de Ehrenfest que tiene sentido:

Partícula en un salto infinito ↙ ↘ Partícula en una semi-línea

$$\blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{X} \rangle_\Psi = \frac{1}{M}\langle \hat{P} \rangle_\Psi \,, \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{P} \rangle_\Psi = \langle \hat{F} \rangle_\Psi \quad \blacktriangleleft \quad \blacktriangleright \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle_u = \frac{1}{M}\langle \hat{p} \rangle_u \,, \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle_u = \langle f_B \rangle_u \quad \blacktriangleleft$$

Comentarios

- Estos resultados ratifican la consistencia interna del formalismo de la mecánica cuántica.
- En ambos casos, la partícula solo se puede mover entre la barrera impenetrable en $x = 0$, y $x = -\infty$.
- En una semi-línea se tiene una familia uniparamétrica de condiciones de frontera impenetrables para $\hat{h} = \hat{h}^\dagger$. Por ejemplo:

$$u'(0) + \eta u(0) = 0 \,, \quad \eta \in \mathbb{R} \cup \{\infty\} \,.$$

- Sin embargo, el límite $V_0 \to \infty$ solo conduce a la condición de frontera de Dirichlet, $u(0) = 0$.

5. La trayectoria clásica a partir del movimiento cuántico para la partícula en una caja (transparente)

5.1) El Principio de Correspondencia como límite

$$\blacktriangleright \quad \hbar \to 0\,, \quad n \to \infty\,, \quad n\hbar = \text{constante} \quad \blacktriangleleft$$

- El límite clásico es $\hbar \to 0$, el límite de números cuánticos altos es $n \to \infty$, y de la regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld-Wilson (BSW) se tiene que

$$n\hbar = \frac{1}{2\pi} \oint dx\, p(x) = \frac{J}{2\pi}\,,$$

donde J es la acción clásica, $p(x)$ es el momentum clásico, y la integral se hace en un período entero del movimiento.

- Bajo las condiciones establecidas en el Principio de Correspondencia, se debe cumplir que

$$\blacktriangleright \quad \langle \hat{x} \rangle(t) \equiv \langle \Psi, \hat{x}\Psi \rangle \to x(t)\,, \quad \langle \hat{p} \rangle(t) \equiv \langle \Psi, \hat{p}\Psi \rangle \to p(t) \quad \blacktriangleleft$$

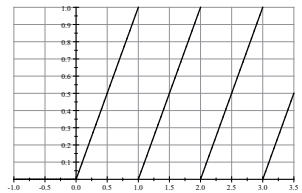
(el estado general $\Psi = \Psi(x,t)$ esta normalizado, y $x(t)$ y $p(t)$ son la posición y el momentum clásicos).

5.2) Resultados clásicos y cuánticos

- Resultados clásicos:

$$\blacktriangleright \quad x(t) = \frac{a}{2} + i\frac{a}{2\pi} \sum_{(0\neq)\tau=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\tau} \exp\left(i\frac{2\pi\tau}{T} t \right) \quad \blacktriangleleft$$

[Posición en función del tiempo $= x(t) \in [\,0, a\,]$ (FIG. 3).]

FIG. 3 

- Resultados cuánticos:

$$\blacktriangleright \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} = \frac{1}{2\mu}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,, \quad \mathrm{Dom}(\hat{H}) \sim \{\, \Psi(0,t) = \Psi(a,t)\,,\ \Psi_x(0,t) = \Psi_x(a,t)\,\} \quad \blacktriangleleft$$

- $\hat{H}$ y $\hat{p}$ conmutan y comparten autofunciones.
- (i) Las autofunciones de $\hat{p}$ con autovalores $p_n = +2\pi\hbar n$ son:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\exp\left(i\frac{2\pi n}{a}x\right)\,, \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{2\pi n}{a}\right)^2 \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

- (ii) Las autofunciones de $\hat{p}$ con autovalores $p_n = -2\pi\hbar n$ son:

$$\chi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\exp\left(-i\frac{2\pi n}{a}x\right)\,, \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{2\pi n}{a}\right)^2 \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

- (iii) La autofunción de $\hat{p}$ con autovalor $p_{n=0} = 0$ es:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\,, \quad E_n = 0 \quad (n = 0)$$

- El estado normalizado más general tiene la forma:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{-n}\chi_n(x)\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) + A_0\psi_0(x)\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) + \sum_{n=1}^{\infty} A_n\phi_n(x)\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right),$$

donde

$$\sum_{n=1}^{\infty} \mid A_{-n} \mid^2 + \mid A_0 \mid^2 + \sum_{n=1}^{\infty} \mid A_n \mid^2 = 1 \quad \Leftarrow \quad \| \Psi \|^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle = 1$$

- El valor medio del operador posición $\hat{x} = x$ viene dado por:

$$\langle \hat{x} \rangle(t) = \langle \Psi, \hat{x}\Psi \rangle = \int_0^a dx\, x \mid \Psi(x,t) \mid^2$$

$$\Rightarrow \quad \langle \hat{x} \rangle(t) = \frac{a}{2} + i\frac{a}{2\pi}\sum_{\substack{n=0\\(n\neq m)}}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\bar{A}_n A_m \frac{1}{n-m}\exp\left[i\frac{(E_n - E_m)}{\hbar}t\right] - i\frac{a}{2\pi}\sum_{\substack{n=0\\(n\neq m)}}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\bar{A}_{-n} A_{-m}\frac{1}{n-m}\exp\left[i\frac{(E_n - E_m)}{\hbar}t\right]$$

$$-i\frac{a}{2\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}\bar{A}_{-n}A_m\frac{1}{n+m}\exp\left[i\frac{(E_n-E_m)}{\hbar}t\right]+i\frac{a}{2\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}A_{-n}\bar{A}_m\frac{1}{n+m}\exp\left[-i\frac{(E_n-E_m)}{\hbar}t\right].$$

- Imponiendo la condición $A_{-n}=0$ con $n=1,2,3,\ldots$ (partícula moviéndose de izquierda a derecha) se obtiene el resultado:

$$\langle\hat{x}\rangle(t)=\frac{a}{2}+i\frac{a}{2\pi}\sum_{\substack{n=0\\(n\neq m)}}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\bar{A}_nA_m\frac{1}{n-m}\exp\left[i\frac{(E_n-E_m)}{\hbar}t\right],$$

donde

$$\mid A_0\mid^2+\sum_{n=1}^{\infty}\mid A_n\mid^2=\sum_{n=0}^{\infty}\bar{A}_nA_n=1$$

5.3) Límite asociado al Principio de Correspondencia impuesto sobre $\langle\hat{x}\rangle(t)$

- $\langle\hat{x}\rangle(t)$ puede ser escrito de la siguiente forma ($\tau\equiv n-m\Rightarrow m=n-\tau$):

$$\blacktriangleright\quad\langle\hat{x}\rangle(t)=\frac{a}{2}+i\frac{a}{2\pi}\sum_{\substack{\tau=-\infty\\(\tau\neq 0)}}^{\infty}\frac{1}{\tau}\sum_{n=0}^{\infty}\bar{A}_nA_{n-\tau}\exp\left[i\frac{(E_n-E_{n-\tau})}{\hbar}t\right]\quad\blacktriangleleft$$

- En el límite $n\gg 1$, o $n\approx n-\tau$ ($n\gg\tau$), junto con $n\hbar=\text{constante}$ ($\hbar\to 0$):

$$\frac{E_n-E_{n-\tau}}{\hbar}=2\pi\frac{1}{\frac{\mu a^2}{2\pi n\hbar}}\tau\left(1-\frac{\tau}{2n}\right)\approx 2\pi\frac{1}{\frac{\mu a^2}{2\pi n\hbar}}\tau=\frac{2\pi\tau}{T(n)},$$

donde el período de la partícula clásica en función de n, $T(n)$, fue obtenido de la regla de cuantización BSW.
- Finalmente, asumiendo que la suma sobre n en $\langle\hat{x}\rangle(t)$ es apreciable solo en $n=N$ con $N\gg 1$, usando la aproximación $n\approx n-\tau$, y asumiendo que en la vecindad de N el período $T(n)$ no cambia mucho (de hecho, $T(n)\approx T=a\sqrt{\mu/2E}$), se obtiene:

$$\langle\hat{x}\rangle(t)\approx\frac{a}{2}+i\frac{a}{2\pi}\sum_{\substack{\tau=-\infty\\(\tau\neq 0)}}^{\infty}\frac{1}{\tau}\sum_{n\text{ around }N}^{\infty}\bar{A}_nA_n\exp\left[i\frac{2\pi\tau}{T(n)}t\right]\approx\frac{a}{2}+i\frac{a}{2\pi}\sum_{\substack{\tau=-\infty\\(\tau\neq 0)}}^{\infty}\frac{1}{\tau}\exp\left[i\frac{2\pi\tau}{T(n)}t\right]\sum_{n\text{ around }N}^{\infty}\bar{A}_nA_n$$

$$\blacktriangleright\quad\Rightarrow\quad\langle\hat{x}\rangle(t)\approx\frac{a}{2}+i\frac{a}{2\pi}\sum_{\substack{\tau=-\infty\\(\tau\neq 0)}}^{\infty}\frac{1}{\tau}\exp\left(i\frac{2\pi\tau}{T}t\right)=x(t)\quad\blacktriangleleft$$

<u>Conclusión</u>: $\langle\hat{x}\rangle(t)$ y $x(t)$ están de acuerdo bajo las condiciones del Principio de Correspondencia.

BIBLIOGRAFÍA

[1] S. De Vincenzo, "Classical-quantum versus exact quantum results for a particle in a box," Revista Brasileira de Ensino de Física. **34**, 2701 (2012).

[2] S. De Vincenzo, "Confinement, average forces, and the Ehrenfest theorem for a one-dimensional particle," PRAMANA, Journal of Physics. **80**, 797-810 (2013).

[3] S. De Vincenzo, "On time derivatives for $\langle \hat{x} \rangle$ and $\langle \hat{p} \rangle$: formal 1D calculations," Revista Brasileira de Ensino de Física. **35**, 2308 (2013).

[4] S. De Vincenzo, "On average forces and the Ehrenfest theorem for a particle in a semi-infinite interval," Revista Mexicana de Física E. **59**, 84-90 (2013).

[5] S. De Vincenzo, "Classical path from quantum motion for a particle in a transparent box," Revista Brasileira de Ensino de Física. **36**, 2313 (2014).