

Sobre el origen del carácter no local de la dinámica cuántica

CÉSAR EDUARDO PACHÓN CONTRERAS

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

2014

Sobre el origen del carácter no local de la dinámica cuántica

TRABAJO DE GRADO
PARA OPTAR AL TÍTULO DE FÍSICO

CÉSAR EDUARDO PACHÓN CONTRERAS

DIRECTOR: LEONARDO AUGUSTO PACHÓN, PH.D.

CODIRECTOR: RAFAEL TORRES AMARIS, PH.D.

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

2014

A

Juan A. Pacheco

Agradecimientos

A mi director Leonardo A. Pachón y a mi codirector Rafael A. Torres, por sus ideas, consejos y aportes a mi trabajo, por su tiempo y paciencia.

A mis calificadores el profesor Ilia Davidovich Mikhailov y el profesor Harold Paredes, por su tiempo, colaboración y paciencia al tratar estos temas tan complicados de entender.

A todos los profesores que me acompañaron durante todo el pregrado y que ayudaron a mi formación como Físico, entre ellos el profesor Luis Núñez, el profesor Milton Flórez, el profesor Yeinzon Rodríguez, y el profesor Rafael Cabanzo, a ellos muchas gracias por compartir su conocimiento día a día, durante todos estos años.

A mis padres César A. Pachón y Norma Contreras, a mi abuela María de los Ángeles Carreño, por su preocupación y cariño infinito.

A mi novia Paola Reyes quien me ha acompañado durante cuatro años y con quien he compartido tantas cosas buenas, además de su apoyo y contribución a este trabajo, por las discusiones sobre mecánica cuántica.

A mis hermanos Leonardo Augusto Pachón, Leonela Pachón, Luis Carlos Pachón y Gerardo Camargo y a mi sobrino quien es como mi hermano menor Juan Andrés Pacheco “El enano”.

A mis compañeros, Diego A. Galeano, Oswado Nieto, Joseph Vergel, Néstor Granados, Andrés Valdivieso, Oscar Forero, Jhon F. Torres, y Elkin Santos, por las extensas discusiones académicas e interminables días y noches de estudio. Aquí quiero agradecer enormemente. A la señora Rosa Alba Narváez “La mamá de Oswaldo”, por su preocupación, apoyo y tantos litros de café en esas noches de estudio.

A mi segunda familia “TOROS UIS RUGBY CLUB”, quienes me acompañaron durante toda la carrera y lo seguirán haciendo, gracias por tantas alegrías, por enseñarme el valor del trabajo en equipo y la disciplina, no sólo en el juego sino en la vida “UIS, UIS, TOROS”.

Índice general

Introducción	13
1. Dinámica cuántica	16
1.1. Dinámica cuántica del operador densidad	18
2. Dinámica cuántica en el espacio de fase	20
2.1. Representación de la dinámica cuántica en el espacio de fase	20
2.2. Función de Wigner	21
2.3. Propiedades de la función de Wigner	22
3. El propagador de la función de Wigner	23
3.1. Propagador de Weyl	23
3.2. Propagador de la función de Wigner	24
3.3. Propiedades del propagador de Wigner	24
3.4. Integrales de caminos en el espacio de fase	25
3.5. Propagación semiclásica de la función de Wigner	26
4. No-localidad dinámica cuántica en el espacio de fase	28

ÍNDICE GENERAL

4.1. No-localidad cinemática y no-localidad dinámica	28
4.2. Variables modulares	29
4.3. No-localidad dinámica en un objeto dinámico	30
4.3.1. No-localidad y el principio de incertidumbre	32
4.3.2. No-localidad y el principio de superposición	32
4.3.3. No-localidad y la transición clásico cuántica	33
5. Conclusiones y Perspectivas	35
A. Formalismo de Weyl	36
A.1. Operador de desplazamiento	36
A.2. Operador \hat{d}	36
A.3. Transformación de Weyl	37
A.4. Transformación de Weyl del producto de dos operadores	37
A.5. Transformación de Weyl del producto de tres operadores	38
B. Efecto Aharonov-Bohm	39
C. Evaluación numérica del propagador	42
Bibliografía	44

Índice de figuras

1.1. Representación esquemática de la propiedad de semi-grupo	17
1.2. Experimento de doble rendija	18
2.1. Probabilidades marginal calculadas a partir de la función de Wigner.	22
3.1. Esquema de la Propagación semiclassical a partir de la contribución de pares de trayectorias	27
4.1. Propagador de Feynman y Propagador de Wigner para una molécula diatómica	31
4.2. Representación de las contribuciones a la evolución de la trayectoria	32
4.3. Desaparición de la no-localidad dinámica en el límite clásico	34
B.1. Efecto Aharonov-Bohm	40
B.2. Vista superior efecto A.B.	41

Resumen

TÍTULO: Sobre el origen del carácter no local de la dinámica cuántica. ^{*}

AUTOR: César Eduardo Pachón C. [†]

PALABRAS CLAVES: No-localidad dinámica, No-localidad cinemática, Propagador de Wigner, Propagador de Feynman, Símbolo de Weyl .

DESCRIPCIÓN:

La no-localidad de las correlaciones entre sistemas físicos es uno de los rasgos característicos de la mecánica cuántica. La no-localidad es responsable de características inesperadas de la dinámica cuántica como el tunelamiento y el entrelazamiento; además, ha sido recientemente explotada como recurso para la información cuántica [3]. El origen de la no-localidad de las mediciones cuánticas y su relación con los postulados fundamentales de la mecánica cuántica, como el principio de incertidumbre, ha sido dilucidado muy recientemente [19]. Sin embargo, los problemas de interferencia cuántica implican dos tipos de no-localidad: una es la no-localidad expresada en términos de las desigualdades de Bell (de naturaleza cinemática y discutida en la ref. [19]) y la otra, es la no localidad de la ecuación cuántica de movimiento de un observable físico (de naturaleza dinámica) [2, 25]. Esta última ha sido escasamente discutida, explorada o entendida [25].

Con base en la teoría de grupos dinámicos y una formulación de integrales de caminos en el espacio de fase mecánico-cuántico, aquí se relaciona el origen de la no-localidad dinámica con el principio de superposición mediado por la presencia de interacciones no lineales entre los sistemas. La desaparición de la no-localidad en el mundo clásico también es discutida. Estos resultados se analizan en detalle para el caso de una molécula diatómica modelada con el potencial de Morse.

^{*} Trabajo de Grado.

[†] Escuela de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander. Director: Leonardo A. Pachón., Ph.D. Codirector: Rafael Torres Amaris., Ph.D.

Abstract

TITLE: On the origin of the nonlocal character of quantum dynamics. ^{*}

AUTHOR: César Eduardo Pachón C. [†]

KEYWORDS: Dynamic Non-locality, Kinematic Non-locality, Wigner propagator, Feynman Propagator, Weyl Symbol

DESCRIPTION: Non-locality of correlations between systems is one of the hallmarks of quantum mechanics. Non-locality is responsible for unexpected features of system dynamics at the quantum regime such as tunnelling and entanglement; it has also recently been extensively exploited as a resource for quantum information [3]. The origin of non-locality of quantum measurements and its relations to the fundamental postulates of quantum mechanics, such as the uncertainty principle, have been only recently elucidated [19]. However, quantum interference problems involve two kind of non-localities: a non-locality expressed in terms of the Bell-inequalities (of kinematic nature, the one discussed in [19]) and the non-locality of the quantum equation of motion of a physical observable (of dynamic nature) [2, 25]. The latter has been barely discussed, explored or understood [25].

Based on the group theory and a formulation of the path integrals in the quantum mechanical phase-space, the origin of dynamical non-locality is related here to the superposition principle mediated by the presence of non-linear interactions between systems [21]. The vanishing of non-locality in the classical world is also discussed. These results are discussed in detail for the case of a diatomic molecule modeled by the Morse potential.

^{*} Degree work.

[†] Escuela de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander. Director: Leonardo A. Pachón., Ph.D. Codirector: Rafael Torres Amaris., Ph.D.

Notación

$\mathbf{r}, \tilde{\mathbf{r}}$	Vectores en $2f$ -dimensiones en el espacio de fase
$\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{R}}$	Vectores en $2f$ -dimensiones en el espacio de fase
A, M	Matrices
I	Matriz identidad
J	Matriz simpléctica
\wedge	Producto simpléctico
$\hat{\square}$	Operador en el espacio de Hilbert
$\hat{\rho}$	Operador matriz densidad
\square_W	Símbolo de Weyl del operador $\hat{\square}$
\hat{U}, U_W	Operador unitario de evolución temporal y el asociado al símbolo de Weyl
ρ_W	Funcion de Wigner asociada a $\hat{\rho}$
$G_W(\mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}', t')$	Propagador de Wigner para \mathbf{r}' en $t = t'$ a \mathbf{r}'' en $t = t''$
\mathcal{D}	Integral de caminos a lo largo de la trayectoria \cdot
i, i^*	Unidad imaginaria y su complejo conjugado

Introducción

La no-localidad de la dinámica de observables físicos es uno de los rasgos característicos de la teoría cuántica. Si esta no-localidad es realmente una característica intrínseca de la naturaleza o si es simplemente artificio de la representación de los fenómenos cuánticos, es y ha sido un asunto de profundas reflexiones y debates al interior de la comunidad científica. En este trabajo se realiza un acercamiento sistemático a este asunto, dejando a un lado asuntos de carácter ontológico y filosófico. Este acercamiento inicia con una clara distinción de dos tipos de no localidad: la no-localidad cinemática y la no-localidad dinámica.

Por un lado, la no-localidad cinemática surge de la estructura del espacio de Hilbert y no crea ningún cambio en las distribuciones de probabilidad [27]. Por otro lado, la no-localidad dinámica se refiere al carácter no local de las ecuaciones de movimiento cuánticas, i.e., al carácter no local de la ecuación de Schrödinger [25] y por tanto, es fundamentalmente diferente a la no localidad cinemática [2, 25].

La no-localidad cinemática ha sido de gran utilidad y recientemente se usa como una fuente de “cuantificación” en el ámbito de la información cuántica [3]. La no-localidad dinámica se introdujo por primera vez por Aharonov y Bohm [1] con el fin de explicar los efectos no locales de los fenómenos topológicos. En particular, para explicar cómo campos electromagnéticos no nulos en algunas regiones del espacio pueden afectar la dinámica de partículas en otras regiones del espacio. Este efecto se conoce comúnmente como el efecto Aharonov-Bohm (ver apéndice B). Este efecto predice que un campo magnético (o eléctrico) dentro de una región confinada puede tener un impacto medible sobre una partícula cargada que nunca haya viajado dentro de la región del campo. Con el fin de representar la correspondencia más cercana entre la medición y la teoría, Aharonov *et al.* propusieron la existencia de interacciones no locales entre la partícula y el campo [1]. Sin embargo, esta propuesta está en completa contradicción con la naturaleza local de las interacciones electromagnéticas [4].

Tanto la no-localidad dinámica como la cinemática son genéricas y pueden encontrarse en casi cualquier tipo de fenómeno cuántico. La no-localidad dinámica puede evidenciarse en el experimento de la doble rendija [25]. Para el experimento de la doble rendija se supone una placa que posee dos ranuras (izquierda y derecha) por las cuales se hace incidir un haz e.g. electrones de una fuente S para que finalmente converjan a una pantalla detectora. El haz entrante inicial parece comportarse como una onda cuando cae sobre las ranuras (izquierda y derecha), pero cuando se registran en la pantalla, su función de onda “colapsa” en la de una partícula localizada (ver, e.g., Sección 2.1 en la Ref. [26]). Al repetir el experimento con un conjunto de muchas partículas, el patrón de interferencia se manifiesta a través de la densidad de los impactos a lo largo de la pantalla (alineado con, por ejemplo, la dirección x), $|\psi_I(x) + e^{i\alpha}\psi_D(x)|^2$. Aquí $\psi_I(x)$ [$\psi_D(x)$] denota la función de onda asociada a la partícula procedente de la ranura izquierda [derecha] y α es la fase relativa entre las partes izquierda y derecha de la función de onda.

El problema aquí radica en la definición de la fase asociada en ambos casos: clásicamente la fase de las ondas como el sonido, las ondas en el agua o las mismas ondas electromagnéticas puede determinarse

a partir de experimentos sin problemas de no-localidad, pero el significado de una fase cuántica es muy diferente. Multiplicando la función de onda $\psi_I(x) + e^{i\alpha}\psi_D(x)$ por una fase ϕ global, no cambia la fase α relativa y por tanto, no produce un estado físico diferente. Además, parece que la fase relativa α no puede medirse directamente en una sola partícula ya que no puede estar representada por un operador hermítico [10], i.e., $\psi_I(x) + e^{i\alpha}\psi_D(x)$ y $\psi_I(x) + e^{i\beta}\psi_D(x)$ no son, en general, ortogonales y por tanto, no pueden ser funciones propias pertenecientes a diferentes valores propios de un operador hermítico. En contraste a la fase clásica, un cambio en la relación de fase cuántica de $\psi_I(x) + \psi_D(x)$ a $\psi_I(x) - \psi_D(x)$ no daría lugar a un cambio medible en cualquiera de las propiedades locales. El único cambio se produce en ciertas propiedades no locales o cuando las dos componentes $\psi_I(x)$ y $\psi_D(x)$ se superponen e interfieren. De manera que la fase relativa no puede considerarse simplemente como la diferencia entre una fase local en $\psi_I(x)$ y otra fase local del $\psi_D(x)$.

El análisis de procesos de interferencia cuántica, como el descrito arriba, tradicionalmente se analizan en términos de la ecuación de Schrödinger o a través de la formulación de integrales de caminos de Feynman. Sin embargo, debido a la no-localidad cuántica, la interpretación y entendimiento de estos fenómenos es primitiva. Para el caso particular del experimento de la doble rendija, esto puede resumirse en las palabras de Feynman [14]: “*A phenomenon which is impossible... to explain in any classical way, and which has in it the heart of quantum mechanics. In reality, it contains the only mystery of quantum mechanics*”.¹

El advenimiento de la teoría cuántica de la información ha impulsado el profundo conocimiento de la no-localidad cinemática [19] y ha repercutido en temas tan complejos como las comunicaciones [3]. Sin embargo, y a pesar de haber sido comprobada experimentalmente [20], la comprensión de no-localidad dinámica dista de ser completa y así mismo, nuestra comprensión de la mecánica cuántica [25]. Tradicionalmente, la no-localidad dinámica ha sido formulada *exclusivamente* en términos de variables modulares [2, 25, 27, 28], que como pueden verse la sección 4.2 no son operadores hermíticos y no tienen análogo clásico [25]. En este trabajo se exploró la siguiente idea: si la no-localidad dinámica es un fenómeno intrínseco a la dinámica cuántica, ¿por qué no explorar esta propiedad en un objeto dinámico que tenga un análogo clásico bien definido, tal como el generador mismo de la dinámica en el espacio de fase, en lugar de algunos operadores específicos como las variables modulares?

En la exploración y desarrollo de esta idea, fue importante revisar la formulación de la dinámica cuántica en términos de integrales de caminos de Feynman, el concepto de operador densidad (ver capítulo 1) y la formulación de la dinámica cuántica en el espacio de fase (ver capítulo 2). Con el objetivo de extraer los procesos físicos responsables por este carácter no local de la dinámica y, de interpretarlos en términos de conceptos clásicos como trayectorias, en el capítulo 3 se introduce el propagador de la función de Wigner [15] y su versión semiclásica [6, 8]. En este capítulo se presenta una nueva derivación del propagador semiclásico desde la perspectiva de integrales de caminos en el espacio de fase [21]. En el capítulo 4 se analizan diversos aspectos de la no-localidad dinámica a partir de la formulación por integrales de caminos de la dinámica cuántica en el espacio de fase. En particular, se demuestra como el principio de incertidumbre y la superposición determinan el carácter no-local de los resultados en las mediciones cuánticas. [21]. Usando herramientas y conceptos de la teoría de grupos, en el capítulo 4 también se discute la relación entre las variables modulares y la formulación de la mecánica cuántica en el espacio de fase [21]. Esta relación permite encontrar una equivalencia formal entre la formulación desarrollada aquí [21] y la formulación tradicional [2, 25, 27, 28]. Además, permite extender formalmente el concepto de variables modulares a sistemas con espacios de Hilbert de dimensión finita (e.g., qubits) y a la teoría cuántica de campos. Finalmente, las conclusiones de este trabajo se presentan en el capítulo 5.

Es importante mencionar que producto de los avances y resultados de este trabajo han sido presentados en dos eventos internacionales, el International Workshop on Quantum Coherence and Decoherence-

¹ “*Un fenómeno que es imposible... de explicar de forma clásica, y que contiene en este el corazón de la mecánica cuántica. De hecho, contiene el único misterio de la mecánica cuántica*”.

IWQCD1 organizado por la Universidad del Valle Cali-Colombia y en APS March Meeting 2014 Volume 59, Number 1 en la sesion A33 Quantum Foundations: Quantum Theory Meets Relativity realizado en Denver, Colorado, y un evento nacional, la Quinta Escuela de Física Matemática, The Mathematics of Entanglement, organizada por la Universidad de los Andes en Bogotá, Colombia, adicional a las presentaciones en eventos este trabajo ya se encuentra alojado en el ARXIV [21] esperando ser sometido para su publicación.

CAPÍTULO 1

Dinámica cuántica

La evolución de sistemas cuánticos se formula comúnmente en términos de la ecuación de Schrödinger. En esta formulación, el objeto central es el operador de Hamilton o hamiltoniano que, generalmente, representa la energía del sistema. En este contexto, la dinámica puede reducirse al cálculo de los valores y de las funciones propias asociadas a este operador. Como alternativa a esta formulación hamiltoniana, es posible construir una versión lagrangiana de la dinámica. Esto se obtiene a través de la formulación desarrollada por Feynman [9] en términos de integrales de caminos. En esta formulación, en lugar de encontrar funciones propias del hamiltoniano, lo que se hace es calcular una integral funcional que produce directamente el propagador requerido para el cálculo de la dinámica del sistema. La gran ventaja de esta formulación es que brinda una estrecha relación entre la dinámica cuántica y la dinámica clásica, de manera que la dinámica cuántica puede entenderse de manera más intuitiva.

Para introducir la formulación de Feynman y los propagadores, es necesario plantear el problema básico de la mecánica cuántica: determinar la solución $|\Psi(t)\rangle$ de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, i.e.,

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi\rangle, \quad (1.1)$$

donde \hat{H} denota el operador hamiltoniano. La solución formal se escribe de la siguiente manera

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{\tau} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}(t')\right) |\Psi(0)\rangle. \quad (1.2)$$

Aquí $\hat{\tau}$ representa el operador de ordenamiento temporal cronológico. La solución para el caso de hamiltonianos independientes del tiempo está dada por

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) |\Psi(0)\rangle. \quad (1.3)$$

En esta solución formal de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, se observan dos términos: (i) el estado inicial $|\Psi(0)\rangle$ que da las condiciones iniciales y (ii) el propagador que contiene toda la información necesaria para determinar la evolución en el tiempo del sistema.

En la representación de la posición, la expresión (1.3) toma la siguiente forma

$$\langle x|\Psi(t)\rangle = \int dx' \langle x| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) |x'\rangle \langle x'|\Psi(0)\rangle, \quad (1.4)$$

donde $\Psi(x', 0) = \langle x' | \Psi(0) \rangle$. Equivalentemente, $\Psi(x, t) = \int dx' K(x, t, x', 0) \Psi(x', 0)$, con el propagador

$$K(x, t, x', 0) = \langle x | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) | x' \rangle. \quad (1.5)$$

Este es precisamente el objeto central de la formulación de Feynman de la mecánica cuántica. Antes de abordar la representación de integrales de caminos es necesario mencionar la propiedad de composición del propagador. La propagación cuántica unitaria entre los estados $|\Psi(0)\rangle$ y $|\Psi(t)\rangle$ puede descomponerse entre la propagación de $|\Psi(0)\rangle$ a un estado intermedio $|\Psi(t')\rangle$ y la subsiguiente propagación desde este estado intermedio hasta el estado final $|\Psi(t)\rangle$, de manera explícita

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t')\right] \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t'\right) |\Psi(0)\rangle, \quad (1.6)$$

o su equivalentemente

$$\Psi(x, t) = \int dx' \int dx'' K(x, t, x'', t') K(x'', t', x', 0) \Psi(x', 0). \quad (1.7)$$

Al comparar las ecuaciones (1.5) y (1.6), se encuentra la propiedad de semi-grupo del propagador, que es representada en el diagrama de la figura (1.1)

$$K(x, t, x', 0) = \int dx'' K(x, t, x'', t_1) K(x'', t_1, x', 0). \quad (1.8)$$

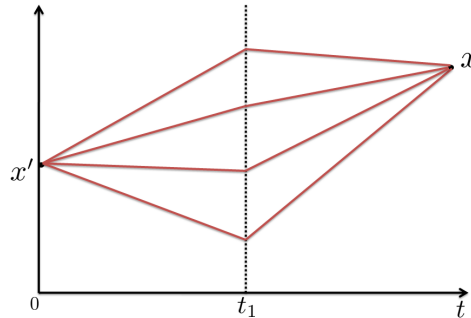


Figura 1.1: Representación esquemática de la propiedad de semi-grupo (1.8). La evolución temporal se descompone en propagadores: uno hasta el tiempo t_1 en algún punto intermedio y otro hasta un x final.

A continuación se introduce una representación esquemática a partir de las integrales de caminos con base en el experimento de la doble rendija. Este experimento muestra la diferencia fundamental entre la física clásica y la física cuántica y, además motiva el estudio de las integrales de caminos. Considérese una fuente S de partículas monoenergética, por ejemplo, electrones ubicados en la posición A (ver figura 1.2). El flujo de electrones se mide en una pantalla C orientada hacia la fuente. Imagínese ahora que se introduce una tercera pantalla entre las otras con dos ranuras en ella que pueden ser abiertas o cerradas (véase la figura 1.2). Cuando la primera rendija está abierta y la segunda cerrada se mide un flujo F_1 , cuando la primera ranura está cerrada y la segunda abierta el flujo F_2 , y cuando ambas rendijas están abiertas se mide un flujo F .

En la física clásica, se espera que los flujos en C de los tres casos satisfagan la relación $F = F_1 + F_2$. En realidad, se encuentra que en general $F = F_1 + F_2 + F_{\text{int}}$, donde F_{int} corresponde precisamente a la interferencia entre dos ondas que pasan respectivamente a través de 1 y 2:

$$F = |\phi_1 + \phi_2|^2 = \underbrace{|\phi_1|^2}_{F_1} + \underbrace{|\phi_2|^2}_{F_2} + \underbrace{2\text{Re}(\phi_1 * \phi_2)}_{F_{\text{int}}} \quad (1.9)$$

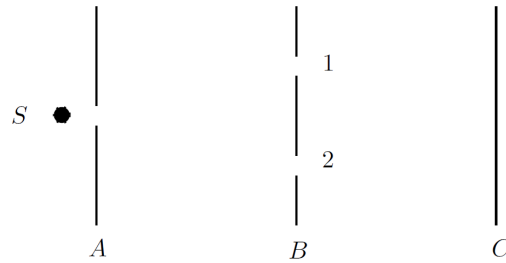


Figura 1.2: Experimento de doble rendija: una fuente de electrones se encuentra en algún lugar de A , y un detector está situado en la pantalla C . Una pantalla B con dos ranuras 1 y 2 que pueden estar abiertas o cerradas se coloca en el medio, de modo que los electrones tienen que pasar a través de 1 o 2 para ir de A a C . Se mide el flujo de electrones en la pantalla C .

¿Cómo puede interpretarse este resultado? ¿El comportamiento de las ondas implica que el electrón es un objeto deslocalizado? ¿El electrón pasa a través de ambas rendijas? En realidad no (ver e.g. Sección 2.1 en la Ref [26]). Cuando se detecta, el electrón es puntual. Más notablemente, si se trata de detectar por dónde pasó el electrón, se encuentra que, o bien pasa a través de 1 o 2 (esto se hace mediante el establecimiento de detectores en 1 y 2 y considerando un flujo muy débil, con el fin de hacer que la probabilidad de detecciones coincidentes en 1 y 2 sea arbitrariamente pequeño).

De acuerdo con la interpretación de Copenhague, F debe ser interpretada como una densidad de probabilidad. En la práctica, esto significa que calcular la amplitud ϕ como si se tratara de ondas, e interpretar la intensidad $|\phi|^2$ como una densidad de probabilidad para una posición particular de una partícula puntual. En este sentido, cabe preguntarse ¿cómo es que es contradictoria la dualidad onda partícula? La respuesta está en el principio de indeterminación. En este caso, cuando tratamos de detectar cual ruta alternativa tomó el electrón, también se destruye la interferencia. Por tanto, otra formulación del principio de indeterminación es: las determinaciones de la alternativa adoptada por un proceso capaz de seguir más de una alternativa, destruye la interferencia entre las alternativas. En resumen: (i) lo que se suma es la amplitud ϕ y no la propia densidad de probabilidad y (ii) la diferencia entre la composición clásica y cuántica de las probabilidades está dada por la interferencia entre las distintas trayectorias clásicas.

1.1 Dinámica cuántica del operador densidad

Cuando se inician los estudios estadísticos en la mecánica clásica, se enfoca la atención en la densidad de probabilidad $\rho(q, p, t)$ donde q es la posición, p es el momento y t el tiempo. Esta densidad describe la fenomenología de los sistemas físicos. Posteriormente, al introducir la teoría cuántica en el estudio de sistemas de este tipo se usa con total libertad expresiones como: “supongamos que el sistema se encuentra en el estado $|\psi\rangle$ ”, entendiéndose con esto que $|\psi\rangle$ es un estado propio de un conjunto completo de observables compatibles (CCOC), que por supuesto, corresponde a una idealización. En general, no siempre se puede describir un sistema con esta única función de onda o más técnicamente, con un elemento del espacio proyectivo de Hilbert. De modo que debe construirse un nuevo instrumento matemático. Este instrumento matemático se denomina operador densidad $\hat{\rho}$ y describe tanto estados mezclados como puros no necesariamente ortogonales.

Para introducir la noción de estados puros y mezclados, es necesario mencionar que si el estado de un sistema está descrito por el vector $|\Psi\rangle$, el operador densidad asociado a este estado es el proyector $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$. Un sistema cuántico estará en un estado puro si $\text{tr}[\hat{\rho}^2] = 1$. Sin embargo, también es posible

que un sistema pueda estar en un conjunto o mezcla estadística de diferentes vectores de estado: Por ejemplo, puede haber un 50% de probabilidad de que esté en el vector de estado $|\Psi_1\rangle$ y un 50% de posibilidades de que esté en el vector de estado $|\Psi_2\rangle$. En esta situación el operador densidad estará dado por $\hat{\rho} = 1/2(|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + |\Psi_2\rangle\langle\Psi_2|)$ y $\text{tr}[\hat{\rho}^2] < 1$. Note que esta mezcla estadística no es igual a la mezcla o superposición coherente estados $\hat{\rho} = 1/2[(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle)(\langle\Psi_1| + \langle\Psi_2|)]$.

El operador densidad es entonces capaz de describir tanto estados puros como mezclados. En general, el operador densidad puede expresarse como

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1} p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (1.10)$$

siendo p_i la probabilidad de que el sistema se halle en el estado ψ_i . Este operador densidad tiene algunas propiedades interesantes desde un punto de vista práctico:

- Es autoadjunto y acotado.
- Es un operador cuya traza es igual a la unidad $\text{tr}[\hat{\rho}] = 1$. Esto implica que $\sum_i p_i = 1$.
- Es un operador compacto y por tanto sus autovectores forman una base ortonormal, y si $\hat{\rho}|\psi_i\rangle = q_j|\psi_i\rangle$ entonces $q_j \geq 0 \forall j$.
- El valor medio de una observable \hat{A} del sistema de estados mezclados se define como el promedio estadístico, con pesos p_i , de sus valores medios en los estados puros $|\psi_i\rangle$ con se construyó el estado mezclado, esto es:

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_{i=1} p_i \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle = \text{tr}[A\hat{\rho}]. \quad (1.11)$$

De manera que se tiene la posibilidad de expresar el valor esperado de un observable en términos de la traza del producto de éste con el operador densidad.

En el siguiente capítulo se hace uso de la representación de estados físicos en términos de operadores densidad para introducir la representación de la mecánica cuántica en el espacio de fase.

CAPÍTULO 2

Dinámica cuántica en el espacio de fase

La necesidad y el afán por entender la naturaleza en toda su extensión, a menudo, conduce a querer predecir eventos. Se tiene la ilusión de que el poder predecir los eventos es sinónimo de entender el fenómeno. En ese orden de ideas, uno puede preguntarse, ¿cómo evoluciona un sistema dado en el tiempo? Esta pregunta no distingue ninguna rama en particular de la ciencia. Posteriormente, aparece de forma natural la pregunta, ¿qué origina esa evolución? En la física, en concreto, se asocia dicha evolución con la fuerza, al menos desde el punto de vista clásico. De manera que poder modelar la dinámica de un sistema, da información fundamental sobre el fenómeno que se desea describir. En mecánica cuántica, la dinámica del sistema se estudia a partir del operador unitario de evolución temporal. En este capítulo se presenta un tratamiento de este operador.

2.1 Representación de la dinámica cuántica en el espacio de fase

En esta sección se presenta una descripción de la dinámica cuántica en el espacio de fase basada en el enfoque de operador densidad tratado anteriormente. En mecánica estadística clásica, el promedio estadístico de un observable se hace integrando sobre el espacio de fase el producto del observable por una distribución de probabilidad $\rho(q, p)$. En el caso cuántico, como se vio en el capítulo anterior, el valor esperado está dado por la traza del producto del observable y el operador densidad. De manera que uno puede preguntarse, ¿es posible formular la estadística cuántica en el espacio de fase y estudiarla de forma análoga como se hace en la mecánica estadística clásica? La respuesta de parte de Weyl [29], Wigner [30], Husimi Groenewold y Moyal [11] fue parcialmente positiva y sus trabajos fueron el punto de partida para el estudio de la mecánica cuántica estadística. El presente trabajo se centra en las formulaciones desarrolladas por Wigner [30] y Wyl [29]. Las razones para esto se discuten mas adelante.

La evolución temporal del operador densidad $\hat{\rho}$ en un sistema cuántico se determina a través de la ecuación de Landau-Von Neumann,

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (2.1)$$

cuya solución se expresa en términos del operador de evolución temporal $\hat{U}(t)$

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger(t). \quad (2.2)$$

De modo que el operador densidad inicial $\hat{\rho}$ evoluciona desde un tiempo inicial $t = 0$ hasta un tiempo posterior arbitrario t . Para obtener una representación en el espacio de fase de la expresión (2.2) es necesario definir la transformada de Weyl $T_W(A)$ de un operador arbitrario \hat{A}

$$T_W[\hat{A}] := A_W(p, q) \equiv \text{tr}[\hat{A}(\hat{p}, \hat{q})\hat{d}(p, q)], \quad (2.3)$$

donde \hat{d} es el operador hermítico definido como

$$\begin{aligned} \hat{d}(p, q) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dudv \exp \left\{ \frac{i}{\hbar}(up + vq) \right\} \hat{T}(-u, -v), \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dudv \exp \left\{ \frac{i}{\hbar}[u(\hat{p} - p) + v(\hat{q} - q)] \right\} \hat{T}(-u, -v). \end{aligned} \quad (2.4)$$

nótese que \hat{d} está construido en términos de operadores unitarios de desplazamiento \hat{T}

$$\hat{T}(u, v) = \exp \left[\frac{i}{\hbar}(u\hat{p} + v\hat{q}) \right]. \quad (2.5)$$

Los operadores \hat{d} y \hat{T} se definen con mas detalle en el apéndice A. Allí también se pueden encontrar algunas de sus propiedades más relevantes para el desarrollo de este trabajo.

2.2 Función de Wigner

La función de Wigner (también llamada distribución de Wigner de cuasi-probabilidad) es una distribución de cuasi-probabilidad introducida en 1932 por Eugene Wigner para estudiar correlaciones cuánticas análogamente a la mecánica estadística clásica. La función de Wigner asocia a la función de onda, o más formalmente, al operador densidad, una distribución de probabilidad en el espacio de fase cuántico. La función de Wigner fue propuesta de manera tal que, desde el punto de vista matemático, la mecánica estadística clásica y cuántica compartieran características similares. Su formalismo tiene en cuenta requisitos de la mecánica cuántica tales como el principio de incertidumbre, manifestado en el espacio de fase como la restricción del tamaño ocupado por el estado cuántico [12, 13]. La función de Wigner se define como la transformada de Weyl del operador densidad multiplicada por $\frac{1}{2\pi\hbar}$, i.e.,

$$\rho_W(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T_W \left[\frac{\hat{\rho}}{2\pi\hbar} \right], \quad (2.6)$$

donde ρ_W representa la función de Wigner. En representación de la posición esta expresión toma la forma,

$$\rho_W(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \int d^f u \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{u} \right\} \left\langle \mathbf{q} + \frac{\mathbf{u}}{2} \left| \frac{\hat{\rho}}{(2\pi\hbar)^f} \right| \mathbf{q} - \frac{\mathbf{u}}{2} \right\rangle, \quad (2.7)$$

aquí \mathbf{p} , \mathbf{q} representan las cantidades conjugadas de posición y momento, respectivamente, y f denota el número de grados de libertad del sistema. Esta expresión corresponde a una representación del operador densidad en el espacio de fase.

2.3 Propiedades de la función de Wigner

Las propiedades más relevantes de la función de Wigner, para el presente trabajo, se presentan a continuación. En particular, la función de Wigner

- es real. Esto es consecuencia de la hermiticidad del operador densidad.
- está normalizada, i.e., $\int d^f p d^f q \rho_W(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = 1$. Esta propiedad es consecuencia del hecho que $\text{tr}(\hat{\rho}) = 1$
- provee las distribuciones marginales

$$P_r(q) = |\psi(q)|^2 = \int d^f p \rho_W(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (2.8)$$

$$P_r(p) = |\psi(p)|^2 = \int d^f q \rho_W(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (2.9)$$

correctamente. La figura 2.1 representa esta situación para un estado gaussiano

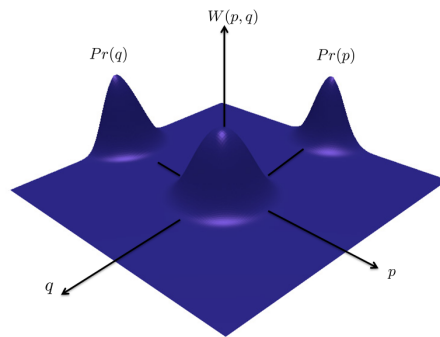


Figura 2.1: Probabilidades marginal calculadas a partir de la función de Wigner.

- puede ser reconstruida experimentalmente mediante tomografía cuántica [13].

Además, la función de Wigner disfruta de un lugar privilegiado en el estudio del límite clásico [32]. Recientemente, se ha sugerido que el enfoque de la función de Wigner puede ser visto como una analogía cuántica a la formulación de la mecánica clásica introducida en 1932 por Bernard Koopman y John von Neumann.

CAPÍTULO 3

El propagador de la función de Wigner

En este capítulo, se introduce el formalismo que determina la evolución de la función de Wigner, sus relaciones con la transformada de Weyl y su papel en la transcripción al espacio de fase.

3.1 Propagador de Weyl

En este capítulo se expone el propagador de Weyl, su construcción y desarrollo en términos de integrales de caminos. Para iniciar, se retoma la ecuación (2.2) y con el fin de obtener una expresión para su propagador, se aplica la transformada de Weyl. Este procedimiento requiere conocer el resultado de la transformada de Weyl del producto de tres operadores (ver apéndice A.5). Para el caso particular de la evolución del operador densidad, la transformada de Weyl del producto de tres operadores resulta en:

$$\begin{aligned} \rho_W(\mathbf{r}'', t) = \int d^{2f} r' \left\{ \frac{1}{(\pi\hbar)^{2f}} \int \int d^{2f} r_1 d^{2f} r_2 \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'' + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}') \right. \\ \left. \exp \left[-\frac{2i}{\hbar} (\mathbf{r}_2 \wedge \mathbf{r}'' + \mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{r}') \right] U_W(\mathbf{r}_1, t) U_W^*(\mathbf{r}_2, t) \right\} \rho_W(\mathbf{r}', 0), \end{aligned} \quad (3.1)$$

aquí se ha definido un vector en el espacio de fase $2f$ -dimensional $\mathbf{r}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{p}_i \\ \mathbf{q}_i \end{pmatrix}$, el producto simpléctico $\mathbf{r}_i \wedge \mathbf{r}_j \equiv \mathbf{r}_i^T \mathbf{J} \mathbf{r}_j$, donde \mathbf{J} es la matriz simpléctica unitaria $\mathbf{J} \equiv \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $U_W(r, t)$ denota la transformada de Weyl del operador evolución, denominado el *propagador de Weyl*

$$U(r, t)_W = \int d^f y \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{y} \right) \left\langle \mathbf{q} + \frac{\mathbf{y}}{2} \left| \hat{U}(t) \right| \mathbf{q} - \frac{\mathbf{y}}{2} \right\rangle, \quad (3.2)$$

$$= \int d^f y \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{y} \right) K \left(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{y}}{2}, t; \mathbf{q} - \frac{\mathbf{y}}{2}, 0 \right), \quad (3.3)$$

De manera que la ecuación (3.1) puede expresarse como:

$$\rho_W(\mathbf{r}'', t) = \int d^{2f} r' G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) \rho_W(\mathbf{r}', 0), \quad (3.4)$$

por tanto, el propagador de la función de Wigner está dado por la expresión entre corchetes de la ecuación (3.1).

3.2 Propagador de la función de Wigner

A continuación se establece la relación entre el operador cuántico unitario de evolución temporal $\hat{U}(t)$, y el propagador de Wigner. Como se mostró anteriormente, el propagador de la función de Wigner resulta de la trasformada de Weyl de la ecuación de movimiento del operador densidad. Resulta conveniente escribirlo en términos de una convolución de propagadores de Weyl. Para esto, se reescribe la expresión entre llaves en la ecuación (3.1)

$$G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) \equiv \frac{1}{(\pi\hbar)^{2f}} \int \int d^{2f} r_1 d^{2f} r_2 \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'' + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}') \exp\left(-\frac{2i}{\hbar}(\mathbf{r}_2 \wedge \mathbf{r}'' + \mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{r}')\right) U_W(\mathbf{r}_1, t) U_W^*(\mathbf{r}_2, t), \quad (3.5)$$

se propone un cambio de variable, y se apela a las propiedades de la función delta. Después de este procedimiento, se obtiene una expresión compacta para el propagador de Wigner en términos del propagador de Weyl

$$G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) = \frac{1}{(\pi\hbar)^{2f}} \int \int d^{2f} R \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{R} \wedge (\mathbf{r}'' - \mathbf{r}')\right] U_W\left(\frac{\mathbf{r}'' + \mathbf{r}' + \mathbf{R}}{2}, t\right) U_W^*\left(\frac{\mathbf{r}'' + \mathbf{r}' - \mathbf{R}}{2}, t\right). \quad (3.6)$$

Esta ecuación corresponde a la representación general para el propagador Wigner que se considerará en el capítulo siguiente como punto de partida para el desarrollo de los cálculos. En esta expresión puede verse que dado un sistema mecánico-cuántico y una vez conocido el correspondiente operador unitario de evolución temporal $\hat{U}(t)$, es posible obtener la propagación de la función de Wigner. De aquí es claro que en la ecuación (3.6) se involucra el propagador de Weyl en todo el espacio de fase y no solo en las condiciones iniciales y finales, este hecho es importante para la discusión de la no-localidad en la mecánica cuántica.

3.3 Propiedades del propagador de Wigner

Debido a la estrecha relación entre el propagador de Wigner y el de Weyl, no es inesperado que algunas propiedades del propagador de Wigner dependan de la correspondiente propiedad del operador de evolución temporal, principalmente de su unitariedad. En términos del propagador de Weyl esta condición se escribe: $U_W^*(\mathbf{r}, t) = U_W(\mathbf{r}, -t) = U_W^{-1}(\mathbf{r}, t)$. En particular,

- En primer lugar, considérese la condición inicial $\hat{U}(0) = \hat{1}$. El propagador de Weyl en $t = 0$ es $U_W(\mathbf{r}, 0) = 1$, con esto se obtiene inmediatamente que

$$G_W(\mathbf{r}'', 0; \mathbf{r}', 0) = \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'). \quad (3.7)$$

De la expresión (3.7) puede verse que el propagador de Wigner no está restringido por el principio de incertidumbre [21, 22].

- A partir de la regla de composición para el operador evolución temporal se obtiene

$$G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) = \int d^{2f} r''' G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}''', t''') G_W(\mathbf{r}''', t'''; \mathbf{r}', 0), \quad (3.8)$$

es decir, el propagador satisface la ecuación de tipo Chapman-Kolmogorov.

- Si se tiene en cuenta que la hermiticidad del operador densidad implica que la función de Wigner es real, entonces

$$\rho_W(\mathbf{r}'', t) = \int d^{2f} r' G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) \rho_W(\mathbf{r}', 0), \quad (3.9)$$

implica que el propagador de Wigner es real.

- A tiempos fijos, el propagador de Wigner es un operador ortogonal, es decir,

$$\begin{aligned} \int d^{2f} r''' G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) G_W(\mathbf{r}''', t; \mathbf{r}', 0) &= \int d^{2f} r''' G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) G_W(\mathbf{r}', 0; \mathbf{r}''', t) \\ &= G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}''', t) \\ &= \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''). \end{aligned} \quad (3.10)$$

3.4 Integrales de caminos en el espacio de fase

De forma análoga al formalismo de las integrales de caminos de Feynman, es posible obtener una expresión en términos de integrales de caminos para el propagador de Wigner [15]. Para esto, se divide el intervalo $(0, t)$ en N pequeños pasos $\Delta t = t/N$. Esta discretización del tiempo se hace con el fin de que el cálculo de la transformada de Weyl sea mucho más sencilla. Para Δt pequeño, la transformada de Weyl del operador evolución toma la forma $U_W(\mathbf{r}, \Delta t) \sim \exp\left(-i\frac{H_W(\mathbf{r})}{\hbar}\Delta t\right)$, donde $H_W(\mathbf{r})$ denota la transformada de Weyl del operador Hamiltoniano. Reemplazando esta expresión en la ecuación (3.5) se obtiene el propagador de la función de Wigner para pasos pequeños,

$$G_W(\mathbf{r}_n, n\Delta t; \mathbf{r}_{n-1}, (n-1)\Delta t) \equiv G_{n,n-1} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2f}} \int d^{2f} R_n \exp\left(\frac{i}{\hbar}\phi_n\right), \quad (3.11)$$

en donde hemos denotado la fase

$$\phi_n \equiv \Delta\mathbf{r}_n \wedge \mathbf{R}_n + \left[H_W\left(\bar{\mathbf{r}}_n + \frac{\mathbf{R}_n}{2}\right) - H_W\left(\bar{\mathbf{r}}_n - \frac{\mathbf{R}_n}{2}\right) \right] \Delta t, \quad (3.12)$$

aquí $\Delta\mathbf{r}_n \equiv \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1}$ y $\bar{\mathbf{r}}_n \equiv \frac{\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_{n-1}}{2}$. Considerando que el propagador satisface una ecuación de tipo Chapman-Kolmogorov, es decir, que se puede escribir como una composición, se llega a que el propagador para tiempos finitos está dado por [15]:

$$G(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N-1} \left[\int d^{2f} r_n \right] \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{d^{2f} R_n}{(\pi\hbar)^{2f}} \right] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \phi_n\right). \quad (3.13)$$

El límite aquí es un acercamiento paso a paso de la expresión a su límite. El límite continuo de la fase de la ecuación (3.13) adquiere la forma de una integral funcional de acción

$$\sum_{n=1}^N \phi_n \rightarrow S[\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{R}\}, t] \equiv \int_0^t d\tau \left[\dot{\mathbf{r}} \wedge \mathbf{R} + H_W\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}\right) - H_W\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}\right) \right], \quad (3.14)$$

donde $\mathbf{r}(\tau)$ es una trayectoria en el espacio de fase con punto inicial en $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}'$ y punto final en $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}''$. \mathbf{R} puede ser considerada como una fluctuación sin restricciones alrededor de la trayectoria. En este límite continuo, el propagador de Wigner toma la forma:

$$G(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \int \mathcal{D}^{2f} r \int \mathcal{D}^{2f} R \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{R}\}, t]\right), \quad (3.15)$$

donde $\mathcal{D}^{2f} r$ y $\mathcal{D}^{2f} R$ denotan cada uno un producto infinito de medidas en el espacio de fase [15].

3.5 Propagación semiclásica de la función de Wigner

En el límite semiclásico, se considera la expresión para el propagador de la función de Wigner en el límite continuo y se calculan los extremales del funcional $S[\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{R}\}, t]$. En particular los extremales están dados por las soluciones a

$$\frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}} = 0 \quad y \quad \frac{\partial S}{\partial \mathbf{R}} = 0, \quad (3.16)$$

la derivada respecto a \mathbf{r} se obtiene directamente y la derivada respecto a \mathbf{R} se encuentra integrando primero (3.14) parcialmente respecto a t , de manera que

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{2} \mathbf{J} \left[\nabla H_{\text{W}} \left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) + \nabla H_{\text{W}} \left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \right], \quad (3.17)$$

$$\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{J} \left[\nabla H_{\text{W}} \left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) - \nabla H_{\text{W}} \left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \right]. \quad (3.18)$$

Al introducir unas nuevas variables $\mathbf{r}_{\pm} \equiv \mathbf{r} \pm \frac{\mathbf{R}}{2}$, se obtiene que

$$\dot{\mathbf{r}}_{\pm} = \mathbf{J} \nabla H(\mathbf{r}_{\pm}), \quad (3.19)$$

es decir, las ecuaciones de Hamilton para \mathbf{r}_{\pm} . de manera que se han encontrado, un par de trayectorias clásicas, soluciones estacionarias, que determinan la propagación en el espacio de fase [15]. Puede verse que \mathbf{r}_{\pm} , no solo determina la propagación en el espacio de fase, sino que también son soluciones de la ecuación clásica de movimiento. En este caso, las expresiones de integrales de caminos se sustituyen por sumatoria sobre estas trayectorias y se pondera con las segundas derivadas de la acción a lo largo de estas trayectorias [21]. Esta matriz de segundas derivadas puede relacionarse con la diferencia de las matrices de estabilidad \mathbf{M}_+ y \mathbf{M}_- de \mathbf{r}_+ y \mathbf{r}_- , respectivamente,

$$\det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S[\{\mathbf{r}\}, \{\bar{\mathbf{r}}\}, t]}{\partial \bar{\mathbf{q}}^2} & \frac{\partial^2 S[\{\mathbf{r}\}, \{\bar{\mathbf{r}}\}, t]}{\partial \bar{\mathbf{p}}^2} \\ \frac{\partial^2 S[\{\mathbf{r}\}, \{\bar{\mathbf{r}}\}, t]}{\partial \mathbf{q}^2} & \frac{\partial^2 S[\{\mathbf{r}\}, \{\bar{\mathbf{r}}\}, t]}{\partial \mathbf{p}^2} \end{pmatrix} = \frac{1}{4f} \det \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{q}''_+}{\partial \mathbf{q}'_+} - \frac{\partial \mathbf{q}''_-}{\partial \mathbf{q}'_-} & \frac{\partial \mathbf{q}''_+}{\partial \mathbf{p}'_+} - \frac{\partial \mathbf{q}''_-}{\partial \mathbf{p}'_-} \\ \frac{\partial \mathbf{p}''_+}{\partial \mathbf{q}'_+} - \frac{\partial \mathbf{p}''_-}{\partial \mathbf{q}'_-} & \frac{\partial \mathbf{p}''_+}{\partial \mathbf{p}'_+} - \frac{\partial \mathbf{p}''_-}{\partial \mathbf{p}'_-} \end{pmatrix} = \frac{1}{4f} \det (\mathbf{M}_+ - \mathbf{M}_-). \quad (3.20)$$

Dado que la suma sobre las trayectorias contiene términos j_+j_- y j_-j_+ , podemos garantizar que el propagador es real. Al tomar en cuenta los últimos argumentos, se muestra que el propagador toma la forma [21, 22] .

$$G_{\text{W}}(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) = \frac{4^f}{h^f} \sum_j \frac{2 \cos \left(\frac{1}{\hbar} S_j^{\text{vV}}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', t) - \nu_j \frac{\pi}{4} \right)}{|\det (\mathbf{M}_{j_+} - \mathbf{M}_{j_-})|^{1/2}}, \quad (3.21)$$

donde ν_j hace referencia al índice de inercia, también llamado índice de Maslov [16]. Aquí $S_j^{\text{vV}}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', t)$ dado por

$$\begin{aligned} S_j^{\text{vV}}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', t) &= (\bar{\mathbf{r}}_{j_+} - \bar{\mathbf{r}}_{j_-}) \wedge (\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') + S_{j_+} - S_{j_-} \\ &= \int_0^t ds [\dot{\bar{\mathbf{r}}}_j(s) \wedge \mathbf{r}_j(s) - H_{j_+}(\mathbf{r}_{j_+}) + H_{j_-}(\mathbf{r}_{j_-})], \end{aligned} \quad (3.22)$$

donde $\bar{\mathbf{r}}_j(s) \equiv [\mathbf{r}_{j_-}(s) + \mathbf{r}_{j_+}(s)]/2$ y $\tilde{\mathbf{r}}_j(s) \equiv \mathbf{r}_{j_+}(s) - \mathbf{r}_{j_-}(s)$. Además de los dos términos hamiltonianos, incluye el área simpléctica encerrada entre las dos secciones de la trayectoria y los vectores $\mathbf{r}'_{j_+} - \mathbf{r}'_{j_-}$ y $\mathbf{r}''_{j_+} - \mathbf{r}''_{j_-}$ (ver figura 3.1).

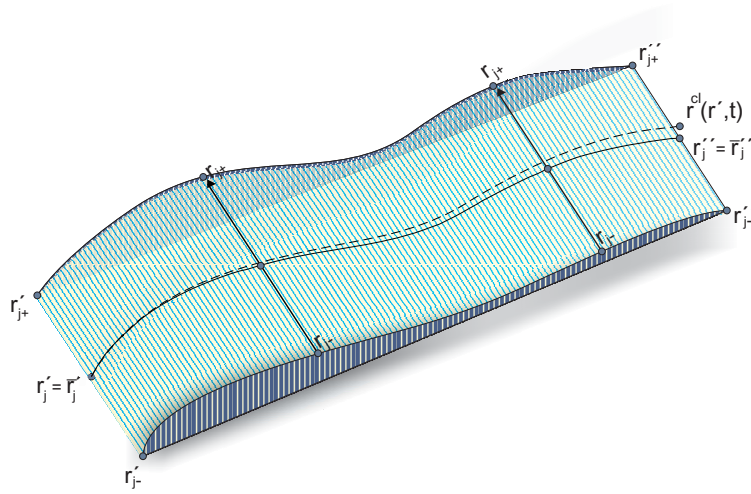


Figura 3.1: Esquema de la Propagación semiclásica a partir de la contribución de pares de trayectorias

Este resultado para la formulación de integrales de caminos coincide con el resultado derivado en la Ref. [8]. El ingrediente básico que proporciona este enfoque es la propagación mediante pares de trayectorias. Cada punto único \mathbf{r}' en el espacio de fase es propagado por pares de trayectorias $\mathbf{r}_{j\pm}$, de tal forma que \mathbf{r}' es el punto medio entre \mathbf{r}'_{j+} y \mathbf{r}'_{j-} (ver figura 3.1), las trayectorias $\mathbf{r}_{j\pm}$ evolucionan en el tiempo t hasta llegar a los puntos $\mathbf{r}''_{j\pm}$. La contribución de esta pareja a la evolución de \mathbf{r}' se localiza en el punto medio entre \mathbf{r}''_{j+} y \mathbf{r}''_{j-} .

CAPÍTULO 4

No-localidad dinámica cuántica en el espacio de fase

Para iniciar el estudio de la dinámica cuántica se hace totalmente necesario diferenciar claramente la no-localidad dinámica de la no-localidad cinemática. Con el fin de contextualizar al lector con este tipo de no localidad que, como se dijo anteriormente ha sido poco explotada. Siguiendo este camino se dará inicio a este capítulo con una corta discusión al respecto, seguido de la introducción de las variables modulares.

4.1 No-localidad cinemática y no-localidad dinámica

La no-localidad cinemática es producto de la estructura del espacio de Hilbert [27] y a diferencia de la no-localidad dinámica, no crea cambios en la distribución de probabilidad. Un enfoque estándar de la no-localidad dinámica puede ser formulado así: considérese, por ejemplo, el operador desplazamiento (también conocido como operador de momento modular) $\hat{D} = e^{i\hat{p}L/\hbar}$ bajo la acción de un hamiltoniano estándar unidimensional $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{q})$. Así, el operador desplazamiento evoluciona clásicamente como

$$\frac{de^{i\hat{p}L/\hbar}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}L \frac{dV(q)}{dq} e^{i\hat{p}L/\hbar}, \quad (4.1)$$

mientras que en mecánica cuántica

$$\frac{de^{i\hat{p}L/\hbar}}{dt} = -i \frac{L}{\hbar} e^{i\hat{p}L/\hbar} \frac{V(q+L) - V(q)}{L}. \quad (4.2)$$

La comparación directa de las ecuaciones clásicas y cuánticas de movimiento expresa claramente el carácter no local de la evolución cuántica, pues la ecuación de movimiento depende del potencial en dos posiciones diferentes $V(q+L)$ y $V(q)$. Este resultado es conocido como el efecto Aharonov-Bohm escalar y sugiere que la dinámica cuántica es fundamentalmente no local [1].

Anteriormente se comentó que la no-localidad dinámica ha sido explicada en términos de variables

modulares. A continuación se introducen estas variables modulares y se aclaran las relaciones con la formulación de Weyl.

4.2 Variables modulares

Para hablar de variables modulares se debe iniciar por hablar de los efectos cuánticos del potencial, como el efecto Aharonov-Bohm. Los experimentos muestran que aunque el campo desvanece en la región donde se encuentra la partícula parece haber algún tipo de interacción entre la partícula y la fuente del potencial. En la física clásica, una interacción puede ser definida como un intercambio de una cantidad física que se conserva entre los dos sistemas que interaccionan, es decir, clásicamente no se considera una interacción entre la fuente, y por ejemplo, una partícula cargada, si no hay intercambio de momento entre ellos. Ahora surge una pregunta importante, ¿es posible cuánticamente que este efecto del potencial sobre la partícula, en las zonas donde el potencial es cero, debido al intercambio de alguna cantidad física que se conserva entre la fuente y la partícula cargada? La respuesta a estas cantidades fueron las variables modulares [2].

Con el fin de apreciar el papel crucial del operador de desplazamiento y de las variables modulares, se inicia por hacer una conexión con la formulación de la mecánica cuántica desarrolladas por Weyl. Al hacer esto, puede verse que un sistema físico con f grados de libertad podría describirse en términos de su estado o en términos de sus observables, es decir, en términos del álgebra de observables. En general, los observables de un sistema son funciones de la posición \mathbf{q} del sistema y su momento \mathbf{p} , estos resultan ser operadores en mecánica cuántica. Para definir un sistema cuántico en términos de un álgebra generada por los operadores $\hat{\mathbf{q}}$ y $\hat{\mathbf{p}}$, se debe tener en cuenta las relaciones de conmutación de Heisenberg.

$$[\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}] = i\mathbf{1}\hbar, \quad [\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}] = \mathbf{0}, \quad [\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{p}}] = \mathbf{0}. \quad (4.3)$$

El espacio vectorial generado por los operadores $\hat{\mathbf{q}}$ y $\hat{\mathbf{p}}$ con la relación de conmutación (4.3) definen lo que es conocido como el álgebra de Lie. Weyl notó que la relación de conmutación en (4.3) implica que $\hat{\mathbf{q}}$ y $\hat{\mathbf{p}}$ no pueden tener norma finita. Dado que la medición de observables físicos es hecha por un dispositivo de medición limitado, $\hat{\mathbf{q}}$ y $\hat{\mathbf{p}}$, son opciones no físicas para la construcción del álgebra de observables cuánticos. Por tanto, Weyl sugirió considerar el álgebra polinómica generada por las funciones acotadas $\hat{P}_{\mathbf{u}} = e^{i\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar}$ y $\hat{Q}_{\mathbf{v}} = e^{i\mathbf{v}\cdot\hat{\mathbf{q}}/\hbar}$ con $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \text{Re}^f$. En notación abreviada, el álgebra de los observables cuánticos es generado por el operador

$$\hat{T}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = e^{i\phi(\mathbf{u}, \mathbf{v})} \hat{P}_{\mathbf{u}} \hat{Q}_{\mathbf{v}}, \quad (4.4)$$

donde $\phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}/\hbar^2$. En términos físicos, que $\hat{T}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ sea el generador, significa que cualquier observable puede ser escrito en términos de éste. Para mayor comodidad, se asume que el sistema que se quiere caracterizar sólo tiene un grado de libertad, $f = 1$, y se toma luego la doble transformada de Fourier de $\hat{T}(u, v)$

$$\hat{d}(p, q) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int du dv \exp \left[\frac{i}{\hbar} (up + vq) \right] \hat{T}(-u, -v), \quad (4.5)$$

donde $p, q \in \text{Re}$ y $\text{Tr}(\hat{d}) = 1$. Por medio de esta transformación se asocia un operador $\hat{d}(p, q)$ a cada uno de los puntos $\mathbf{r} = (p, q)$ en el espacio de fase. Dado que $\hat{T}(u, v)$ es unitario $\hat{d}(p, q)$ es hermitico (ver apéndice A.1) entonces es un observable legítimo. Siendo $\hat{d}(p, q)$ la transformada de Fourier del generador del álgebra $\hat{T}(u, v)$, también puede ser expresado cualquier operador asociado al sistema físico en términos de $\hat{d}(p, q)$. En particular, si se representa el estado de un sistema cuántico mediante el operador densidad $\hat{\rho}$. Entonces, se tiene que

$$\hat{\rho} = \int d\mathbf{r} \rho_{\text{W}}(\mathbf{r}) \hat{d}(\mathbf{r}), \quad (4.6)$$

donde $\rho_W(\mathbf{r})$ se puede interpretar como los coeficientes de la expansión de $\hat{\rho}$ en términos de $\hat{d}(\mathbf{r})$. El operador de desplazamiento $\hat{d}(p, q)$ es entonces la base más fundamental en la mecánica cuántica y, por tanto, se espera que todas sus características complejas estén codificadas en él. Dado que $\hat{d}(p, q)$ se construye con el momento modular \hat{P}_u y la posición modular \hat{Q}_v , ahora podemos entender el por qué las variables modulares son tan especiales.

Aunque el formalismo de Weyl discutido aquí es ampliamente conocido, con base en una extensa revisión bibliográfica, puede afirmarse que la relación entre las variables modulares y la representación de la mecánica cuántica en el espacio de fase es un resultado original de este trabajo. Ya que $\hat{d}(p, q)$ puede entenderse como el generador del grupo dinámico de Weyl-Heisenberg, esta formulación señala de manera clara el camino para explorar los efectos del potencial en otros contextos físicos. Por ejemplo, la extensión a espacios de Hilbert de dimensión finita se hace proyectando en los generadores del grupo de Dirac y en el caso de teoría cuántica de campos, se realiza proyectando en los generadores del grupo de Poncaré [21]. Además, como se discute a continuación, permite el análisis de la no-localidad dinámica en el generador mismo de la dinámica.

4.3 No-localidad dinámica en un objeto dinámico

Dado que se espera que la no-localidad esté codificada en el propagador o de manera equivalente en la amplitud de probabilidad $K(q'', t'', q', t')$, para estudiar la estructura de esta amplitud de probabilidad, por medio de un ejemplo, considérese una molécula diatómica, y suponga que la interacción entre los átomos puede ser descrita mediante el potencial de Morse. Para mayor detalle respecto a las funciones propias de este sistema puede verse [5].

$$V(q) = D_0 \left[1 - e^{\alpha(q-q_e)} \right]^2, \quad (4.7)$$

donde q es la distancia entre átomos, q_e la distancia de equilibrio, D_0 la profundidad del pozo y α controla la anchura del potencial. Este potencial es perfecto para el presente estudio porque describe una fuerte interacción no lineal y además es un modelo que describe de manera precisa, e.g., la molécula de nitrógeno [17]. El cálculo de la evolución temporal en general, se muestra en el apéndice C, allí se desarrolla el proceso para la construcción del algoritmo que con el que se obtiene la dinámica del sistema. Para efectos prácticos, puede tenerse en cuenta que para pequeños desplazamientos de la posición de equilibrio q_e , el potencial $V(q)$ puede aproximarse a segundo orden en $q - q_e$, $V(q) = 0,5m\omega_M^2(q - q_e)^2$, donde $\omega_M = \sqrt{2a^2D_0/m}$ y m denota la masa. En la figura 4.1 se muestra la parte real de $K(q'', t'', q', t')$ para una configuración particular de parámetros. Aquí puede verse que en ambos casos, tanto para el caso de interacción lineal como para el de interrelación no lineal, la amplitud de probabilidad muestra una rica y densa estructura y por esto no es posible determinar, desde el propagador, si la dinámica es local o no local. Sin embargo, se sabe que bajo una interacción lineal, la dinámica es local [23].

Si se considera un hamiltoniano estándar $H_W = p^2/2m + V_W(q)$, la acción en la ecuación (3.15) está dada por

$$S[\{\mathbf{r}\}, \{\tilde{\mathbf{r}}\}, t] = \int_0^t dt' \left[V_W \left(\mathbf{q} + \frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2} \right) - V_W \left(\mathbf{q} - \frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2} \right) - \frac{dV_W(\mathbf{q})}{d\mathbf{q}} \tilde{\mathbf{q}} \right]. \quad (4.8)$$

Una relación fundamental surge cuando se confrontan las ecuaciones (4.8) con (4.1) y (4.2). El propagador de Wigner contiene términos que son no locales $V_W(\mathbf{q} + \tilde{\mathbf{q}}/2) - V_W(\mathbf{q} - \tilde{\mathbf{q}}/2)$ asociados al potencial, así como las contribuciones locales expresadas por el término $(dV_W(\mathbf{q})/d\mathbf{q})\tilde{\mathbf{q}}$. Para un potencial armónico, (4.8) desaparece, es decir, $G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0)$ es una función delta a lo largo de la trayectoria

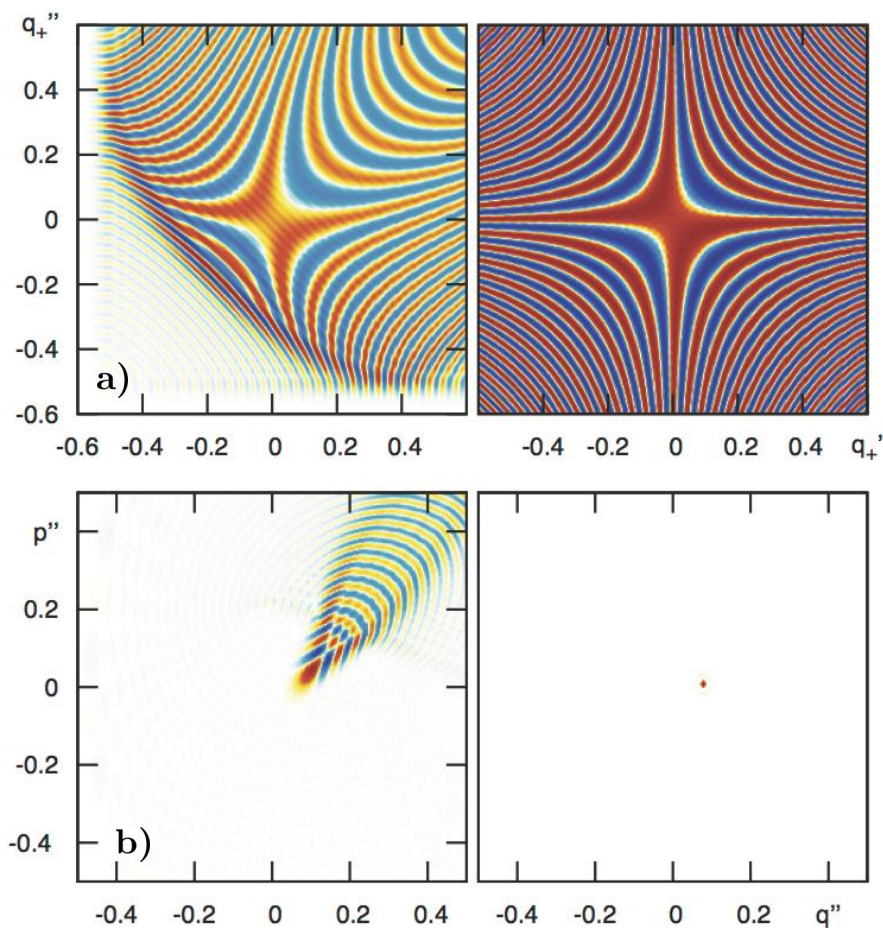


Figura 4.1: Propagador de Feynman (paneles superiores) y Propagador de Wigner (paneles inferiores) para una molécula diatómica modelada usando el potencial Morse. El panel superior derecho representa la parte real del propagador de Feynman para el caso del potencial de Morse mientras que el panel superior izquierdo contiene la parte real de su versión linealizada (aproximación armónica). En los paneles inferiores se presenta el propagador de la función de Wigner asociado a los paneles superiores para una condición inicial \mathbf{r}' dada. Parámetros: $m = 0,5$, $D_0 = 1$, $\alpha = 1,25$, $q_e = 0$.

clásica [6, 24], o en otras palabras el propagador de Frobenius-Perron [21]. Por tanto, las desviaciones de la evolución clásica sólo se esperan para los casos no armónicos, un hecho muy bien conocido. Sin embargo, lo que realmente dice (4.8), es que el carácter no local dinámico de la mecánica cuántica está dado por el grado de no-linealidad del sistema [21].

En los paneles inferiores de la figura 4.1 se muestra el propagador de Wigner para una condición inicial \mathbf{r} dada y un tiempo fijo usando el potencial de Morse (panel inferior izquierdo) y su versión armónica (panel inferior derecho). Contrario al caso del propagador de Feynman (paneles superiores), en este caso la diferencia entre la dinámica no-local en el espacio de fase (un partón rico en estructura) y la dinámica local (un punto en el espacio de fase) es clara. A continuación se discute el origen de estas diferencias entre los casos no-lineales (dinámica no local) y lineales (dinámica local) en términos de la interferencia de trayectorias.

4.3.1. No-localidad y el principio de incertidumbre

Recientemente, se probó que el principio de incertidumbre determina la no-localidad de la mecánica cuántica y de cualquier teoría física de la información [19]. Sin embargo, este resultado sólo puede aplicarse en el sentido de la no-localidad cinemática. Con el fin de explorar el efecto de la no-localidad, cinemática y dinámica, en la medida de un observable dado \hat{O} , se calcula el valor esperado de \hat{O} en términos de la función de Wigner, es decir,

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \int dr'' O_W(\mathbf{r}'') \int dr' G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) \rho_W(\mathbf{r}', 0). \quad (4.9)$$

Esta expresión contiene la no-localidad dinámica a través de $G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0)$ y la no-localidad cinemática proporcionada por $\rho_W(\mathbf{r}', 0)$. Tras notar que el propagador de la función de Wigner no está limitado por el principio de incertidumbre [6, 7, 21], es evidente que el principio de incertidumbre influye en el resultado de la medición sólo a través de $\rho_W(\mathbf{r}', 0)$, en un sentido cinemático. Así, el carácter no local de una medición cuántica también está determinado por la no-localidad dinámica [21].

4.3.2. No-localidad y el principio de superposición

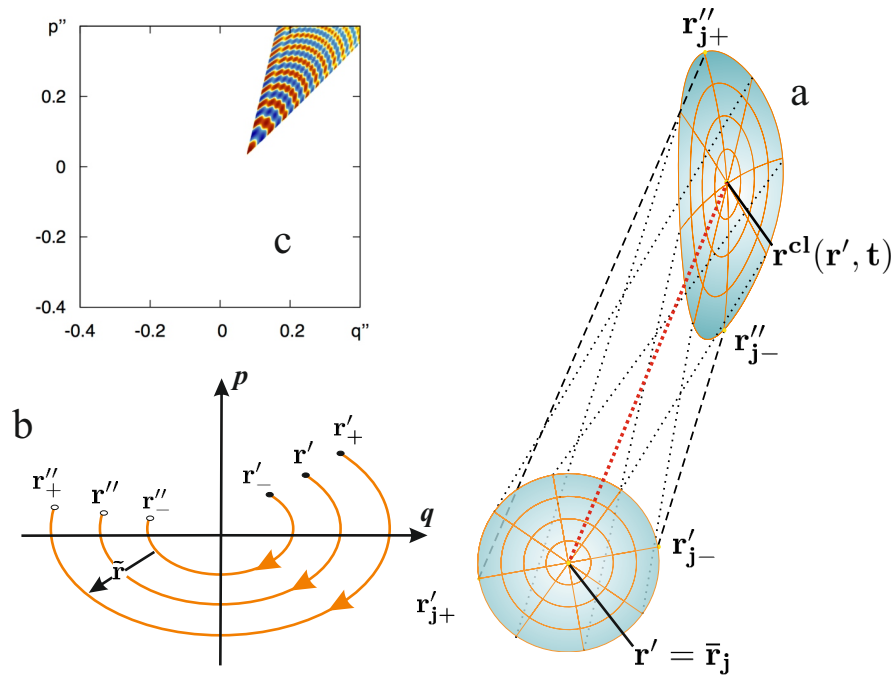


Figura 4.2: Representación de las contribuciones a la evolución de la trayectoria según el enfoque de pares de trayectorias (4.2.a) para diferentes tipos de interacciones implementadas, un caso lineal (4.2.b), y uno no lineal (4.2.c).

En este punto uno puede preguntarse, si el propagador Wigner no está limitado por el principio de incertidumbre, ¿existe alguna relación entre éste y la no localidad codificada en la anterior? La respuesta es no, la no-localidad dinámica es generada por el principio de superposición, un principio dinámico [21]. Se mostró que para explorar esta evolución es necesario considerar la transformación del producto de tres operadores (ver apéndice A.5), esta transformada es la clave del carácter no

local mediado por el principio de superposición. En el apéndice A.1 pueden verse con más detalle los cálculos para la composición de operadores \hat{d} (2.2). Lo importante de esto, es que la composición de dos operadores \hat{d} da como resultado una superposición infinita de operadores \hat{d} . Las interferencias entre las componentes de esta superposición son precisamente las responsables del carácter no local de la dinámica cuántica.

Para ver esto con claridad, se puede usar la descripción semiclásica del propagador de Wigner extraída de [6, 8, 22] y que se explica brevemente en la sección 3.5. En la figura 4.2.a se presenta la construcción semiclásica del propagador de Wigner mostrado en el panel inferior izquierdo de la figura 4.1. Allí puede verse que la aproximación semiclásica describe correctamente el no local de la dinámica.

Para sistemas bajo interacciones lineales puede verse en la figura (4.2.b), que la contribución de cada par se encuentra exactamente sobre la solución clásica de la ecuación de movimiento, de modo que la evolución de las interferencias entre trayectorias coincide con las soluciones de la dinámica clásica. Sin embargo, para sistemas no lineales (ver 4.2.a) este no es el caso. La contribución puede ser ubicada en cualquier lugar. Estas contribuciones fuera de $\mathbf{r}^{\text{cl}}(\mathbf{r}', t)$ hacen que el propagador sea no local y diferente de un punto sin estructura en $\mathbf{r}^{\text{cl}}(\mathbf{r}', t)$ como se observa en (4.2.c).

Así pues, puede verse como la interferencia de todos los caminos posibles generan un patrón complejo que expresa, sin ambigüedades, el carácter no local de la evolución cuántica. Vale la pena mencionar que, como se puede deducir de los resultados presentados en la figura 4.2, la dinámica es no local tanto en la posición como en el momento.

4.3.3. No-localidad y la transición clásico cuántica

En el límite clásico $\hbar \rightarrow 0$ se espera que la no-localidad dinámica esté ausente. A este régimen puede llegarse en el supuesto de masas grandes o parámetros del potencial que hagan que la acción de $S[r]$ cambie drásticamente en el orden de la constante reducida de Planck. Esta transición clásico-cuántica está en el enfoque de lo expuesto por Feynman y Hibbs [9]. Esto debido a la falta de una teoría general de los sistemas cuánticos abiertos en el espacio de fase [23] impide explorar la transición cuántico-clásica en el espíritu de Zurek [31]. Para el caso particular que de este trabajo, el límite clásico se puede interpretar como el límite en el que el número de estados acotados, $\lambda = \sqrt{2mD_0}/a\hbar$ es grande. Por tanto, podemos tomar, por ejemplo, un valor pequeño para la masa m y aumentar este parámetro de manera sistemática con el fin de ver cómo la no-localidad dinámica simplemente se desvanece. La figura (4.3) muestra una representación del propagador de Wigner para esta situación a pasos equivalentes a $2\pi\omega_M/4$ en cada caso. A medida que se aumenta la masa, puede verse como el propagador Wigner tiene menos y menos estructura, una característica relacionada con la desaparición de la no-localidad dinámica en el límite clásico.

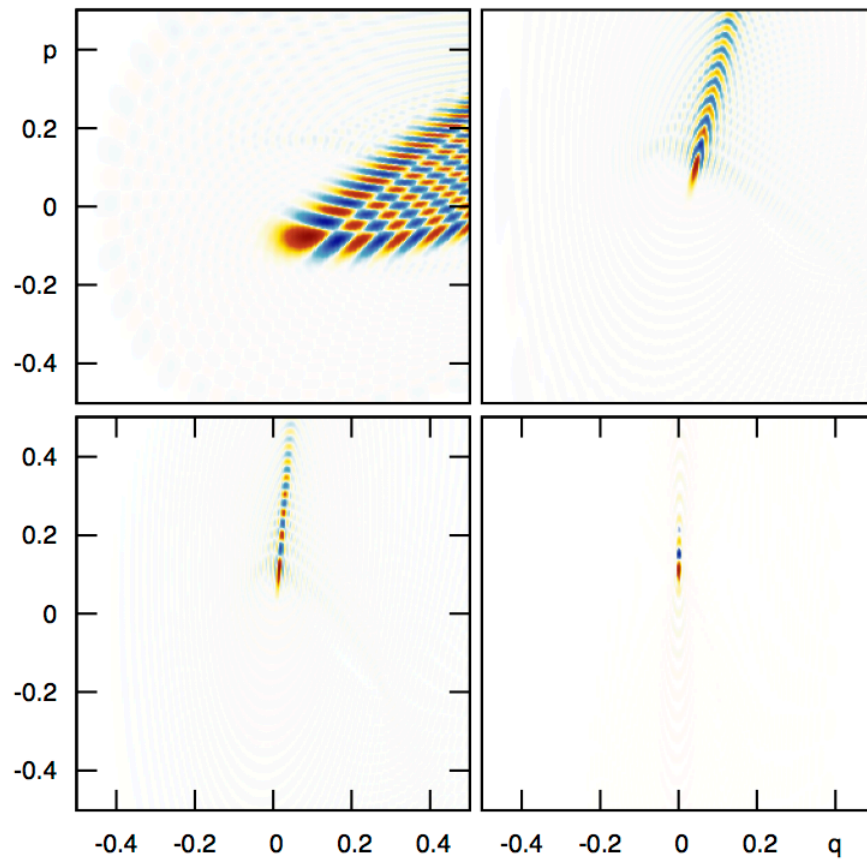


Figura 4.3: Desaparición de la no-localidad dinámica en el límite clásico. Propagador de Wigner en el mínimo del potencial $V(q)$ para cuatro diferentes valores de la masa: (a) $m = 0,25$, (b) $m = 1$, (c) $m = 2$ y (d) $m = 10$.

CAPÍTULO 5

Conclusiones y Perspectivas

En este trabajo se expuso un posible camino al entrañado origen de la no-localidad dinámica. Los resultados respaldan con contundencia la estrecha relación entre el grado de linealidad del potencial implementado y la presencia de efectos no locales de tipo dinámico. Así, se establece que la no localidad dinámica se presenta para interacciones de tipo no lineal como el caso del potencial de Morse, mientras que para casos en el que el potencial es lineal como el potencial armónico, el comportamiento corresponde al comportamiento clásico. Una estructura simple, una delta a lo largo de la trayectoria clásica.

Es importante recalcar que los aportes se hacen siguiendo el desarrollo del propio generador de la dinámica, el propagador y los resultados de la presencia de la no-localidad dinámica se basan en éste y no en cierto tipo de operadores como se ha planteado durante más de cuarenta años en la literatura. Implementar el propagador permitió descartar por completo cualquier anomalía que se pudieran presentar en los cálculos debidas a la incertidumbre, ya que como se comentó anteriormente el propagador no está restringido por este principio. Además, permitió tener en un mismo contexto la física clásica y cuántica, el resultado más importante de este trabajo, muestra que en el desarrollo del propagador la no-localidad dinámica es generada por el principio de superposición, esto se ve claramente en la construcción de la transformada de Weyl, que se utiliza para encontrar la función de Wigner. La superposición infinita de operadores \hat{d} evidentemente es la responsable de esta no-localidad dinámica.

Finalmente, se mostró de forma sencilla la transición clásico-cuántica de esta no-localidad. Con el fin de dejar claro que este fenómeno es de carácter cuántico, puede verse que la estructura densa del propagador se pierde a medida que $\hbar \rightarrow 0$, y converge nuevamente a un punto en el espacio de fase que elimina totalmente cualquier ambigüedad de existencia de no-localidad dinámica.

Con este trabajo se da un paso importante en la comprensión más fundamental de la naturaleza de la dinámica cuántica. El poder conocer su origen, permite extender sus conceptos a, por ejemplo, la Teoría Cuántica de Campos. Dado que el fenómeno es genérico y está presente en cualquier interacción, estas ideas pueden implementarse en cualquier teoría. En computación cuántica, abriría la posibilidad de un mayor control en implementación de compuertas cuánticas y sus las interacciones (aplicaciones) [18].

APÉNDICE A

Formalismo de Weyl

A.1 Operador de desplazamiento

Dados u y $v \in \text{Re}$, y sean \hat{q} y \hat{p} operadores de posición y momento respectivamente, se define el operador desplazamiento

$$\hat{T}(u, v) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(u\hat{p} + v\hat{q})\right). \quad (\text{A.1})$$

Con el fin de mostrar la regla de composición, se introduce la identidad de Baker-Campbell-Hausdorff

$$\exp\{\hat{A} + \hat{B}\} = \exp\{\hat{A}\} \exp\{\hat{B}\} \exp\left\{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right\}. \quad (\text{A.2})$$

De manera que la regla de composición se escribe

$$\hat{T}(u, v)\hat{T}(u', v') = \exp\left\{\frac{i}{2\hbar}(uv' + vu')\right\} \hat{T}(u + u', v + v'), \quad (\text{A.3})$$

donde es evidente que \hat{T} es unitario.

A.2 Operador \hat{d}

Suponga que $u, v, p, q \in \text{Re}$ y sean \hat{q} y \hat{p} operadores de posición y momento respectivamente, entonces el operador \hat{d} se define como:

$$\begin{aligned} \hat{d}(p, q) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dudv \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(up + vq)\right\} \hat{T}(-u, -v), \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dudv \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(u(\hat{p} - p) + v(\hat{q} - q))\right\} \hat{T}(-u, -v), \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

debido a que \hat{T} es unitario, \hat{d} es hermitico. Dados $\hat{d}(p, q)$ y $\hat{d}(p', q')$ dos operadores la composición de estos esta dada por:

$$\hat{d}(p, q)\hat{d}(p', q') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dudvdv' dv' \hat{T}(-u - u', -v - v') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(u'(p' - v/2) + v'(q' - u/2) + (up + vq))] \right\}, \quad (\text{A.5})$$

aplicando un cambio de variable $u = 2(q'' - q')$, $v = 2(p' - p'')$, $u'' - u' = 2(q'' - q')$ y $v'' - v' = 2(p' - p'')$ se obtiene

$$\hat{d}(\mathbf{r})\hat{d}(\mathbf{r}') = \frac{2}{\pi\hbar} \int d^2r'' \hat{d}(\mathbf{r}'') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \Delta_3(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \mathbf{r}) \right\}, \quad (\text{A.6})$$

con $\mathbf{r} = (p, q)$, $\Delta_3(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \mathbf{r}) \equiv 2(\mathbf{r}'' \wedge \mathbf{r}' + \mathbf{r}' \wedge \mathbf{r} + \mathbf{r} \wedge \mathbf{r}'')$ y $\mathbf{r}' \wedge \mathbf{r}'' = \mathbf{r}^t \mathbf{J} \mathbf{r}''$, con \mathbf{J} la matriz simpléctica unidad.

A.3 Transformación de Weyl

Sea $\hat{A}(\hat{p}, \hat{q})$ un operador arbitrario, entonces la transformada de Weyl de \hat{A} se define como:

$$T_W[\hat{A}] = A(p, q) := \text{tr}[\hat{A}(\hat{p}, \hat{q})\hat{d}(p, q)], \quad (\text{A.7})$$

la cual es invertible

$$\hat{A}(\hat{p}, \hat{q}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dqdp A(p, q)\hat{d}(p, q) \quad (\text{A.8})$$

Partiendo de esta definición y haciendo uso de (A.4) junto con (A.2) se obtiene,

$$A(p, q) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dudvdq' \left\langle q' \left| \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} up \right\} \hat{A} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} up \right\} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} vq \right\} \right| q' \right\rangle \quad (\text{A.9})$$

$$A(p, q) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dudvdq' \left\langle q' + \frac{u}{2} \left| \hat{A} \right| q' - \frac{u}{2} \right\rangle \exp \left\{ \frac{1}{2\hbar} up \right\} \exp \left\{ \frac{1}{2\hbar} v(q' - q) \right\}, \quad (\text{A.10})$$

esto conduce a la expresión que comúnmente define la transformación de Weyl

$$A(p, q) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int du \left\langle q + \frac{u}{2} \left| \hat{A} \right| q - \frac{u}{2} \right\rangle \exp \left\{ \frac{1}{2\hbar} up \right\}. \quad (\text{A.11})$$

A.4 Transformación de Weyl del producto de dos operadores

Dado un operador \hat{A} suponga que $\hat{A} = \hat{A}_1 \hat{A}_2$, con \hat{A}_1, \hat{A}_2 también operadores, aplicando la expresión (A.7)

$$A(p, q) = \text{tr}[\hat{A}_1(\hat{p}, \hat{q})\hat{A}_2(\hat{p}, \hat{q})\hat{d}(p, q)], \quad (\text{A.12})$$

recurriendo a (A.8)

$$\hat{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dr' dr'' \hat{A}_1(\mathbf{r}') \hat{A}_2(\mathbf{r}'') \text{tr}[\hat{d}(\mathbf{r}') \hat{d}(\mathbf{r}'') \hat{d}(\mathbf{r})], \quad (\text{A.13})$$

aplicando A.6 se obtiene

$$\hat{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \int dr' dr'' \hat{A}_1(\mathbf{r}') \hat{A}_2(\mathbf{r}'') \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \Delta_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \mathbf{r}') \right\}, \quad (\text{A.14})$$

puede verse que el producto de dos operadores es una superposición infinita de los mismos operadores.

A.5 Transformación de Weyl del producto de tres operadores

Dado un operador \hat{A} suponga $\hat{A} = \hat{A}_1\hat{A}_2\hat{A}_3$, $\hat{A}_{12} = \hat{A}_1\hat{A}_2$ y $\hat{A} = \hat{A}_{12}\hat{A}_3$ con \hat{A}_1 , \hat{A}_2 , \hat{A}_3 , \hat{A}_{12} también operadores, aplicando dos veces (A.14)

$$\begin{aligned}\hat{A}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \int dr_0 dr_3 \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\Delta_3(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_3, \mathbf{r})\right\} \hat{A}_{12}(\mathbf{r}_0)\hat{A}_3(\mathbf{r}_3) \\ &= \frac{1}{(\pi\hbar)^4} \int dr_0 dr_1 dr_2 dr_3 \hat{A}_1(\mathbf{r}_1)\hat{A}_2(\mathbf{r}_2)\hat{A}_3(\mathbf{r}_3) \\ &\quad \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}(\Delta_3(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}) + (\Delta_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_0))\right\}\end{aligned}\tag{A.15}$$

integrando sobre \mathbf{r}_0

$$\begin{aligned}\int dr_0 \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}[\Delta_3(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}) + \Delta_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_0)]\right\} &= (\pi\hbar)^2 \delta(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ &\quad \exp\left\{-\frac{2i}{\hbar}(\mathbf{r}_3 \wedge \mathbf{r} + \mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{r}_2)\right\}\end{aligned}\tag{A.16}$$

finalmente se obtiene que

$$A(\mathbf{r}) = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \int dr_1 dr_2 dr_3 \hat{A}_1(\mathbf{r}_1)\hat{A}_2(\mathbf{r}_2)\hat{A}_3(\mathbf{r}_3) \delta(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \exp\left\{-\frac{2i}{\hbar}(\mathbf{r}_3 \wedge \mathbf{r} + \mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{r}_2)\right\}\tag{A.17}$$

de esta forma queda claro que para este caso el producto de operadores genera una superposición infinita de operadores.

APÉNDICE B

Efecto Aharonov-Bohm

Este pequeño apéndice sigue la descripción del efecto Aharonov-Bohm expuesto por el Dr. Bert Janssen en su curso mecánica Analítica en la Universidad de Granada.

En el electromagnetismo, los campos físicos son los campos electromagnético \mathbf{E} y \mathbf{B} , mientras los potenciales ϕ y \mathbf{A} sólo son construcciones matemáticas para manejar mejor las ecuaciones de Maxwell. Sin embargo, esto sólo es verdad en la física clásica. En la mecánica cuántica se presentan efectos físicos debido a los potenciales [1]. El ejemplo más conocido es el efecto Aharonov-Bohm.

En la mecánica cuántica, la posición de un electrón (o cualquier otra partícula) no está completamente determinada, sino que está descrita por la *función de onda* $\Psi(\mathbf{q}, t)$, una función compleja cuya norma al cuadrado $|\Psi(\mathbf{q}, t)|^2$ da la probabilidad de encontrar el electrón en la posición \mathbf{q} . Por tanto, la función de onda no está determinada unívocamente: dada una función de onda $\Psi(\mathbf{q}, t)$, siempre se puede añadir una fase tal que $\Psi(\mathbf{q}, t)$ y $\Psi(\mathbf{q}, t) = e^{i\alpha}\Psi(\mathbf{q}, t)$ tienen la misma física.

El hecho que tanto los potenciales como la fase de la función de onda no representan conceptos físicos, sugiere una relación entre estos. Efectivamente, a través del formalismo hamiltoniano se puede demostrar que una transformación de gauge de los potenciales induce un cambio de fase en la función de onda [2]. El hamiltoniano de una partícula en un campo electromagnético

$$H = \frac{1}{2m}(p_i - eA_i)^2 + V(q_i), \quad (\text{B.1})$$

en la mecánica cuántica se convierte, reemplazando los momentos p_i por el operadores $-\hbar\partial_i$, en

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar} A_i \right)^2 + V(q_i), \quad (\text{B.2})$$

En la mecánica cuántica la evolución de la función de onda $\Psi(\mathbf{q}, t)$ y la ecuación de movimiento es la *ecuación de Schrödinger*.

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.3})$$

Al aplicar una transformación gauge $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\Lambda$, cambiará el hamiltoniano de la ecuación (B.2). Sin embargo, la transformación gauge no puede tener consecuencias físicas. Por tanto, la única manera de conseguir que la función de onda siga satisfaciendo la ecuación de Schrödinger es añadirle un factor de fase $e^{ieA/\hbar}$. Es justo este cambio de fase el que utiliza el efecto Aharonov-Bohm [2]. El experimento es

el siguiente [1]: considera una fuente de electrones colocada frente a una pantalla (detector). Entre la fuente de electrones y pantalla se introduce un solenoide por el cual pasa una corriente (ver figura B.1). El solenoide genera un campo magnético $\mathbf{B} = 0$ fuera y $\mathbf{B} = I\mathbf{e}_z$ dentro del solenoide. Tomando por

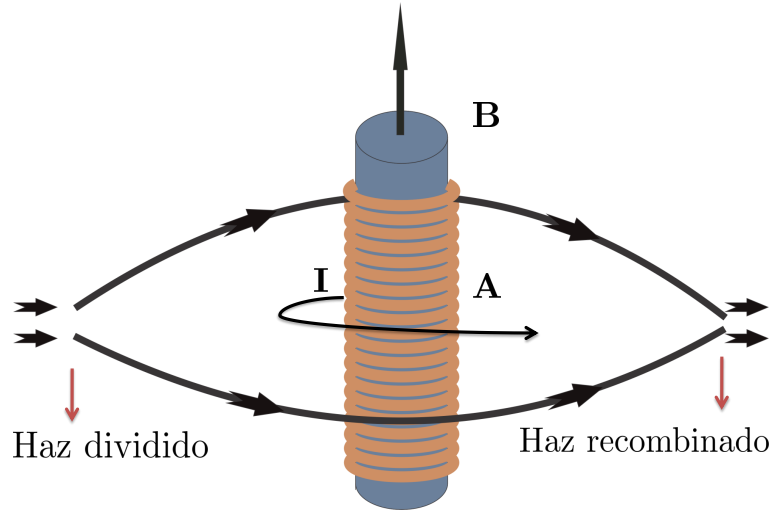


Figura B.1: El efecto Aharonov-Bohm: electrones emitidos por una fuente, pasan alrededor de un solenoide. El campo magnético \mathbf{B} fuera del solenoide es cero, sin embargo, el potencial \mathbf{A} no. Clásicamente, los electrones no están influenciados por el flujo magnético dentro del solenoide. Cuánticamente la función de ondas adquiere una fase, que modifica el patrón de interferencias.

simplicidad el radio del solenoide a cero, manteniendo el flujo magnético $\Phi = \int \int d^2q \mathbf{B} \cdot \mathbf{n}$ constante, el potencial que genera este campo magnético es en coordenadas cilíndricas (con el eje z a lo largo del solenoide) es

$$\mathbf{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \mathbf{e}_\phi, \quad (\text{B.4})$$

utilizando la ecuación anterior se puede comprobar que $\mathbf{B} = 0$ en todo el espacio, menos en el origen $r = 0$.

Clásicamente los electrones no notan la presencia del flujo magnético, puesto que $\mathbf{B} = 0$ a lo largo de toda su trayectoria (y por tanto la fuerza de Lorentz es cero). Sin embargo, en la mecánica cuántica, al conectar el flujo, la función de ondas de los electrones adquiere un factor de la fase

$$\Psi_0(\mathbf{r}) \rightarrow \Psi_{(\mathbf{A})} = \exp\left(-\frac{ie}{\hbar} \int_{\infty}^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}')\right) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}). \quad (\text{B.5})$$

Debido a esta fase, el comportamiento en la pantalla será diferente. La probabilidad de encontrar el electrón en la posición \mathbf{q} viene dado por el cuadrado de la norma de la suma de las dos contribuciones, una por cada camino γ_1 y γ_2 , por encima y por debajo del solenoide, respectivamente, (ver figura B.2).

$$P |\Psi_{\gamma_1}(\mathbf{r}) + \Psi_{\gamma_2}(\mathbf{r})|^2. \quad (\text{B.6})$$

En general, la contribución de los dos caminos causará un patrón de interferencias en la pantalla, debido a que en algunos puntos las dos contribuciones se anulan, mientras en otros puntos se suman.

Es importante mencionar que, aunque los electrones no notan en ningún momento el campo magnético,

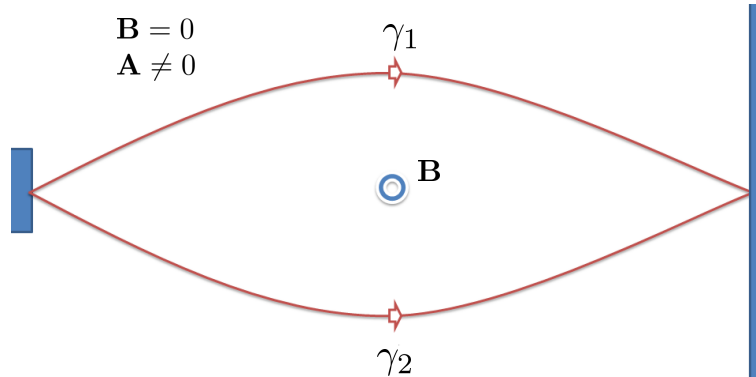


Figura B.2: Vista superior de la configuración experimental del efecto Aharonov Bohm

la probabilidad P será distinta para $\Phi = 0$ que para $\Phi \neq 0$. En general se tiene que

$$P \left| \exp\left(\frac{-ie}{\hbar} \int_{\gamma_1} \mathbf{dr}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}')\right) \Psi_{\gamma_1}^{(0)}(\mathbf{r}) + \exp\left(\frac{-ie}{\hbar} \int_{\gamma_2} \mathbf{A}(\mathbf{r}')\right) \Psi_{\gamma_2}^{(0)}(\mathbf{r}) \right|^2, \quad (\text{B.7})$$

$$= \left| \exp\left(\frac{-ie}{\hbar} \int_{\gamma_1} \mathbf{dr}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}')\right) \right|^2 \cdot \left| \exp\left(\frac{-ie}{\hbar} \int_{\gamma_1 - \gamma_2} \mathbf{dr}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}')\right) \Psi_{\gamma_1}^{(0)}(\mathbf{r}) + \Psi_{\gamma_2}^{(0)}(\mathbf{r}) \right|^2, \quad (\text{B.8})$$

$$= \left| e^{ie\Phi/\hbar} \Psi_{\gamma_1}^{(0)}(\mathbf{r}) \Psi_{\gamma_2}^{(0)}(\mathbf{r}) \right|^2, \quad (\text{B.9})$$

donde se ha usado que la integral de contorno de \mathbf{A} a lo largo de una trayectoria cerrada $\gamma = \gamma_1 - \gamma_2$ alrededor del solenoide es igual a Φ :

$$\oint_{\gamma} \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A} = \int \int d^2x (\nabla \times \mathbf{A} \cdot \mathbf{n}) = \int \int d^2x \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = \Phi. \quad (\text{B.10})$$

De la ecuación (B.7) es claro que la medición en la pantalla será diferente para $\Phi = 0$ y $\Phi \neq 0$. El factor de fase extra, en el caso de que el flujo magnético causa que el patrón de interferencias generado se desplace con respecto al caso sin flujo. Esto es sorprendente, puesto que el desplazamiento del patrón de interferencias es un efecto físico, mientras que los electrones sólo han podido interactuar con \mathbf{A} , puesto que $\mathbf{B} = 0$. ¿Significa esto que el potencial \mathbf{A} sí tiene significado físico? Aunque el campo magnético fuera del solenoide es cero, hay claramente un efecto físico debido a la presencia de \mathbf{A} . Sin embargo, como se puede ver en la expresión (B.10) este efecto es proporcional a Φ , el flujo de \mathbf{B} a través del solenoide. Mirando bien la fórmula (B.10), hay algo raro que debería llamar la atención. Dado que $\mathbf{B} = 0$, el potencial \mathbf{A} tiene que ser un gauge puro, es decir, $\mathbf{A} = \nabla\Lambda$.

Efectivamente, a partir de la ecuación (B.10), se tiene que

$$\Lambda = \frac{1}{2} \Phi \phi. \quad (\text{B.11})$$

Sin embargo, la integral sobre una curva cerrada de un gradiente (el rotacional de un gradiente) es cero, mientras la contribución en la expresión (B.10) da un resultado finito Φ , justo el efecto físico.

APÉNDICE C

Evaluación numérica del propagador

Cuando se quiere ver la evolución de un sistema, se hace necesario implementar el operador de evolución temporal \hat{U} . Suponga que posee un hamiltoniano estándar independiente del tiempo, es decir, con energía cinética $\hat{T} = \hat{p}^2/2m$ y energía potencial $\hat{V} = V(\hat{q})$. El operador unitario de evolución temporal se escribe

$$\hat{U} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \quad (\text{C.1})$$

y el hamiltoniano obedece a la ecuación de valores propios

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (\text{C.2})$$

En representación de la posición, se tiene que

$$\begin{aligned} \langle q|\hat{U}|q'\rangle &= \langle q|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|q'\rangle \\ &= \sum_{n,n'} \langle q|n'\rangle \langle n'|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|n\rangle \langle n|q'\rangle \\ &= \sum_{n,n'} \psi_{n'}(q) \psi_n^*(q') \langle n'|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|n\rangle \\ &= \sum_{n,n'} \psi_{n'}(q) \psi_n^*(q') e^{\frac{i}{\hbar}E_n t} \langle n'|n\rangle \\ &= \sum_{n,n'} \psi_{n'}(q) \psi_n^*(q') e^{\frac{i}{\hbar}E_n t} \delta_{n,n'} \\ &= \sum_n \psi_n(q) \psi_n^*(q') e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Para el caso particular del oscilador de Morse discutido en la sección 4.3, las autofunciones $\psi_n(q)$ pueden derivarse analíticamente (ver Ref. [5]).

Para obtener el propagador de Wigner numéricamente, se usó una expresión alterna a la ecuación (3.6) derivada en la Ref. [22] (ver sección 2.3.2 en esa referencia), específicamente,

$$\begin{aligned} G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\tilde{q}' \int d\tilde{q}'' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p' \tilde{q}' - p'' - \tilde{q}'') \right\} \\ &\times \hat{U}^* \left(q'' - \frac{\tilde{q}''}{2}, t; q' - \frac{\tilde{q}'}{2}, 0 \right) \hat{U} \left(q'' - \frac{\tilde{q}''}{2}, t; q' - \frac{\tilde{q}'}{2}, 0 \right). \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Con el fin de evaluar numéricamente la expresión (C.1) se hace necesario restringir la dimension del espacio de Hilbert a una dimensión finita $D_{\mathcal{H}}$, esto implica que es necesario reescribir esta expresión. En este proceso debe tenerse en cuenta que los argumentos del propagador ahora denotan números enteros y hacen referencia a los índices de las matrices U y U^* . Por tanto, el caso de índices impares requiere de cuidado. Este problema se resuelve calculando el propagador de Wigner como [22]

$$G_W(\mathbf{r}'', t; \mathbf{r}', 0) = \frac{1}{D_{\mathcal{H}}} \sum_{\tilde{q}' = -D_{\mathcal{H}}/2}^{D_{\mathcal{H}}/2-1} \sum_{\tilde{q}'' = -D_{\mathcal{H}}/2}^{D_{\mathcal{H}}/2-1} \exp\{2\pi i(p' \tilde{q}' - p'' \tilde{q}'')/D_{\mathcal{H}}\} \overline{UU}(q', q''; \tilde{q}', \tilde{q}'') \quad (\text{C.5})$$

donde

$$\overline{UU}(q', q''; \tilde{q}', \tilde{q}'') = \begin{cases} UU(q', q''; \tilde{q}', \tilde{q}''), & \tilde{q}' \text{ y } \tilde{q}'' \text{ son pares,} \\ \frac{1}{\pi} \sum_{\tilde{q}' = -D_{\mathcal{H}}/2}^{D_{\mathcal{H}}/2-1} \frac{(-1)^{\tilde{q}' - \tilde{q}'}}{\tilde{q}' - \mathbf{q} + \frac{1}{2}} UU(q', q''; \tilde{q}', \tilde{q}''), & \tilde{q}' \text{ par y } \tilde{q}'' \text{ impar,} \\ \frac{1}{\pi} \sum_{\tilde{q}' = -D_{\mathcal{H}}/2}^{D_{\mathcal{H}}/2-1} \frac{(-1)^{\tilde{q}' - \tilde{q}'}}{\tilde{q}' - \mathbf{q} + \frac{1}{2}} UU(q', q''; \tilde{q}', \tilde{q}''), & \tilde{q}' \text{ impar y } \tilde{q}'' \text{ par,} \\ \frac{1}{\pi} \sum_{\tilde{q}' = -D_{\mathcal{H}}/2}^{D_{\mathcal{H}}/2-1} \frac{(-1)^{\tilde{q}' - \tilde{q}'}}{\tilde{q}' - \mathbf{q} + \frac{1}{2}} \frac{1}{\pi} \sum_{\tilde{q}'' = -D_{\mathcal{H}}/2}^{D_{\mathcal{H}}/2-1} \frac{(-1)^{\tilde{q}'' - \tilde{q}''}}{\tilde{q}'' - \mathbf{q} + \frac{1}{2}} UU(q', q''; \tilde{q}', \tilde{q}'') & \tilde{q}' \text{ impar y } \tilde{q}'' \text{ impar,} \end{cases}$$

con

$$UU(q', q''; \tilde{q}', \tilde{q}'') = \begin{cases} \hat{U}^* \left(q'' - \frac{\tilde{q}''}{2}, t; q' - \frac{\tilde{q}'}{2}, 0 \right) \hat{U} \left(q'' - \frac{\tilde{q}''}{2}, t; q' - \frac{\tilde{q}'}{2}, 0 \right), & \tilde{q}' \text{ y } \tilde{q}'' \text{ son pares,} \\ \hat{U}^* \left(q'' - \frac{\tilde{q}''+1}{2}, t; q' - \frac{\tilde{q}'}{2}, 0 \right) \hat{U} \left(q'' - \frac{\tilde{q}''-1}{2}, t; q' - \frac{\tilde{q}'}{2}, 0 \right), & \tilde{q}' \text{ par y } \tilde{q}'' \text{ impar,} \\ \hat{U}^* \left(q'' - \frac{\tilde{q}''}{2}, t; q' - \frac{\tilde{q}'+1}{2}, 0 \right) \hat{U} \left(q'' - \frac{\tilde{q}''}{2}, t; q' - \frac{\tilde{q}'-1}{2}, 0 \right), & \tilde{q}' \text{ impar y } \tilde{q}'' \text{ par,} \\ \hat{U}^* \left(q'' - \frac{\tilde{q}''+1}{2}, t; q' - \frac{\tilde{q}'+1}{2}, 0 \right) \hat{U} \left(q'' - \frac{\tilde{q}''-1}{2}, t; q' - \frac{\tilde{q}'-1}{2}, 0 \right), & \tilde{q}' \text{ impar y } \tilde{q}'' \text{ impar.} \end{cases}$$

El área trabajo se define como $\frac{-D_{\mathcal{H}}}{2} + |q'| \leq \frac{q''}{2} < \frac{-D_{\mathcal{H}}}{2} - |q'|$. Debido al extenso y tedioso trabajo al calcular las combinaciones impar-par e impar-impar, puede restringirse el cálculo sólo a la combinación par-par que seria equivalente a trabajar con la mitad de la resolución. El carcter finito de este espacio de trabajo da lugar a una constante de Planck efectiva. Para ver esto, puede tomarse la posición y el momento en intervalos de longitud L y M , respectivamente, los cuales se almacenan en vectores de tamaño $D_{\mathcal{H}}$, la constante de Planck efectiva estará dado por $\hbar = LM/(2\pi D_{\mathcal{H}})$. Esta relación es particularmente importante si se desea evaluar (C.5) usando algoritmos de transformada de Fourier rápida (FFT).

Bibliografía

- [1] Y. Aharonov and D. Bohm. Further considerations on electromagnetic potentials in the quantum theory. *Phys. Rev.*, 123:1511–1524, 1961.
- [2] Y. Aharonov, H. Pendleton, and A. Petersen. Modular variables in quantum theory. *Int. J. Theor. Phys.*, 2:213–230, 1969.
- [3] Harry Buhrman, Richard Cleve, Serge Massar, and Ronald de Wolf. Nonlocality and communication complexity. *Rev. Mod. Phys.*, 82:665–698, 2010.
- [4] T.Y. Cao. *Conceptual Foundations of Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, 2004.
- [5] Jens Peder Dahl and Michael Springborg. The morse oscillator in position space, momentum space, and phase space. *The Journal of Chemical Physics*, 88(7), 1988.
- [6] T. Dittrich, E. A. Gómez, and L. A. Pachón. Semiclassical propagation of Wigner functions. *J. Chem. Phys.*, 132:214102, 2010.
- [7] T. Dittrich and L. A. Pachón. Time-domain scars: resolving the spectral form factor in phase space. *Phys. Rev. Lett.*, 102:150401, 2009.
- [8] T. Dittrich, C. Viviescas, and L. Sandoval. Semiclassical propagator of the Wigner function. *Phys. Rev. Lett.*, 96:070403, 2006.
- [9] R. P. Feynman and A. R. Hibbs. *Quantum physics and path integrals*. McGraw–Hill, New York, 1965.
- [10] K. Fujikawa and H. Suzuki. *Path Integrals and Quantum Anomalies*. International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, 2004.
- [11] Kôdi Husimi. Some Formal Properties of the Density Matrix. *Nippon Sugaku-Buturigakkwai Kizi Dai 3 Ki*, 22(4):264–314, 1940.
- [12] Charles Jaff and Paul Brumer. Classicalquantum correspondence in the distribution dynamics of integrable systems. *The Journal of Chemical Physics*, 82(5), 1985.
- [13] Pfau T. Mlynek J. Kurtsiefer, Ch. Measurement of the Wigner function of an ensemble of helium atoms. *Nature*, 386(150), 1997.
- [14] R. Leighton M. Sands, R. Feynman. *The Feynman Lectures on Physics*, volume III. Addison-Wesley, 1965.
- [15] M. S. Marinov. A new type of phase-space integrals. *Phys. Lett. A*, 153:5, 1991.
- [16] M.S. Marinov. Path integrals in quantum theory: An outlook of basic concepts. *Physics Reports*, 60(1):1 – 57, 1980.
- [17] Catalin Miron, Christophe Nicolas, Oksana Travnikova, Paul Morin, Yuping Sun, Faris Gelmukhanov, Nobuhiro Kosugi, and Victor Kimberg. Imaging molecular potentials using ultrahigh-resolution resonant photoemission. *Nature Phys.*, (2):135138, 2011.

-
- [18] Christine A. Muschik, Klemens Hammerer, Eugene S. Polzik, and Ignacio J. Cirac. Quantum teleportation of dynamics and effective interactions between remote systems. *Phys. Rev. Lett.*, 111:020501, Jul 2013.
- [19] J. Oppenheim and S. Wehner. The uncertainty principle determines the nonlocality of quantum mechanics. *Science*, 330:1072, 2010.
- [20] Nobuyuki Osakabe, Tsuyoshi Matsuda, Takeshi Kawasaki, Junji Endo, Akira Tonomura, Shinichiro Yano, and Hiroji Yamada. Experimental confirmation of aharonov-bohm effect using a toroidal magnetic field confined by a superconductor. *Phys. Rev. A*, 34:815–822, 1986.
- [21] C. E. Pachon and L. A. Pachon. The Origin of the Dynamical Quantum Non-locality. *ArXiv e-prints*, July 2013.
- [22] L. A. Pachón. *Coherence and Decoherence in the Semiclassical propagation of the Wigner function*. PhD thesis, Universidad Nacional de Colombia, 2010.
- [23] L. A. Pachón, T. Dittrich, and G.-L. Ingold. Non-Markovian dissipative semiclassical propagator of the Wigner function. *In preparation.*, 2011.
- [24] L. A. Pachón, T. Dittrich, and G.-L. Ingold. Non-Markovian dissipative semiclassical propagator of the Wigner function. *In preparation.*, 2011.
- [25] S. Popescu. Dynamical quantum non-locality. *Nature Phys.*, 6:151, 2010.
- [26] M.A. Schlosshauer. *Decoherence: And the Quantum-To-Classical Transition*. The Frontiers Collection. Textstream, 2007.
- [27] Jeff Tollaksen. Dynamical quantum nonlocality. *AIP Conf. Proc.*, 1327:269, 2011.
- [28] Jeff Tollaksen, Yakir Aharonov, Aharon Casher, Tirzah Kaufherr, and Shmuel Nussino. Quantum interference experiments, modular variables and weak measurements. *New J. Phys.*, 12:013023, 2010.
- [29] H. Weyl. Quantenmechanik und gruppentheorie. *Zeitschrift fr Physik*, 46(1-2):1–46, 1927.
- [30] E. Wigner. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. *Phys. Rev.*, 40:749–759, Jun 1932.
- [31] W. H. Zurek. Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. *Rev. Mod. Phys.*, 54:685, 1982.
- [32] Wojciech H. Zurek. Decoherence and the transition from quantum to classical. *Print edition*, 44(10), 1991.