

Trabajo Fin de Grado-Grado en Físicas

EL LÍMITE CLÁSICO EN SISTEMAS CUÁNTICOS E HÍBRIDOS

Director:
Jesús Clemente Gallardo

Autor:
Andrés Bea Bragado

Curso 2024-2025

Abstract:

En este trabajo buscamos una forma de implementar una formulación unificada entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica para así poder entender el límite entre ambas dinámicas, dejando abierta la puerta a plantear modelos con una parte híbrida de ambas mecánicas y una parte puramente cuántica. Todo ello con el objetivo de poder simular átomos y moléculas de una forma más simplificada.

Agradecimientos:

Quería comenzar estos agradecimientos dando el reconocimiento a mi tutor, por toda la ayuda a la hora de entender la materia y alimentar mi curiosidad por el bonito campo que es la física cuántica y teórica en general. Darle también las gracias por su disponibilidad, aun teniendo en cuenta que puedo llegar a ser algo 'cansino'. Querría continuar dándole las gracias a mi familia, a mi madre y a mi padre, por siempre mantenerme con los pies en el suelo, por darme la oportunidad de estudiar lo que quería y darme siempre amor incondicional. A mi hermano por ser un modelo a seguir y por todos esos ratos de juego y de apoyo mutuo. No me puedo olvidar de mis abuelos; a mi abuela, por siempre tener un plato de comida y una historia que contarme de su juventud. Para terminar con la familia, mi abuelo, por ayudarme tantas veces a estudiar y a memorizar, por todos los viajes juntos a conocer cualquier rincón y por todos los paseos sin rumbo en lo que me enseñabas como funcionaba todo. Siguiendo me gustaría agradecer a mi novia, Paula, lo primero por aguantarme cuando me daban bajones o me quería rendir, por darme esos empujones a mejorar y por ser un 'sol' cuando hace falta. Continuar agradeciendo a mi mejor amigo de toda la vida, Óscar, que me conoce desde los 3 años y que nunca me ha fallado y se le puede contar cualquier cosa. También agradecer a Iñigo, por todos los paseos y rutas por Villanueva para despejar la cabeza. Puesto que no quiero sonar muy 'ñoño', voy a terminar por aquí, antes de emocionarme, concluyendo con gracias a toda esa gente que es parte de mi vida y me ayuda a seguir adelante, a no tirar la toalla cuando ya no me dan las fuerzas.

Índice

1. Introducción	1
2. Marco teórico	2
2.1. Formalismo de Koopman	2
2.2. Función de Wigner	3
2.3. Preparación de los modelos	6
2.4. Descripción de la dinámica	6
2.4.1. Estudio de la parte clásica	7
2.4.2. Estudio de la parte cuántica	8
2.4.3. Estudio del caso unificado	9
3. Experimentos numéricos	14
3.1. Caso clásico	14
3.2. Caso unificado	21
3.3. Comparación entre el caso unificado y los casos cuánticos y clásicos	21
4. Conclusiones y líneas de trabajo futuras	24
5. Bibliografía	25
6. Anexos	26
6.1. Teorema de Ehrenfest	26
6.2. Teorema de Stone	26
6.3. Cálculo de Weyl	27
6.4. Cálculo de la evolución temporal de la función de Wigner	29
6.5. Resumen de la mecánica hamiltoniana geométrica	31
6.6. Cálculo exacto del oscilador armónico cuántico	32
6.7. Cálculo exacta del oscilador armónico clásico	33
6.8. Tiempo de simulación	34
6.9. Caso unificado parte 2	35
6.10. Códigos clásico 1	37
6.11. Código clásico 2	39
6.12. Código unificado	42
6.13. Código Unificado 2	45
6.14. Código Wigner	45

1. Introducción

Uno de los problemas que surgieron desde el nacimiento de la mecánica cuántica (MQ) es el límite a partir del cual es necesario prescindir de la mecánica clásica (MC) y comenzar a estudiar desde un punto de vista cuántico. Uno podría pensar que la solución es modelizarlo todo desde dicha vista y prescindir completamente de las representaciones anteriores. Sin embargo los efectos cuánticos solo son patentes en escalas muy pequeñas que en muchas ocasiones no son detectables experimentalmente, y por tanto carece de sentido representarlos. Otro problema que surge a la idea de usar únicamente teorías cuánticas es la complejidad operacional que esta modelización encierra. Por ejemplo, un sistema clásico en $1D$ se puede modelizar con 2 grados de libertad, y para componer sistemas usamos el producto cartesiano de espacios, lo que genera que para N partículas lo modelicemos como $2N$ grados de libertad. Sin embargo, para M partículas cuánticas con spin $1/2$ la composición se lleva a cabo a partir del producto tensorial, haciendo que los grados de libertad escalen como 2^M . Visualizando ambas dependencias se observa claramente la diferencia en complejidad. El problema incluso es más acusado si tenemos en cuenta problemas en espacios de Hilbert de dimensión infinita.

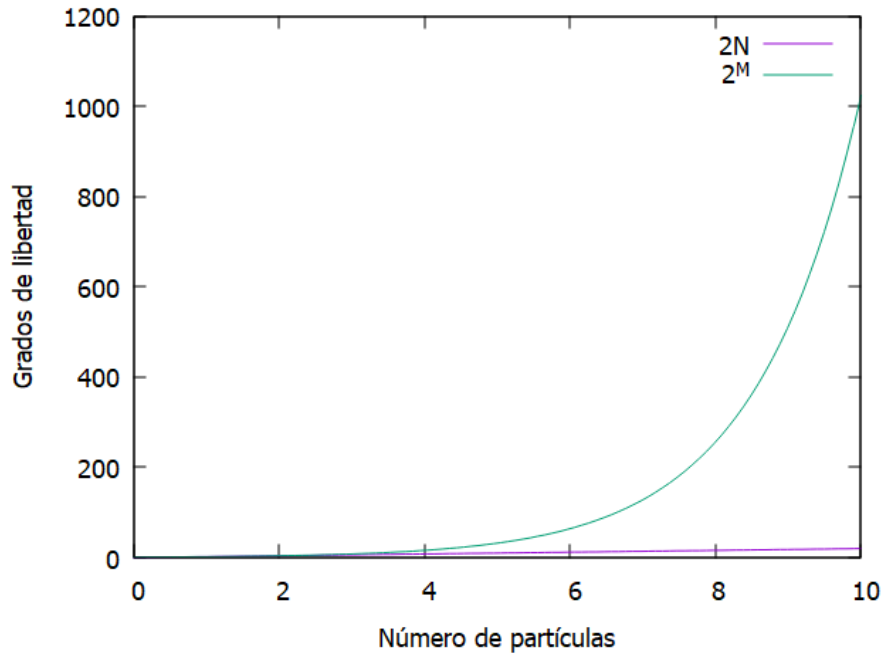


Figura 1. N^2 frente a 2^M

Todo lo visto anteriormente motiva el uso de aproximaciones como la de *Born – Oppenheimer* para modelizar sistemas complejos como son átomos con Z alto, donde el núcleo se considera clásico y la nube de electrones se acopla de forma cuántica. Cuando esta aproximación no es suficiente se pueden buscar modelos más complicados en los que los grados de libertad clásicos y cuánticos evolucionan acoplados. En este trabajo buscamos analizar el límite a partir del cual podemos prescindir de la mecánica cuántica sin perder las propiedades observables experimentalmente. Para ello vamos a estudiar los formalismos de *Koopman* y *ODM*, que permite definir en el espacio de Hilbert una familia de modelos mediados por un parámetro continuo que indica su naturaleza. A partir de ello vamos a realizar experimentos numéricos con el objetivo de entender cómo converge y cómo la no-conmutatividad del álgebra de observables puede emplearse para modelizar la transición entre ambas dinámicas. Como posibilidad a futuro comentaremos el implementar sistemas híbridos en los cuales acoplar mecánica clásica y cuántica.

2. Marco teórico

Partiendo de primeros principios, la MQ se define sobre un espacio de Hilbert, pudiendo variar de dimensión finita a infinita. Sobre ello se construye un álgebra con sus relaciones de conmutación bien definidas y una teoría de probabilidad basada en funciones, observables y una serie de axiomas. Para definir la evolución de un sistema en MQ partimos de la ecuación de Schrödinger en función del Hamiltoniano:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle \quad (1)$$

Mientras que para el caso clásico podemos usar la ecuación de Liouville como modelo dinámico de la curva de evolución del sistema. Tomando un espacio de fases (q, p) , la evolución de la función densidad $\rho(x, p; t)$ sometido a un potencial $U(x)$ es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \left[\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p} \right] \rho = 0 \quad (2)$$

Puesto que queremos unificar ambas representaciones, carece de sentido hacerlo para un sistema clásico aislado, ya que éste presenta un carácter determinista que en la formulación de la mecánica cuántica sería imposible. Por tanto basaremos todo el trabajo en mecánica estadística, que permite esa representación probabilística que necesitamos para que ambos formalismos converjan. Encima de eso nos centraremos en el formalismo de Koopman para expresar la parte clásica, ya que hay que construirla sobre un espacio de Hilbert. En el caso de la parte cuántica también será necesario introducir la función de Wigner para poder estudiar el espacio de fases correctamente.

2.1. Formalismo de Koopman

Como acabamos de citar, necesitamos del formalismo de Koopman para poder escribir la mecánica clásica sobre un espacio de Hilbert y poder definir operadores. El desarrollo está basado en la referencia [1], que a su vez se basa en el trabajo original de Koopman en [2]. Comenzamos tomando un sistema Hamiltoniano clásico definido sobre una variedad simpléctica $(\mathcal{P}, \Omega)$, es decir, que contiene una dos-forma Ω cerrada y no degenerada (para un resumen de la mecánica geométrica ver 6,5). El espacio clásico $\mathcal{P}$ cuenta con una forma canónica de volumen $d\mu$ que consiste en el producto exterior de n copias de Ω , donde $2n$ es la dimensión de $\mathcal{P}$.

$$d\mu := \Omega \wedge \dots \wedge \Omega \quad (3)$$

Podemos entonces tomar un espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathcal{P}, d\mu)$ de funciones de cuadrado integrable en $\mathcal{P}$:

$$\mathcal{L}^2(\mathcal{P}, d\mu) = \left\{ f : \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{C} \mid \int d\mu |f|^2 < \infty \right\} \quad (4)$$

Con un producto hermítico interno:

$$\langle f | g \rangle = \int d\mu f^\dagger g \quad (5)$$

Para cualquier par f, g que pertenezcan a $\mathcal{L}^2$. La proposición de Koopman era que cualquier transformación canónica sobre $\mathcal{P}$, véase una aplicación que deje el paréntesis de Poisson invariante,

$$\psi : \mathcal{P} \rightarrow \mathcal{P} \quad (6)$$

da lugar a un operador unitario en $\mathcal{L}^2(\mathcal{P}, d\mu)$.

$$U(f) := \psi^* f = f \circ \psi \quad f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{P}, d\mu) \quad (7)$$

U tiene la característica de ser lineal y biyectivo, lo que permite que cualquier $g \in \mathcal{L}^2(\mathcal{P}, d\mu)$ se pueda representar como $g = U(f)$ para algún $f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{P}, d\mu)$, tal que $f = g \circ \psi^{-1}$. Esta propiedad nos permite, a partir de funciones, definir operadores sobre el espacio de Hilbert. Además U es una isometría debido a la invarianza de $d\mu$ bajo ψ :

$$\|U(f)\|^2 = \int_{\mathcal{P}} d\mu(x) |f(\psi(x))|^2 = \int_{\mathcal{P}} d\mu |f(x)|^2 = \|f\|^2 \quad (8)$$

Con todo esto definido, tomemos ahora un $H \in C^\infty(\mathcal{P})$ que llamaremos hamiltoniano y F_t que corresponde con el flujo hamiltoniano sobre $\mathcal{P}$.

$$(x(t), p(t)) = F_t(x_0, p_0) \quad t \in [a, b] \quad (9)$$

Con ello, F_t define una transformación canónica en $\mathcal{P}$ y, si el flujo es completo, es decir, está bien definido en todo $t \in \mathbb{R}$ entonces:

$$U(t)(f) = f \circ F_t \quad (10)$$

Define un grupo unitario de transformaciones $\mathcal{L}^2(\mathcal{P}, d\mu)$ tal que:

$$\hat{U}(t) := e^{-i\hat{L}t} \quad (11)$$

Donde $\hat{L} := iX_H$ es el operador de Koopman y X_H se corresponde con el campo vectorial Hamiltoniano, que por el teorema de Stone (ver (6.2)) es autoadjunto y unitario. En representación x y p tendríamos:

$$L = -i \left(\frac{\partial H}{\partial x^k} \frac{\partial}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial}{\partial x^k} \right) \quad (12)$$

Con ello bajo el formalismo de Koopman podemos escribir la mecánica clásica en una forma que se asemeja a la ecuación de Schrödinger:

$$i \frac{d}{dt} f = \hat{L} f \quad (13)$$

2.2. Función de Wigner

Merece la pena tratar la función de Wigner en algo de profundidad, ya que serán una herramienta clave para entender los experimentos numéricos y el caso unificado.

Basándonos en el trabajo [3], que se basa en el original de Wigner [4], podemos introducir dicha función como una representación alternativa, surgida en 1932 de manos de Wigner, a las funciones de onda en mecánica cuántica. Esta función permite, con un solo objeto matemático, encapsular la evolución de un sistema sobre el espacio de fases y, en muchos casos, relacionar con la mecánica clásica. Sin embargo la función de Wigner, que busca representar la probabilidad de dicho sistema, presenta el problema de ser una cuasi-probabilidad, ya que cuenta con regiones de probabilidad negativa por lo que no tiene una interpretación directa física. Para enunciarla debemos partir primero del espacio de fases en x y p . En MQ , definiremos entonces dos probabilidades para el espacio de fase relacionadas por la transformada de Fourier y usando que $p = \hbar k$.

$$P(x) = |\psi(x)|^2 \quad P(k) = |\phi(k)|^2 \quad \phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x) e^{-ikx} \quad (14)$$

Uno querría tener un objeto matemático que encapsulase a la vez la probabilidad de medir x y medir p para poder obtener valores esperados de operadores $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$ en el espacio de fases.

$$\langle A \rangle = \int \int dx dp P(x, p) A(x, p) \quad (15)$$

Eso es lo que intenta reproducir la función de Wigner, sin embargo por el principio de incertidumbre de Heissenberg es imposible tener una función de probabilidad estricta para ello, de ahí que se defina como una cuasi-probabilidad con zonas negativas.

Para poder construir la función de Wigner va a ser necesario usar un nuevo formalismo para la mecánica cuántica basada en el espacio de fase, lo que nos crea la necesidad de tener un mapa que relacione los operadores del espacio de Hilbert en la visión de Schrödinger con dicho espacio. Para ello podemos usar la transformación de Weyl. Nos definimos:

$$\bar{A}(x, p) = \int dy \langle x + y/2 | \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) | x - y/2 \rangle e^{-ipy/\hbar} \quad (16)$$

Esta transformación toma un operador en un espacio de Hilbert y lo representa como una función de x y p . Además cuenta con una propiedad de gran importancia para el desarrollo.

$$Tr(\hat{A}\hat{B}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int dx dp \bar{A}(x, p) \bar{B}(x, p) \quad (17)$$

Cabe demostrar esta propiedad, para ello tomamos la transformada de Weyl de cada uno de ellos y escribimos:

$$\begin{aligned} & \int \int dx dp \bar{A}(x, p) \bar{B}(x, p) = \\ & = \int \int \int \int dx dp dy dy' \langle x + y/2 | \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) | x - y/2 \rangle \langle x + y'/2 | \hat{B}(\hat{x}, \hat{p}) | x - y'/2 \rangle e^{-\frac{ip(y+y')}{\hbar}} \end{aligned} \quad (18)$$

Usando el siguiente resultado para poder integrar sobre y' :

$$\int dy e^{ipy/\hbar} = 2\pi\hbar\delta(y); \quad \int \int dx dp \bar{A}(x, p) \bar{B}(x, p) = \quad (19)$$

$$\begin{aligned} & = \int \int \int \int dx dp dy dy' \langle x + y/2 | \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) | x - y/2 \rangle \langle x + y'/2 | \hat{B}(\hat{x}, \hat{p}) | x - y'/2 \rangle \delta(y + y') \\ & = 2\pi\hbar \int \int dx dy \langle x + y/2 | \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) | x - y/2 \rangle \langle x - y/2 | \hat{B}(\hat{x}, \hat{p}) | x + y/2 \rangle \end{aligned} \quad (20)$$

Haciendo un cambio de variable $u = x - y/2$ y $v = x + y/2$, la expresión se simplifica a:

$$\begin{aligned} \int \int dx dp \bar{A}(x, p) \bar{B}(x, p) & = 2\pi\hbar \int \int du dv \langle v | \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) | u \rangle \langle u | \hat{B}(\hat{x}, \hat{p}) | v \rangle = \\ & = 2\pi\hbar Tr(\hat{A}\hat{B}) \end{aligned} \quad (21)$$

Con eso queda probada la relación (17).

Continuando con la función de Wigner, tomamos la matriz densidad del sistema a estudiar, definida sobre un sistema puro como:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi| \quad \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle = \psi(x) \psi^*(x') \quad (22)$$

Una propiedad de la matriz densidad, si los $|\psi\rangle$ están normalizados, es que su traza es 1.

$$Tr[\hat{\rho}] = \sum_n \langle n | \hat{\rho} | n \rangle = \sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (23)$$

Usando esta propiedad podemos obtener el valor esperado de $\hat{A}$ como:

$$\langle \hat{A} \rangle = Tr[\hat{\rho}\hat{A}] = \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | \hat{A} | n \rangle = \sum_n \langle \psi | \hat{A} | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (24)$$

Con esto usando, la ecuación (17) podemos escribir:

$$\langle A \rangle = Tr[\hat{\rho}\hat{A}] = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int dx dp \bar{\rho}(x, p) \bar{A}(x, p) \quad (25)$$

De esta expresión es directo deducir la función de Wigner:

$$W(x, p) = \frac{\bar{\rho}}{2\pi\hbar} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dy \psi(x + y/2) \psi^*(x - y/2) e^{-ipy/\hbar} \quad (26)$$

Y repitiendo la ecuación (15) tenemos la cuasi-probabilidad para obtener valores esperados.

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \int dx dp W(x, p) \bar{A}(x, p) \quad (27)$$

En general, la transformada de Weyl no es fácil de realizar, sin embargo, en el caso en el que el operador a medir no tenga términos cruzados en x y p , los cálculos se simplifican mucho. Supongamos un operador $\hat{A}$ que solo depende de x :

$$\bar{A}(x) = \int dy \langle x + y/2 | \hat{A} | x - y/2 \rangle e^{-ipy/\hbar} = \int dy \langle x | \hat{A} | x \rangle e^{-ipy/\hbar} \delta(y) = A(x) \quad (28)$$

En el caso de p , la transformada de Weyl se puede definir en términos del momento y por tanto el cálculo es análogo. Como se vera en la sección (2.4.3), en la ecuación (91), quedará claro que la función obtenida es proporcional a la función de Wigner y por tanto se comportará igual a la misma. Dos propiedades que se obtienen de forma casi directa de la función de Wigner son que está normalizada sobre el espacio de fase y que siempre toma valores reales:

$$Tr[\hat{\rho}\mathbb{1}] = 1 = \int \int dx dp W(x, p) \mathbb{1} = \int \int dx dp W(x, p) \quad (29)$$

$$\begin{aligned} W^*(x, p) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int dy e^{ipy/\hbar} \psi^*(x + y/2) \psi(x - y/2); y \rightarrow -y \Rightarrow \\ \Rightarrow W^*(x, p) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int dy e^{-ipy/\hbar} \psi^*(x - y/2) \psi(x + y/2) = W(x, p) \end{aligned} \quad (30)$$

Solo nos queda ver de dónde viene que sea una cuasi-probabilidad. Supongamos que tomamos dos matrices densidad $\hat{\rho}_a$ y $\hat{\rho}_b$ tales que provienen de dos estados distintos ortogonales entre sí.

$$Tr[\hat{\rho}_a, \hat{\rho}_b] = \int \int dx dp W_a(x, p) W_b(x, p) = |\langle \psi_a | \psi_b \rangle|^2 = 0 \quad (31)$$

Esto nos permite deducir la siguiente relación:

$$\int \int dx dp W_a(x, p) W_b(x, p) = 0 \quad (32)$$

Que solo se puede cumplir si una de ellas es 0 para todo el espacio, lo cual no se cumple ya que anularíamos todas las funciones de Wigner; o que haya regiones del espacio que tengan valores negativos, impidiendo que sea una probabilidad bien definida. Esta característica de valores negativos es consecuencia directa del principio de incertidumbre. También se puede demostrar que el módulo de la función de Wigner está acotado. Vamos a prescindir de demostrarlo y simplemente enunciar que $|W(x, p)| \leq \frac{1}{\pi\hbar}$.

2.3. Preparación de los modelos

Una vez unificado bajo el mismo espacio ambas representaciones, necesitamos una forma de escribir ambas evoluciones, que son esencialmente distintas, bajo una misma ecuación. Nos basaremos en la visión de Operacional Dynamic Modeling (ODM), que será la base de todo lo que resta del marco teórico (para verlo en más detalle ir a [5]). Necesitamos por tanto dos condiciones independientes para poder definir la cinemática en ambos casos a la vez: una forma de definir correctamente los valores esperados junto con su evolución y un álgebra de observables generalizada que encapsule tanto los cuánticos como clásicos.

Para la construcción nos basaremos en el teorema de Ehrenfest (ver 6.1), desde el cual, experimentalmente, se pueden deducir cosas como el álgebra de operadores y sus reglas de conmutación, cosa que nos permite plantear los modelos acordes a su álgebra.

Antes de definir evolución es necesario construir los valores esperados citados anteriormente. Partimos de $2N$ copias de un sistema, independientemente sean cuánticas o clásicas, y suponemos que para cada instante de tiempos $\{t_k\}_1^K$ medimos con absoluta precisión el momento $\{p_n(t_k)\}$ y posición $\{x_n(t_k)\}$ de los sistemas (usamos sistemas unidimensionales en pos de facilitar los desarrollos, y dos copias idénticas de cada uno para no alterar los resultados al medir). Con ello podemos reconstruir la evolución temporal de ambas magnitudes $x_n(t)$ y $p_n(t)$ interpolando las $2KN$ medidas.

El siguiente paso será definir los respectivos momentos l de las distribuciones $[\bar{x}(t)]^l = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N [x_n(t)]^l$ y $[\bar{p}(t)]^l = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N [p_n(t)]^l$ pudiendo, a partir de ellos, realizar una aproximación a las derivadas temporales de las medias $\bar{x}(t) = [\bar{x}(t)]^1$ y $\bar{p}(t) = [\bar{p}(t)]^1$ usando una expansión en coeficientes.

$$\frac{d}{dt}\bar{x}(t) = \sum_l (a_l [\bar{x}(t)]^l + b_l [\bar{p}(t)]^l) + \sum_{k,l \neq 0} c_{kl} [\bar{x}(t)]^l [\bar{p}(t)]^k \quad (33)$$

$$\frac{d}{dt}\bar{p}(t) = \sum_l (d_l [\bar{x}(t)]^l + e_l [\bar{p}(t)]^l) + \sum_{k,l \neq 0} f_{kl} [\bar{x}(t)]^l [\bar{p}(t)]^k \quad (34)$$

Centrándonos en el caso no disipativo, estas relaciones se reducen a las ya conocidas:

$$m \frac{d}{dt}\bar{x}(t) = \bar{p}(t) \quad \frac{d}{dt}\bar{p}(t) = -U'(x; t) \quad (35)$$

Donde $-U'(x; t) = \sum_l d_l [\bar{x}(t)]^l$

2.4. Descripción de la dinámica

Recuperando lo citado en la introducción, vamos a modelizar todo en función de la formulación de la mecánica cuántica (desde la visión de Schrödinger). Ésta se escribe sobre varios postulados. Los que nos interesan dicen: I) Los estados del sistema se representa por vectores $|\Psi\rangle$ sobre un espacio de Hilbert complejo y los observables son operadores autoadjuntos sobre dicho espacio. La composición de varios sistemas se compone del producto tensorial de los subsistemas que lo componen. II) El valor esperado de un observable $\hat{A}$ en un tiempo t es $\bar{A}(t) = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle$. III) La probabilidad de medir el valor a en un tiempo t al medir el observable $\hat{A}$ es $|\langle A | \Psi(t) \rangle|^2$, dado que $\hat{A} | A \rangle = a | A \rangle$.

Aunque estos axiomas se usen para definir la MQ , nada obliga a que sean únicamente válidos en ese entorno por lo que vamos a reescribir las ecuaciones (35) en función de estos postulados:

$$m \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{x} | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{p} | \Psi(t) \rangle \quad (36)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{p} | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t) | -U'(\hat{x}) | \Psi(t) \rangle \quad (37)$$

2.4.1. Estudio de la parte clásica

Entonces, usando el formalismo de Koopman vamos a aplicar ODM [5] ya que es el método que permitirá unificar ambas dinámicas. Tomemos que $\hat{x}$ y $\hat{p}$ son operadores autoadjuntos sobre $\mathcal{L}^2(\mathcal{P}, d\mu)$ que representan la posición y el momento respectivamente. Es directo de la experimentación comprobar que clásicamente la relación de conmutación entre ambos es:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = 0 \quad (38)$$

Este hecho encapsula dos resultados claves de la MC , podemos medir simultáneamente el momento y la posición con un precisión arbitraria y el orden de medida de observables es irrelevante. Tomando las ecuaciones ((36) y (37)) y aplicando la regla de la cadena tenemos:

$$\langle d\Psi(t)/dt | \hat{x} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \hat{x} | d\Psi(t)/dt \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{p}/m | \Psi(t) \rangle \quad (39)$$

$$\langle d\Psi(t)/dt | \hat{p} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \hat{p} | d\Psi(t)/dt \rangle = \langle \Psi(t) | -U'(\hat{x}) | \Psi(t) \rangle \quad (40)$$

Que a partir del teorema de *Stone* (ver 6.2) permite sustituir la siguiente relación en ambas ecuaciones:

$$i \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle = \hat{L} | \Psi(t) \rangle \quad (41)$$

Puesto que el resultado no puede depender del estado que se escoja podemos eliminar los valores esperados y obtener las siguientes relaciones para el operador $\hat{L}$:

$$i[\hat{L}, \hat{x}] = \hat{p}/m \quad i[\hat{L}, \hat{p}] = -U'(\hat{x}) \quad (42)$$

La condición de que momento y posición conmute impone una limitación en $\hat{L}$, $\hat{L}$ no puede depender únicamente de $\hat{x}$ y $\hat{p}$ ya que en ese caso ambos conmutadores se anulan y deja de existir dinámica. Es necesario extender nuestro conjunto de operadores con dos nuevos fuera del subespacio clásico que permitan imponer nuevas relaciones de conmutación que insuflen dinámica, λ_x y λ_p que cumplen:

$$[\hat{x}, \hat{\lambda}_x] = [\hat{p}, \hat{\lambda}_p] = i \quad (43)$$

Cualquier otro conjunto de parejas de estos operadores se anula. Haciendo uso del cálculo de Weyl (ver 6.3) podemos convertir las ecuaciones de conmutadores en ecuaciones diferenciales:

$$m \frac{\partial}{\partial \lambda_x} L(x, p, \lambda_x, \lambda_p) = p \quad (44)$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_p} L(x, p, \lambda_x, \lambda_p) = -U'(x) \quad (45)$$

Resolviendo obtenemos el valor del generador $\hat{L}$ como:

$$\hat{L} = \hat{p}\hat{\lambda}_x/m - U'(\hat{x})\hat{\lambda}_p + f(\hat{x}, \hat{p}) \quad (46)$$

En esta ecuación, $f(\hat{x}, \hat{p})$ es una función arbitraria de valor real que no cambia en nada la dinámica del sistema. Hasta este punto hemos conseguido encapsular la evolución de la dinámica de un conjunto de sistemas clásicos en una función de un espacio de Hilbert, sin embargo no hemos recuperado la ecuación de Liouville, para ello hay que ver la ecuación del movimiento para la función densidad. La función densidad nos devuelve la probabilidad de que en un instante de t , el sistema se encuentre en el valor x_k y p_k . Volviendo a los postulados expuestos al inicio de esta sección, esa probabilidad viene de evaluar $|\langle px|\Psi(t)\rangle|^2$, puesto que hasta ahora estábamos trabajando con operadores, es necesario escoger una representación, en este caso tomaremos la representación $x - p$ donde $\hat{x} = x$, $\hat{p} = p$, $\hat{\lambda}_x = -i\partial_x$, $\hat{\lambda}_p = -i\partial_p$ y $U'(x) = \partial_x U(x)$ siendo $U = U(x)$ el potencial al que se somete el sistema. Ambas λ las podemos entender como los "momentos" de cada uno de las magnitudes de nuestro modelo y cumplen las relaciones de conmutación que habíamos propuesto. Reescribimos la ecuación (41):

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial x} - iU'(x)\frac{\partial}{\partial p} - f(x, p) \right] \langle xp|\Psi(t)\rangle = 0 \quad (47)$$

Con ello, usando la definición anterior de función densidad en el espacio de fases $x - p$, $\rho(x, p; t) = |\langle xp|\Psi(t)\rangle|^2$ la ecuación anterior nos devuelve el resultado que buscábamos, la ecuación de Liouville para el caso clásico:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, p; t) = \left[-\frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial x} + U'(x)\frac{\partial}{\partial p} \right] \rho(x, p; t) \quad (48)$$

En la ecuación anterior, f ha sido fijado a 0 por elección ya que la característica de que $f(x, p)$ conmute con todos los demás observables clásicos imposibilita su detección experimental, por tanto se vuelve irrelevante para la dinámica del sistema (para un cálculo más detallado, ver el cálculo de F en el apartado 2.4.3)

2.4.2. Estudio de la parte cuántica

Una de las características que diferencian a la MQ de la MC es la relación de conmutación entre $\hat{x}$ y $\hat{p}$:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (49)$$

Igual que en el caso clásico esta relación tenía dos importantes consecuencias, en el cuántico tenemos el principio de incertidumbre de Heissenberg, que dicta que no podemos medir momento y posición a la vez con absoluta certeza; y que importa el orden en el que se miden los observables. Repitiendo el uso del teorema de Stone (ver 6.2), escribimos el generador de dinámica de la parte cuántica que denotaremos $\hat{H}$ y lo introducimos en la ecuaciones (39) y (40).

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (50)$$

$$im[\hat{H}, \hat{x}] = \hbar\hat{p} \quad i[\hat{H}, \hat{p}] = -\hbar U'(\hat{x}) \quad (51)$$

A diferencia del caso clásico donde la conmutación de $\hat{x}$ y $\hat{p}$ nos dejaba sin dinámica, obligando a añadir dos operadores; en este caso no es necesario añadirlos, permitiendo que $\hat{H} = \hat{H}(\hat{x}, \hat{p})$ y pudiendo usar el cálculo de Weyl para obtener las ecuaciones diferenciales $m\partial_p H = p$ y $\partial_x H = \partial_x U$; que nos devuelven el generador de dinámica $\hat{H}$, que coincide con el Hamiltoniano del sistema:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}) \quad (52)$$

Este resultado da un punto importante a comentar, puesto que la ecuación de Schrödinger la hemos obtenido a partir de la relación de conmutación y el teorema de Ehrenfest, el teorema de Ehrenfest es más fundamental en la MQ que la ecuación de Schrödinger. (Para la función densidad para un sistema cuántico ver el apartado 2.2 sobre las funciones de Wigner)

2.4.3. Estudio del caso unificado

Como hemos visto en los dos casos anteriores, la única diferencia en el cálculo clásico y cuántico es la relación de conmutación entre $\hat{x}$ y $\hat{p}$. Para poder unificar ambas tenemos que trabajar sobre los diferentes planos que se crean al elegir 2 operadores de los 4 que hemos definido en la parte clásica y sus reglas de conmutación. Tomando $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{\lambda}_x$, $\hat{\lambda}_p$ tal como se han definido en (38) y (43), vamos a definir 4 operadores clásico-cuánticos $\hat{x}_q$, $\hat{p}_q$, $\hat{\theta}_x$ y $\hat{\theta}_p$ con nuevas relaciones de conmutación:

$$[\hat{x}_q, \hat{p}_q] = i\hbar\kappa \quad [\hat{x}_q, \hat{\theta}_x] = [\hat{p}_q, \hat{\theta}_p] = i \quad (53)$$

El valor de κ está definido en el intervalo $[0, 1]$, permitiendo que se mantenga la consistencia de la parte cuántica para cualquier valor $\kappa \neq 0$ y que recuperemos la dinámica clásica de manera suave cuando $\kappa \rightarrow 0$. Esta definición, continua en κ , va a ser la que nos permite estudiar cómo se acerca el sistema a la transición. Puesto que $\hbar$ aparece en las derivadas temporales y en el operador $\hat{p}$ en la parte cuántica, la condición $\hbar \rightarrow 0$ es más estricta que κ , motivando el uso de la misma. Siguiendo el desarrollo de las dos secciones anteriores, vamos a aplicar ODM a nuestro caso:

$$m \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{x}_q | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{p}_q | \Psi(t) \rangle \quad (54)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{p}_q | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t) | -U'(\hat{x}_q) | \Psi(t) \rangle \quad (55)$$

Volvemos a aplicar la regla de la cadena y sustituimos el teorema de Stone en las dos ecuaciones anteriores para obtener un nuevo generador $\hat{\mathcal{H}}$ y sus ecuaciones en conmutadores:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\Psi(t)\rangle \quad (56)$$

$$i m [\hat{\mathcal{H}}, \hat{x}_q] = \hat{p}_q \quad i [\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}_q] = -U'(\hat{x}_q) \quad (57)$$

Usando el cálculo de Weyl podemos obtener dos ecuaciones en derivadas parciales para $\hat{\mathcal{H}}$:

$$\kappa m \partial_{p_q} \mathcal{H} + \frac{m}{\hbar} \partial_{\theta_x} \mathcal{H} = p_q \quad \kappa \partial_{x_q} \mathcal{H} - \frac{1}{\hbar} \partial_{\theta_p} \mathcal{H} = U'(x_q) \quad (58)$$

La solución más general posible para $\hat{\mathcal{H}}$ queda:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{\kappa} \left[\frac{\hat{p}_q^2}{2m} + U(\hat{x}_q) \right] + F(\hat{p}_q - \hbar\kappa\theta_x, \hat{x}_q + \hbar\kappa\theta_p) \quad (59)$$

En esta solución, F es una función diferenciable de 2 variables arbitrarias. Merece la pena demostrar que F no es observable experimentalmente a partir de un observable $\hat{O}(\hat{x}_q, \hat{p}_q)$, y por tanto queda a libre elección. El teorema de Ehrenfest para $\hat{O}$ nos asegura:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{O} | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t) | [\hat{O}, \hat{\mathcal{H}}] | \Psi(t) \rangle \quad (60)$$

Para que F tuviese relevancia en el teorema de Ehrenfest, sería necesario que el conmutador $[F, \hat{O}]$ fuese distinto de 0, entonces solo queda estudiarlo.

$$[F, \hat{O}] \propto [\hat{p}_q, \hat{p}_q - \hbar\kappa\theta_x]; [\hat{x}_q, \hat{p}_q - \hbar\kappa\theta_x]; [\hat{p}_q, \hat{x}_q + \hbar\kappa\theta_p]; [\hat{x}_q, \hat{x}_q + \hbar\kappa\theta_p] \quad (61)$$

Es inmediato con las definiciones de los conmutadores de la expresión (53) ver que todos los de la expresión anterior se anulan, forzando que $[F, \hat{O}] = 0$, por lo que su contribución es nula y no medible experimentalmente, quedando como un grado de libertad en el sistema a fijar como queramos (de aquí extraemos que en el caso clásico podamos fijar f a 0).

A partir de este punto necesitamos ver como fijar F para asegurar que el Hamiltoniano del caso cuántico converja correctamente al Liouvilliano cuando $\kappa \rightarrow 0$. Puesto que el álgebra clásica y cuántica son isomorfas en esta representación, los operadores clásico-cuánticos se pueden expresar como diversas combinaciones lineales de los clásicos. Es necesario entonces estudiar cuáles, fijado F , convergen correctamente. Para ello hace falta tomar el caso más general posible en el que dos parámetros, α y β , sirven de constantes de proporcionalidad:

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \hat{x}_q = \hat{x} \quad (62)$$

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \hat{p}_q = \alpha \hat{p} \quad (63)$$

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \hat{\mathcal{H}} = \beta \hbar L \quad (64)$$

Un primer análisis puede sugerir intentar fijar F a 0 como en el caso clásico, quedando $\hat{\mathcal{H}} = \hat{H}_q = 1/\kappa[\hat{p}_q^2/2m + U(\hat{x}_q)]$, sin embargo podemos probar que en este caso la condición $\alpha = \beta = 1$ no se puede alcanzar, por ende el sistema no converge correctamente. Para ello nos hace falta enunciar un primer lema: asumiendo que $U'(x_q) \neq 0$, si existen $\hat{x}_q$ y $\hat{p}_q$ tales que sean combinación lineal de los operadores clásicos únicamente y cumplen las condiciones (62), (63) y (64), entonces su conmutador es $[\hat{x}_q, \hat{p}_q] = i\beta(\alpha + 1/\alpha)\hbar\kappa + o(\kappa)$; siendo $o(\kappa)$ el resto definido al hacer tender κ a 0.

Para demostrar este lema partimos de expresar $\hat{x}_q$ y $\hat{p}_q$ como la combinación lineal (en favor de aligerar la notación durante la demostración, asumiremos que todos son operadores y prescindiremos del acento $\hat{x}$):

$$x_q = \frac{\partial x_q}{\partial x}x + \frac{\partial x_q}{\partial p}p + \frac{\partial x_q}{\partial \lambda_x}\lambda_x + \frac{\partial x_q}{\partial \lambda_p}\lambda_p \quad (65)$$

$$p_q = \frac{\partial p_q}{\partial x}x + \frac{\partial p_q}{\partial p}p + \frac{\partial p_q}{\partial \lambda_x}\lambda_x + \frac{\partial p_q}{\partial \lambda_p}\lambda_p \quad (66)$$

De las ecuaciones ((62)-(64)) tenemos:

$$\beta\hbar \frac{\partial L}{\partial \lambda_x} = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\partial H_q}{\partial \lambda_x} \Rightarrow \beta\hbar \frac{p}{m} = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left[\frac{p_q}{\kappa m} \frac{\partial p_q}{\partial \lambda_x} + \frac{U'(x_q)}{\kappa} \frac{\partial x_q}{\partial \lambda_x} \right] = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left[\frac{\alpha p}{\kappa m} \frac{\partial p_q}{\partial \lambda_x} + \frac{U'(x)}{\kappa} \frac{\partial x_q}{\partial \lambda_x} \right] \quad (67)$$

$$\beta\hbar \frac{\partial L}{\partial \lambda_p} = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\partial H_q}{\partial \lambda_p} \Rightarrow -\beta\hbar U'(x) = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left[\frac{p_q}{\kappa m} \frac{\partial p_q}{\partial \lambda_p} + \frac{U'(x_q)}{\kappa} \frac{\partial x_q}{\partial \lambda_p} \right] = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left[\frac{\alpha p}{\kappa m} \frac{\partial p_q}{\partial \lambda_p} + \frac{U'(x)}{\kappa} \frac{\partial x_q}{\partial \lambda_p} \right] \quad (68)$$

Con ello solo queda despejar las siguientes relaciones:

$$\frac{\partial p_q}{\partial \lambda_x} = \frac{\beta\hbar}{\alpha}\kappa + o(\kappa) \quad \frac{\partial x_q}{\partial \lambda_x} = o(\kappa) \quad (69)$$

$$\frac{\partial x_q}{\partial \lambda_p} = -\beta\hbar\kappa + o(\kappa) \quad \frac{\partial p_q}{\partial \lambda_p} = o(\kappa) \quad (70)$$

Derivando en las expresiones (62) y (63) respecto a x y a p obtenemos el resto de relaciones que necesitábamos:

$$\frac{\partial x_q}{\partial x} = 1 + o(\kappa) \quad \frac{\partial x_q}{\partial p} = o(\kappa) \quad \frac{\partial p_q}{\partial p} = \alpha + o(\kappa) \quad \frac{\partial p_q}{\partial x} = o(\kappa) \quad (71)$$

Para finalizar la demostración sustituimos todos los resultados en (65) y (66) y calculamos el conmutador usando las relaciones conocidas de los operadores clásicos:

$$x_q = x - \beta\hbar\kappa\lambda_p + o(\kappa) \quad p_q = \alpha p + \frac{\beta\hbar}{\alpha}\lambda_x + o(\kappa) \quad (72)$$

$$[x_q, p_q] = \beta\hbar\alpha\kappa[p, \lambda_p] + \frac{\beta\hbar}{\alpha}\kappa[x, \lambda_x] + o(\kappa) = i\beta\hbar\left(\alpha + \frac{1}{\alpha}\right)\kappa + o(\kappa) \quad (73)$$

Con el lema probado es inmediato ver por qué con F fijado a 0 no podemos obtener a la vez las ecuaciones ((62)-(64)) con $\alpha = \beta = 1$ y el conmutador de $[\hat{x}_q, \hat{p}_q] = i\hbar\kappa$. Si usamos el lema anterior para las condiciones impuestas a α y β , el conmutador que obtenemos es $[\hat{x}_q, \hat{p}_q] = 2i\hbar\kappa$, por lo que no recuperamos el límite clásico y con $F = 0$ el generador es inconsistente.

Este problema de inconsistencia lleva a pensar que F debe de tener una forma funcional explícita, para lo cual es necesario demostrar otro resultado más que lleva a la forma de F .

Resultado 1: Asumiendo que $F = F(x, p) = Q(p) + G(x)$ y $U' \neq 0$, si existen los operadores $\hat{x}_q, \hat{p}_q, \hat{\theta}_x$ y $\hat{\theta}_p$ tales que son combinaciones lineales de $\hat{x}, \hat{p}, \hat{\lambda}_x$ y $\hat{\lambda}_p$ y cumplen:

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \hat{x}_q = \hat{x} \quad \lim_{\kappa \rightarrow 0} \hat{p}_q = \hat{p} \quad \lim_{\kappa \rightarrow 0} \hat{\theta}_x = \hat{\lambda}_x \quad \lim_{\kappa \rightarrow 0} \hat{\theta}_p = \hat{\lambda}_p \quad \lim_{\kappa \rightarrow 0} \hat{\mathcal{H}} = \hbar \hat{L} \quad (74)$$

La forma de F es:

$$F(p, x) = -\frac{p^2}{2m\kappa} - \frac{1}{\kappa}U(x) + O(1) \quad (\kappa \rightarrow 0) \quad (75)$$

La prueba de este resultado transcurre igual que la prueba del lema anterior (también prescindimos del acento en los operadores para aligerar notación).

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \lambda_x} L = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda_x} \mathcal{H} \quad \hbar \frac{\partial}{\partial \lambda_p} L = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda_p} \mathcal{H} \quad (76)$$

$$\hbar \frac{p}{m} = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left[\frac{p}{\kappa m} \frac{\partial p_q}{\partial \lambda_x} + \frac{U'(x_q)}{\kappa} \frac{\partial x_q}{\partial \lambda_x} + F'_1(p, x) \left(\frac{\partial p_q}{\partial \lambda_x} - \hbar \kappa \frac{\partial \theta_x}{\partial \lambda_x} \right) + F'_2(p, x) \left(\frac{\partial x_q}{\partial \lambda_x} - \hbar \kappa \frac{\partial \theta_p}{\partial \lambda_x} \right) \right] \quad (77)$$

$$-\hbar U'(x) = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left[\frac{p}{\kappa m} \frac{\partial p_q}{\partial \lambda_p} + \frac{U'(x_q)}{\kappa} \frac{\partial x_q}{\partial \lambda_p} + F'_1(p, x) \left(\frac{\partial p_q}{\partial \lambda_p} - \hbar \kappa \frac{\partial \theta_x}{\partial \lambda_p} \right) + F'_2(p, x) \left(\frac{\partial x_q}{\partial \lambda_p} - \hbar \kappa \frac{\partial \theta_p}{\partial \lambda_p} \right) \right] \quad (78)$$

En ambas ecuaciones definiremos que F'_1 es la función F derivada respecto a su primer argumento y F'_2 respecto al segundo argumento. Bajo la condición de F separable y los límites propuestos para todas las variables, las ecuaciones anteriores se simplifican a las dos siguientes condiciones para G y Q que a su vez satisfacen F :

$$Q'(p) = -\frac{p}{\kappa m} + O(1) \quad G'(x) = -\frac{1}{\kappa}U'(x) + O(1) \quad (79)$$

Si ahora tomamos que $\partial_{\lambda_x} \hat{x}_q = o(\kappa)$ y $\partial_{\lambda_p} \hat{p}_q = o(\kappa)$, que no es una condición muy estricta, podemos definir una forma funcional para F que permite que $\hat{\mathcal{H}}$ cumpla todo lo que queríamos para que el isomorfismo entre el álgebra cuántico y clásico sea completo:

$$\hat{\mathcal{H}}_{qc} = \frac{\hbar}{m} \hat{p} \hat{\lambda}_x + \frac{1}{\kappa} U \left(\hat{x} - \frac{\hbar \kappa}{2} \lambda_p \right) - \frac{1}{\kappa} U \left(\hat{x} + \frac{\hbar \kappa}{2} \lambda_p \right) \quad (80)$$

Además, con este desarrollo concluimos que la combinación lineal que satisfacen los operadores clásico-cuánticos es:

$$\hat{x}_q = \hat{x} - \frac{\hbar \kappa}{2} \lambda_p \quad \hat{p}_q = \hat{p} - \frac{\hbar \kappa}{2} \lambda_x \quad \hat{\theta}_x = \hat{\lambda}_x \quad \hat{\theta}_p = \hat{\lambda}_p \quad (81)$$

Queda comprobar para qué potenciales es válida la función, ya que hasta ahora la única condición que habíamos impuesto es que no fuera nulo, para ello vamos a estudiar dos casos. El primero será que para todo $\kappa \in [1, 0]$, $\hat{\mathcal{H}}_{qc} = \hbar \hat{L}$. Tomando la representación en $x - \lambda_p$ nuestros operadores se convierten en:

$$\hat{x} = x \quad \hat{p} = -i \frac{\partial}{\partial \lambda_p} \quad \hat{\lambda}_x = -i \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{\lambda}_p = \lambda_p \quad (82)$$

Con esta representación expandiendo el potencial U en serie llegamos a:

$$U(x - \alpha) - U(x + \alpha) = -2\alpha U'(x); \quad \alpha = \hbar\kappa\lambda_p/2 \quad (83)$$

El siguiente paso es obtener el espectro del potencial y para ello realizamos una transformada de Fourier sobre la variable x obteniendo:

$$[\alpha\omega - \sin(\alpha\omega)]\bar{U}(\omega) = 0; \quad \bar{U}(\omega) = \int dx \frac{U}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\omega x} \quad (84)$$

La única solución posible para $y = \sin(y)$ es 0, lo que implica que las soluciones no triviales de la ecuación anterior pasan por el origen, lo que implica, obtenido de [6], que la forma más general del potencial es:

$$\bar{U}(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \delta^{(n)}(\omega) \quad (85)$$

Donde $\delta^{(n)}$ son las derivadas n-esimas de la delta de Dirac. Estos no son un resultado trivial y usaremos directamente el valor obtenido de la referencia [7].

$$\omega^m \delta^{(n)}(\omega) = \begin{cases} (-1)^m \frac{n!}{(n-m)!} \delta^{(n-m)}(\omega) & si \quad m < n \\ (-1)^n n! \delta(\omega) & si \quad m = n \\ 0 & si \quad m > n \end{cases} \quad (86)$$

Seguindo de este resultado uno puede demostrar que los tres primeros términos de la expansión en serie quedan libres mientras que los demás quedan con una relación en función de α , y como tiene que ser válida para cualquier α concluimos que:

$$\bar{U}(\omega) = c_0 \delta(\omega) + c_1 \delta'(\omega) + c_2 \delta''(\omega) \quad (87)$$

Con ello es la transformada de Fourier de un potencial cuadrático, lo que nos lleva a considerar que $\hat{\mathcal{H}}_{qc} = \hbar L \forall \kappa$ se cumple únicamente para potenciales de este tipo. Este caso lo estudiaremos en la siguiente sección aunque es menos interesante que el siguiente, ya que con esto la función clásica evoluciona igual que la función cuántica, es decir no hay diferencia en el comportamiento en el sistema que nos permita estudiar el límite.

El segundo caso a estudio es el límite asintótico al mismo, es decir vamos a considerar que solo queremos que $\hat{\mathcal{H}}_{qc} = \hbar L$ si $\kappa \rightarrow 0$. En ese caso tomamos la expansión en serie de $U(x - \alpha/2) - U(x + \alpha/2)$

$$U(x - \alpha/2) - U(x + \alpha/2) = \sum_n \frac{\frac{\partial^n U(x)}{\partial x^n}}{n!} \left[\left(\frac{-1}{2\alpha} \right)^n - \left(\frac{-1}{2\alpha} \right)^n \right] = - \sum_s \frac{\frac{\partial^{2s+1} U(x)}{\partial x^{2s+1}}}{(2s+1)!} \left(\frac{1}{2} \right)^{2s} \alpha^{2s+1} \quad (88)$$

Donde en este caso $\alpha = \hbar\kappa\lambda_p$. Lo único que necesitamos comprobar es si cuando $\kappa \rightarrow 0$, $1/\kappa U(x - \alpha/2) - 1/\kappa U(x + \alpha/2) = -\hbar U'(x)\lambda_p$. El resultado es casi directo si tenemos en cuenta que cualquier término en la expresión (88) en el que α sea mayor a orden 1, se anula al aplicar $\kappa \rightarrow 0$. Con ello

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{1}{\kappa} U(x - \alpha/2) - \frac{1}{\kappa} U(x + \alpha/2) = \lim_{\kappa \rightarrow 0} - \sum_s \frac{\frac{\partial^{2s+1} U(x)}{\partial x^{2s+1}}}{(2s+1)!} \left(\frac{1}{2} \right)^{2s} \frac{\alpha^{2s+1}}{\kappa} = -\hbar U'(x)\lambda_p \quad (89)$$

Con este resultado comprobamos que, a partir del límite asintótico, no tenemos ninguna limitación en la forma del potencial. Este caso citabamos que era más interesante por un motivo, permite añadir correcciones únicamente cuánticas y que se aprecien con mayor o menor intensidad en el sistema en función de qué plano en κ tomemos.

Para terminar esta sección, recuperando la ecuación (56), podemos obtener una expresión para el caso unificado que cumple la distribución de cuasi-probabilidad de Wigner (ver 2.2). Para ello retomamos la representación $x - \lambda_p$ y haciendo lo mismo que en el caso clásico, escribimos una ecuación para $\rho_k \propto |\langle x\lambda_p|\Psi(t)\rangle|^2$ bajo dos nuevas variables, $u = x - \hbar\kappa\lambda_p/2$ y $v = x + \hbar\kappa\lambda_p/2$:

$$\left[i\hbar\kappa \frac{\partial}{\partial t} - \frac{(\hbar\kappa)^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial v^2} - \frac{\partial^2}{\partial u^2} \right) - U(u) + U(v) \right] \rho_\kappa = 0 \quad (90)$$

Ante este resultado ρ_k define una cuasi-función densidad para un sistema tanto cuántico como clásico después de sustituir $\hbar \rightarrow \hbar\kappa$. Con esto, solo queda realizar la transformada de Fourier de λ_p a p para obtener la función de onda $|\langle xp|\Psi(t)\rangle|^2$ que será proporcional a la cuasi-probabilidad de Wigner.

$$|\langle xp|\Psi(t)\rangle|^2 = \sqrt{\frac{\hbar\kappa}{2\pi}} \int d\lambda_p \rho_k(x - \hbar\kappa\lambda_p/2, x + \hbar\kappa\lambda_p/2; t) e^{ip\lambda_p} \quad (91)$$

Como resumen del objetivo del trabajo, una vez visto el marco teórico, con este formalismo unificado y el uso de la construcción de Koopman; vamos a poder caracterizar una familia continua de modelos que va a capturar la transición entre la modelización clásica (con un álgebra de observables conmutativa), y la cuántica (con un álgebra de observables no conmutativa), con una familia de modelos dinámicos también continua. Este era uno de los objetivos teóricos del trabajo, el poder construir un marco para el límite clásico en un formalismo unificado y con una familia de dinámicas continua. En el siguiente capítulo vamos a analizar ejemplos concretos para hacer un primer análisis de las conclusiones.

3. Experimentos numéricos

En esta sección nos centramos en analizar la evolución de nuestros sistemas frente al tiempo con el objetivo de comprobar si el formalismo es válido y cómo varía al acercarnos al límite clásico. Para ello diseñamos en *python* tres experimentos que analizan el caso puramente clásico y el caso unificado.

3.1. Caso clásico

En esta primera parte del caso clásico, partiendo de lo visto en la sección 2, estudiaremos la evolución que genera el Liouvilliano en la ecuación (41) para un potencial armónico en una dimensión, con el objetivo de entender el caso clásico sobre un espacio de Hilbert y para tener los valores esperados. Pensando en la solución del oscilador armónico sobre un espacio de Hilbert puramente cuántico, es lógico tratar de realizar lo mismo en el Liouvilliano.

Comenzamos adimensionalizando el operador $\hat{L}$ para poder aplicarlo a la ecuación. Un análisis de dimensiones devuelve lo siguiente.

$$[\hat{L}] = \left[\frac{\hat{P}}{m} \hat{\lambda}_x \right] - [m\omega^2 \hat{X} \hat{\lambda}_p] = \frac{m \cdot l}{m \cdot t} l^{-1} - m \cdot t^{-2} \cdot l \cdot \frac{t}{m \cdot l} = \frac{1}{t} \quad (92)$$

Esto nos permite definir el operador $\hat{\mathcal{L}}$, necesario para poder definir los operadores escalera como solución del oscilador.

$$\hat{\mathcal{L}} = \frac{\hat{L}}{\omega} = \frac{\hat{P}}{m \cdot \omega} \hat{\lambda}_x - m \cdot \omega \hat{x} \hat{\lambda}_p = \hat{\mathcal{P}} \hat{\Lambda}_x - \hat{\mathcal{X}} \hat{\Lambda}_p; \quad [\hat{\mathcal{L}}] = \text{adimensional} \quad (93)$$

En favor de aligerar la notación, durante lo que queda de sección los operadores se escribirán en mayúsculas, eliminando el circunflejo. De la ecuación anterior se extrae también que los operadores P , X , λ_x y λ_p también quedan adimensionalizados. Para ello es necesario introducir una longitud característica del sistema que denotaremos como l_0 .

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \frac{p}{m \cdot \omega \cdot l_0} \\ \mathcal{X} &= \frac{X}{l_0} \\ \Lambda_p &= \lambda_p \cdot m \cdot \omega \cdot l_0 \\ \Lambda_x &= \lambda_x \cdot l_0 \end{aligned} \quad (94)$$

Puesto que estamos trabajando con $\mathbb{R}^4$, tanto x como p funcionan como coordenadas independientes, convirtiendo el problema en dos osciladores armónicos acoplados por el Liouvilliano, cada uno con su propio conjunto de operadores escalera.

$$\begin{aligned} a_p &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{P} + i\Lambda_p) \\ a_p^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{P} - i\Lambda_p) \\ a_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{X} + i\Lambda_x) \\ a_x^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{X} - i\Lambda_x) \end{aligned} \quad (95)$$

Operando con el conjunto de operadores escalera podemos reescribir el Liouvilliano sobre un espacio de *Fock* como un producto de operadores de ambos espacios; cabe resaltar que hasta ahora, el producto de operadores de x y p es un producto tensorial implícito entre ambos espacios, siendo el primero el de p y el segundo el de x ($\mathcal{P}\Lambda_x = \mathcal{P} \otimes \Lambda_x$).

$$\mathcal{L} = -i \cdot (a_p^\dagger \otimes a_x - a_p \otimes a_x^\dagger) \quad (96)$$

Es directo comprobar que $\mathcal{L}$ es hermítico, por lo que define una evolución unitaria bajo la ecuación (41).

A partir de este punto se plantea un problema sobre los operadores del sistema, ya que son de dimensión infinita, y aunque el operador a si que cuenta con autoestados, no existen autoestados para el operador $a^\dagger$. Esto impide obtener una solución exacta en dimensión infinita y nos obliga a acotar el sistema a una N finita, imponiendo que la acción del operador $a^\dagger$ sobre el estado N es 0. Esto nos permite escribir las matrices de ambos operadores para cualquiera de los dos espacios.

$$a = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & & 0 \\ \sqrt{N-1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{N-2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & & \dots & \sqrt{1} & 0 \end{bmatrix} \quad (97)$$

$$a^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{N-1} & 0 & \dots & & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{N-2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{N-3} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & & & & \vdots & \sqrt{1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (98)$$

Con estas dos matrices construimos los productos $a_p^\dagger \otimes a_x$ y $a_p \otimes a_x^\dagger$ y por tanto tenemos el operador $\mathcal{L}$ (lo que es también tener el L) en forma matricial, lo que nos permite calcular su acción sobre la base del producto tensorial de los espacios de *Fock* de x y p .

Aunque antes se ha comentado que el limitar a dimensión finita es un problema, por las características del Liouvilliano L es hermítico para potenciales del tipo x^n , por lo que la evolución unitaria conserva la norma de cualquier vector que esté dentro de la dimensión N que hemos fijado, es decir que estén acotados a cierta energía. Esto significa que la evolución es unitaria y se restringe la dimensión finita que hemos fijado, lo que falsea la dinámica real al contacto con el borde.

La expresión exacta para potenciales de x^3 y x^4 quedaría:

$$\mathcal{L}_3 = \frac{i}{2}(a_p \otimes a_x^\dagger - a_p \otimes a_x + a_p^\dagger \otimes a_x^\dagger - a_p^\dagger \otimes a_x) + \frac{i}{2\sqrt{2}}(a_p^\dagger - a_p) \otimes [(a_x + a_x^\dagger)^2] \quad (99)$$

$$\mathcal{L}_4 = \frac{i}{2}(a_p \otimes a_x^\dagger - a_p \otimes a_x + a_p^\dagger \otimes a_x^\dagger - a_p^\dagger \otimes a_x) + \frac{i}{2\sqrt{2}}(a_p^\dagger - a_p) \otimes [(a_x + a_x^\dagger)^3] \quad (100)$$

Comprobamos, a modo de ejemplo, que $\mathcal{L}_3$ es hermítico:

$$\mathcal{L}_3^\dagger = \frac{-i}{2}(-a_p \otimes a_x^\dagger + a_p \otimes a_x - a_p^\dagger \otimes a_x^\dagger + a_p^\dagger \otimes a_x) - \frac{i}{2\sqrt{2}}(-a_p^\dagger + a_p) \otimes [(a_x + a_x^\dagger)^2] = \mathcal{L}_3 \quad (101)$$

Con ello es claro ver que el término $\mathcal{P}\Lambda_x$ es hermítico por sí mismo, y que el término $\mathcal{X}^n\Lambda_p$ también lo es para cualquier n . La justificación es que tanto $\mathcal{P}$, $\mathcal{X}$, Λ_x y Λ_p son definidos hermíticos, por lo que cualquier producto de ellos lo es también, por lo que todos definirán una evolución unitaria.

Planteamos un código que permite estudiar a la vez osciladores con potenciales de orden 2, 3 y 4 (ver 6.10 para el código). Obteniendo así que para un estado inicial $|p, x\rangle = |0, 2\rangle$ sobre $N = 10$, con $\omega = 1$, bajo un potencial de orden 2, tenemos:

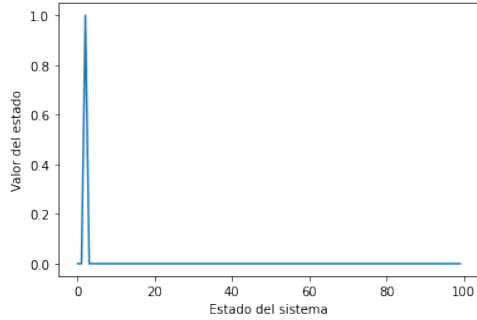


Figura 2. $t = 0.0$

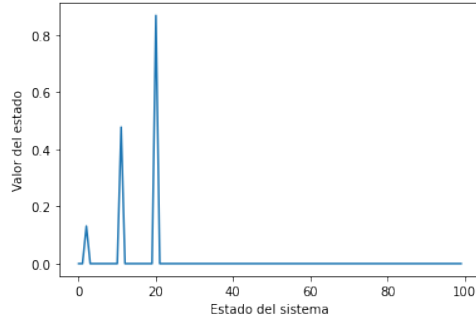


Figura 3. $t = 0.2$

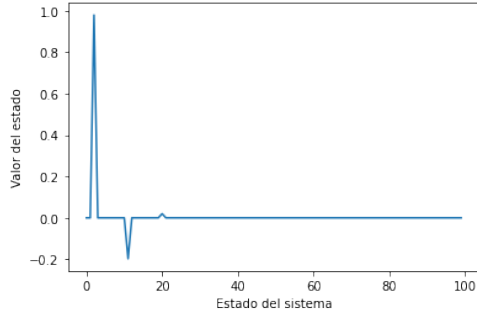


Figura 4. $t = 0.5$

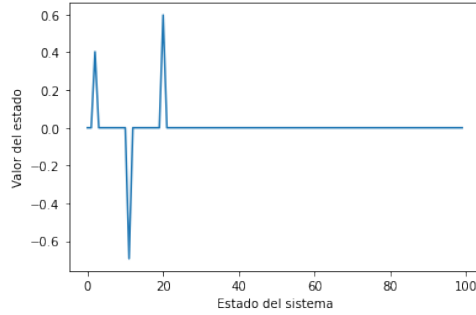


Figura 5. $t = 0.9$

Figura 6. Simulación clásica orden 2

Para este caso, tras la simulación, observamos que el sistema solo puebla los niveles esperados, es decir, solo llega al nivel $|20\rangle$ en la base $|p \otimes x\rangle$ que corresponde con el $|2, 0\rangle$ en la base $|p, x\rangle$. Esto es lógico puesto que el sistema oscila entre tener solo energía potencial o tener solo cinética, pero mantiene la energía como conjunto. Este hecho verifica que para orden 2 es correcta la aproximación de dimensión finita en los operadores. Merece ahora la pena revisar uno de los otros dos casos para comprobar porque la aproximación de dimensión finita deja de ser válida para cualquier otro potencial. Para ello tomamos el de orden 4 $U(x) = x^2 + x^4$, ya que esperaríamos que sucediera algo similar al orden 2, con un p máximo y un x máximo. Por tanto, bajo las mismas condiciones de antes tenemos:

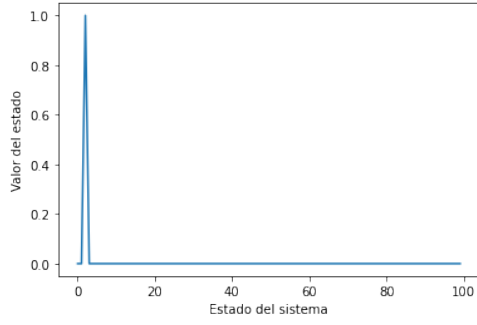


Figura 7. $t = 0.0$

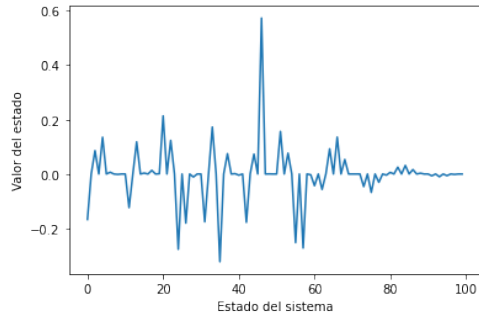


Figura 8. $t = 0.2$

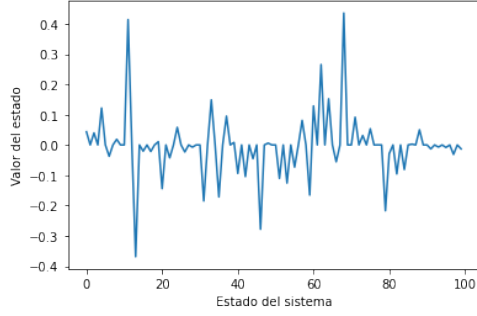


Figura 9. $t = 0.5$

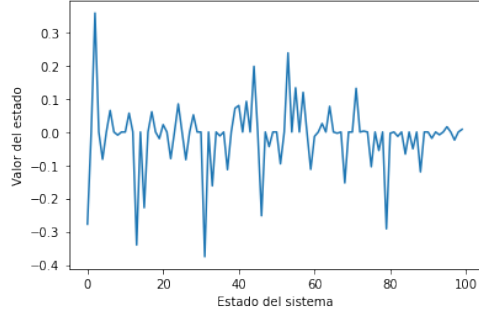


Figura 10. $t = 0.9$

Figura 11. Simulación clásica orden 4

A la vista de estos nuevos resultados es claro ver que al evolucionar, se propaga paulatinamente a niveles cada vez más altos. A primera vista es un resultado que carece de sentido hasta que consideramos que los estados usados para representar estos sistemas son únicamente autoestados para el orden 2, por lo cual nada nos asegura que en otros órdenes también lo sean. Dicho esto, al no ser autoestados, el sistema no se restringe a esos subespacios, lo que nos impide que la aproximación finita sea válida en este rango ya que nada impide que pueble niveles superiores, y al acotar N estamos cambiando la trayectoria aunque sea unitario. Aún así, los resultados anteriores reproducen correctamente la evolución del sistema hasta $t = 0.2$, que es cuando se puebla el último nivel de nuestra aproximación. Por tanto podemos obtener valores esperados hasta ese instante y así poder comparar como evolucionan los distintos observables.

En el experimento que realizaremos, dado que queremos estudiar la transición entre un álgebra clásica conmutativa y una cuántica no conmutativa, vamos a considerar valores esperados que caractericen esa transición. Así, consideraremos operadores que serán X , P , $[X, P]$, Δx y Δp ; usamos el hecho de que conocemos las formas matriciales de los operadores escalera por lo que podemos calcular $\langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle$ como el producto de matrices sobre el espacio de Fock. Se discutirán esos valores al final de la sección de experimentos. Cabe destacar que como fijamos C del potencial de orden 4 más pequeña, las simulaciones tardan más en llegar al borde por lo que la simulación es fiable en intervalos más amplios.

Como complemento al análisis del caso clásico que estamos modelizando sobre un espacio de Hilbert empleando el formalismo de Koopman, merece también la pena simular la evolución de la función densidad $\rho(x, p; t)$ acorde a la ecuación (48) para así tener una comparativa con el caso unificado del comportamiento de un paquete Gaussiano. Para ello vamos a realizar una simulación usando el método de Runge-Kutta a orden 4. Este método sirve para calcular numéricamente la evolución de una ecuación diferencial y hace uso de 4 pendientes medias pesadas en distintos puntos del intervalo temporal que se defina. Para aplicarlo partimos de la ecuación diferencial a resolver y una condición inicial:

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t) \quad y(t_0) = y_0 \quad (102)$$

Ahora tomamos un paso temporal $\Delta t > 0$ y aplicamos la evolución al instante $t_0 + \Delta t$ con la siguiente forma:

$$y(t_0 + \Delta t) = y_0 + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (103)$$

Repitiendo este proceso un número n arbitrario de veces obtenemos cómo evoluciona nuestro sistema. Las distintas k son las pendientes citadas anteriormente y se calculan de la siguiente forma:

$$k_1 = f(t, y) \quad (104)$$

$$k_2 = f\left(y + \frac{\Delta t}{2}k_1, t + \frac{\Delta t}{2}\right) \quad (105)$$

$$k_3 = f\left(y + \frac{\Delta t}{2}k_2, t + \frac{\Delta t}{2}\right) \quad (106)$$

$$k_4 = f(y + \Delta t \cdot k_3, t + \Delta t) \quad (107)$$

Con el método explicado, lo siguiente es aplicarlo a nuestra ecuación, por lo cual empezamos con el caso de orden 2, $f = [-p/m\partial_x + m\omega^2 x\partial_p]\rho(x, p; t)$, que no depende explícitamente del tiempo, por lo que eso simplifica el cálculo, pero sí que cuenta con derivadas espaciales. Para solucionar esta situación decidimos realizar la simulación sobre un mallado discreto de $N \cdot N$, de tal forma que $\rho(x, p)$ pasa a ser $\rho_{i,j}$, siendo estas las coordenadas de la matriz $N \cdot N$ que representa los valores de ρ sobre el mallado. Con ello podemos definir las derivadas sobre el mallado como los incrementos en cada una de las dos direcciones.

$$\frac{d\rho_{i,j}}{dx} = \frac{\rho_{i+1,j} - \rho_{i,j}}{\Delta x} \quad \frac{d\rho_{i,j}}{dp} = \frac{\rho_{i,j+1} - \rho_{i,j}}{\Delta p} \quad (108)$$

El último paso de la simulación es asegurar cuánto tiempo es fiable la misma, es decir, cuándo los valores obtenidos se desvían de los reales. Para ello vamos a usar la siguiente propiedad, la evolución del sistema ha de ser unitaria, y por tanto la norma de ρ debería permanecer constante. Con esto en mente, cuando la norma de la simulación varíe un 1 % respecto al valor original, terminaremos las iteraciones, en caso de las condiciones elegidas ese tiempo ronda unos 0,14 segundos en unidades de la simulación. (código 6.11)

A partir del código obtenemos una serie de mapas de calor que representan como evoluciona el sistema con la condición inicial de una gaussiana cuya integral vale 1 para que ρ sea consistente.

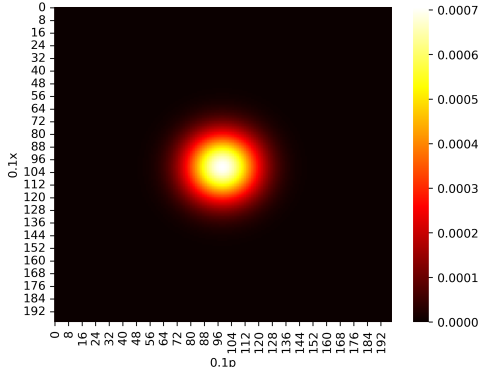


Figura 12. $t = 0.0$

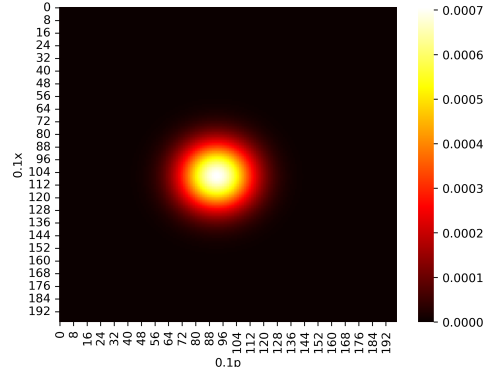


Figura 13. $t = 0.06$

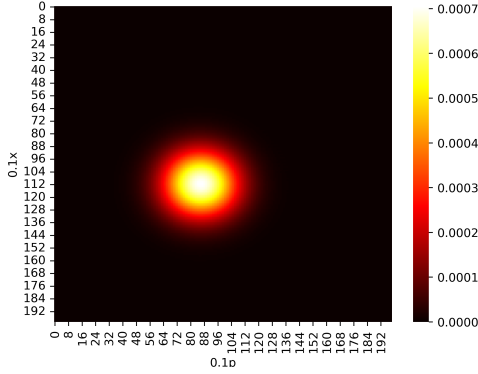


Figura 14. $t = 0.12$

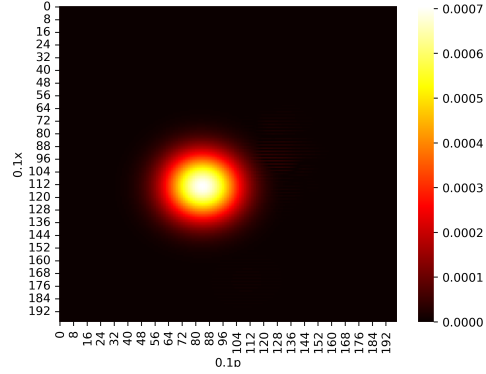


Figura 15. $t = 0.14$

Figura 16. Simulación clásica orden 2 de la función densidad

En la simulación anterior, la gaussiana esta centrada en 100-100 sobre el mallado ($x = 10$ y $p = 10$) y su sigma vale 15 en unidades del mallado, en cuanto a las constantes del sistema, se han fijado todas a 1 por comodidad de simulación. El interespaciado en los puntos de la red es de 0,1; con un paso temporal de 0,001.

Puesto que la solución exacta clásica para una gaussiana es bien conocida (para un cálculo detallado y las gráficas ver (6.7)), podemos comprobar que evoluciona siguiendo la trayectoria descrita por la ecuación teórica, asegurando que la simulación es fiable para comparar con la unificada y que el haberla discretizado no supone una pérdida de información notable en este intervalo de tiempo.

Con ello continuamos con el potencial de orden 4, el cual, como se ha discutido en el marco teórico, es uno de los que nos permitirá estudiar claramente el límite ya que la evolución clásica y cuántica se separarán. Por tanto vamos a repetir todos los pasos anteriores para la simulación, pero en este caso cambiamos f asignando que ahora se le añade un potencial $C/4 \cdot x^4$

$$f = \left[\frac{-p}{m} \frac{\partial}{\partial x} + (m\omega^2 x + Cx^3) \frac{\partial}{\partial p} \right] \rho(x, p; t) \quad (109)$$

Las condiciones de la simulación son las mismas que el caso anterior con C fijado a 1 para la nueva f y un paso temporal 0,0001. Elegimos un caso de C alto a diferencia de en el resto de simulaciones para poder analizar claramente sus efectos.

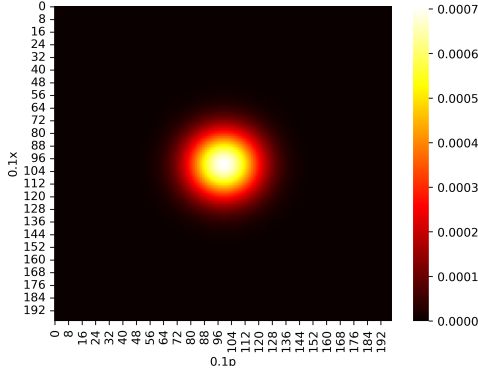


Figura 17. $t = 0.00$

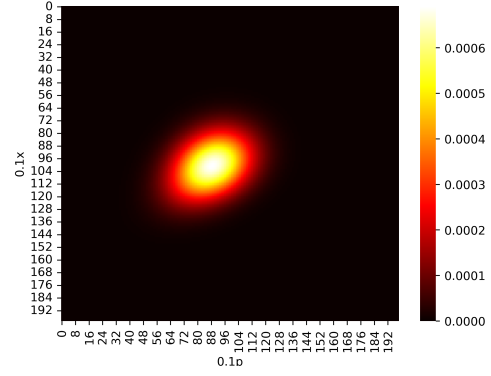


Figura 18. $t = 0.01$

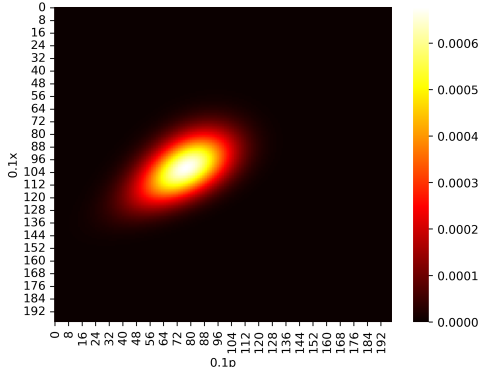


Figura 19. $t = 0.02$

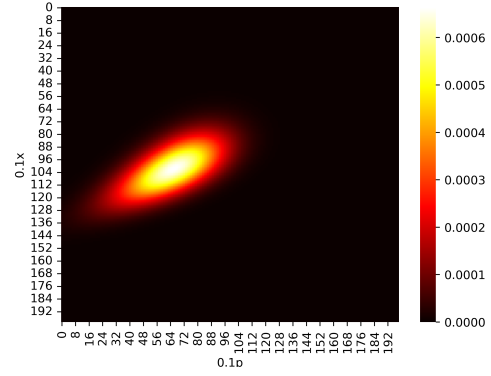


Figura 20. $t = 0.03$

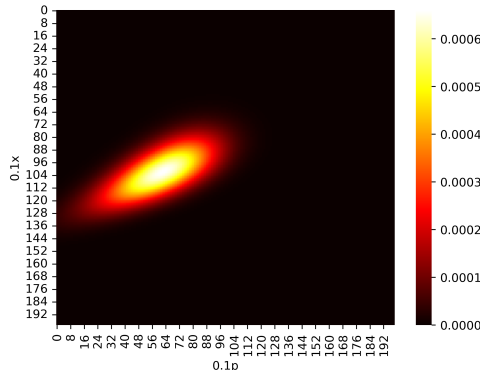


Figura 21. $t = 0.04$

Figura 22. Simulación clásica orden 4 de la función densidad

Queda a la vista de la simulación que el paquete de ondas se deforma para este potencial. Igual que con la otra forma de estudiar el caso clásico, podríamos obtener los valores esperados de X , P , $[X, P]$, Δx y Δp como $\int dx dp O(x, p) W(x, p)$ donde O es el observable.

3.2. Caso unificado

Igual que con la primera parte clásica, podemos tomar la ecuación (80) y escribir el generador de dinámica H_{qc} adimensionalizado igual que lo hicimos anteriormente (seguimos prescindiendo del acento circunflejo en pos de aligerar notación).

$$\mathcal{H}_{qc} = p\lambda_x - x\lambda_p - C \left[x^3\lambda_p + \frac{(\hbar\kappa)^2}{4}x\lambda_p^3 \right] \quad (110)$$

En la ecuación anterior consideramos que los operadores ya estan adimensionalizados, C se corresponde con la constante del potencial cuártico que fijaremos a 0,1. Con ello es directo realizar el paso al espacio de Fock usando los mismos operadores que se habían introducido en la sección anterior ecuación ((95)). Con ello solo nos queda aplicar el valor esperado de X , P , λ_x , λ_p y con ello obtener X_q y P_q que permite estudiar cómo cambia el conmutador al variar el valor de κ (para ver el código ir a 6,12). Cabe resaltar que se intento tambien el otro formalismo visto en la parte clásica aunque no se obtuvieron resultados útiles, para ver esa forma ir al anexo 6,9

3.3. Comparación entre el caso unificado y los casos cuánticos y clásicos

Conseguido tener los valores esperados del caso clásico y del caso unificado solo nos queda exponer las gráficas de cada uno y comprobar si los resultados obtenidos casan con lo esperado. Como se ha citado al final de la parte anterior, prescindimos de comparar en el espacio de fases y solo lo haremos sobre Hilbert. Para ello cabe destacar que se han fijado las constantes del sistema a 1, menos C que se ha fijado a 0,1 quedando el potencial $U(x) = 0,5x^2 + 0,25Cx^4$. Merece la pena parar a explicar la elección de la condición inicial. A diferencia del espacio de fases, donde la intuición de lo que sucede es bastante clara, en el espacio de Fock es complicado entender que condición inicial reproduce la gaussiana que habíamos propuesto. Es donde entran los estados coherentes, definidos como

$$|z\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (111)$$

Nos quedamos con solo los primero N . La característica de estos estados es que el valor esperado de X y de P se comporta como una aproximación a una gaussiana clásica permitiéndonos implementar una condición inicial sobre la cual sí que podemos intuir qué sucede. Para ello el centro de la gaussiana queda definido con $x = 7,55$ y el momento $p = 7,55$. Simulando con un paso temporal de 0,00125 para un tiempo total de 0,05 obtenemos las siguientes gráficas (para la explicación de por qué este tiempo ir a anexo 6.8).

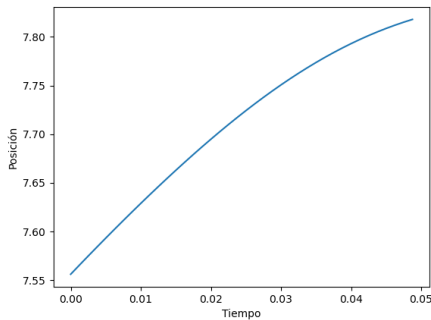


Figura 23. X

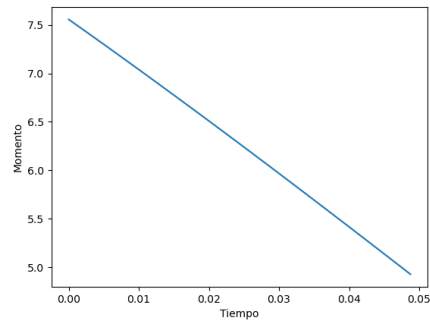


Figura 24. P

Figura 25. Simulación clásica

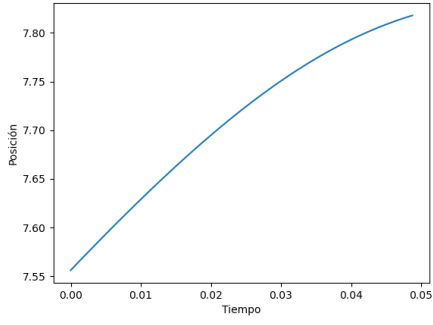


Figura 26. $|X_q|(\kappa = 0)$

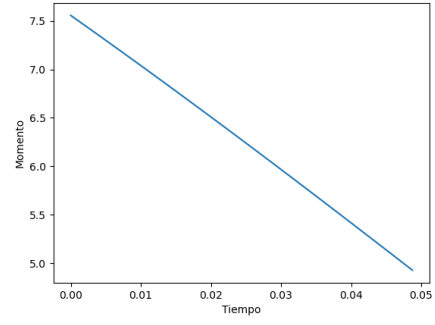


Figura 27. $|P_q|(\kappa = 0)$

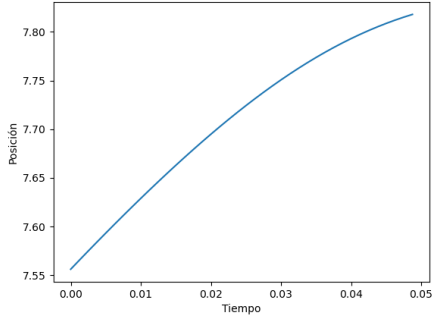


Figura 28. $|X_q|(\kappa = 0,1)$

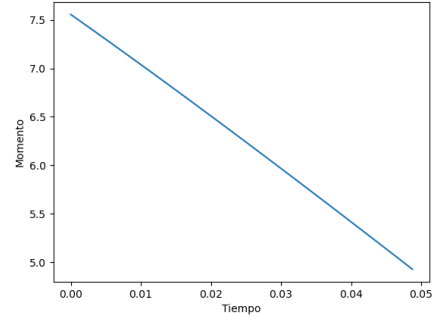


Figura 29. $|P_q|(\kappa = 0,1)$

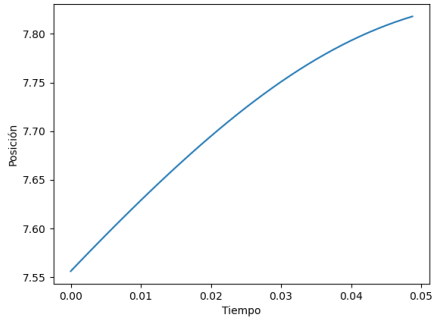


Figura 30. $|X_q|(\kappa = 0,5)$

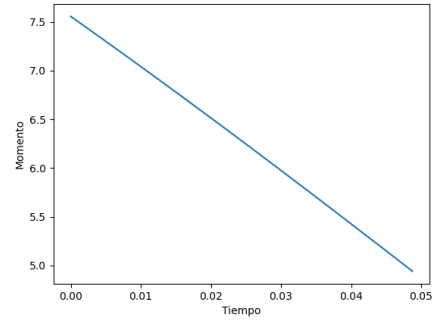


Figura 31. $|P_q|(\kappa = 0,5)$

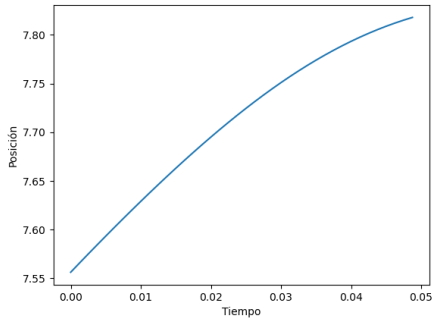


Figura 32. $|X_q|(\kappa = 1,0)$

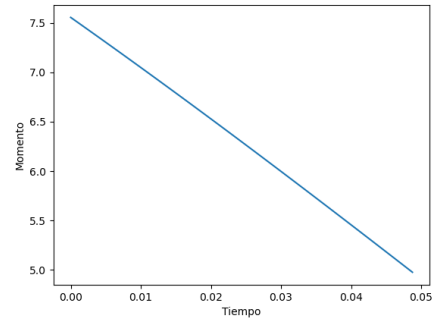


Figura 33. $|P_q|(\kappa = 1,0)$

Figura 34. Simulación *ODM*

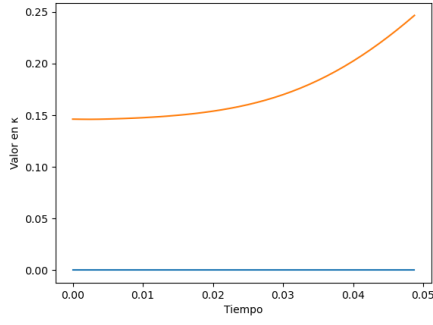


Figura 35. $|[X, P]|$ en azul y $|\Delta x \Delta p|$ en naranja (clásica)

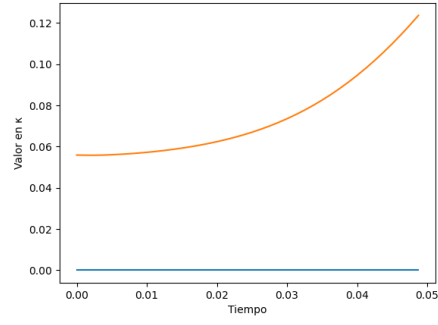


Figura 36. $|[X_q, P_q]|$ en azul y $|\Delta x_q \Delta p_q|$ en naranja ($\kappa = 0$)

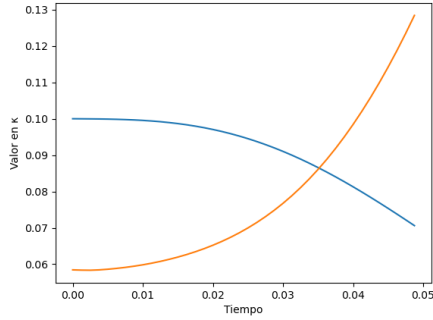


Figura 37. $|[X_q, P_q]|$ en azul y $|\Delta x_q \Delta p_q|$ en naranja ($\kappa = 0,1$)

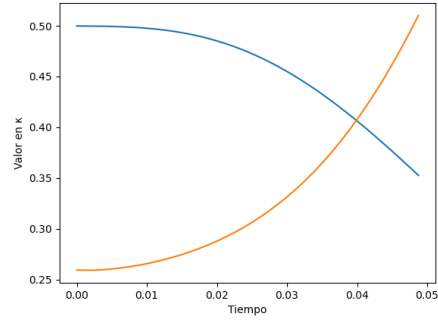


Figura 38. $|[X_q, P_q]|$ en azul y $|\Delta x_q \Delta p_q|$ en naranja ($\kappa = 0,5$)

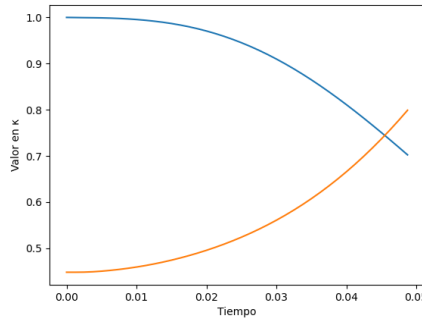


Figura 39. $|[X_q, P_q]|$ en azul y $|\Delta x_q \Delta p_q|$ en naranja ($\kappa = 1,0$)

Figura 40. Comparación del conmutador y la incertidumbre del sistema

A la vista de los resultado obtenidos hay que comentar varias cosas, la primera es que el caso $\kappa = 0$ reproduce exactamente igual el caso clásico que era lo que queríamos por lo cual el caso límite cumple correctamente nuestras estimaciones. Cabe comentar también que en todas las simulaciones solo son fiables hasta $t = 0,01$ aproximadamente, que es el momento en el que el paquete de ondas se ve reflejado con el borde del dominio, aún así el criterio está explicado en el anexo 6.8. Podemos ver entonces que fijado $\hbar = 1$, el conmutador de $mod([X_q, P_q])$ debería ser igual a κ y el principio de incertidumbre ser $|\Delta x_q \Delta p_q| \geq \kappa/2$. Para el tiempo inicial se cumple correctamente, empezando a desviarse del valor real por los ya citados efectos de borde. Fijándonos en el clásico, la incertidumbre es sobre $|\Delta x \Delta p|$, que viene de la propia gaussiana, no del principio de incertidumbre ya que son las variables clásicas, y aumenta, a parte de por efectos de borde, por el propio potencial cuártico que deforma el paquete.

Por último vemos que todos los modelos cumplen que la trayectoria clásica es la misma, cambiando solo la trayectoria cuántica, añadiendo una parte imaginaria muy pequeña. Esto también casa con la teoría propuesta y verifica que el formalismo es conveniente para tratar el límite y que todo converge suavemente.

4. Conclusiones y líneas de trabajo futuras

Patente queda a lo largo del trabajo que modelizar sistemas clásicos sobre espacios de Hilbert es posible y que a partir de eso podemos generalizar un formalismo que reproduce a la vez sistemas de dos naturalezas muy diferentes como son la *MC* y la *MQ*. Hemos visto que al hacerlo, y emplear el formalismo de Koopman para modelizar la mecánica estadística clásica sobre espacios de Hilbert, podemos considerar el problema del límite clásico de una forma simple. Hemos visto cómo podemos definir una familia continua de modelos dinámicos cuánticos indexadas por un parámetro $\kappa \in [0, 1]$, cuyo límite en $\kappa = 0$ es el sistema clásico que, cuantizado, da el sistema cuántico del extremo $\kappa = 1$. Este hecho abre las puertas a un objetivo que se ha discutido al principio del trabajo, modelizar sistemas complejos como átomos o moléculas bajo este formalismo. La idea sería tomar dos estados sobre el espacio de *Fock* del producto tensorial de ambos y añadir un término de interacción. A partir de esto, sería estudiar qué sucede cuando uno de los dos sistemas presenta $\kappa = 0$ y el otro $\kappa \neq 0$. Sobre todo sería bueno estudiar si ambos sistemas sienten la interacción, ya que un problema que presentan la mayoría de aproximaciones híbridas, es que no se consigue que ambos sistemas sientan la interacción. Se deja como línea futura de trabajo ya que no se ha contado con el tiempo suficiente para realizarlo.

Otro de los puntos a futuro es estudiar nuevas formas de la función F de la sección 2.4.3 que nos permitía interpolar las dinámicas de forma continua e implementar mejor las correcciones cuánticas, manteniendo el resto de sus propiedades. Todo esto con el afán de que en su forma actual solo admite correcciones en el momento λ_p , no en x . Aún así son correcciones prometedoras ya que al estudiar el caso de Wigner (anexo 6.4), vemos que las correcciones se realizan sobre las derivadas tercera del momento.

Siguiendo con líneas de trabajo a futuro, sería conveniente tratar los experimentos sobre el formalismo unificado con precisiones mayores, véase aumentar la complejidad del mallado o el orden de las simulaciones de Runge-Kutta en el caso del segundo experimento. De hecho, para conseguir que la simulación sobre el espacio de fases funcione sería conveniente barajar opciones como elementos finitos. Para la primera simulación sería conveniente buscar formas de aumentar el tamaño de N , sin embargo es problemático ya que la implementación del estado coherente lleva implícito un factorial que limitaba esa N en gran medida.

5. Bibliografía

- [1] Dariusz Chruściński. “Koopman’s approach to dissipation”. En: Reports on Mathematical Physics 57.3 (1 de jun. de 2006), págs. 319-332. ISSN: 0034-4877. DOI: 10.1016/S0034-4877(06)80023-6. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0034487706800236>.
- [2] B. O. Koopman. “Hamiltonian Systems and Transformation in Hilbert Space”. En: 17.5 (mayo de 1931). Publisher: Proceedings of the National Academy of Sciences, págs. 315-318. DOI: 10.1073/pnas.17.5.315. URL: <https://www.pnas.org/doi/10.1073/pnas.17.5.315>.
- [3] Jon Brogaard. “Wigner function formalism in Quantum mechanics”. Tesis doct. Faculty of Science-University of Copenhagen, 2015. URL: https://nbi.ku.dk/english/theses/bachelor-theses/jon-brogaard/Jon_Brogaard_Bachelorthesis_2015.pdf.
- [4] E. Wigner. “On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium”. En: Physical Review 40.5 (1 de jun. de 1932). Publisher: American Physical Society, págs. 749-759. DOI: 10.1103/PhysRev.40.749. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.40.749>.
- [5] Denys I. Bondar et al. “Operational Dynamic Modeling Transcending Quantum and Classical Mechanics”. En: Physical Review Letters 109.19 (8 de nov. de 2012), pág. 190403. ISSN: 0031-9007, 1079-7114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.190403. arXiv: 1105.4014[quant-ph]. URL: <http://arxiv.org/abs/1105.4014>.
- [6] I. M. Gelfand y G. E. Shilov. Generalized Functions Vol 1 Properties And Operations. 1964. URL: <http://archive.org/details/gelfand-shilov-generalized-functions-vol-1-properties-and-operations>.
- [7] Ram P. Kanwal. Generalized functions: theory and technique. 2nd ed. Boston: Birkhäuser, 1998. ix+462. ISBN: 978-0-8176-4006-4.

6. Anexos

6.1. Teorema de Ehrenfest

El teorema de Ehrenfest permite relacionar la variación temporal de un operador con su conmutador, para ello vamos a enunciarlo formalmente. Sea $\hat{A}$ un operador autoadjunto sobre un espacio de Hilbert y $|\Psi\rangle$ una función de onda sobre el mismo espacio. En ese caso bajo el generador de dinámica del sistema, que denotaremos como el operador autoadjunto $\hat{H}$, la variación del valor esperado de A respecto al tiempo es:

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \Psi \rangle \quad (112)$$

La demostración del teorema es bastante directa y sigue los siguientes cálculos. Tomando que el sistema esta definido sobre un volumen V , calculamos explícitamente la variación del valor esperado de A .

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle &= \frac{d}{dt} \int_V dx^3 \Psi^\dagger \hat{A} \Psi = \int_V dx^3 \frac{d\Psi^\dagger}{dt} \hat{A} \Psi + \int_V dx^3 \Psi^\dagger \hat{A} \frac{d\Psi}{dt} + \int_V dx^3 \Psi^\dagger \frac{d\hat{A}}{dt} \Psi = \\ &= \langle d\Psi/dt | \hat{A} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{A} | d\Psi/dt \rangle + \langle \Psi | \partial \hat{A} / \partial t | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (113)$$

Puesto que $|\Psi\rangle$ cumple el teorema de Stone ((6.2)), podemos escribir el generador de dinámica del sistema. Y por tanto:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle \quad (114)$$

Por lo que sustituyendo en la ecuación anterior tenemos que:

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{H} \hat{A} | \Psi \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{A} \hat{H} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \Psi \rangle \quad (115)$$

Con ello queda probado el teorema ya que los dos primeros términos de la expresión se corresponden con el conmutador. La importancia de este teorema para el desarrollo de los resultados es que midiendo experimentalmente la evolución del operador $\hat{A}$ y asumiendo que no depende explícitamente del tiempo, podemos obtener las relaciones de conmutación del mismo con el generador de dinámica. Y conocer estas relaciones permite, a partir del cálculo de Weyl ((6.3)), conocer la forma explícita del generador.

6.2. Teorema de Stone

El teorema de Stone, obtenido de [5], dice: Si $\hat{U}(t)$ es un grupo uniparamétrico unitario fuertemente continuo (en general la evolución de un sistema sucede bajo un grupo unitario de este tipo; por ejemplo $SU(2)$ para el *Spin* o $SO(3)$ para el momento angular de un átomo), en ese caso existe un único operador autoadjunto $\hat{H}$, que denotaremos generador de dinámica, que cumple:

$$U(t) = e^{-i\hat{H}t} \quad (116)$$

La interpretación de este teorema es que la solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y a la ecuación de Liouville son únicas, además de conservar la norma. A nivel físico, este teorema refleja que los estados (o los observables en función de la visión) dependen suavemente del tiempo.

6.3. Cálculo de Weyl

El análisis no conmutativo, obtenido de [5], en lo que concierne a este trabajo, busca relacionar funciones de variables que no conmutan entre si y obtener resultados a partir de los mismo. Estos cálculos nacen a la vez que la mecánica cuántica por la creciente necesidad de trabajar con variables no conmutativas. En este caso nos centraremos en el cálculo de Weyl, siendo una de las representaciones más comunes, más estrictamente en el teorema 1 que servirá para relacionar ecuaciones de conmutadores con ecuaciones diferenciales. El punto de partida del desarrollo es que bajo transformada de Fourier, una función de n variables lo suficientemente suave no cambia. Con ello podemos escribir una función arbitraria f de operadores que no conmutan como:

$$f(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int \prod_{l=1}^n d\xi_l d\mu_l \exp \left[i \sum_{q=1}^n \mu_q (\hat{A}_q - \xi_q) \right] f(\xi_1, \dots, \xi_n) \quad (117)$$

Teniendo en cuenta que la exponencial de un operador esta definida como la serie de Taylor de la misma:

$$\exp(\hat{A}) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} \quad (118)$$

La siguiente identidad, $f^\dagger(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n) = f(\hat{A}_1^\dagger, \dots, \hat{A}_n^\dagger)$ asegura que una función de operadores autoadjuntos es autoadjunta en si misma: Podemos demostrar esa igualdad a partir de:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \hat{A}_k} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left[f(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_k + \epsilon, \dots, \hat{A}_n) - f(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_k, \dots, \hat{A}_n) \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^n} \int \prod_{l=1}^n d\xi_l d\mu_l i \mu_k \exp \left[i \sum_{q=1}^n \mu_q (\hat{A}_q - \xi_q) \right] f(\xi_1, \dots, \xi_n) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^n} \int \prod_{l=1}^n d\xi_l d\mu_l f(\xi_1, \dots, \xi_n) \left(-\frac{\partial}{\partial \xi_k} \right) \exp \left[i \sum_{q=1}^n \mu_q (\hat{A}_q - \xi_q) \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^n} \int \prod_{l=1}^n d\xi_l d\mu_l \exp \left[i \sum_{q=1}^n \mu_q (\hat{A}_q - \xi_q) \right] \frac{\partial f(\xi_1, \dots, \xi_n)}{\partial \xi_k} \end{aligned} \quad (119)$$

Con esto tenemos definido un mapa uno-uno entre la función $f(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n)$ y $f(\xi_1, \dots, \xi_n)$ y entre sus respectivas derivadas. Obtenido esto podemos enunciar el llamado teorema 1 que es de vital importancia:

Sean $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n$ algunos operadores y sea $\hat{C}_k = [\hat{A}_k, \hat{B}]$ con $k = 1, \dots, n$. Si $[\hat{A}_k, \hat{C}_l] = [\hat{B}, \hat{C}_k] = 0 \forall k, l = 1, \dots, n$, entonces:

$$[f(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n), \hat{B}] = \sum_{k=1}^n [\hat{A}_k, \hat{B}] \frac{\partial}{\partial \hat{A}_k} f(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n) \quad (120)$$

Con $f(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n)$ definido como en la ecuación (117). Para la prueba de este resultado partimos de definir $\hat{A} := i \sum_{q=1}^n \mu_q (\hat{A}_q - \xi_q)$ y $\hat{C} := [\hat{A}, \hat{B}] = i \sum_{q=1}^n \mu_q \hat{C}_q$. Si ahora tomamos que el conmutador de $[\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0$ bajo las condiciones del teorema podemos usar la siguiente identidad:

$$[\hat{A}_1 \dots \hat{A}_n, \hat{B}] = \sum_{k=1}^n \hat{A}_1 \dots \hat{A}_{k-1} [\hat{A}_k, \hat{B}] \hat{A}_{k+1} \dots \hat{A}_n \quad (121)$$

Obteniendo así que $[\hat{A}^k, \hat{B}] = k\hat{C}\hat{A}^{k-1}$ y usando la expansión de la exponencial tenemos:

$$[\exp(\hat{A}), \hat{B}] = \hat{C}\exp(\hat{A}) = \sum_{q=0}^n \hat{C}_q \frac{\partial}{\partial \hat{A}_q} \exp(\hat{A}) \quad (122)$$

Sustituyendo esta expresión en (117) y haciendo el conmutador con $\hat{B}$ llegamos a la expresión que queríamos demostrar.

En favor de ejemplificar los cálculos que realizamos en el marco teórico, vamos a calcular explícitamente la conversión de una de las ecuaciones de la parte clásica.

$$i[\hat{L}, \hat{x}] = \hat{p}/m \Rightarrow [L(\hat{x}, \hat{p}, \hat{\lambda}_x, \hat{\lambda}_p), \hat{x}] = [\hat{\lambda}_x, \hat{x}] \frac{\partial}{\partial \hat{\lambda}_x} L(\hat{x}, \hat{p}, \hat{\lambda}_x, \hat{\lambda}_p) \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \hat{\lambda}_x} L = \hat{p}/m$$

6.4. Cálculo de la evolución temporal de la función de Wigner

Siguiendo el mismo desarrollo usado en 2,2, obtenido del mismo desarrollo en [3], partimos de considerar que para un hamiltoniano no dependiente del tiempo, la evolución temporal de sus autoestados es

$$\psi_n(x, t) = u_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \quad (123)$$

Si recuperamos la expresión (26), es directo comprobar que la dependencia temporal siempre se anula entre estados, por lo que la función de Wigner no depende explícitamente del tiempo. Sin embargo, esto no implica que la función de Wigner no tenga una dependencia temporal, ya que tanto x como p dependen del tiempo. Por ello vamos a derivar respecto a t y usar la ecuación de Schrödinger para eliminar las derivadas parciales.

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dy e^{-ipy/\hbar} \left[\psi(x+y/2) \frac{\partial \psi^*(x-y/2)}{\partial t} + \frac{\partial \psi(x+y/2)}{\partial t} \psi^*(x-y/2) \right] \quad (124)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x) \psi(x, t) \quad (125)$$

Cabe destacar que $\psi(x, t)$ no tiene porque ser un autoestado. Introduciendo la ecuación (125) en (124) y reorganizando podemos separar la evolución en la parte cinética y la parte potencial, quedando

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{\partial W_T}{\partial t} + \frac{\partial W_U}{\partial t} \quad (126)$$

$$\frac{\partial W_T}{\partial t} = \frac{1}{4\pi i m} \int dy e^{-ipy/\hbar} \left[\psi(x+y/2) \frac{\partial^2 \psi^*(x-y/2)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x+y/2)}{\partial x^2} \psi^*(x-y/2) \right] \quad (127)$$

$$\frac{\partial W_U}{\partial t} = \frac{2\pi}{i\hbar^2} \int dy e^{-ipy/\hbar} [U(x+y/2) - U(x-y/2)] \psi(x+y/2) \psi^*(x-y/2) \quad (128)$$

Ahora vamos a integrar cada una de las dos partes de la expresión anterior, para ello empezamos con W_T . Para cada uno de los dos sumandos de la expresión podemos usar que

$$\int dy e^{-ipy/\hbar} \psi(x+y/2) \frac{\partial^2 \psi^*(x-y/2)}{\partial x^2} = -2 \int dy e^{-ipy/\hbar} \psi(x+y/2) \frac{\partial^2 \psi^*(x-y/2)}{\partial x \partial y} \quad (129)$$

Esta expresión la integramos por partes quedándonos

$$\frac{-2ip}{\hbar} \int e^{-ipy/\hbar} \psi(x+y/2) \frac{\partial \psi^*(x-y/2)}{\partial x} + \int e^{-ipy/\hbar} \frac{\partial \psi(x+y/2)}{\partial x} \frac{\partial \psi^*(x-y/2)}{\partial x} \quad (130)$$

Si ahora repetimos el proceso para el segundo sumando, obtenemos la misma expresión pero con el segundo termino cambiado de signo, lo que permite expresar (127) como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_T}{\partial t} &= \frac{-p}{m2\pi\hbar} \int e^{-ipy/\hbar} \left[\psi(x+y/2) \frac{\partial \psi^*(x-y/2)}{\partial x} + \frac{\partial \psi(x+y/2)}{\partial x} \psi^*(x-y/2) \right] \\ &= \frac{-p}{m2\pi\hbar} \frac{\partial}{\partial x} \int e^{-ipy/\hbar} [\psi(x+y/2) \psi^*(x-y/2)] = \frac{-p}{m} \frac{\partial W}{\partial x} \end{aligned} \quad (131)$$

Para integrar (128), partimos de tratar U como una expansión en serie

$$\begin{aligned} U(x+y/2) - U(x-y/2) &= \sum_n \frac{\frac{\partial^n U(x)}{\partial x^n}}{n!} \left[\left(\frac{-1}{2y} \right)^n - \left(\frac{-1}{2y} \right)^n \right] \\ &= \sum_s \frac{\frac{\partial^{2s+1} U(x)}{\partial x^{2s+1}}}{(2s+1)!} \left(\frac{1}{2} \right)^{2s} y^{2s+1} \end{aligned} \quad (132)$$

Introduciendo este resultado en (128) y escribiendo la derivada completa de W tenemos

$$\frac{\partial W(x,p)}{\partial t} = \frac{-p}{2m} \frac{\partial W(x,p)}{\partial x} + \sum_s (-\hbar^2)^s \frac{1}{(2s+1)!} \left(\frac{1}{2} \right)^{2s} \frac{\partial^{2s+1} U(x)}{\partial x^{2s+1}} \frac{\partial^{2s+1} W(x,p)}{\partial p^{2s+1}} \quad (133)$$

Puesto que nuestro hamiltoniano es el del oscilador armónico en el primer caso, vamos a ignorar las derivadas de orden mayor que dos, puesto que no aparecen en el oscilador. Esto reduce la expresión en gran medida a

$$\frac{\partial W(x,p)}{\partial t} = \frac{-p}{2m} \frac{\partial W(x,p)}{\partial x} + \frac{\partial U(x)}{\partial x} \frac{\partial W(x,p)}{\partial p} \quad (134)$$

Vista esta expresión, lo primero que llama la atención es que es una ecuación puramente clásica, ya que no aparece el término $\hbar$. Otro detalle importante es que cumple que no depende explícitamente del tiempo como habíamos dicho al comenzar el desarrollo. Por último, si usamos el paréntesis de Poisson, lo que hemos obtenido es que W cumple una ecuación de Liouville

$$\frac{\partial W(x,p)}{\partial t} = -\{W(x,p), H\} = -\frac{\partial W(x,p)}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} + \frac{\partial W(x,p)}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} \quad (135)$$

Este hecho nos asegura que la función de distribución de Wigner evoluciona temporalmente igual que una función de densidad puramente clásica en el orden 2, resultado de gran importancia para nuestros experimentos numéricos.

Por otro lado vamos a añadir términos de orden 4, en ese caso será relevante para nuestro otro potencial. Con ello la expresión (133) se reduce a

$$\frac{\partial W(x,p)}{\partial t} = \frac{-p}{2m} \frac{\partial W(x,p)}{\partial x} + \frac{\partial U(x)}{\partial x} \frac{\partial W(x,p)}{\partial p} - \frac{\hbar^2}{4 \cdot 3!} \frac{\partial^3 U(x)}{\partial x^3} \frac{\partial^3 W(x,p)}{\partial p^3} \quad (136)$$

Observamos que la evolución se compone del paréntesis de Poisson más un término puramente cuántico que varía con la derivada tercera del sistema

6.5. Resumen de la mecánica hamiltoniana geométrica

El objetivo de esta sección es aclarar el concepto geométrico que hay detrás de la proposición de Koopman. Para ello vamos a partir de tomar $\mathbb{R}^n$ como nuestra variedad $\mathcal{P}$. A partir del mismo podemos definir un fibrado tangente implícito a la variedad $T\mathbb{R}^n$, y por tanto un fibrado cotangente a la misma $T^*\mathbb{R}^n$ cuyo cuerpo lo tomaremos como las funciones infinitamente diferenciables $C^\infty(\mathbb{R}^n)$ (vamos a prescindir de explicar como llegar a ello puesto que no es necesario para entender la explicación). Con ello podemos tomar las uno-formas (aplicaciones que toman un campo vectorial sobre la variedad y lo convierten a un campo escalar sobre el cuerpo) definidas sobre dicho fibrado contangente $\Lambda^1(T^*\mathbb{R}^n)$ donde denotaremos $\{q^k\}$ la base de $\mathbb{R}^n$ y $\{p_k\}$ la base de la fibra. De entre todas las uno-formas vamos a tomar $\theta = p_k dq^k$ donde dq^k son los vectores en la dirección de la base. A partir de ello podemos definir una dos-forma (aplicación sobre dos campos vectoriales antisimétrica al cuerpo de funciones) de la siguiente forma: $\omega = -d\theta = dq^k \wedge dp_k$. Si esta forma es definida cerrada, es decir, que proviene directamente de la diferencial de una uno-forma (por lo cual su diferencial es 0) y además exigimos que sea no degenerada tenemos una variedad simpléctica.

Con todo esto podemos tomar una función $\mathcal{H} \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ que denotaremos como Hamiltoniano y a partir de la misma definiremos el campo vectorial $X_H = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} \frac{\partial}{\partial q^k} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^k} \frac{\partial}{\partial p_k}$. Ya podemos definir la siguiente ecuación tensorial que reproduce las ecuaciones de Hamilton sobre cualquier sistema de coordenadas:

$$i_{X_H} \omega = d\mathcal{H} \quad (137)$$

En favor de ejemplificar como se aplican los operadores para recuperar las ecuaciones de Hamilton vamos a desarrollar la expresión. Antes de comenzar el desarrollo, puesto que ω es un tensor, tomamos un sistema de referencia en el que $\omega = \omega(q, p) dq \wedge dp = dq \wedge dp$. Tomando ahora el campo X_H realizamos la operación $i_{X_H} \omega$.

$$i_{X_H} \omega = \left(q(q, p) \frac{\partial}{\partial q^k} + p(q, p) \frac{\partial}{\partial p_k} \right) (dq \otimes dp - dp \otimes dq) = q(q, p) dp - p(q, p) dq \quad (138)$$

Ahora realizamos la diferencial del hamiltoniano:

$$d\mathcal{H} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} dq + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} dp \quad (139)$$

Igualando ambas expresiones recuperamos las ecuaciones de Hamilton como habíamos propuesto:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} = -p(q, p) \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = q(q, p) \quad (140)$$

6.6. Cálculo exacto del oscilador armónico cuántico

Recuperando de los experimentos numéricos, el oscilador armónico cuántico requiere un tratamiento idéntico para la primera parte clásica, pero con ecuación de Schrödinger bajo un potencial de orden 2, vista anteriormente en (2).

$$[H] = \left[\frac{P^2}{m}\right] + [m\omega^2 x^2] = \frac{m^2 \cdot l^2}{m \cdot t} + \frac{m \cdot l^2}{t^2} = \frac{m \cdot l^2}{t^2} = E \quad (141)$$

Usando la adimensionalización del Hamiltoniano $\hbar\omega$, los operadores X y P pasan a ser:

$$\begin{aligned} \mathcal{X} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \\ \mathcal{P} &= \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} P \\ \mathcal{H} &= \frac{1}{2}\mathcal{P}^2 + \frac{1}{2}\mathcal{X}^2 \end{aligned} \quad (142)$$

Usando los operadores a y $a^\dagger$, definidos en forma matricial en ((97)) y ((98)) podemos reescribir $\mathcal{H}$. Cabe resaltar que en este caso solo tenemos un par de operadores a , ya que en el caso cuántico, P depende directamente de x como $-i\hbar\partial_x$.

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{X} + i\mathcal{P}) \\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{X} - i\mathcal{P}) \\ H &= \hbar\omega\mathcal{H} = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2) \end{aligned} \quad (143)$$

El producto de $a^\dagger a$ es el operador N , el cual si cuenta con autoestados y es de la forma:

$$N = \begin{bmatrix} \ddots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 3 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & 2 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (144)$$

Claramente es una matriz diagonal por lo que la evolución temporal es directa:

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_n C_n |n\rangle \Rightarrow |\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n e^{-i\omega(n+1/2)(t-t_0)} |n\rangle = \sum_n C_n(t-t_0) |n\rangle \quad (145)$$

Donde C_n son los coeficientes del estado en $t = 0$. Por tanto para el caso cuántico una simulación carece de sentido, ya que existe una solución exacta al sistema en orden 2. Para ordenes superiores sucede lo mismo que en el caso clásico al implementar la base.

6.7. Cálculo exacta del oscilador armónico clásico

Partiendo de la ecuación de Liouville (ver (2)) y de las soluciones del oscilador armónico clásico $x(t) = A \cdot \cos(\omega t + \theta)$ y $p(t) = -m\omega A \cdot \sin(\omega t + \theta)$, podemos escribir la función densidad, teniendo en cuenta que la hemos definido como una gaussiana de la siguiente forma:

$$\rho(x, p; t) = N e^{-\frac{(x-x(t))^2}{c^2} - \frac{(p-p(t))^2}{d^2}} \quad (146)$$

Donde $x(t)$ y $p(t)$ corresponden con la posición del centro de la gaussiana en función del tiempo, c y d son las sigmas en cada dirección y N es el factor de normalización para que la función valga 1 en todo el espacio definido. Para calcular esta N realizamos la integral en x y en p a todo el dominio y la introducimos en $\rho(x, p; t)$ quedando:

$$N \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-x(t))^2}{c^2} - \frac{(p-p(t))^2}{d^2}} dx dp = N c d \pi = 1 \quad (147)$$

$$\rho(x, p; t) = \frac{1}{c d \pi} \exp \left\{ -\frac{(x - A \cdot \cos(\omega t + \theta))^2}{c^2} - \frac{(p + A m \omega \cdot \sin(\omega t + \theta) - b)^2}{d^2} \right\} \quad (148)$$

Podemos representarla, ajustando a las mismas constantes que la simulación, para comparar con la solución obtenida por métodos numéricos.

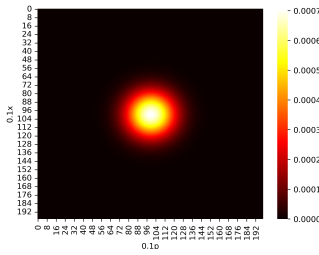


Figura 41. $t = 0.0$

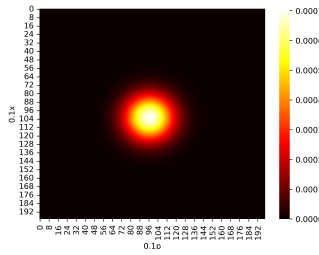


Figura 42. $t = 0.03$

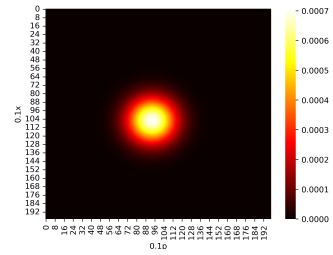


Figura 43. $t = 0.06$

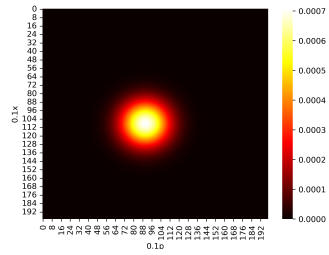


Figura 44. $t = 0.09$

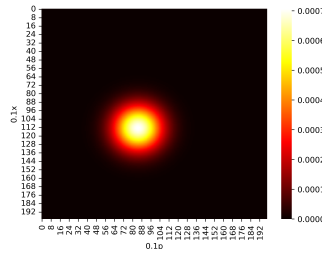


Figura 45. $t = 0.14$

Figura 46. Cálculo exacto de la función densidad clásica para un potencial de orden 2

6.8. Tiempo de simulación

Debido a que en las simulaciones sobre el espacio de *Fock* hemos considerado dimensión finita, tanto que el estado coherente funciona igual que una gaussiana clásica, como que el conmutador queda bien definido, son aproximaciones que se cumplen mientras los efectos del borde sean despreciables, por tanto hay que elegir un criterio, ya que a partir de cualquier mínimo paso de integración, el modelo diverge del real. El criterio a seguir fue el siguiente: Cuando la cola de la gaussiana coincide con el nivel más alto del sistema, terminamos la simulación. En nuestro caso, usando la gaussiana propuesta en el experimento, sobre un espacio de $N = 40$, es decir 1600 en total, obtenemos lo siguiente.

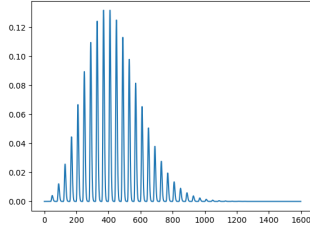


Figura 47. $t = 0.00$

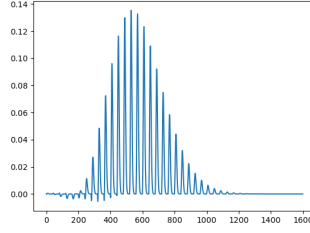


Figura 48. $t = 0.01$

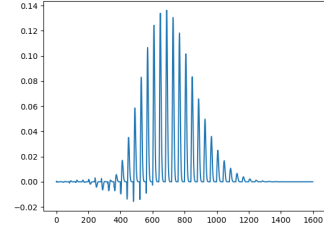


Figura 49. $t = 0.02$

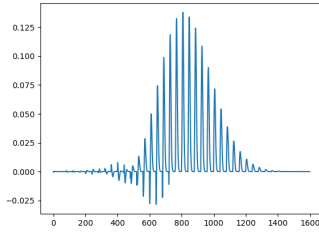


Figura 50. $t = 0.03$

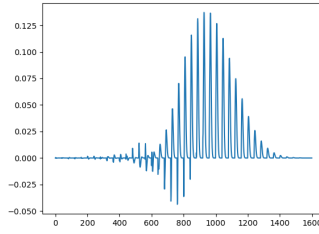


Figura 51. $t = 0.04$

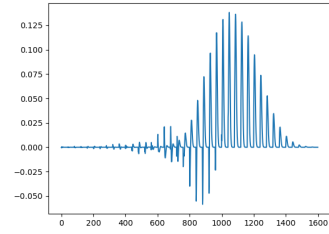


Figura 52. $t = 0.05$

Figura 53. Cálculo del tiempo de simulación sobre el espacio de *Fock*

Usando este criterio no eliminamos completamente los efectos de borde, que se observan en la parte reflejada, pero si que podemos considerar que las variaciones respecto a los valores reales serán controladas, por tanto tomamos que el t final es 0,05 con paso temporal de 0,00125.

6.9. Caso unificado parte 2

Para el otro enfoque del caso unificado vamos a usar un desarrollo análogo a la segunda parte clásica, vamos a buscar resolver la ecuación (90) bajo un mallado discreto. Sin embargo esta ecuación se encuentra sobre el espacio $x - \lambda_p$, que es necesario ya que para que la dinámica tenga sentido hay que realizarla sobre dos variables que conmuten en todos los espacios, a diferencia del resto de parejas que se pueden elegir. Sin embargo, esto complica el implementar una gaussiana idéntica a la clásica, para ello hacemos uso de la ecuación (91) con la cual vemos como pasar entre espacios. Discretizando la expresión podemos llegar a una forma funcional sobre el mallado como en la parte clásica

$$\rho(x - m, x + m) = \sqrt{\frac{\hbar\kappa}{2\pi}} \sum_p \Delta p \alpha(x, p) e^{-2i \frac{pm}{\hbar\kappa}}; \quad m = \frac{\hbar\kappa\lambda_p}{2} \quad (149)$$

$$\alpha(x, p) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar\kappa}} \sum_p \Delta m \rho(x - m, x + m) e^{-2i \frac{pm}{\hbar\kappa}}; \quad m = \frac{\hbar\kappa\lambda_p}{2} \quad (150)$$

Donde ρ es la función densidad sobre $x - \lambda_p$ y α sobre $x - p$. Usando la ecuación (90) igual que en el caso clásico buscábamos calcular la evolución en cada espacio, sin embargo la complejidad numérica no ha permitido llegar a resultados con esa simulación ya que aun para el caso únicamente cuadrático con $\kappa = 0$, los resultados no tenían sentido.

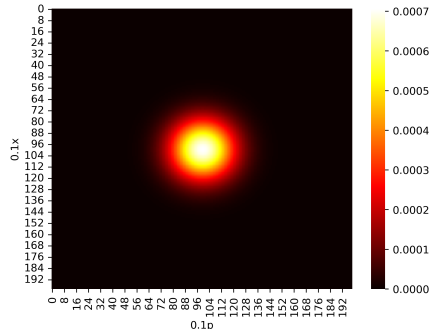


Figura 54. $t = 0.00$

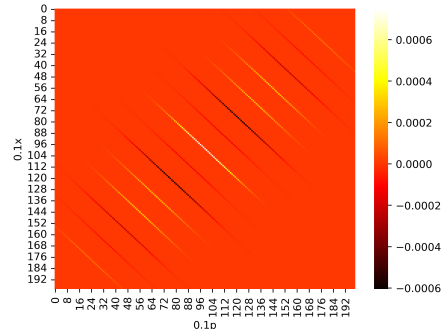


Figura 55. $t = 0.01$

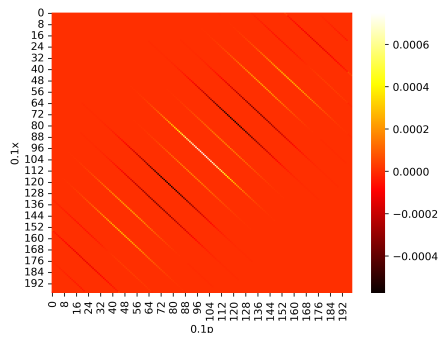


Figura 56. $t = 0.02$

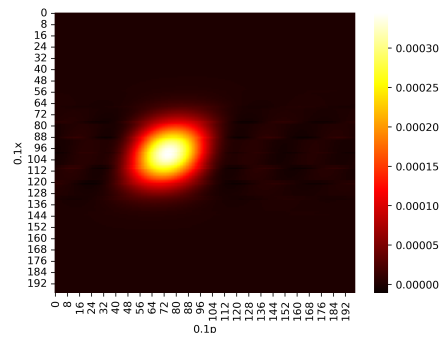


Figura 57. $t = 0.03$

Figura 58. Simulación Wigner en *ODM*

Antes de abandonar esta vía y comparar solo los resultados de la primera, decidimos tomar un enfoque distinto para por lo menos poder tener la intuición sobre el espacio de fases. Para ello usando el anexo (6.4) planteamos la ecuación exacta de la función de Wigner.

Para ello tomamos las ecuaciones de evolución de ese anexo, que para el caso cuadrático se corresponde con:

$$\frac{\partial W(x,p)}{\partial t} = \frac{-p}{2m} \frac{\partial W(x,p)}{\partial x} + \frac{\partial U(x)}{\partial x} \frac{\partial W(x,p)}{\partial p} \quad (151)$$

Y para el caso cuártico se corresponden con:

$$\frac{\partial W(x,p)}{\partial t} = \frac{-p}{2m} \frac{\partial W(x,p)}{\partial x} + \frac{\partial U(x)}{\partial x} \frac{\partial W(x,p)}{\partial p} - \frac{\hbar^2}{4 \cdot 3!} \frac{\partial^3 U(x)}{\partial x^3} \frac{\partial^3 W(x,p)}{\partial p^3} \quad (152)$$

A diferencia de usar *ODM*, estas evoluciones no permiten el parámetro κ para estudio del límite, por lo cual solo podemos simular $\hbar = 0$ y $\hbar = 1$. Puesto que al implementar un código, el $\hbar = 0$ es idéntico al clásico solo vamos a exponer el caso $\hbar = 1$ y para el potencial $U(x) = 0,5x^2 + 0,25Cx^4$ con $C = 0,1$.

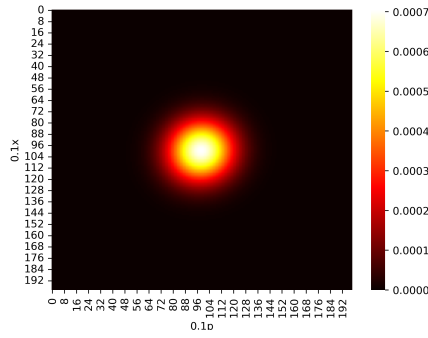


Figura 59. $t = 0.00$

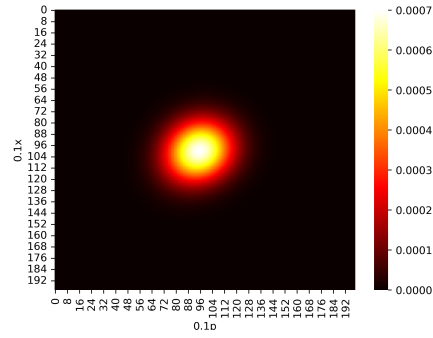


Figura 60. $t = 0.03$

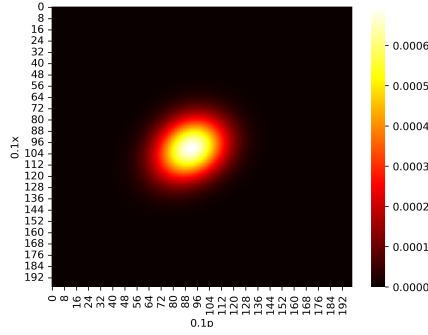


Figura 61. $t = 0.06$

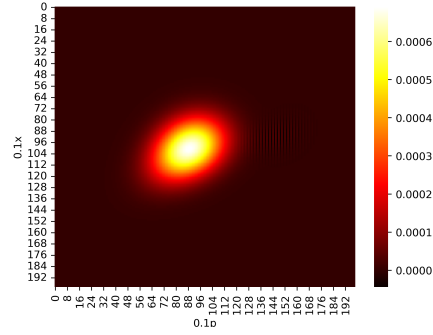


Figura 62. $t = 0.09$

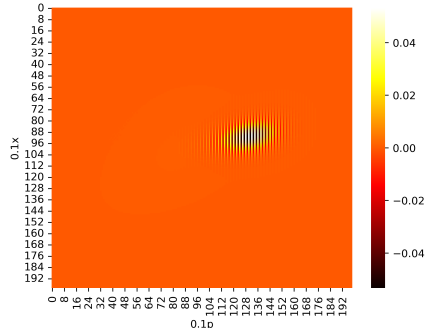


Figura 63. $t = 0.12$

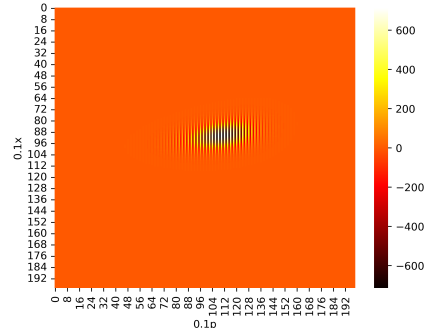


Figura 64. $t = 0.16$

Figura 65. Simulación cuántica de Wigner

6.10. Códigos clásico 1

Están todos en el repositorio de <https://gitfront.io/r/Andres/ksx4REaU6oCR/TFG/>
(Oscilador clásico)

```
1
2 import numpy as np
3 import numpy.linalg as linalg
4 import matplotlib.pyplot as plt
5 from scipy.linalg import expm
6
7 N = int(40)
8
9 w = 1
10 C = 0.1
11 a = np.zeros((N,N)) #destrucci n
12 a1 = np.zeros((N,N)) #creaci n
13
14 for k in range(N):
15     for i in range(N):
16         if i == k - 1:
17             a[k,i] = np.sqrt(N - k)
18         else:
19             if i == k + 1:
20                 a1[k,i] = np.sqrt(N - 1 - k)
21 alpha = 1/np.sqrt(2)*(a1+a)
22 beta = 1j/np.sqrt(2)*(a1-a)
23
24 P = np.kron(alpha,np.identity(N))
25 lambda_p = np.kron(beta,np.identity(N))
26 X = np.kron(np.identity(N),alpha)
27 lambda_x = np.kron(np.identity(N),beta)
28 COM1 = X@P - P@X
29 H = P@lambda_x - X@lambda_p - C*(X@X@X@lambda_p)
30 Psi = np.zeros((np.power(N,2),1), complex)
31
32 al = 0
33 for k in range(N):
34     for i in range(N):
35         Psi[k*N+i] = np.exp(-0.5*(k*N+i-4*(N)-5)*(k*N+i-4*(N)-5)/30/30)
36         #Psi[k*N+i] = Psi_p[k]*Psi_x[i]
37         #Psi[k*N+i] = 1
38
39 al = Psi.T.conjugate()@Psi
40 Psi = Psi/np.sqrt(al)
41 V = []
42 B = []
43 for i in range(N*N):
44     V.append(Psi[i].real)
45     B.append(i)
46 plt.plot(B,V)
47 aux = 0
48
49 C1 = []
50 C2 = []
51 C3 = []
52 C4 = []
53 C7 = []
54 DD = []
55 aux1 = 0
56 aux2 = 0
57 aux3 = 0
58 aux4 = 0
59 aux7 = 0
```

```

60 j = 0
61 for k in range(10):
62     L = expm(-1j*H*j*0.1)
63     psi = L@Psi
64     aux1 = (psi.T.conjugate()@X@psi)[0]
65     aux2 = (psi.T.conjugate()@P@psi)[0]
66     aux3 = (psi.T.conjugate()@lambda_x@psi)[0]
67     aux4 = (psi.T.conjugate()@lambda_p@psi)[0]
68     aux7 = (psi.T.conjugate()@COM1@psi)[0]
69     C1.append(np.sqrt(aux1*aux1.conjugate()))
70     C2.append(np.sqrt(aux2*aux2.conjugate()))
71     C3.append(np.sqrt(aux3*aux3.conjugate()))
72     C4.append(np.sqrt(aux4*aux4.conjugate()))
73     C7.append(np.sqrt(aux7*aux7.conjugate()))
74     DD.append(j*0.1)
75     j += 1
76     print(j)
77     #plt.savefig("prueba" + str(j) + ".png")
78 plt.figure(j+1)
79 plt.xlabel('Tiempo')
80 plt.ylabel('Posici n')
81 plt.plot(DD,C1)
82 #plt.savefig("Fock_c_1.png")
83 plt.figure(j+2)
84 plt.xlabel('Tiempo')
85 plt.ylabel('Momento')
86 plt.plot(DD,C2)
87 #plt.savefig("Fock_c_1.png")
88 plt.figure(j+3)
89 plt.xlabel('Tiempo')
90 plt.ylabel('Momento de la posici n')
91 plt.plot(DD,C3)
92 #plt.savefig("Fock_c_1.png")
93 plt.figure(j+4)
94 plt.xlabel('Tiempo')
95 plt.ylabel('Momento del momento')
96 plt.plot(DD,C4)
97 #plt.savefig("Fock_c_1.png")
98 plt.figure(j+5)
99 plt.xlabel('Tiempo')
100 plt.ylabel('Conmutador cl sico')
101 plt.plot(DD,C7)
102 #plt.savefig("Fock_c_1.png")

```

6.11. Código clásico 2

Están todos en el repositorio de <https://gitfront.io/r/Andres/ksx4REaU6oCR/TFG/>
(Función $Densidad_{clásico}$; Wigner)

```
1 import numpy as np
2 import numpy.linalg as linalg
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 from mpl_toolkits.mplot3d import axes3d
5 from scipy.linalg import expm
6 import seaborn as sns
7
8 N = 199
9 m = 1
10 w = 1
11 C = 0
12 du = 0.1
13 dv = 0.1
14 b = 0.5*N
15 d = 0.5*N
16 c = 15
17 f = 15
18 a = 0
19 x = 1
20 x0 = 0
21 p0 = 0
22 Sigma_x = 0
23 Sigma_p = 0
24 com = 0
25 rho = np.zeros((N,N), float)
26 k1 = np.zeros((N,N), float)
27 k2 = np.zeros((N,N), float)
28 k3 = np.zeros((N,N), float)
29 k4 = np.zeros((N,N), float)
30
31
32 t = 0
33 dt = 10e-4
34 for i in range(N):
35     for j in range(N):
36         rho[i,j] = np.exp(-0.5*(i-b)*(i-b)/c/c-0.5*(j-d)*(j-d)/f/f)
37         #if (i+j-b-d)*(i+j-b-d) > 50*50:
38             #rho[i,j] = 0
39         #rho[i,j] = 1
40         a += rho[i,j]
41 rho = rho/a
42 a = 0
43 #for i in range(N):
44     #for j in range(10):
45         #rho[100+j,i] = 0
46 for i in range(N):
47     for j in range(N):
48         com += (i*du*j*dv-j*dv*i*du)*rho[i,j]
49         x0 += (i*du)*rho[i,j]
50         p0 += (j*dv)*rho[i,j]
51         Sigma_x += (i*du*i*du)*rho[i,j]
52         Sigma_p += (j*dv*j*dv)*rho[i,j]
53 Sigma_x = (Sigma_x - x0*x0)*(Sigma_x - x0*x0)
54 Sigma_p = (Sigma_p - p0*p0)*(Sigma_p - p0*p0)
55 S = sns.heatmap(rho,annot=False, cmap="hot", linewidths=.0005)
56 plt.ylabel('0.1x')
57 plt.xlabel('0.1p')
58 plt.show(S)
59 figure = S.get_figure()
```

```

60 print('Tiempo:',t)
61 print('Conmutador',com)
62 print('Posici n:',x0)
63 print('Momento:',p0)
64 print('Varianza^2 x:',Sigma_x)
65 print('Varianza^2 p:',Sigma_p)
66 X = []
67 P = []
68 COM = []
69 Sigma_x = []
70 Sigma_p = []
71 T = []
72 X.append(x0)
73 P.append(p0)
74 COM.append(com)
75 Sigma_x.append(Sigma_x)
76 Sigma_p.append(Sigma_p)
77 T.append(t)
78 aux = 0
79 #figure.savefig("c" + str(aux) + ".png", dpi=400)
80
81 while (x-1)*(x-1) < 0.0001:
82     t += dt
83     x = 0
84     com = 0
85     x0 = 0
86     p0 = 0
87     Sigma_x = 0
88     Sigma_p = 0
89     for i in range(N-1):
90         for j in range(N-1):
91             k1[i,j] = -(j)*dv/m*(rho[i+1,j]-rho[i,j])/du + (m*w*w*i*du+C*i*i*i*du*du*du)
92             *(rho[i,j+1]-rho[i,j])/dv)
93         for i in range(N-1):
94             for j in range(N-1):
95                 k2[i,j] = -(j)*dv/m*(rho[i+1,j]+0.5*dt*k1[i+1,j]-rho[i,j]-0.5*dt*k1[i,j])/du
96                 + (m*w*w*i*du+C*i*i*i*du*du*du)*(rho[i,j+1]+0.5*dt*k1[i,j+1]-rho[i,j]-0.5*dt*k1[i,j]
97                 )/dv)
98             for i in range(N-1):
99                 for j in range(N-1):
100                     k3[i,j] = -(j)*dv/m*(rho[i+1,j]+0.5*dt*k2[i+1,j]-rho[i,j]-0.5*dt*k2[i,j])/du
101                     + (m*w*w*i*du+C*i*i*i*du*du*du)*(rho[i,j+1]+0.5*dt*k2[i,j+1]-rho[i,j]-0.5*dt*k2[i,j]
102                     )/dv)
103                     for i in range(N-1):
104                         for j in range(N-1):
105                             k4[i,j] = -(j)*dv/m*(rho[i+1,j]+dt*k3[i+1,j]-rho[i,j]-dt*k3[i,j])/du + (m*w*
106                             w*i*du+C*i*i*i*du*du*du)*(rho[i,j+1]+dt*k3[i,j+1]-rho[i,j]-dt*k3[i,j])/dv)
107                     for i in range(N):
108                         for j in range(N):
109                             rho[i,j] = rho[i,j] + dt/6*(k1[i,j] + 2*k2[i,j] + 2*k3[i,j] + k4[i,j])
110                             if rho[i,j] < 0:
111                                 rho[i,j] = 0
112                                 x += rho[i,j]
113             if int(t/dt) % 10 == 0:
114                 S = sns.heatmap(rho,annot=False, cmap="hot", linewidths=.0005)
115                 plt.ylabel('0.1x')
116                 plt.xlabel('0.1p')
117                 plt.show(S)
118                 figure = S.get_figure()
119                 aux += 1
120                 #figure.savefig("c" + str(aux) + ".png", dpi=400)
121                 print('Tiempo',t)
122                 for i in range(N):
123                     for j in range(N):

```

```

118         com += (i*du*j*dv-j*dv*i*du)*rho[i,j]
119         x0 += (i*du)*rho[i,j]
120         p0 += (j*dv)*rho[i,j]
121         Sigma_x += (i*du*i*du)*rho[i,j]
122         Sigma_p += (j*dv*j*dv)*rho[i,j]
123     Sigma_x = (Sigma_x - x0*x0)*(Sigma_x - x0*x0)
124     Sigma_p = (Sigma_p - p0*p0)*(Sigma_p - p0*p0)
125     print('Conmutador',com)
126     print('Posici n:',x0)
127     print('Momento:',p0)
128     print('Varianza^2 x:',Sigma_x)
129     print('Varianza^2 p:',Sigma_p)
130     X.append(x0)
131     P.append(p0)
132     COM.append(com)
133     Sigma_x.append(Sigma_x)
134     Sigma_p.append(Sigma_p)
135     T.append(t)
136
137 print('Bucle 1 terminado', x)
138 S = sns.heatmap(rho,annot=False, cmap="hot", linewidths=.0005)
139 plt.ylabel('0.1x')
140 plt.xlabel('0.1p')
141 plt.show(S)
142 figure = S.get_figure()
143 aux += 1
144 #figure.savefig("c" + str(aux) + ".png", dpi=400)
145 print('Tiempo',t)
146 com = 0
147 x0 = 0
148 p0 = 0
149 Sigma_x = 0
150 Sigma_p = 0
151 for i in range(N):
152     for j in range(N):
153         com += (i*du*j*dv-j*dv*i*du)*rho[i,j]
154         x0 += (i*du)*rho[i,j]
155         p0 += (j*dv)*rho[i,j]
156         Sigma_x += (i*du*i*du)*rho[i,j]
157         Sigma_p += (j*dv*j*dv)*rho[i,j]
158 Sigma_x = (Sigma_x - x0*x0)*(Sigma_x - x0*x0)
159 Sigma_p = (Sigma_p - p0*p0)*(Sigma_p - p0*p0)
160 print('Conmutador',com)
161 print('Posici n:',x0)
162 print('Momento:',p0)
163 print('Varianza^2 x:',Sigma_x)
164 print('Varianza^2 p:',Sigma_p)
165 X.append(x0)
166 P.append(p0)
167 COM.append(com)
168 Sigma_x.append(Sigma_x)
169 Sigma_p.append(Sigma_p)
170 T.append(t)
171 plt.figure(0)
172 plt.xlabel('Tiempo')
173 plt.ylabel('Posici n')
174 plt.plot(T,X)
175 plt.savefig("Posici n_c.png")
176 plt.figure(1)
177 plt.xlabel('Tiempo')
178 plt.ylabel('Momento')
179 plt.plot(T,P)
180 plt.savefig("Momento_c.png")
181 plt.figure(2)

```

```

182 plt.xlabel('Tiempo')
183 plt.ylabel('Conmutador')
184 plt.plot(T, COM)
185 plt.savefig("Conmutador_c.png")
186 plt.figure(3)
187 plt.xlabel('Tiempo')
188 plt.ylabel('varianza^2 x')
189 plt.plot(T, Sigma_x)
190 plt.savefig("Varianzax_c.png")
191 plt.figure(4)
192 plt.xlabel('Tiempo')
193 plt.ylabel('varianza^2 p')
194 plt.plot(T, Sigma_p)
195 plt.savefig("Varianzax_p.png")

```

6.12. Código unificado

Están todos en el repositorio de <https://gitfront.io/r/Andres/ksx4REaU6oCR/TFG/>
(Oscilador Unificado)

```

1 import numpy as np
2 import numpy.linalg as linalg
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 from scipy.linalg import expm
5
6 N = int(40)
7 kappa = 0
8 hbar = 1
9 C = 0.1
10 a = np.zeros((N,N)) #destrucci n
11 a1 = np.zeros((N,N)) #creaci n
12 alpha = np.zeros((N,N))
13 beta = np.zeros((N,N))
14 P = np.zeros((N*N,N*N))
15 theta_p = np.zeros((N*N,N*N))
16 x = np.zeros((N*N,N*N))
17 theta_x = np.zeros((N*N,N*N))
18 for k in range(N):
19     for i in range(N):
20         if i == k - 1:
21             a[k,i] = np.sqrt(N - k)
22         else:
23             if i == k + 1:
24                 a1[k,i] = np.sqrt(N - 1 - k)
25 alpha = 1/np.sqrt(2)*(a1+a)
26 beta = 1j/np.sqrt(2)*(a1-a)
27
28 P = np.kron(alpha,np.identity(N))
29 lambda_p = np.kron(beta,np.identity(N))
30 X = np.kron(np.identity(N),alpha)
31 lambda_x = np.kron(np.identity(N),beta)
32 P_q = P + 0.5*hbar*kappa*lambda_x
33 X_q = X - 0.5*hbar*kappa*lambda_p
34 COM1 = X@P - P@X
35 COM2 = X_q@P_q - P_q@X_q
36
37 H = P@lambda_x - X@lambda_p - C*(X@X@X@lambda_p - hbar*kappa*hbar*kappa/4*
   X@lambda_p@lambda_p@lambda_p)
38 L = expm(-1j*H*1)
39 Psi_x = np.zeros((N,1), complex)
40 Psi_p = np.zeros((N,1), complex)
41 Psi = np.zeros((np.power(N,2),1), complex)
42 Psi_x[2] = 1

```

```

43 Psi_p[2] = 1
44
45 al = float(0)
46 for k in range(int(N)):
47     for i in range(N):
48         Psi[k*N+i] = np.exp(-0.5*(k*N+i-4*(N)-5)*(k*N+i-4*(N)-5)/30/30)
49         #Psi[k*N+i] = Psi_p[k]*Psi_x[i]
50         #al += Psi[k*N+i]
51
52 al = Psi.T.conjugate()@Psi
53 Psi = Psi/np.sqrt(al)
54 V = []
55 B = []
56 for i in range(N*N):
57     V.append(Psi[i].real)
58     B.append(i)
59 plt.plot(B,V)
60 L = expm(-1j*H*0)
61 psi = L@Psi
62 psi.T.conjugate()@Ppsi
63
64
65 C1 = []
66 C2 = []
67 C3 = []
68 C4 = []
69 C5 = []
70 C6 = []
71 C7 = []
72 C7i = []
73 C8 = []
74 C8i = []
75 DD = []
76 aux1 = 0
77 aux2 = 0
78 aux3 = 0
79 aux4 = 0
80 aux5 = 0
81 aux6 = 0
82 aux7 = 0
83 aux8 = 0
84 aux9 = 0
85 j = 0
86 dt = 0.1
87 for j in range(10):
88     L = expm(-1j*H*j*dt)
89     psi = L@Psi
90     aux1 = (psi.T.conjugate()@X@psi)[0]
91     aux2 = (psi.T.conjugate()@P@psi)[0]
92     aux3 = (psi.T.conjugate()@lambda_x@psi)[0]
93     aux4 = (psi.T.conjugate()@lambda_p@psi)[0]
94     aux5 = (psi.T.conjugate()@P_q@psi)[0]
95     aux6 = (psi.T.conjugate()@X_q@psi)[0]
96     aux7 = (psi.T.conjugate()@COM1@psi)[0]
97     aux8 = (psi.T.conjugate()@COM2@psi)[0]
98     aux9 += np.sqrt(aux8*aux8.conjugate())
99     print(aux1)
100     print(Psi[N*N-1])
101     print(Psi.T.conjugate()@Psi)
102     C1.append(aux1)
103     C2.append(aux2)
104     C3.append(np.sqrt(aux3*aux3.conjugate()))
105     C4.append(np.sqrt(aux4*aux4.conjugate()))
106     C5.append(np.sqrt(aux5*aux5.conjugate()))

```

```

107     C6.append(np.sqrt(aux6*aux6.conjugate()))
108     C7.append(np.sqrt(aux7*aux7.conjugate()))
109     #C7i.append(aux7.imag)
110     C8.append(np.sqrt(aux8*aux8.conjugate()))
111     #C7i.append(aux8.imag)
112     DD.append(j*dt)
113     #plt.savefig("prueba" + str(j) + ".png")
114 aux9 = aux9/3
115 plt.figure(j+1)
116 plt.xlabel('Tiempo')
117 plt.ylabel('Posici n')
118 plt.plot(DD,C1)
119 #plt.savefig("Fock_uni_10_1.png")
120 plt.figure(j+2)
121 plt.xlabel('Tiempo')
122 plt.ylabel('Momento')
123 plt.plot(DD,C2)
124 #plt.savefig("Fock_uni_10_2.png")
125 plt.figure(j+3)
126 plt.xlabel('Tiempo')
127 plt.ylabel('Momento de la posici n')
128 plt.plot(DD,C3)
129 #plt.savefig("Fock_uni_10_3.png")
130 plt.figure(j+4)
131 plt.xlabel('Tiempo')
132 plt.ylabel('Momento del momento')
133 plt.plot(DD,C4)
134 #plt.savefig("Fock_uni_10_4.png")
135 plt.figure(j+5)
136 plt.xlabel('Tiempo')
137 plt.ylabel('Momento Unificado')
138 plt.plot(DD,C5)
139 #plt.savefig("Fock_uni_10_5.png")
140 plt.figure(j+6)
141 plt.xlabel('Tiempo')
142 plt.ylabel('Posici n unificada')
143 plt.plot(DD,C6)
144 #plt.savefig("Fock_uni_10_6.png")
145 plt.figure(j+7)
146 plt.xlabel('Tiempo')
147 plt.ylabel('Conmutador cl sico')
148 plt.plot(DD,C7)
149 #plt.savefig("Fock_uni_10_7.png")
150 plt.figure(j+8)
151 plt.xlabel('Tiempo')
152 plt.ylabel('Conmutador unificado')
153 plt.plot(DD,C8)
154 #plt.savefig("Fock_uni_10_1.png")

```

6.13. Código Unificado 2

Este código es el que no se consiguió lograr que funcionase así que prescindimos de añadirlo aquí, aun así esta disponible en el repositorio

6.14. Código Wigner

Están todos en el repositorio de <https://gitfront.io/r/Andres/ksx4REaU6oCR/TFG/>
(Función $Densidad_{clásico}$; Wigner)

```
1 import numpy as np
2 import numpy.linalg as linalg
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 from mpl_toolkits.mplot3d import axes3d
5 from scipy.linalg import expm
6 import seaborn as sns
7
8 N = 199
9 hbar = 1.5
10 m = 1
11 w = 1
12 C = 0.1
13 du = 0.1
14 dv = 0.1
15 b = 0.5*N
16 d = 0.5*N
17 c = 15
18 f = 15
19 COM = []
20 com = 0
21 sigma_x = 0
22 sigma_p = 0
23 NUM = []
24 rho = np.zeros((N,N), float)
25 k1 = np.zeros((N,N), float)
26 k2 = np.zeros((N,N), float)
27 k3 = np.zeros((N,N), float)
28 k4 = np.zeros((N,N), float)
29 a = 0
30 x0 = 0
31 p0 = 0
32 for i in range(N):
33     for j in range(N):
34         rho[i,j] = np.exp(-0.5*(i-b)*(i-b)/c/c-0.5*(j-d)*(j-d)/f/f)
35         a += rho[i,j]
36 rho = rho/a
37 a = 0
38 t = 0
39 dt = 10e-6
40 x = 1
41 for i in range(N):
42     for j in range(N):
43         com += (i*du*j*dv-j*dv*i*du)*rho[i,j]
44         x0 += (i*du)*rho[i,j]
45         p0 += (j*dv)*rho[i,j]
46         sigma_x += (i*du*i*du)*rho[i,j]
47         sigma_p += (j*dv*j*dv)*rho[i,j]
48 sigma_x = (sigma_x - x0*x0)*(sigma_x - x0*x0)
49 sigma_p = (sigma_p - p0*p0)*(sigma_p - p0*p0)
50 S = sns.heatmap(rho,annot=False, cmap="hot", linewidths=.0005)
51 plt.ylabel('0.1x')
52 plt.xlabel('0.1p')
53 plt.show(S)
54 figure = S.get_figure()
```

```

55 print('Tiempo:',t)
56 print('Conmutador',com)
57 print('Posici n:',x0)
58 print('Momento:',p0)
59 print('Varianza^2 x:',sigma_x)
60 print('Varianza^2 p:',sigma_p)
61 X = []
62 P = []
63 COM = []
64 Sigma_x = []
65 Sigma_p = []
66 T = []
67 X.append(x0)
68 P.append(p0)
69 COM.append(com)
70 Sigma_x.append(sigma_x)
71 Sigma_p.append(sigma_p)
72 T.append(t)
73 aux = 0
74 figure.savefig("w" + str(aux) + ".png", dpi=400)
75
76
77
78 while (x-1)*(x-1) < 0.0001:
79     t += dt
80     x = 0
81     com = 0
82     x0 = 0
83     p0 = 0
84     sigma_x = 0
85     sigma_p = 0
86     for i in range(N-3):
87         for j in range(N-3):
88             k1[i,j] = (-(j)*dv/m*(rho[i+1,j]-rho[i,j])/du + (m*w*w*i*du+C*i*i*i*du*du*du)
89             *(rho[i,j+1]-rho[i,j])/dv)-hbar*hbar/4*C*i*du*(rho[i,j+3]-3*rho[i,j+2]+3*rho[i,j+1]-
90             rho[i,j])/dv/dv/dv
91             for i in range(N-3):
92                 for j in range(N-3):
93                     k2[i,j] = (-(j)*dv/m*(rho[i+1,j]+0.5*dt*k1[i+1,j]-rho[i,j]-0.5*dt*k1[i,j])/du
94                     + (m*w*w*w*i*du+C*i*i*i*du*du*du)*(rho[i,j+1]+0.5*dt*k1[i,j+1]-rho[i,j]-0.5*dt*k1[i,j]
95                     ])/dv)-hbar*hbar/4*C*i*du*(rho[i,j+3]+0.5*dt*k1[i,j+3]-3*rho[i,j+2]-3*0.5*dt*k1[i,j
96                     +2]+3*rho[i,j+1]+3*0.5*dt*k1[i,j+1]-rho[i,j]-0.5*dt*k1[i,j])/dv/dv/dv
97                     for i in range(N-3):
98                         for j in range(N-3):
99                             k3[i,j] = (-(j)*dv/m*(rho[i+1,j]+0.5*dt*k2[i+1,j]-rho[i,j]-0.5*dt*k2[i,j])/du
100                             + (m*w*w*w*i*du+C*i*i*i*du*du*du)*(rho[i,j+1]+0.5*dt*k2[i,j+1]-rho[i,j]-0.5*dt*k2[i,j]
101                             ])/dv)-hbar*hbar/4*C*i*du*(rho[i,j+3]+0.5*dt*k2[i,j+3]-3*rho[i,j+2]-3*0.5*dt*k2[i,j
102                             +2]+3*rho[i,j+1]+3*0.5*dt*k2[i,j+1]-rho[i,j]-0.5*dt*k2[i,j])/dv/dv/dv
103                             for i in range(N-3):
104                                 for j in range(N-3):
105                                     k4[i,j] = (-(j)*dv/m*(rho[i+1,j]+dt*k3[i+1,j]-rho[i,j]-dt*k3[i,j])/du + (m*w*
106                                     w*i*du+C*i*i*i*du*du*du)*(rho[i,j+1]+dt*k3[i,j+1]-rho[i,j]-dt*k3[i,j])/dv)-hbar*hbar
107                                     /4*C*i*du*(rho[i,j+3]+dt*k3[i,j+3]-3*rho[i,j+2]-3*dt*k3[i,j+2]+3*rho[i,j+1]+3*dt*k3[i
108                                     ,j+1]-rho[i,j]-dt*k3[i,j])/dv/dv/dv
109                             for i in range(N):
110                                 for j in range(N):
111                                     rho[i,j] = rho[i,j] + dt/6*(k1[i,j] + 2*k2[i,j] + 2*k3[i,j] + k4[i,j])
112                                     x += rho[i,j]
113         if int(t/dt) % 100 == 0:
114             S = sns.heatmap(rho,annot=False, cmap="hot", linewidths=.0005)
115             plt.ylabel('0.1x')
116             plt.xlabel('0.1p')
117             plt.show(S)
118             figure = S.get_figure()

```

```

108     aux += 1
109     figure.savefig("w" + str(aux) + ".png", dpi=400)
110     print('Tiempo',t)
111     for i in range(N):
112         for j in range(N):
113             com += (i*du*j*dv-j*dv*i*du)*rho[i,j]
114             x0 += (i*du)*rho[i,j]
115             p0 += (j*dv)*rho[i,j]
116             sigma_x += (i*du*i*du)*rho[i,j]
117             sigma_p += (j*dv*j*dv)*rho[i,j]
118         sigma_x = (sigma_x - x0*x0)*(sigma_x - x0*x0)
119         sigma_p = (sigma_p - p0*p0)*(sigma_p - p0*p0)
120         print('Conmutador',com)
121         print('Posici n:',x0)
122         print('Momento:',p0)
123         print('Varianza^2 x:',sigma_x)
124         print('Varianza^2 p:',sigma_p)
125         X.append(x0)
126         P.append(p0)
127         COM.append(com)
128         Sigma_x.append(sigma_x)
129         Sigma_p.append(sigma_p)
130         T.append(t)
131
132     print('Fin',x)
133     S = sns.heatmap(rho,annot=False, cmap="hot", linewidths=.0005)
134     plt.ylabel('0.1x')
135     plt.xlabel('0.1p')
136     plt.show(S)
137     figure = S.get_figure()
138     aux += 1
139     figure.savefig("w" + str(aux) + ".png", dpi=400)
140     print('Tiempo',t)
141     com = 0
142     x0 = 0
143     p0 = 0
144     sigma_x = 0
145     sigma_p = 0
146     for i in range(N):
147         for j in range(N):
148             com += (i*du*j*dv-j*dv*i*du)*rho[i,j]
149             x0 += (i*du)*rho[i,j]
150             p0 += (j*dv)*rho[i,j]
151             sigma_x += (i*du*i*du)*rho[i,j]
152             sigma_p += (j*dv*j*dv)*rho[i,j]
153     sigma_x = (sigma_x - x0*x0)*(sigma_x - x0*x0)
154     sigma_p = (sigma_p - p0*p0)*(sigma_p - p0*p0)
155     print('Conmutador',com)
156     print('Posici n:',x0)
157     print('Momento:',p0)
158     print('Varianza^2 x:',sigma_x)
159     print('Varianza^2 p:',sigma_p)
160     X.append(x0)
161     P.append(p0)
162     COM.append(com)
163     Sigma_x.append(sigma_x)
164     Sigma_p.append(sigma_p)
165     T.append(t)
166     plt.figure(0)
167     plt.xlabel('Tiempo')
168     plt.ylabel('Posici n')
169     plt.plot(T,X)
170     plt.savefig("Posici n_w.png")
171     plt.figure(1)

```

```

172 plt.xlabel('Tiempo')
173 plt.ylabel('Momento')
174 plt.plot(T,P)
175 plt.savefig("Momento_w.png")
176 plt.figure(2)
177 plt.xlabel('Tiempo')
178 plt.ylabel('Conmutador')
179 plt.plot(T,COM)
180 plt.savefig("Conmutador_w.png")
181 plt.figure(3)
182 plt.xlabel('Tiempo')
183 plt.ylabel('varianza^2 x')
184 plt.plot(T,Sigma_x)
185 plt.savefig("Varianzax_w.png")
186 plt.figure(4)
187 plt.xlabel('Tiempo')
188 plt.ylabel('varianza^2 p')
189 plt.plot(T,Sigma_p)
190 plt.savefig("Varianzax_w.png")

```