

## FUNCIONES DE ONDA EN EL ESPACIO DE FASE

D. Campos \*  
Departamento de Física,  
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá.

**RESUMEN.** Ilustramos la posibilidad de describir sistemas mecánico-cuánticos por medio de funciones de onda  $\Psi(q, p)$  que dependen simultáneamente de la posición  $q$  y del impulso lineal  $p$  de las partículas. Se tiene así una formulación alternativa a las representaciones de coordenadas e impulsos, usadas tradicionalmente. La estructura de las funciones de onda  $\Psi(q, p)$  es compatible con la relación de incertidumbre de Heisenberg.

**ABSTRACT.** We illustrate the possibility to describe quantum mechanical systems by using wavefunctions  $\Psi(q, p)$  that depend simultaneously on position  $q$  and momentum  $p$  of the particles. We obtain an alternative formulation to the  $q$ - and  $p$ -representations used traditionally. The structure of the wavefunctions  $\Psi(q, p)$  is compatible with the Heisenberg uncertainty relation.

### 1. Introducción

Vamos a considerar un sistema mecánico-cuántico de un grado de libertad, con operadores posición e impulso,  $\hat{q}$  y  $\hat{p}$ . El estado del sistema en un instante de tiempo dado lo designaremos por el ket  $|\Psi\rangle$ , el cual admite las representaciones usuales de coordenadas y de impulsos, descritas por las funciones de onda

$$\Psi(q) = \langle q | \Psi \rangle, \quad \tilde{\Psi}(p) = \langle p | \Psi \rangle, \quad (1)$$

conectadas entre sí por una transformada de Fourier.

Si el sistema fuera clásico, su estado se describiría por un punto  $(q, p)$  del espacio de fase y podríamos medir en principio, con toda precisión, tanto la posición  $q$  como el impulso lineal  $p$  de la partícula. En la mecánica cuántica rige el principio de incertidumbre,  $\Delta q \Delta p \geq \hbar/2$ , el cual establece que es imposible reducir simultáneamente las incertidumbres en los observables básicos de posición e impulso; esto es, si  $\Delta q$  disminuye entonces  $\Delta p$  aumenta, y viceversa.

No obstante que el principio de incertidumbre es de forzoso cumplimiento, él no prohíbe la descripción de estados mecánico cuánticos mediante funciones de onda

$$\Psi(p, q) = \langle p, q | \Psi \rangle, \quad \Psi(q, p) = \langle q, p | \Psi \rangle \quad (2)$$

que dependen tanto de la posición como del impulso de la partícula. El objetivo de este artículo es ilustrar esta situación. Para los fines subsiguientes introduciremos  $q_0$  y  $p_0$  como unidades de longitud e impulso lineal, sujetas a la restricción  $q_0 p_0 = \hbar$ .

## 2. Estados coherentes

La descripción de estados mecánico-cuánticos mediante funciones de onda definidas en el espacio de fase surge de manera natural a partir de la existencia de los estados coherentes de Glauber  $|p, q\rangle$ , definidos como los kets propios del operador destrucción [1]:

$$\hat{a} =: \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \frac{\hat{q}}{q_0} + i \frac{\hat{p}}{p_0} \right] \quad (3)$$

Esto es, los estados coherentes satisfacen por definición la ecuación de valores propios

$$\hat{a} |p, q\rangle = z |p, q\rangle \quad (4)$$

donde  $q$  y  $p$  se interpretan como valores esperados,

$$q =: \langle p, q | \hat{q} | p, q \rangle = \frac{q_0}{\sqrt{2}} (z + z^*), \quad (5a)$$

$$p =: \langle p, q | \hat{p} | p, q \rangle = -i \frac{p_0}{\sqrt{2}} (z - z^*), \quad (5b)$$

y  $z$  es un número complejo construido como

$$z =: \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \frac{q}{q_0} + i \frac{p}{p_0} \right]. \quad (5c)$$

Una propiedad fundamental de los estados coherentes es que forman un conjunto completo y, por lo tanto, el estado del sistema se puede expandir en la forma

$$|\Psi\rangle = \int \frac{dq dp}{2\pi\hbar} |p, q\rangle \Psi(p, q), \quad (6)$$

donde  $\Psi(p, q)$  es la función de onda definida en la ecuación (2) y la integración cubre todo el espacio de fase.

Nos referiremos a los estados  $|p, q\rangle$  como estados coherentes- $pq$  y a la función de onda  $\Psi(p, q)$  como representación- $pq$  del estado del sistema. Por razones de simetría entre las variables  $p$  y  $q$  es conveniente introducir estados coherentes- $qp$  y la función de onda- $qp$ , definidos por las relaciones

$$|q, p\rangle := w^*(q, p) |p, q\rangle \quad (7)$$

$$\Psi(q, p) =: \langle q, p | \Psi \rangle = w(q, p) \Psi(p, q) \quad (8)$$

donde hemos introducido el factor de fase

$$w(q, p) =: \exp \left[ \frac{i}{\hbar} qp \right] \quad (9)$$

que interviene en la transformada de Fourier que convierte la función de onda en representación de impulsos en la función de onda en representación de coordenadas. Las funciones de onda  $\Psi(p, q)$  y  $\Psi(q, p)$  describen de manera completamente equivalente el estado del sistema mecánico-cuántico, están definidas en el espacio de fase y su valor es, en general, un número complejo. Por lo tanto, su representación gráfica requiere dibujar por separado la parte real y la parte imaginaria, como funciones de las variables  $q$  y  $p$ .

Si conocemos las funciones de onda  $qp$  y  $-pq$ , podemos extraer las funciones de onda convencionales mediante aplicación de las relaciones [2]

$$\Psi(q) = \frac{1}{(2\sqrt{\pi} p_0)^{1/2} (2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(q, p) dp, \quad (10)$$

$$\tilde{\Psi}(p) = \frac{1}{(2\sqrt{\pi} q_0)^{1/2} (2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(p, q) dq, \quad (11)$$

las cuales indican la manera como se suman las amplitudes de probabilidad en el espacio de fase con el fin de generar amplitudes de probabilidad en posición o en impulso, respectivamente. El principio de incertidumbre se cumple de manera automática puesto que las funciones  $\Psi(q)$  y  $\tilde{\Psi}(p)$  están conectadas entre si por una transformada de Fourier.

Las funciones  $\Psi(p, q)$  y  $\Psi(q, p)$ , las cuales reciben el nombre de representación de estados coherentes o funciones de onda en el espacio de fase, se pueden determinar a partir del conocimiento de las representaciones de coordenadas y de impulsos, según las relaciones

$$\Psi(q, p) = \int_{-\infty}^{\infty} w^*(q', p) M(q') \Psi(q' + q) dq', \quad (12)$$

$$\Psi(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} w(q, p') \tilde{M}(p') \tilde{\Psi}(p' + p) dp', \quad (13)$$

donde hemos introducido las funciones auxiliares

$$M(q) =: \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} q_0}} \exp\left\{-\frac{1}{2} (q/q_0)^2\right\}, \quad (14)$$

$$\tilde{M}(p) =: \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} p_0}} \exp\left\{-\frac{1}{2} (p/p_0)^2\right\}, \quad (15)$$

conectadas entre si a través de una transformada de Fourier (tercera gráfica de la Fig.1).

### 3. Algunos ejemplos

Con el fin de ganar en visualización física sobre la formulación de la mecánica cuántica en el espacio de fase vamos a presentar ahora algunos ejemplos elementales.

#### 3.1. Estado de impulso bien definido

Consideremos una partícula de un grado de libertad en un estado de impulso lineal bien definido,  $|p'\rangle$ ; esto es, el sistema se encuentra en un estado que satisface la ecuación de valores propios

$$\hat{p} |p'\rangle = p' |p'\rangle. \quad (16a)$$

Es bien conocido que el estado  $|p\rangle$  admite las representaciones

$$\tilde{\Psi}(p) = \langle p | p' \rangle = \delta(p - p'), \quad (16b)$$

$$\Psi(q) = \langle q | p' \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} w(q, p') \quad (16c)$$

de tal manera que por aplicación de las transformaciones (12) y (13) podemos obtener las funciones de onda en el espacio de fase:

$$\Psi(q, p) = w(q, p') \tilde{M}(p - p') \quad (17a)$$

$$\Psi(p, q) = w^*(q, p - p') \tilde{M}(p - p'). \quad (17b)$$

Por otro lado, las funciones de onda  $\Psi(q)$  y  $\tilde{\Psi}(p)$  se pueden reconstruir a partir de las funciones de onda en el espacio de fase, usando para ello las transformaciones (10) y (11) y las relaciones

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2 - \beta x) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left(-\frac{\beta^2}{4\alpha}\right),$$

$$\delta(p - p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} w^*(q, p - p') dq.$$

Para visualizar las funciones de onda en el espacio de fase y con el fin de eliminar el comportamiento oscilatorio generado por  $w(q, p - p')$  hemos graficado en la Fig.-1 la función

$$w(q, p - p') \Psi(p, q) = \tilde{M}(p - p')$$

para el caso  $p' = 0$ . La curva correspondiente a otro valor de  $p'$  se obtiene desplazando de manera rígida la curva correspondiente a  $p' = 0$  hasta que el máximo coincida con la posición  $p = p'$ . Tal como se indica en la última gráfica de la Fig.-1, si fijamos un valor de  $q$  y hacemos un corte a lo largo del eje  $p$  obtenemos una gaussiana cuyo tasa de decaimiento está determinado por el valor de  $p_0$  adoptado para la unidad de impulso.

No obstante que la partícula tiene un impulso  $p'$  bien definido, la función de onda en el espacio de fase no involucra una delta de Dirac. Sin embargo,  $p = p'$  es un punto privilegiado del eje  $p$ , ya que en este punto la función de onda alcanza su máximo valor. Por otro lado, al sumar las amplitudes de probabilidad a lo largo del eje  $q$ , de acuerdo al procedimiento estipulado por la ecuación (11), obtenemos una amplitud total  $\delta(p - p')$ , que no es otra cosa que la función de onda en representación de impulsos.

A lo largo del eje  $q$  no existe ningún punto privilegiado para la función de onda en el espacio de fase, lo cual significa que la incertidumbre en posición es infinita. Si sumamos las amplitudes de probabilidad a lo largo del eje  $p$ , siguiendo lo estipulado por la ecuación (10), generamos una onda plana que refleja de nuevo la incertidumbre total en la posición de la partícula.

### 3.2. Estado de posición bien definida

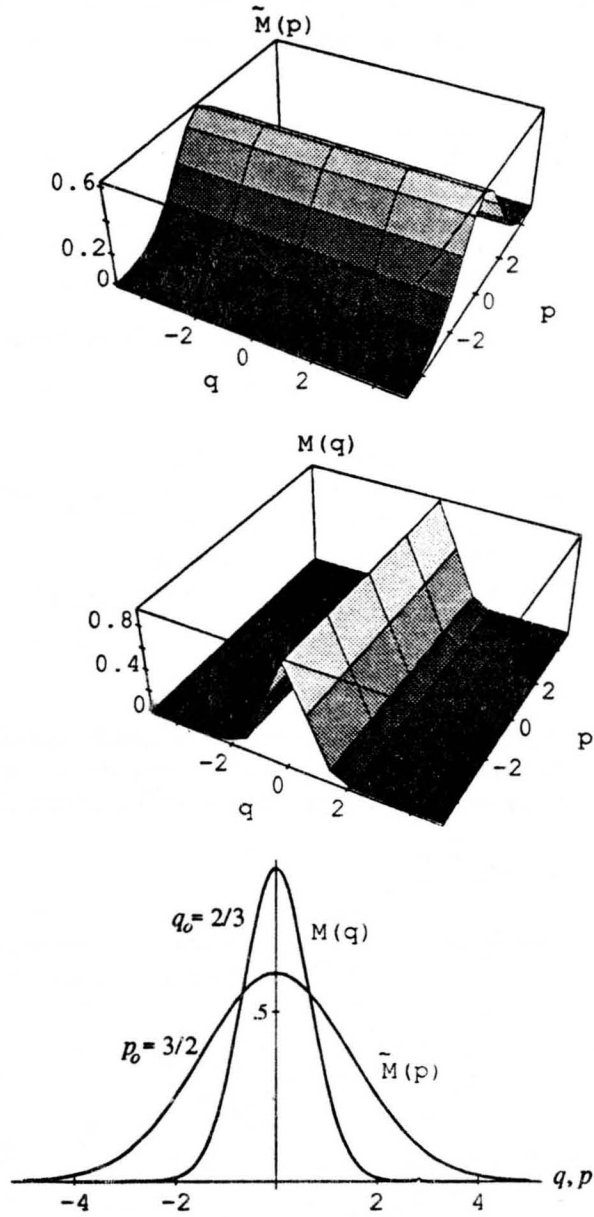


Fig.1. Estados de impulso y posición bien definida en representación- $pq$ .

Como segundo ejemplo vamos a considerar ahora un estado  $|q\rangle$  tal que  $\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$ . En este caso tenemos las funciones de onda

$$\Psi(q) = \langle q|q\rangle = \delta(q - q),$$

$$\tilde{\Psi}(p) = \langle p|q\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} w^*(q, p),$$

y usando las ecuaciones (12) y (13) obtenemos

$$\Psi(p, q) = w^*(p, q) M(q - q)$$

$$\Psi(q, p) = w(q - q, p) M(q - q). \quad (18)$$

Por razones similares a las enunciadas en el caso anterior, en la segunda gráfica de la Fig.1 hemos dibujado la función

$$w^*(q - q, p) \Psi(q, p) = M(q - q)$$

para el caso  $q = 0$ . Tal como se indica en la última gráfica de la Fig.-1, si en el espacio de fase fijamos un valor de  $p$  y hacemos un corte a lo largo del eje  $q$  obtenemos una gaussiana cuyo rata de decaimiento está determinado por el valor de  $q_0$  adoptado como la unidad de longitud. El análisis de la función de onda en el espacio de fase para el caso de una partícula con posición bien definida es análogo al realizado para el caso de una partícula con impulso bien definido.

### 3.3. Oscilador armónico

Sea  $|n\rangle$  un ket propio del operador número o, lo que es equivalente, un estado propio del Hamiltoniano asociado con un oscilador armónico de masa  $m$  y frecuencia  $\omega$ . Puesto que un estado coherente  $|z\rangle = |p, q\rangle$  se puede expandir en la forma [3]

$$|p, q\rangle = [w(q, p) \exp(-z z^*)]^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (19)$$

podemos usar la relación de ortogonalidad de los estados  $|n\rangle$  para obtener la siguiente representación- $pq$  de los estados propios del Hamiltoniano del oscilador armónico:

$$\varphi_n(p, q) := \langle p, q|n\rangle$$

$$= [w^*(q, p) M(p, q)]^{1/2} \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{q}{q_0} - i \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{p}{p_0} \right]^n, \quad (20)$$

donde hemos empleado (5c), introducido la función auxiliar

$$M(p, q) =: \exp(-z z^*) = (\pi\hbar)^{1/2} \tilde{M}(p) M(q), \quad (21)$$

y observado que las unidades naturales de posición e impulso son dadas por

$$q_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}}, \quad p_0 = \sqrt{\hbar m \omega}. \quad (22)$$

En (19) hemos introducido un factor de fase  $w(q/2, p)$ , que no se incluye normalmente en la literatura [3], [4], con el fin de que al aplicar las relaciones (10) y (11)

obtenemos las funciones de onda correctas. El siguiente razonamiento sugiere el factor de fase que hemos indicado. Como el Hamiltoniano del oscilador armónico

$$\hat{H} = \left[ \frac{\hat{p}}{p_0} \right]^2 + \left[ \frac{\hat{q}}{q_0} \right]^2 \frac{1}{2} \hbar \omega$$

es simétrico (excepto por constantes) respecto a los operadores de posición e impulso, esperamos que las funciones de onda en representación de coordenadas y de impulsos tengan una forma similar. Pero como estas funciones se deducen por aplicación de las ecuaciones (10) y (11), entonces  $\varphi_n(p, q)$  y  $\varphi_n(q, p)$  deben tener esencialmente la misma estructura. Por otro lado, como en virtud de (8) se debe cumplir la relación  $\varphi_n(q, p) = w(q, p) \varphi_n(p, q)$ , la función  $\varphi_n(p, q)$  debe incluir un factor de fase  $w^*(q/2, p)$  con el fin de garantizar que al ser multiplicada por  $w(q, p)$  obtengamos como resultado un factor de fase  $w(q/2, p)$  para la función  $\varphi_n(q, p)$ . Los factores de fase de las funciones  $-pq$  y  $-qp$  sólo se diferencian en una operación de complejo conjugado, garantizando así que las funciones  $\varphi_n(p, q)$  y  $\varphi_n(q, p)$  tienen una estructura similar. Cualquier otra elección de factor de fase conduce a una asimetría físicamente inaceptable entre las funciones de onda del oscilador armónico.

En las Figs.-2 graficamos la parte real y la parte imaginaria de las funciones  $w(\pm q, p) \varphi_n(p, q)$  para varios valores del número cuántico  $n$ . Debido a la existencia del factor  $M(p, q)$  en la ecuación (19), las curvas tienen una forma gaussiana en las regiones del espacio de fase donde alcanzan sus máximos valores. El corte que se observa en las superficies es solamente aparente, debido a razones gráficas.

La estructura que se observa en  $\varphi_n(p, q)$  es fácil de entender si tenemos en cuenta su paridad,  $\varphi_n(-p, -q) = (-1)^n \varphi_n(p, q)$ , y si usamos el teorema binomial para descomponer la función en su parte real e imaginaria.  $\varphi_0(p, q)$  es real y su comportamiento está determinado por la raíz cuadrada de  $M(p, q)$ . La parte real de la función  $\varphi_1(p, q)$  se anula a lo largo de toda la línea  $q = 0$ , mientras que su parte imaginaria se anula a lo largo del eje  $p = 0$ . La estructura de la función  $\varphi_2(p, q)$  es más complicada ya que su parte real está asociada con la función  $(q/q_0)^2 - (p/p_0)^2$  mientras que su parte imaginaria depende de  $-q p/\hbar$ .

En este ejemplo hemos obtenido la función  $\varphi_n(p, q)$  por un método que no requiere el conocimiento previo de la representación de coordenadas o de impulsos: esto es, no hemos usado las ecuaciones (12) o (13). Esto nos permite someter a prueba las relaciones (11) y (10), para generar por medio de ellas las funciones de onda  $\tilde{\varphi}_n(p)$  y  $\varphi_n(q)$  y comparar el resultado con datos bien conocidos [3]. Por ejemplo, para deducir  $\tilde{\varphi}_n(p)$  usamos el teorema binomial en la forma

$$\begin{aligned} (x + iy)^n &= 2^{-n} \sum_{m=0}^n i^m \binom{n}{m} H_{n-m}(x) H_m(y), \\ &= 2^{-n} \sum_{m=0}^n i^{n-m} \binom{n}{m} H_m(x) H_{n-m}(y), \end{aligned} \tag{23}$$

donde  $H_n(y)$  son polinomios de Hermite, la transformada integral [5]

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-iyx) \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) H_m(x) dx = \sqrt{2\pi} (-i)^m \exp\left(-\frac{1}{2}y^2\right) H_m(y), \tag{24}$$

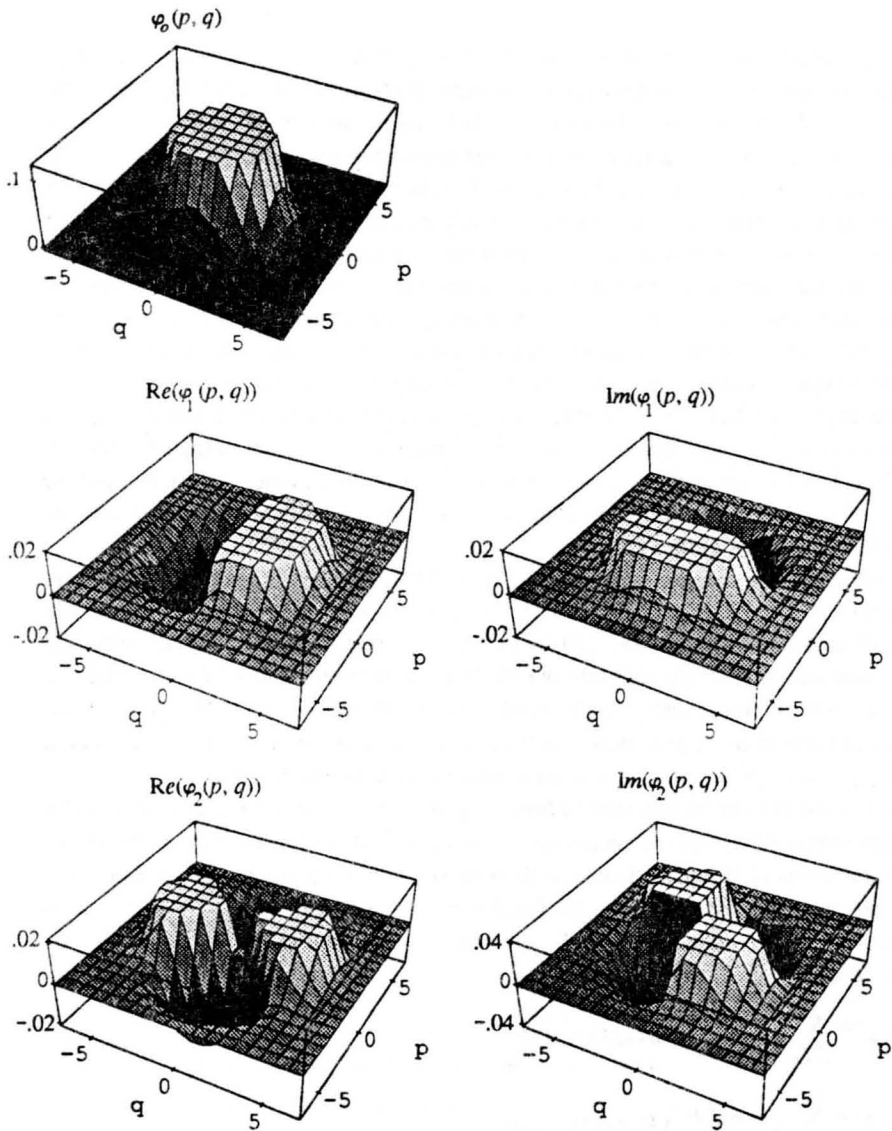


Fig.2. Primeros estados del oscilador armónico en representación- $pq$ .



y la relación [6]

$$\sum_{m=0}^n \binom{n}{m} H_{n-m}(\sqrt{2} \sigma) H_m(\sqrt{2} \rho) = 2^{n/2} H_n(\sigma + \rho). \quad (25)$$

Esto es, con ayuda de las relaciones anteriores, aplicamos (11) y obtenemos la función de onda en representación de impulsos:

$$\tilde{\varphi}_n(p) = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n n!}} \tilde{M}(p) H_n(p/p_0). \quad (26)$$

Un procedimiento completamente similar, aplicando (10), conduce a la función de onda en representación de coordenadas:

$$\varphi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} M(q) H_n(q/q_0). \quad (27)$$

#### 4. Conclusión

La posición y el impulso de una partícula son variables canónicamente conjugadas, en el sentido de que obedecen la relación de conmutación  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \hat{1}$ , la cual da origen al principio de incertidumbre de Heisenberg. Esto significa que es imposible encontrar el sistema físico en un estado descrito por una función  $\Psi(p, q) = \delta(q - q') \delta(p - p')$  construida como el producto de dos funciones delta de Dirac, una en posición y otra en impulso. En otras palabras, un punto  $(q, p)$  del espacio de fase no puede representar un estado mecánico-cuántico, físicamente realizable.

El hecho anterior se manifiesta en la estructura de las funciones de onda- $qp$  y  $-pq$  que hemos dado como ejemplos. Las funciones auxiliares  $M(q)$  y  $\tilde{M}(p)$  están ligadas entre sí a través de la relación  $q_0 p_0 = \hbar$ , determinando por lo tanto el grado de precisión con el cual podemos ubicar la partícula tanto en posición como en impulso. El significado de las funciones de onda- $pq$  y  $-qp$  se manifiesta a través de la siguiente interpretación física, la cual es consistente con el principio de incertidumbre de Heisenberg:

$$|\Psi(p, q)|^2 = |\Psi(q, p)|^2$$

= Probabilidad de encontrar el sistema físico en el estado coherente  $|p, q\rangle$

= Probabilidad de encontrar el sistema físico en un estado mecánico-cuántico tal que los valores esperados de posición e impulso sean  $q$  y  $p$ , respectivamente.

Después del trabajo de Glauber [1] en óptica cuántica, el concepto de estados coherentes y sus generalizaciones ha sido investigada de manera amplia por diferentes autores. Para una discusión sobre el tema referimos al lector a los trabajos de Klauder y Skagerstam [7] y de Zhang et al [8], y las referencias allí citadas.

#### Referencias

- [1] R. J. Glauber, Coherent and Incoherent States of the Radiation Field, Phys. Rev. **131**, 2766 (1963).

- [2] D. Campos, A Method for the Solution of Quantum-Mechanical Time Evolution Problems, por publicar, (1991).
- [3] D. Campos, Teoría de Sistemas Cuánticos, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, (1989).
- [4] W. H. Louisell, Quantum Statistical Properties of Radiation, Wiley, New York, (1973).
- [5] N. N. Lebedew, Spezielle Funktionen und ihre Anwendung, Bibliographisches Institut, Mannheim, (1973).
- [6] H. Hochstadt, The Functions of Mathematical Physics, New York, Wiley, (1971).
- [7] J. R. Klauder and B. S. Skagerstam (Eds.), Coherent States, Applications in Physics and Mathematical Physics, Singapore, World-Scientific, (1985).
- [8] W. M. Zhang, D. H. Feng and R. Gilmore, Coherent states: Theory and some applications, Rev. Mod. Phys. 62, 867, (1990).

---

\* Profesor Titular de la Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Física, Bogotá.