

INTERRELACION ENTRE LOS METODOS DE RAYLEIGH-SCHRÖDINGER, BRILLOUIN-WIGNER Y EL DE TRANSFORMACIONES CANONICAS

D. Campos

Departamento de Física, Universidad Nacional
Santafé de Bogotá

RESUMEN

Se desarrolla la teoría de perturbaciones independientes del tiempo para un operador arbitrario $\hat{H}(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \hat{H}^{(k)}$ que se puede expandir en series de potencias de un parámetro de perturbación λ . Una formulación unificada permite establecer la interrelación formal entre los métodos de Rayleigh-Schrödinger, Brillouin-Wigner y el de transformaciones canónicas. Se propone un nuevo método que hemos denominado aproximación de Born.

ABSTRACT

Time-independent perturbation theory is developed for an arbitrary operator $\hat{H}(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \hat{H}^{(k)}$, which can be expanded in power series of the perturbation parameter λ . A unified formulation allows the establishment of a formal interrelation between the methods of Rayleigh-Schrödinger, of Brillouin-Wigner and of canonical transformations. A new method, here called Born approximation, is proposed.

1. INTRODUCCION

La presentación estándar de la teoría de perturbaciones [1-3] hace uso básicamente de dos suposiciones: (i) el operador $\hat{H}(\lambda)$ se puede descomponer como la suma de un operador no perturbado $\hat{H}^{(0)}$ y una perturbación de primer orden $\hat{H}^{(1)}$, (ii) Los operadores $\hat{H}^{(0)}$ y $\hat{H}^{(1)}$ son hermíticos. En el presente trabajo se desarrolla la teoría de perturbaciones dentro de un contexto más general, analizando el caso de un operador $\hat{H}(\lambda)$ que depende de un parámetro λ y que admite, en principio, una expansión en potencias de λ con contribuciones de cualquier orden:

$$\hat{H}(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \hat{H}^{(k)} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V}(\lambda) \quad (1)$$

donde

$$\hat{V}(\lambda) := \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \hat{H}^{(k)}. \quad (2)$$

Por otro lado, los operadores $\hat{H}(\lambda)$, $\hat{H}^{(k)}$, para $k \geq 0$, pueden ser no hermíticos y el parámetro de perturbación λ un número complejo. La generalización no es sólo de interés académico ya que muchos problemas físicos, por ejemplo en física nuclear o en colisiones moleculares, hacen uso de potenciales efectivos complejos, donde la parte imaginaria del potencial permite simular la pérdida de partículas debido a procesos inelásticos [4-6].

Como consecuencia de un cuidadoso tratamiento se desarrolla una formulación unificada que permite establecer la interrelación formal entre los métodos de Rayleigh-Schrödinger, Brillouin-Wigner [7] y el de transformaciones canónicas [3].

2. CORRECCIONES A LOS KETS PROPIOS

El objeto central de la teoría de perturbaciones es el de desarrollar un procedimiento sistemático que permita solucionar la ecuación de valores propios

$$\hat{H}(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle \quad (3)$$

asociada con un operador arbitrario $\hat{H}(\lambda)$; esto es, tanto los valores propios $E_n(\lambda)$ como los kets propios $|\psi_n(\lambda)\rangle$ son cantidades desconocidas que queremos determinar, al menos de manera aproximada. La suposición básica consiste en aceptar que el operador $\hat{H}(\lambda)$, sus valores propios y kets propios admiten expansiones de Taylor en términos del parámetro de perturbación λ :

$$\hat{H}(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \hat{H}^{(k)} \quad (4)$$

$$E_n(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k E_n^{(k)} \quad (5)$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k |\psi_n^{(k)}\rangle. \quad (6)$$

Convencionalmente se denomina *sistema no perturbado* y *sistema perturbado* a las situaciones físicas en las cuales λ es igual a cero o diferente de cero, respectivamente. En lo anterior, los coeficientes de la expansión del operador $\hat{H}(\lambda)$ se determinan según la relación

$$\hat{H}^{(k)} := \frac{1}{k!} \left. \frac{\partial^k \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda^k} \right|_{\lambda=0}, \quad (7)$$

la cual es útil debido a que $\hat{H}(\lambda)$ es conocido. Para los valores propios y kets propios se cumplen relaciones similares pero, en principio, no las podemos aplicar debido a que justamente $E_n(\lambda)$ y $|\psi_n(\lambda)\rangle$ son las cantidades desconocidas que queremos determinar. El objetivo de la teoría de perturbaciones es el de desarrollar una técnica que permita evaluar las cantidades $\{E_n^{(0)}, E_n^{(1)}, E_n^{(2)}, \dots\}$ y $\{|\psi_n^{(0)}\rangle, |\psi_n^{(1)}\rangle, |\psi_n^{(2)}\rangle, \dots\}$ a partir del conocimiento de $\{\hat{H}^{(0)}, \hat{H}^{(1)}, \hat{H}^{(2)}, \dots\}$.

2.1 Condición de normalización

Por las ventajas para los cálculos analíticos subsiguientes y sin pérdida alguna de generalidad elegimos la *condición de normalización*

$$1 = \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n(\lambda) \rangle. \quad (8)$$

Al substituir (6) en esta expresión, suponer que los kets propios no perturbados están normalizados a uno, $\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle = 1$, y tener en cuenta que la relación resultante debe cumplirse para valores arbitrarios de λ , dentro de un cierto radio de convergencia, se obtienen las *relaciones de ortogonalidad*:

$$\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(m)} \rangle = \begin{cases} 1 & \text{para } m = 0 \\ 0 & \text{para } m \geq 1. \end{cases} \quad (9)$$

Esto es, para cada estado n , los kets $|\psi_n^{(m)}\rangle$ que representan las correcciones ($m \geq 1$) se deben elegir como ortogonales al correspondiente ket no perturbado, $|\psi_n^{(0)}\rangle$. Como el valor propio $E_n^{(0)}$ puede ser g veces degenerado, el ket propio $|\psi_n^{(0)}\rangle$ se forma como una combinación lineal

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = \sum_{r=1}^g a_r |\psi_{nr}^{(0)}\rangle, \quad \langle \psi_{nr}^{(0)} | \psi_{nr}^{(0)} \rangle = \delta_{Rr}, \quad (10)$$

donde los coeficientes de la expansión son números complejos arbitrarios, excepto por la restricción de la condición de normalización (9). Para garantizar el cumplimiento de la condición de ortogonalidad (9), es conveniente introducir el operador proyección

$$\hat{P}_n = \hat{I} - \sum_{r=1}^g |\psi_{nr}^{(0)}\rangle \langle \psi_{nr}^{(0)}|, \quad (11 a)$$

el cual al actuar sobre un ket arbitrario $|\psi_n(\lambda)\rangle$ extrae la parte que es ortogonal a $|\psi_n^{(0)}\rangle$,

$$|\Phi_n(\lambda)\rangle := \hat{P}_n |\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k |\psi_n^{(k)}\rangle, \quad (11 \text{ b})$$

y conduce, por lo tanto, a la descomposición

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \hat{P}_n |\psi_n(\lambda)\rangle. \quad (12)$$

2.2 Ecuaciones básicas para el método de aproximaciones sucesivas

Al substituir las expansiones (4), (5) y (6) en la ecuación de valores propios (3), se obtiene la expresión

$$\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) \sum_{\ell=0}^{\infty} \lambda^{\ell} |\psi_n^{(\ell)}\rangle = 0, \quad (13)$$

la cual podemos reagrupar en potencias de λ mediante el cambio de índices $m = k + \ell$ y el intercambio del orden de las sumas, para dar como resultado (ver Apéndice):

$$\sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \sum_{k=0}^m (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) |\psi_n^{(m-k)}\rangle = 0. \quad (14)$$

Al lado izquierdo se tiene una serie de potencias en λ , la cual es idénticamente igual a cero. Esta relación se cumple para valores arbitrarios de λ , dentro de un cierto radio de convergencia, si los coeficientes de la expansión son idénticamente cero:

$$\sum_{k=0}^m (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) |\psi_n^{(m-k)}\rangle = 0, \quad \text{para } m = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (15)$$

Este conjunto de infinito número de relaciones constituye la base de la teoría de perturbaciones ya que permite desarrollar *aproximaciones sucesivas* para calcular los valores propios y kets propios de $\hat{H}(\lambda)$. En problemas reales no es viable considerar el conjunto de infinito número de valores posibles para m y es necesario restringir los cálculos a un rango finito, digamos: $m = 0, 1, 2, 3, \dots, M$. En este caso se dice que la *aproximación es de orden M*.

La ecuación correspondiente a $m=0$, $(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_n^{(0)}\rangle = 0$, describe el *problema no perturbado*; esto es, la situación física en la cual se asigna al parámetro λ el valor cero:

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \hat{H}(\lambda) &= \hat{H}^{(0)} = \hat{H}(0), & \lim_{\lambda \rightarrow 0} E_n(\lambda) &= E_n^{(0)} = E_n(0) \\ \lim_{\lambda \rightarrow 0} |\psi_n(\lambda)\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle = |\psi_n(0)\rangle, & (\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_n^{(0)}\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Formalmente el conjunto de ecuaciones (15) se puede solucionar una a continuación de la otra, a partir de la ecuación de valores propios correspondiente al operador no perturbado, la cual tiene asociado el *resolvente*

$$\hat{G}^{(0)}(z) := (z - \hat{H}^{(0)})^{-1} = \frac{1}{z - \hat{H}^{(0)}} \quad (17)$$

cuya existencia requiere que $\text{Im}(z) = \varepsilon > 0$ [8]. Por definición, $\hat{G}^{(0)}(z)$ no es otra cosa que el inverso del operador $(z - \hat{H}^{(0)})$, por lo tanto

$$(z - \hat{H}^{(0)}) \hat{G}^{(0)}(z) = \hat{G}^{(0)}(z) (z - \hat{H}^{(0)}) = \hat{1}. \quad (18)$$

Para simplificar la escritura de las ecuaciones es conveniente introducir las abreviaciones

$$\hat{G}_n^{(0)} := \hat{G}^{(0)}(E_n^{(0)} + i\varepsilon) \quad (19)$$

$$\hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} := \hat{G}^{(0)}(E_n(\lambda) + i\varepsilon), \quad (20)$$

donde el subíndice n se refiere al estado n -ésimo bajo consideración y sobreentendemos que ε es diferente de cero pero infinitesimalmente pequeño.

Si en la ecuación (15) se separa el término $k = 0$, la corrección de m -ésimo orden ($m \geq 1$) se puede escribir en término de las correcciones de orden inferior a m , dando origen a la siguiente ecuación que constituye un *resultado fundamental* dentro del presente tratamiento de la teoría de perturbaciones:

$$|\Psi_n^{(m)}\rangle = G_n^{(0)} \sum_{k=1}^m (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) |\Psi_n^{(m-k)}\rangle, \quad \text{para } m \geq 1.$$

En virtud de las relaciones (9) se cumple para $m \geq 1$ la identidad $|\Psi_n^{(m)}\rangle = \hat{P}_n |\Psi_n^{(m)}\rangle$, la cual permite reescribir el resultado anterior en la forma

$$|\Psi_n^{(m)}\rangle = \hat{P}_n \sum_{k=1}^m \hat{G}_n^{[k]} |\Psi_n^{(m-k)}\rangle, \quad \text{para } m \geq 1, \quad (21)$$

donde por comodidad hemos definido operadores auxiliares

$$G_n^{[k]} := \hat{G}_n^{(0)} (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}), \quad \text{para } k \geq 1. \quad (22)$$

La inclusión del operador \hat{P}_n en las expresiones anteriores permitirá garantizar que las relaciones de ortogonalidad (9) se cumplen automáticamente.

3. CORRECCIONES A LOS VALORES PROPIOS

Para determinar $\{E_n^{(0)}, E_n^{(1)}, E_n^{(2)}, \dots\}$ formamos en (3) el producto escalar con el bra no perturbado $\langle \psi_n^{(0)} |$ y escribimos el valor propio $E_n(\lambda)$ en la forma

$$E_n(\lambda) = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}(\lambda) | \psi_n(\lambda) \rangle = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}(\lambda) | \psi_n^{(0)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}(\lambda) \hat{P}_n | \psi_n(\lambda) \rangle, \quad (23)$$

donde hemos tenido en cuenta la condición de normalización $\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n(\lambda) \rangle = 1$. En particular, como consecuencia de la segunda ecuación (16) y de las expansiones (4) a (6), los valores propios no perturbados se obtienen a través del valor esperado

$$E_n^{(0)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle. \quad (24)$$

Para determinar las correcciones a los valores propios sustituimos las expansiones (4) y (6) en (23) para obtener

$$E_n(\lambda) = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(m)} | \psi_n^{(0)} \rangle + \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^{m+k} \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(k)} \hat{P}_n | \psi_n^{(m)} \rangle.$$

Al intercambiar el orden de la doble suma (ver identidad 5 en el apéndice) y comparar el resultado con la expansión (5) encontramos la siguiente *expresión fundamental* para la determinación de las correcciones a la energía no perturbada:

$$E_n^{(m)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(m)} | \psi_n^{(0)} \rangle + \sum_{k=0}^m \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(k)} \hat{P}_n | \psi_n^{(m-k)} \rangle.$$

Para $m \geq 0$, el término $k = m$ no contribuye a la suma debido a que $\hat{P}_n | \psi_n^{(0)} \rangle = 0$; para $m \geq 1$, el sumando correspondiente a $k = 0$ se anula, aún en el caso de que $\hat{H}^{(0)}$ sea no hermítico. Para demostrar esta afirmación escribimos, en primer lugar, la ecuación de valores propios para $\hat{H}^{(0)}$ y su ecuación adjunta

$$\hat{H}^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle, \quad \langle \psi_n^{(0)} | (\hat{H}^{(0)})^+ = (E_n^{(0)})^* \langle \psi_n^{(0)} |. \quad (25)$$

Ahora bien, por definición, se dice que \hat{A}^+ es el operador adjunto de \hat{A} si para todo par de kets (digamos, $|f\rangle$ y $|g\rangle$) se satisface la igualdad $\langle \hat{A}^+ g | f \rangle = \langle g | \hat{A} f \rangle$. Esto es, en el caso particular bajo consideración se cumple para $m \geq 1$,

$$\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(0)} | \psi_n^{(m)} \rangle = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(0)} \psi_n^{(m)} \rangle = \langle (\hat{H}^{(0)})^+ \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(m)} \rangle = (E_n^{(0)})^* \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(m)} \rangle = 0, \quad (26)$$

donde la última igualdad es consecuencia de la relación de ortogonalidad (9).

En *conclusión*, la corrección de orden m al valor propio se determina por medio de la relación

$$E_n^{(m)} = \sum_{k=1}^m \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(k)} \hat{P}_n^{m-k} | \Psi_n^{(m-k)} \rangle \quad \text{para } m \geq 1, \quad (27)$$

en la cual sólo interviene aquella parte de $\hat{H}(\lambda)$ conformada por los $(m+1)$ primeros operadores $\hat{H}^{(k)}$, $0 \leq k \leq m$, y sólo se requiere conocer las correcciones de orden $(m-1)$ e inferior para los kets propios. A propósito, para agrupar en (27) todos los términos en una sola suma, hemos empleado la identidad

$$\hat{P}_n^k = \begin{cases} \hat{I} & \text{para } k=0 \\ \hat{P}_n & \text{para } k \geq 1. \end{cases} \quad (28)$$

4. TEORIA DE PERTURBACIONES DE RAYLEIGH-SCHRÖDINGER

Como consecuencia de los resultados anteriores surge inmediatamente la teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger, la cual parte de la suposición de que el operador no perturbado, $\hat{H}^{(0)}$, es hermítico y que representa un observable. Entonces sus kets propios $(\hat{H}^{(0)} - E_j^{(0)})|\Psi_j^{(0)}\rangle = 0$ forman un conjunto ortonormal completo, el cual permite descomponer el operador unidad como una suma de proyectores

$$\hat{I} = \sum_j |\Psi_j^{(0)}\rangle \langle \Psi_j^{(0)}|, \quad (29)$$

donde la suma sobre j indica suma sobre la parte discreta e integración sobre el continuum. Se supone igualmente que el problema de valores propios no perturbado se ha solucionado completamente.

La corrección de orden m al ket propio se determina mediante la relación (21) la cual, al aplicar (29) para evaluar el resolvente $\hat{G}_n^{(0)}$, adopta la forma

$$\begin{aligned} |\Psi_n^{(m)}\rangle &= \hat{P}_n \hat{G}_n^{(0)} \sum_{k=1}^m (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) |\Psi_n^{(m-k)}\rangle \\ &= \sum_{j \neq n} |\Psi_j^{(0)}\rangle \frac{1}{E_n^{(0)} - E_j^{(0)}} C_{jn}^{(m)}, \quad \text{para } m \geq 1, \end{aligned} \quad (30 a)$$

donde el proyector \hat{P}_n es el responsable de la *exclusión de los estados* no-perturbados degenerados, correspondientes al valor propio $E_n^{(0)}$, y los coeficientes de la expansión están dados por

$$C_{jn}^{(m)} := \sum_{k=1}^m \langle \Psi_j^{(0)} | \hat{H}^{(k)} | \Psi_n^{(m-k)} \rangle. \quad (30 b)$$

En particular,

$$C_{j_n}^{(1)} = \langle \Psi_j^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (30 \text{ c})$$

$$C_{j_n}^{(2)} = \langle \Psi_j^{(0)} | \hat{H}^{(2)} | \Psi_n^{(0)} \rangle + \sum_{l \neq n} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} C_{j_l}^{(1)} C_{l_n}^{(1)}. \quad (30 \text{ d})$$

La corrección de orden m al valor propio se calcula combinando las relaciones (27) y (30 a):

$$E_n^{(m)} = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(m)} | \Psi_n^{(0)} \rangle + \sum_{k=1}^{m-1} \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(k)} \hat{P}_n^{m-k} | \Psi_n^{(m-k)} \rangle$$

$$= \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(m)} | \Psi_n^{(0)} \rangle + \sum_{j \neq n} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_j^{(0)}} \sum_{k=1}^{m-1} \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(k)} | \Psi_j^{(0)} \rangle C_{j_n}^{(m-k)}, \quad (31 \text{ a})$$

donde sobreentendemos que la suma sobre k se anula si su límite superior es menor que su límite inferior. En particular, las correcciones de primer orden y de segundo orden son:

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (31 \text{ b})$$

$$E_n^{(2)} = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(2)} | \Psi_n^{(0)} \rangle + \sum_{j \neq n} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_j^{(0)}} C_{j_n}^{(1)} C_{j_n}^{(1)} \quad (31 \text{ c})$$

De esta manera se han reconstruido los resultados usuales de la teoría de perturbaciones pero, en virtud del método empleado en el presente papel, estamos ahora en capacidad de desarrollar algunos puntos adicionales que serán objeto de estudio en las siguientes secciones.

5. OPERADOR DE TRANSFORMACION ENTRE ESTADOS PERTURBADOS Y NO PERTURBADOS

La ecuación (21) sugiere definir un operador $\hat{U}_n^{(m)}$ tal que al actuar sobre el estado propio no perturbado $|\Psi_n^{(0)}\rangle$ genere la corrección de orden m al ket propio:

$$|\Psi_n^{(m)}\rangle = \hat{U}_n^{(m)} |\Psi_n^{(0)}\rangle \quad (32)$$

con

$$\hat{U}_n^{(0)} = \hat{1}, \quad \hat{U}_n^{(m)} = \hat{P}_n \sum_{k=1}^m \hat{G}_n^{[k]} \hat{U}_n^{(m-k)} \quad \text{para } m \geq 1. \quad (33)$$

La definición de estos operadores es de interés ya que permitirá establecer la conexión con el método de transformaciones canónicas descrito por Davydov [3]. Al tener en cuenta las relaciones de ortogonalidad (9), se verifica que estos operadores satisfacen

$$\langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_n^{(m)} \rangle = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{U}_n^{(m)} | \Psi_n^{(0)} \rangle = \begin{cases} 1 & \text{para } m = 0 \\ 0 & \text{para } m \geq 1. \end{cases} \quad (34)$$

En virtud de (6) se puede introducir un operador $\hat{U}_n(\lambda)$, el cual por definición transforma la solución n -ésima del problema de valores propios no perturbado ($\lambda = 0$) a la solución n -ésima del problema de valores propios asociado con el operador $\hat{H}(\lambda)$:

$$|\Psi_n(\lambda)\rangle = \hat{U}_n(\lambda) |\Psi_n^{(0)}\rangle \quad (35)$$

donde

$$\hat{U}_n(\lambda) = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \hat{U}_n^{(m)}. \quad (36)$$

A propósito, si por algún método diferente se logra conocer $\hat{U}_n(\lambda)$, entonces los operadores $\hat{U}_n^{(m)}$ se podrían determinar a través de la relación

$$\hat{U}_n^{(m)} = \frac{1}{m!} \left. \frac{\partial^m \hat{U}_n(\lambda)}{\partial \lambda^m} \right|_{\lambda=0}. \quad (37)$$

Conceptualmente el operador $\hat{U}_n(\lambda)$ asociado con el n -ésimo estado propio surge dentro de un contexto similar al método de las transformaciones canónicas discutido por Davydov [3], excepto que no exigimos que sea un operador unitario o isométrico. Las propiedades que lo caracterizan están implícitas en las relaciones que lo definen; esto es, en las ecuaciones (33) y (36). Cualquier condición adicional que se imponga sobre este operador requiere demostrar previamente la consistencia con las definiciones básicas ya enunciadas. Para fines de referencia, nos referiremos al procedimiento que ha surgido en el presente artículo como el *método del operador de transformación* $\hat{U}_n(\lambda)$.

5.1 Cálculo de la energía a través de valores esperados con los estados no perturbados

Es de interés demostrar que la corrección $E_n^{(m)}$ a la energía se puede calcular como el valor esperado de cierto operador efectivo $\hat{\mathcal{H}}_n^{(m)}$ y del estado no perturbado. En efecto, con base en (23) y (35), el valor propio $E_n(\lambda)$ se puede escribir como el valor esperado del operador

$$\hat{\mathcal{H}}_n(\lambda) := \hat{H}(\lambda) \hat{U}_n(\lambda) = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \hat{\mathcal{H}}_n^{(m)}; \quad (38)$$

esto es,

$$E_n(\lambda) = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}(\lambda) | \Psi_n^{(0)} \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}_n^{(m)} | \Psi_n^{(0)} \rangle, \quad (39)$$

donde la segunda igualdad en (38) surgió al expandir el operador $\hat{\mathcal{H}}_n(\lambda)$ en potencias de λ . Para determinar los operadores $\hat{\mathcal{H}}_n^{(m)}$, sustituimos (4) y (36) en (38), permutamos las sumas mediante aplicación de la relación (5) del apéndice y usamos la identidad $\hat{P}_n^k \hat{U}_n^{(k)} = \hat{U}_n^{(k)}$, para encontrar

$$\hat{\mathcal{H}}_n^{(m)} = \sum_{k=0}^m \hat{H}^{(k)} \hat{P}_n^{m-k} \hat{U}_n^{(m-k)}. \quad (40)$$

Al comparar la expresión (39) con la expansión (5) para $E_n(\lambda)$, se obtiene que las correcciones a los valores propios se determinan mediante la relación

$$E_n^{(m)} = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}_n^{(m)} | \Psi_n^{(0)} \rangle = \sum_{k=0}^m \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(k)} \hat{P}_n^{m-k} | \Psi_n^{(m-k)} \rangle, \quad \text{para } m \geq 0, \quad (41)$$

donde, para $m \geq 1$, el sumando $k = 0$ se anula por las razones de ortogonalidad arriba anotadas. La primera igualdad es de interés ya que indica que la determinación de $E_n^{(m)}$ no requiere determinar explícitamente las correcciones a los kets propios y que es suficiente hacer uso de (40) y (33) para generar los operadores efectivos que permiten la evaluación de $E_n^{(m)}$ como un valor esperado.

5.2 Ecuación de Lippmann- Schwinger para el estado perturbado

En esta sección se demuestra que el operador $\hat{U}_n(\lambda)$ satisface una ecuación del tipo Lippmann-Schwinger [9], lo cual permite establecer la conexión con el método de Brillouin-Wigner [7] para la teoría de perturbaciones. En primer lugar, al substituir (33) en (36), se encuentra que el operador $\hat{U}_n(\lambda)$ se puede escribir en la forma

$$\hat{U}_n(\lambda) = \hat{I} + \hat{P}_n \sum_{m=1}^{\infty} \lambda^m \sum_{k=1}^m \hat{G}_n^{[k]} \hat{U}_n^{(m-k)},$$

de tal manera que al intercambiar el orden de las sumas (ver relación 5 del apéndice) se tiene

$$\hat{U}_n(\lambda) = \hat{I} + \hat{P}_n \hat{G}_n^{(0)} \hat{W}_n(\lambda) \hat{U}_n(\lambda), \quad (42)$$

donde hemos empleado la definición (22) para $\hat{G}_n^{[k]}$ e introducido una *perturbación relativa*

$$\hat{W}_n(\lambda) := \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) = \hat{V}(\lambda) - (E_n(\lambda) - E_n^{(0)}) = (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) - (E_n(\lambda) - \hat{H}(\lambda)) \quad (43)$$

en la cual $\hat{V}(\lambda)$ es el operador perturbación definido a través de la ecuación (2).

En virtud de (35) y (42), la solución del problema de valores propios para $\hat{H}(\lambda)$ satisface la relación

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \hat{P}_n \hat{G}_n^{(0)} \hat{W}_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle, \quad (44)$$

la cual es una *ecuación del tipo Lippmann-Schwinger* conocido en teoría de colisiones [9]. Es de interés observar que si se substituye la última igualdad (43) en (44), se usa la identidad (18) y la ecuación de valores propios (3) se encuentra la identidad, $|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \hat{P}_n |\psi_n(\lambda)\rangle$. Hasta donde conoce el autor, la ecuación (44) es un resultado nuevo dentro del contexto de la teoría de perturbaciones.

Las ecuaciones (42) y (44) se pueden iterar para dar como resultado

$$\hat{U}_n(\lambda) = \hat{1} + \sum_{r=1}^{\infty} (\hat{P}_n \hat{G}_n^{(0)} \hat{W}_n(\lambda))^r \quad (45 a)$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{r=1}^{\infty} (\hat{P}_n \hat{G}_n^{(0)} \hat{W}_n(\lambda))^r |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (45 b)$$

donde el subíndice n recuerda que se trata de cantidades asociadas con el n -ésimo valor propio. Al substituir la ecuación (45 b) en (23) obtenemos una expresión implícita de la forma $E_n(\lambda) = F(E_n(\lambda))$, cuya solución conduce a los valores propios $E_n(\lambda)$.

5.3 Consistencia de resultados

Es útil observar que (45 b) es consistente con las relaciones (37) y (33) que constituyeron el punto de partida para la deducción. Ahora bién, para verificar la consistencia de los resultados aplicamos el operador $(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)} + i\varepsilon)$ a lado y lado de la ecuación (44), de tal manera que

$$\begin{aligned} & (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)} + i\varepsilon) |\psi_n(\lambda)\rangle \\ &= (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)} + i\varepsilon) |\psi_n^{(0)}\rangle + (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)} + i\varepsilon) \hat{P}_n \hat{G}_n^{(0)} \hat{W}_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle \end{aligned} \quad (46)$$

En primer lugar, se observa que el primer término de la derecha se anula y que la identidad que sobrevive es equivalente a $(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_n^{(0)}\rangle = 0$, lo cual se verifica

substituyendo la perturbación $\hat{W}_n(\lambda)$ por la última igualdad (43). En segundo lugar, la ecuación de valores propios (3) para $\hat{H}(\lambda)$ se puede reconstruir en virtud de la identidad

$$\left(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}\right) \hat{P}_n = E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)} \quad (47)$$

y de la relación (18).

6. TEORÍA DE PERTURBACIONES DE BRILLOUIN- WIGNER

Mostraremos que la teoría de perturbaciones de Brillouin-Wigner es un caso especial de la ecuación (44). Como la perturbación relativa $\hat{W}_n(\lambda)$ incluye el valor propio desconocido $E_n(\lambda)$, es conveniente reformular la expresión (45 b) para dejar explícita la contribución de $\hat{V}(\lambda)$. No es conveniente substituir (47) en (46) ya que la expresión resultante tiene la desventaja de no incluir el proyector \hat{P}_n , el cual queremos mantener para garantizar el cumplimiento de las relaciones de ortogonalidad ya discutidas. Por esta razón nos *restringimos* ahora a un operador $\hat{H}^{(0)}$ hermítico, ya que en este caso $\hat{H}^{(0)}$ y \hat{P}_n conmutan, y se cumple por lo tanto la identidad

$$\left(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)} + i\varepsilon\right) \hat{P}_n = \hat{P}_n \left(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)} + i\varepsilon\right), \quad \hat{H}^{(0)} \text{ hermítico.} \quad (48)$$

Empleando esta propiedad y la relación (43) podemos reescribir (46) en la forma

$$\begin{aligned} & \left[E_n(\lambda) - \hat{H}(\lambda) + i\varepsilon + (\hat{I} - \hat{P}_n) \hat{W}_n(\lambda) \right] \left| \psi_n(\lambda) \right\rangle \\ & = \left[E_n(\lambda) - \hat{H}(\lambda) + i\varepsilon + (\hat{I} - \hat{P}_n) \hat{W}_n(\lambda) \right] \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \hat{P}_n \hat{W}_n(\lambda) \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle, \end{aligned}$$

en la cual podemos usar la identidad

$$E_n(\lambda) - \hat{H}(\lambda) + i\varepsilon + (\hat{I} - \hat{P}_n) \hat{W}_n(\lambda) = \left(E_n(\lambda) - \hat{H}^{(0)} + i\varepsilon \right) \hat{P}_n - \hat{P}_n \hat{V}(\lambda) \quad (49)$$

en conjunto con (47). La ecuación resultante permite determinar formalmente el ket propio perturbado por medio de la expresión

$$\left| \psi_n(\lambda) \right\rangle = \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \hat{G}_n(\lambda) \hat{P}_n \hat{W}_n(\lambda) \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle, \quad (50)$$

donde $\hat{G}_n(\lambda)$ es el *resolvente efectivo*

$$\hat{G}_n(\lambda) := \frac{1}{\left(E_n(\lambda) - \hat{H}^{(0)} + i\varepsilon\right) - \hat{P}_n \hat{V}(\lambda)} = \sum_{r=0}^{\infty} \left(\hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n \hat{V}(\lambda)\right)^r \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)}. \quad (51)$$

En esta expresión la última igualdad surge de usar la identidad, en el límite $N \rightarrow \infty$,

$$\left(\hat{A} - \hat{B}\right)^{-1} = \hat{A}^{-1} + \left(\hat{A}^{-1} \hat{B}\right) \left(\hat{A} - \hat{B}\right)^{-1} = \sum_{r=0}^{N-1} \left(\hat{A}^{-1} \hat{B}\right)^r \hat{A}^{-1} + \left(\hat{A}^{-1} \hat{B}\right)^N \left(\hat{A} - \hat{B}\right)^{-1}. \quad (52)$$

Al comparar (50) y (35) se deduce la relación

$$\begin{aligned} \hat{U}_n(\lambda) &= \hat{I} + \hat{G}_n(\lambda) \hat{P}_n \hat{W}_n(\lambda) \\ &= \hat{I} + \sum_{r=0}^{\infty} \left(\hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n \hat{V}(\lambda)\right)^r \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n \left[\hat{V}(\lambda) - \left(E_n(\lambda) - E_n^{(0)}\right)\right] \end{aligned} \quad (53 \text{ a})$$

en la cual $\hat{G}_{n,\lambda}^{(0)}$ es el resolvente definido en la ecuación (20). Al aplicar este operador sobre el estado no perturbado, la expresión resultante se puede simplificar en virtud de la relación $\hat{P}_n |\psi_n^{(0)}\rangle = 0$, de tal manera que obtenemos

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{r=1}^{\infty} \left(\hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n \hat{V}(\lambda)\right)^r |\psi_n^{(0)}\rangle; \quad (53 \text{ b})$$

la cual no es otra cosa que la ecuación que constituye el punto de partida del método de *Brillouin-Wigner* [7]:

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n \hat{V}(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle, \quad \hat{H}^{(0)} \text{ hermítico.} \quad (54)$$

Tanto en la serie como en la ecuación integral interviene el resolvente $\hat{G}_{n,\lambda}^{(0)}$ en lugar del operador $\hat{G}_n^{(0)}$ que participa en la teoría de Rayleigh-Schrödinger y en el resultado general (45 b). Igualmente, al substituir (54) en (23) se obtiene una expresión implícita de la forma $E_n(\lambda) = F(E_n(\lambda))$, cuya solución conduce a los valores propios $E_n(\lambda)$.

7. APROXIMACIONES DE BORN Y DE BRILLOUIN-WIGNER DE ORDEN R

Las ecuaciones (45 b) y (54) permiten desarrollar métodos de aproximación alternativos al de Rayleigh-Schrödinger. Definimos como *aproximación de Born de orden R* a aquella en la cual la suma infinita que interviene en (45 b) se aproxima por una suma finita que va desde $r = 1$ hasta $r = R$, donde R es un entero positivo. Similarmente, la *aproximación de Brillouin-Wigner de orden R* es aquella en la cual la suma que interviene en (54) se evalúa incluyendo sólo hasta el R -ésimo sumando.

En particular, si suponemos que el operador no perturbado representa un observable y empleamos la descomposición (29) para el operador unidad, encontramos que las aproximaciones de orden uno de Born (B) y de Brillouin-Wigner (W) están dadas por

$$|\overset{1}{\Psi}_n^B\rangle = |\Psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq n} |\Psi_k^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}(\lambda)}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (55)$$

$$|\overset{1}{\Psi}_n^W\rangle = |\Psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq n} |\Psi_k^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}(\lambda)}{\overset{1}{E}_n^W(\lambda) - E_k^{(0)}} \quad (56)$$

donde el número 1 sobre una letra se refiere a la aproximación de primer orden y hemos introducido elementos matriciales

$$V_{nk}(\lambda) = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{V}(\lambda) | \Psi_k^{(0)} \rangle. \quad (57)$$

Las aproximaciones anteriores tienen una forma similar a la de Rayleigh-Schrödinger (RS) (ver 30) pero se diferencian entre si en algunos aspectos. En la de RS sólo interviene la perturbación de primer orden $\hat{H}^{(1)}$ mientras que en las de B y de W interviene la perturbación total $\hat{V}(\lambda)$. Por otro lado, (55) se calcula con base en las energías no perturbadas, mientras que (56) hace uso de las energías perturbadas.

Si hacemos uso de las expresiones anteriores y de (23), las aproximaciones de primer orden de Born (B) y de Brillouin-Wigner (W) para los valores propios de $\hat{H}(\lambda)$ adoptan la forma:

$$\overset{1}{E}_n^B(\lambda) = E_n^{(0)} + V_{nn}(\lambda) + \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk}(\lambda) V_{kn}(\lambda)}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (58)$$

$$\overset{1}{E}_n^W(\lambda) = E_n^{(0)} + V_{nn}(\lambda) + \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk}(\lambda) V_{kn}(\lambda)}{\overset{1}{E}_n^W(\lambda) - E_k^{(0)}}. \quad (59)$$

Tanto en la de RS como en la de B participan las energías no perturbadas mientras que en la de W la energía perturbada $\overset{1}{E}_n^W(\lambda)$ aparece en el denominador en lugar de $E_n^{(0)}$. La incógnita $\overset{1}{E}_n^W(\lambda)$ se encuentra solucionando la ecuación no lineal (59), para lo cual existen métodos numéricos eficientes [10]. Se observa que en las correcciones de primer orden aparecen términos de la forma (31) que sólo intervienen en la teoría de RS como correcciones de segundo orden. Esto significa que las aproximaciones de B y de W convergen más rápidamente que la de RS. Por otro lado, la primera aproximación de Born (ecuaciones 55 y 58) requiere un esfuerzo numérico idéntico al que se necesita en el método de RS para determinar correcciones de la energía a segundo orden y de los kets propios a primer orden.

8. CONCLUSION

Por medio del procedimiento desarrollado en el presente trabajo hemos formulado la teoría de perturbaciones de una manera general, sin restringirnos a operadores hermíticos ni a contribuciones de primer orden en el operador $\hat{H}(\lambda)$. Para la teoría de Rayleigh-Schrödinger se han obtenido expresiones genéricas que permiten evaluar las correcciones de cualquier orden tanto para los kets propios como para los valores propios del sistema perturbado. Se ha determinado un operador $\hat{U}_n(\lambda)$ en el espíritu del método de transformaciones canónicas descrito por Davydov [3], excepto que no ha sido necesario imponer la restricción de que sea isométrico o unitario. El operador $\hat{U}_n(\lambda)$ obedece una ecuación tipo Lippmann-Schwinger que conecta los kets propios no perturbados con los kets propios perturbados, de tal manera que por su intermedio se desarrolla una serie de Born que permite solucionar aproximadamente la ecuación de valores propios para $\hat{H}(\lambda)$. En el caso particular de operadores no perturbados que sean hermíticos, la ecuación de Lippmann-Schwinger conduce también al método de Brillouin-Wigner para la teoría de perturbaciones. La interrelación entre los diferentes métodos ha sido posible a través de una formulación unificada de la teoría de perturbaciones y de un cuidado tratamiento del papel que desempeña el proyector \hat{P}_n en el intercambio del orden de las sumas en diferentes expresiones.

Al lector le puede parecer que la deducción es más complicada que la tradicional, pero el tratamiento dado en este artículo permite tener una visión unificada de los diferentes métodos de la teoría de perturbaciones y su interrelación. Igualmente, según lo que conoce el autor, ha conducido a un resultado completamente nuevo, como es la ecuación (45 b) y el aquí denominado método de Born. Por otro lado, en problemas prácticos es suficiente aplicar los resultados generales obtenidos y no es necesario deducir de nuevo cada una de ellos.

En la presentación estándar de la teoría de perturbaciones se distingue el caso no degenerado del caso degenerado. El presente método es aplicable a ambas situaciones ya que en la expansión (10) podemos elegir todos los coeficientes como cero, excepto uno de ellos que se hace igual a uno, de tal manera que las ecuaciones de Lippmann-Schwinger se iteran a partir del estado $|\psi_n^{(0)}\rangle = |\psi_{nr}^{(0)}\rangle$. El proyector \hat{P}_n sigue obedeciendo la definición (11a) para garantizar que no se presenta singularidad alguna al evaluar el resolvente asociado con el Hamiltoniano no perturbado.

APENDICE

Sea $A(n, m)$ una función de dos variables discretas, sobre los valores

$$n = N, N+1, N+2, N+3, \dots, \infty; \quad m = M, M+1, M+2, M+3, \dots, \infty,$$

donde N y M son enteros predeterminados. Esto es, el conjunto de valores $A(n, m)$ los podemos organizar en forma matricial, como sigue:

$$\begin{array}{cccccc}
 A(N, M) & & & & & \\
 A(N+1, M) & A(N+1, M+1) & & & & \\
 A(N+2, M) & A(N+2, M+1) & A(N+2, M+2) & & & \\
 A(N+3, M) & A(N+3, M+1) & A(N+3, M+2) & A(N+3, M+3) & & \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots
 \end{array}$$

Sumar todos estos elementos matriciales conduce a la identidad

$$\sum_{n=N}^{\infty} \sum_{m=M}^{M-N+n} A(n, m) = \sum_{m=M}^{\infty} \sum_{n=N}^{\infty} A(n+m-M, m) \tag{1}$$

la cual corresponde a dos maneras diferentes, pero equivalentes, de hacer la suma especificada. Al lado izquierdo sumamos sobre las filas, mientras que en el lado derecho sumamos sobre las columnas. Suponemos que la doble suma converge, independiente del orden en la cual se realiza.

Con la ayuda de la identidad anterior podemos demostrar ahora la equivalencia de las ecuaciones (13) y (14), las cuales constituyen el punto clave en la argumentación presentada en el texto del artículo:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) \sum_{\ell=0}^{\infty} \lambda^{\ell} |\Psi_n^{(\ell)}\rangle = 0 \tag{2}$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \sum_{k=0}^m (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) |\Psi_n^{(m-k)}\rangle = 0 \tag{3}$$

Demostración Usando en (2) el cambio de índices $m = k + \ell$, con k fijo, conduce a

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=k}^{\infty} \lambda^{m+k-k} (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) |\Psi_n^{(m+k-2k)}\rangle = 0, \tag{4}$$

donde hemos escrito intencionalmente $\ell = m - k = m + k - 2k$, $m = m + k - k$ con el fin de poder usar la identidad (1) reescrita en la forma

$$\sum_{k=K}^{\infty} \sum_{m=M}^{\infty} A(m+k-K, k) = \sum_{m=M}^{\infty} \sum_{k=K}^{K-M+m} A(m, k). \tag{5}$$

Comparando (4) y (5) hacemos las identificaciones $K = 0$, $M = k$ y

$$A(m+k-K, k) = \lambda^{m+k-k} (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) |\Psi_n^{(m+k-2k)}\rangle,$$

Por lo tanto (4) se convierte en

$$\sum_{m=k}^{\infty} \sum_{k=0}^{m-k} \lambda^{m-k} (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) |\Psi_n^{(m-2k)}\rangle = 0.$$

Ahora bién, mediante el cambio de índices $M = m - k$, k fijo, la última ecuación se puede escribir en la forma deseada (3):

$$\sum_{M=0}^{\infty} \sum_{k=0}^M \lambda^M (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) |\Psi_n^{(M-k)}\rangle = 0.$$

AGRADECIMIENTOS

El autor agradece al Profesor Hernán Estrada sus valiosos comentarios y sugerencias.

REFERENCIAS

- [1] Sakurai, J.J., *Modern Quantum Mechanics*. 1985, Menlo Park, California: The Benjamin/Cummings Publishing Company.
- [2] Merzbacher, E., *Quantum Mechanics*. 1961, New York: Wiley.
- [3] Davydov, A.S., *Quantum Mechanics*. 1966, Ann Arbor: NEO Press.
- [4] Jones, P.B., *The Optical Model in Nuclear and Particle Physics*. 1963, New York: Interscience.
- [5] Micha, D.A., *Optical Potentials in Molecular Collisions*. J. Chem. Phys., 1969. **50**: p. 722.
- [6] Volkin, H., *Generalized Potentials for Inelastic Scattering*. Phys. Rev., 1967. **155**: p. 1177.
- [7] Ziman, J.M., *Elements of Advanced Quantum Theory*. 1969, Cambridge: Cambridge University Press.
- [8] Campos, D., *Teoría de Sistemas Cuánticos*. 1989, Bogotá: Universidad Nacional de Colombia.
- [9] Joachain, C.J., *Quantum Collision Theory*. 1983, Amsterdam: North-Holland.
- [10] Press, W.H., *et al.*, *Numerical Recipes*. 1986, Cambridge: Cambridge University Press.