

MECÁNICA CUÁNTICA II. 2013-2014

Integral de caminos 3

20. Un fluido con un campo de velocidades $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ (arrastre) satisface la ecuación de continuidad

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \mathbf{J} = \rho \mathbf{v}.$$

Cuando además hay difusión, se aplica la misma ecuación pero el flujo tiene un término extra (ley de Fick)

$$\mathbf{J} = \rho \mathbf{v} - D \nabla \rho,$$

siendo D el coeficiente de difusión. (Esto se puede deducir de la ecuación diferencial estocástica

$$d\mathbf{x} = \mathbf{v} dt + d\mathbf{w},$$

donde \mathbf{w} es una variable aleatoria con densidad de probabilidad $(4\pi Dt)^{-d/2} e^{-\mathbf{w}^2/4Dt}$, y $d\mathbf{w}$ corresponde a un tiempo dt . La ecuación estocástica describe cómo se desplaza un caminante en (\mathbf{x}, t) en un tiempo dt y $\rho(\mathbf{x}, t)$ es la densidad de caminantes.)

La ecuación de Schrödinger en tiempo imaginario

$$\partial_t \psi_E(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi_E(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\hbar} V(\mathbf{x}) \psi_E(\mathbf{x}, t)$$

(aquí t denota el tiempo euclídeo) no tiene la forma de una ecuación de continuidad cuando $V \neq 0$ y por tanto no se puede simular directamente mediante una colección de caminantes de los que $\psi_E(\mathbf{x}, t)$ sería la densidad (a menos que se permita que su número varíe). La normalización de $\psi_E(\mathbf{x}, t)$, considerada como una densidad, no se conserva.

Sin embargo, la densidad

$$\rho(\mathbf{x}, t) := \psi_E(\mathbf{x}, t) \varphi_0(\mathbf{x}) e^{E_0 t/\hbar}$$

(aquí $\varphi_0(\mathbf{x})$ es la función de onda del estado fundamental y E_0 la correspondiente energía) es tal que su normalización se conserva (demuéstrese). Demuéstrese también que $\rho(\mathbf{x}, t)$ sí obedece una ecuación de continuidad, con término de arrastre y término de difusión. Determinese el campo de velocidades $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ asociado.

21. (Principio variacional.) La esperanza matemática de cualquier variable aleatoria satisface la desigualdad de Jensen, $\langle e^x \rangle \geq e^{\langle x \rangle}$. Sean W_0 y $W = W_0 + W_1$ dos acciones euclídeas (en $[-T/2, T/2]$ y $T \rightarrow +\infty$) que admiten estados fundamentales con energías E_0 y E , respectivamente, y sea $\langle \cdot \rangle_0$ el promedio sobre caminos obtenido con peso e^{-W_0} (unidades $\hbar = 1$). Usando $\langle e^{-W_1} \rangle_0 \geq e^{-\langle W_1 \rangle_0}$ deducir la siguiente cota variacional: $E \leq E_0 + \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \langle W_1 \rangle_0$. En aplicaciones, típicamente W_0 es cuadrática con parámetros a optimizar y por tanto $\langle W_1 \rangle_0$ es fácilmente calculable. Se obtiene una cota rigurosa, mejor cuanto mejor se elija la acción auxiliar W_0 .