"El saber de mis hijos hará mi grandeza"

UNIVERSIDAD DE SONORA

División de Ciencias Exactas y Naturales

Programa de Maestría en Matemáticas

ALGUNOS ASPECTOS ANALÍTICOS Y GEOMÉTRICOS DE LA CUANTIZACIÓN SEMICLÁSICA

T E S I S

Que para obtener el título de:

Maestro en Matemáticas

Presenta:

Lic. NELSON MAMANI ALEGRIA

Director de tesis: Dr. YURY VOROBEV

Hermosillo, Sonora, México, 28 de julio de 2020

SINODALES

Dr. Misael Avendaño Camacho

Universidad de Sonora

Dr. Yury Vorobev

Universidad de Sonora

Dr. Andres Pedroza

Universidad de Colima

Dr. Carlos Villegas

Universidad Nacional Autónoma de México

Índice general

AGRADECIMIENTOS

En principio quiero agradecer a mis padres, Estela y Mario, por la confianza y el apoyo incondicional que me brindaron siempre. También quiero agradecer a mis hermanos, Cristina y Fabian, por su paciencia y cariño.

Este trabajo de tesis no hubiera sido posible sin la guía de mi profesor y tutor Yuri Vorobev, gracias por toda su paciencia, por todas sus sugerencias y sobre todo por toda la confianza depositada en mí.

Finalmente quiero agradecer también a todos los profesores del Posgrado que han contribuido en mi formación, en especial quiero agradacer a los profesores Misael Avendaño Camacho, Ruben Flores, Andres Pedroza y Carlos Villegas.

Nelson Mamani Alegria

Julio, 2020.

INTRODUCCIÓN

En física, un método de solución de un problema cuántico se denomina semiclásico si el resultado que se obtiene al aplicar el método viene expresado como una serie de potencias de un parámetro pequeño $\hbar$. El método de aproximación semiclásica nos permite construir soluciones aproximadas de algunos problemas asociados a operadores diferenciales o pseudo-diferenciales

$$\hat{H} = H\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial x}, x\right), \tag{1}$$

cuando $\hbar \to 0$. Un modelo importante estudiado en el análisis semiclásico es el operador de Schrödinger

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + U(x). \tag{2}$$

Para este modelo, los dos problemas principales a tratar son:

- El problema de Cauchy: Encontrar una función $\psi(t, x)$ con valores en $\mathbb{C}$ tal que

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, x\right)\psi, \tag{3}$$

$$\psi(t, x)|_{t=0} = \psi_0(x); \tag{4}$$

- El problema espectral: Encontrar $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ con valores en $\mathbb{C}$ y $\lambda \in \mathbb{C}$ tales que

$$H\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x},x\right)\psi=\lambda\psi, \tag{5}$$

$$||\psi||_{L_2(\mathbb{R}^n)}=1. \tag{6}$$

En esta situación, una pregunta fundamental es la siguiente: ¿cómo la dinámica clásica del sistema Hamiltoniano asociado $(\mathbb{R}^{2n},\omega=dp\wedge dx,H=H(p,x))$ determina el comportamiento de las soluciones de esos problemas cuando $\hbar\to 0$?.

Para el problema de Cauchy expresado en las ecuaciones (3) y (4) con condición inicial oscilatoria $\psi_0(x)=exp\left(i\frac{S_0(x)}{\hbar}\right)\varphi_0(x)$, el anzats WKB $\psi^{BKW}=exp\left(i\frac{S(x,t)}{\hbar}\right)\varphi(x,t)$ proporciona una solución asintótica mod $\hbar^2$ para la escala de tiempo finito $0\leq t\leq T$. Aquí S y φ son las soluciones de la ecuación de Hamilton-Jacobi y de la ecuación de Transporte respectivamente, las cuales estan completamente determinados por las trayectorias del sistema Hamiltoniano,

$$\frac{dp}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial x}, \tag{7}$$

$$\frac{dx}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p} \tag{8}$$

que inicia con la superficie inicial Λ_0:

$$p|_{t=0}=\frac{\partial S_0(\alpha)}{\partial x}, \tag{9}$$

$$x|_{t=0}=\alpha \tag{10}$$

La escala de tiempo $[0,T]$ depende de la aparición de los llamados puntos focales en la evolución temporal de Λ_0.

Para el problema espectral (5), (6), usando algunos objetos clásicos asociados al sistema Hamiltoniano (7),(8), el método semiclásico nos permite construir los llamados cuasimodos del operador autoadjunto de Weyl $\hat{H}$ en el límite cuando $\hbar$ tiende a cero. Por un cuasimodo mod $\hbar^N$ de $\hat{H}$, usualmente nos referimos a un par (λ, ψ) que satisface

$$|| \left(H\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, x\right) - \lambda I \right) \psi ||_{L^2(\mathbb{R}^n)} = O(\hbar^N), \tag{11}$$

$$||\psi||_{L^2(\mathbb{R}^n)} = 1 + O(\hbar). \tag{12}$$

En este caso, λ es un valor propio asintótico de $\hat{H}$, esto quiere decir que la distancia entre λ y el espectro de $\hat{H}$ es de orden $\hbar^N$, con $N > 1$. Normalmente, la función ψ no representa ninguna asintótica a las funciones propias de $\hat{H}$ y se denomina una función propia semiclásica de $\hat{H}$, o brevemente, un cuasimodo.

El método de los rayos [9] y la teoría general del operador canónico de Maslov [35], [36],[37] y [38] fueron desarrollados para construir soluciones asintóticas (semiclásicas) de EDP's y cuasimodos, los cuales estan localizados en puntos, trayectorias, toros u otras subvariedades invariantes en el espacio fase $\mathbb{R}^{2n}$ del sistema Hamiltoniano (7),(8). Se pueden distinguir dos casos: (i) caso integrable y, (ii) caso no integrable. El caso integrable se refiere a integrabilidad en el sentido de Liouville y en este caso un dominio abierto en $\mathbb{R}^{2n}$ es trivialmente foliado por n-toros Lagrangianos invariantes $\{\Lambda_c\}_{c\in W}$. Como es bien conocido [35], la cuantización semiclásica de esta familia de n-toros conduce a una serie de cuasimodos $(\lambda_k, \psi_k)_{k\in\mathbb{Z}^n}$ mod $\hbar^2$ del operador $\hat{H}$. Los valores propios asintóticos λ_k son determinados por la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\oint_{\gamma_i} pdx = \left(k_i + \frac{m_i}{4}\right), \tag{13}$$

donde m_i es el índice de Maslov de un 1-ciclo γ_i sobre Λ_c. Esta condición proviene de la construcción de la correspondiente función propia semiclásica ψ_k por medio del operador canónico de Maslov que involucra la transformada de Fourier parcial semiclásica. Nótese que la derivación de la condición (13) no es transparente y se basa en el procedimiento de pegado de funciones locales que oscilan rápidamente. Alternativamente uno puede construir $\psi = \psi_k$ usando la representación integral de Karasev sobre Λ [24], [25]:

$$\psi(x) = (K_\Lambda(\varphi))(x) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{n}{2}}} \int_\Lambda J(\alpha)^{\frac{1}{2}} exp\left(\frac{iS(x,\alpha)}{\hbar}\right) \varphi(\alpha) d\sigma. \tag{14}$$

Aquí, $x \in \mathbb{R}^n$, $\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_n)(mod\ 2\pi) \in \Lambda \approx \mathbb{T}^n, J : \Lambda \to \mathbb{C} \setminus \{0\}$ es una función con valores complejos distinta de cero (un Jacobiano) la cual tiene una interpretación geométrica relacionada con la noción de polarización de Kahler sobre Λ. Más aún, $S(x,\alpha)$ es una función suave con valores complejos (fase) sobre $\mathbb{R}^n_x \times \mathbb{R}^n_\alpha$ con $ImS(x,\alpha) \geq 0$.

Entonces, la condición de cuantización (13) establece el hecho de que, para un x fijo, el producto $J(\alpha)^{\frac{1}{2}} exp\left(\frac{iS(x,\alpha)}{h}\right)$ es una función global sobre Λ, esto es, 2π-periódica en cada α_i. El punto fundamental del enfoque de Karasev es derivar una fórmula de conmutación del tipo:

$$\hat{H}(K(\varphi)) = K(\hat{L}(\varphi)) + O(\hbar^2), \tag{15}$$

para algún operador diferencial lineal de primer orden $\hat{L}$ sobre $C^\infty(\Lambda)$. Observe que la representación de ψ por medio del operador canónico de Maslov puede ser obtenido de (14) aplicando el método de la fase estacionaria.

Siguiendo [24], en el caso general, cuando el símbolo $H(p,x)$ de $\hat{H}$, una subvariedad lagrangiana Λ y una forma de volumen $d\sigma$ no tienen ninguna relación, presentamos una derivación detallada de la fórmula básica (15) y el cálculo del operador $\hat{L}$. Así, usando (15), y la propiedad

$$||K(\varphi)||_{L^2(\mathbb{R}^n)} = ||\varphi||_{L^2(\Lambda,d\sigma)} + O(\hbar), \tag{16}$$

la idea es reducir el problema espectral original (5),(6) sobre el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$ al siguiente problema espectral sobre $L^2(\Lambda, d\sigma)$:

$$\hat{L}\varphi = \lambda\varphi, \tag{17}$$

$$||\varphi||_{L^2(\Lambda,d\sigma)} = 1. \tag{18}$$

Nuestro principal objetivo es adoptar y desarrollar más la representación integral (14) y la fórmula de conmutación (15) para algunas clases de sistemas no integrables. Los varios esquemas de cuantización semiclásica para el caso de sistemas no integrables fueron estudiados en muchos trabajos, por ejemplo,

(i) Cuantización semiclásica de órbitas periódicas estables en $\mathbb{R}^{2n}$ del sistema Hamiltoniano (7),(8) fué estudiado en [9],[37],[8],[40],

(ii) Cuantización semiclásica de subvariedades isotrópicas compactas k-dimensionales en $\mathbb{R}^{2n}$, $(1 < k < n)$ invariante con respecto al flujo de (7),(8) fué estudiado en [37],[11],[28],[29].

Nuestro objetivo es aplicar la representación integral (14) para determinar cuasimodos en el caso de un sistema no integrable que proviene de la teoría adiabática de sistemas Hamiltonianos rápidos y lentos cuánticos [26], [27],[32],[34].

La típica característica de tales modelos cuánticos es que, además del parámetro semiclásico $\hbar$, en la relación de conmutación aparece también la dependencia de un parámetro adiabático pequeño ε. En lugar de la integrabilidad del sistema Hamiltoniano (7),(8), estamos buscando integrales primeras aproximadas en ε, en particular, invariantes adiabáticos [5][6].

Nuestros principales resultados originales son los siguientes:

(i) En el Capítulo 4, damos una derivación completa de la fórmula de conmutación (15) para el caso general, esto es, para un símbolo arbitrario H y un toro Lagrangiano Λ. Este resultado se presenta en el Teorema 4.2...

Como una consecuencia del Teorema 4.2, formulamos un resultado (Teorema 4.3) sobre los cuasimodos de un operador de Weyl $\hbar$-pseudodiferencial $\hat{H}$, asociado a un toro Lagrangiano cuantizado Λ que satisface la siguiente condición de compatibilidad con el sistema Hamiltoniano clásico correspondiente (7), (8);

- $H|_\Lambda = E = const$;
- la forma de volumen $d\sigma$ es invariante con respecto al flujo del sistema Hamiltoniano,

(observe que la primera condición para la función Hamiltoniana H, ser constante a lo largo de Λ, es equivalente a la invarianza de Λ a lo largo de las trayectorias del sistema Hamiltoniano (7), (8)).

Este resultado está basado en el hecho de que el operador $\hat{L} : C^\infty(\Lambda) \to C^\infty(\Lambda)$ en (15) tiene la siguiente solución del problema espectral (17), (18): $\lambda = E$ y $\varphi = 1$.

En la sección 5.1, mostraremos que las condiciones de compatibilidad mencionadas son verificadas en el caso integrable, cuando el sistema Hamiltoniano (7), (8) es integrable en el sentido de Liouville.

(ii) Otra aplicación del Teorema 4.2 se presenta en la sección 5.4, para el problema espectral (5), (6) para un operador de Weyl $\hbar$-pseudodiferencial adiabático [26, 32]:

$$\hat{H} = H\left(-ih\frac{\partial}{\partial x}, x, -i\varepsilon h\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \tag{19}$$

donde $x \in \mathbb{R}$, $y \in \mathbb{R}$ y $\varepsilon \ll 1$ es un parámetro adiabático pequeño.

En el espacio fase

$$\left(\mathbb{R}^4 = \mathbb{R}^{2r}_{\xi,y} \times \mathbb{R}^{2s}_{p,x}, \omega = dp \wedge dx + \frac{1}{\varepsilon} d\xi \wedge dy\right),$$

asociamos al símbolo $H = H(p, x, \xi, y)$ del operador (19) el siguiente sistema Hamiltoniano

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \tag{20}$$

$$\dot{\xi} = -\varepsilon\frac{\partial H}{\partial y}, \quad \dot{y} = \varepsilon\frac{\partial H}{\partial \xi}, \tag{21}$$

que se conoce con el nombre de Sistema Hamiltoniano con variables rápidas y lentas en la teoría adiabática [4, 5, 6]. Uno puede pensar en (20), (21) como un sistem perturbado cuando $\varepsilon \to 0$. Para $\varepsilon = 0$, tenemos el sistema no perturbado

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \tag{22}$$

$$\dot{\xi} = 0, \quad \dot{y} = 0, \tag{23}$$

el cual describe la dinámica de las variables rápidas (p, x) para valores fijos de las variables lentas (ξ, y).

En general el sistema Hamiltoniano original (20), (21) no es integrable, y nuestro objetivo es construir cuasimodos del operador $\hat{H}$ (19) $mod(\hbar^2 + \varepsilon^2)$ asumiendo algunas propiedades de simetría del sistema no perturbado (22), (23).

Supongamos que

(H1) El flujo del sistema no perturbado (22), (23) es periódico, es decir, existe una $\mathbb{S}^1$-acción en $\mathbb{R}^4$ cuyo generador infinitesimal es de la forma

$$\Upsilon = -\frac{\partial J}{\partial x}\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial J}{\partial p}\frac{\partial}{\partial x}$$

donde la función $J = J(p, x, \xi, y)$ es una integral primera del sistema no perturbado y es llamada invariante adiabático.

(H2) En algún dominio abierto de $\mathbb{R}^4$, el conjunto de nivel $\{H = c_1, J = c_2\}$ es compacto y conexo para ciertos valores de $c = (c_1, c_2)$.

Entonces, bajo las hipótesis $(H1)$ y $(H2)$, por resultados sobre formas normales de sistemas adiabáticos (20), (21) [6], se tiene el siguiente hecho

LEMA 0.1. *En algún dominio abierto $N \subset \mathbb{R}^4$ para $\varepsilon \ll 1$ sucientemente pequeño*

- *existe un sistema Hamiltoniano integrable*
$$\left(N, \omega = dp \wedge dx + \frac{1}{\varepsilon} d\xi \wedge dy, H_\varepsilon^{new}, F_\epsilon^{new}\right),$$
tal que $\{H_\varepsilon^{new}, F_\varepsilon^{new}\} = 0$, $H_\varepsilon^{new} = H + O(\varepsilon^2)$ y $F_\varepsilon^{new} = J + O(\varepsilon)$.

- *el dominio N es trivialmente foliado por 2-toros de Liouville*

$$\Lambda_c(\varepsilon) = \{(p, x, \xi, y) \in M \mid H_\varepsilon^{new} = c_1,\ F_\varepsilon^{new} = c_2\}. \tag{24}$$

Observamos que los toros Lagrangianos $\Lambda_c(\varepsilon)$ son invariantes con respecto al flujo del sistema original (20), (21) sólo $mod(\varepsilon^2)$.

Ahora supongamos que un toro de Liouville de la familia (24) satisface la siguiente regla de cuantización modificada:

$$\frac{1}{2\pi}\oint_{\tilde{\gamma}_1(c_1,c_2)}(\xi dy - \varepsilon\theta) = \hbar\varepsilon\left(k_1 + \frac{m_1}{4}\right), \tag{25}$$

$$c_2 = \hbar\left(k_2 + \frac{m_2}{4}\right) \tag{26}$$

donde los enteros $k_1 \sim \frac{1}{\varepsilon h}$ y $k_2 \sim \frac{1}{h}$ cuando $\hbar, \varepsilon \to 0$. Aquí $\theta = \theta_1 d\xi + \theta_2 dy$ es una 1-forma que define la conexión de Hannay-Berry [6].

Aplicando el Teorema 4.2 obtenemos el siguiente resultado

TEOREMA 0.1. *Si $c = (c_1, c_2)$ satisface la regla de cuantización (25), (26), entonces el operador $\hat{H}$ (19) tiene el siguiente cuasimodo $(\lambda = c_1(k_1, k_2), \psi_{k_1,k_2} = K_{\Lambda_{c_1,c_2}(\varepsilon)}(1))$ $mod(h^2 + \varepsilon^2)$.*

Este resultado da una versión alternativa para la construcción de un término adiabático del operador (19) presentado en [32].

Así, podemos resumir que los resultados nuevos y originales son presentados en las secciones 4.3 y 5.4. Más aún, en la tesis también presentamos algunos resultados relevantes conocidos los cuales no son fáciles de hallar en la literatura. En particular, en el Capítulo 2 presentamos un cálculo completo del álgebra de simetría del oscilador cuántico resonante y un método algebraico para el cálculo del espectro del átomo de Hidrógeno. En la sección 5.2 discutimos algunos métodos para calcular el índice de Maslov basado en la geometría de Kahler.

CAPÍTULO 1

PRELIMINARES

En este capítulo introductorio, además de establecer la notación para el resto del trabajo, se presenta los sistemas Hamiltonianos y algunas de sus principales propiedades, las cuales son necesarias para el desarrollo del presente trabajo. Así mismo, como un caso fundamental, se presentan los sistemas integrables en el sentido de Liouville y se dan varios ejemplos de este tipo de sistema.

1.1. Sistemas Hamiltonianos. Propiedades Básicas

Recordemos que si (M,ω) es una variedad simpléctica, un campo $X \in \mathfrak{X}(M)$ se dice simpléctico, si $L_X\omega = 0$ o, equivalentemente, si $i_X\omega$ es una 1-forma cerrada. Denotaremos el conjunto de los campos simplécticos de (M,ω) por $\mathfrak{X}_\omega(M)$.

En el caso en que X sea un campo simpléctico y además $i_X\omega$ sea exacta, existe una función $F : M \to \mathbb{R}$ con $i_X\omega = -dF$. Denotamos entonces $X = X_F$ y decimos que X_F es un campo hamiltoniano con función Hamiltoniana F.

Por la no degeneración de ω, para cada $F \in C^\infty(M)$ existe y es único el campo Hamiltoniano X_F, es decir, se tiene la aplicación $F \mapsto X_F$, que además es $\mathbb{R}$-lineal.

Localmente, si tomamos una carta de Darboux en un punto $x \in M$, podemos escribir $x = (q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)$, la función $F : M \to \mathbb{R}$ expresarla como $F(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)$ y la forma simpléctica por $\omega = dp \wedge dq$.

En coordenadas de Darboux, tenemos

$$dF = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} dp_i,$$

de modo que el campo hamiltoniano de F tiene la forma

$$X_F = \sum_{i=1}^{n} X_{q_i} \frac{\partial}{\partial q_i} + X_{p_i} \frac{\partial}{\partial p_i}.$$

Ahora,

$$dF = -i_{X_F}\omega = \sum_{i=1}^{n} X_{q_i} dp_i - X_{p_i} dq_i.$$

Por tanto, las componentes del campo son $X_{q_i} = \frac{\partial F}{\partial p_i}$ y $X_{p_i} = -\frac{\partial F}{\partial p_i}$. Entonces las curvas integrales $(q_i(t), \ldots, q_n(t), p_1(t), \ldots, p_n(t))$ del campo X_F, son soluciones de las ecuaciones de Hamilton con hamiltoniano F,

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial F}{\partial p_i}, \tag{1.1}$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial F}{\partial q_i}. \tag{1.2}$$

para $i = 1, \ldots, n$.

Cabe preguntarse ahora cuándo los campos simplécticos y los campos hamiltonianos coinciden. Esto es fácil de ver, consideremos la aplicación $C^\infty(M) \ni F \mapsto X_F \in \mathfrak{X}(M)$ y $\mathfrak{X}_\omega(M) \ni X \mapsto [i_X\omega] \in H^1(M)$, donde $H^1(M)$ denota el primer grupo de cohomología de deRham en M. Como $X_F \in \mathfrak{X}_\omega(M)$, tenemos la siguiente sucesión exacta corta de espacios vectoriales

$$0 \to C^\infty(M) \xrightarrow{X_\bullet} \mathfrak{X}_\omega(M) \xrightarrow{[i_\bullet\omega]} H^1(M) \to 0,$$

ya que precisamente $\ker([i_\bullet\omega]) = \mathrm{Im}(X_\bullet)$ es el conjunto de campos hamiltonianos. Si $H^1(M) = 0$ (en particular, si M es simplemente conexo), entonces todo campo simpléctico es hamiltoniano. Como consecuencia, todo campo simpléctico es localmente hamiltoniano. Es decir, si X es un campo simpléctico, en todo punto $x \in M$ podemos tomar un entorno U simplemente conexo en el que hay una función $F : U \to M$ tal que $-i_X\omega = dF$ en U.

EJEMPLO 1.1. El espacio fase estándar para los sistemas mecánicos clásicos es el espacio Euclideano $2n$-dimensional ($M = \mathbb{R}^{2n}_{p,x}, \omega = dp \wedge dx$).

Recuerde que una subvariedad $\Lambda \subset M$ de una variedad simpléctica $2n$-dimensional (M, ω) se dice *isotrópica* si $\omega|_\Lambda = 0$. Una subvariedad Λ de dimensión maximal, $dim\Lambda = n$ se llama *Lagrangiana.*

En particular, una subvariedad n-dimensional Λ en el espacio fase estándar $(\mathbb{R}^{2n}, dp\wedge dx)$ es Lagrangiana si y sólo si $p \cdot dx|_\Lambda$ es una 1-forma cerrada, esto es, la integral $\int_\gamma p \cdot dx$ sólo depende de la clase de homotopía de la curva orientada γ en Λ.

Un ejemplo típico de una subvariedad Lagrangiana $\Lambda \subset \mathbb{R}^{2n}$ es dada por $\Lambda = \left\{p = \frac{\partial S(x)}{\partial x}\right\}$, donde $S = S(x)$ es una función suave sobre $\mathbb{R}^n_x$.

Localmente, una subvariedad Lagrangiana Λ puede ser descrita en términos de las coordenadas de Darboux subordinadas a Λ [17]: en una vecindad de cada punto de Λ existe un sistema de coordenadas local $(p, x) = (p_1, ..., p_n, x_1, ..., x_n)$ tal que

$$\omega = dp \wedge dx,$$

$$\Lambda = \{p_1 = 0, \ldots, p_n = 0\}.$$

Se sigue que:

$$T_m\Lambda = Span\Big\{\frac{\partial}{\partial x_1}\Big|_m, \ldots, \frac{\partial}{\partial x_n}\Big|_m\Big\}.$$

Este hecho implica el siguiente criterio el cual juega un papel importante en la cuantización semiclásica de subvariedades Lagrangianas (ver el Capítulo 4).

LEMA 1.1. *Sea (M, ω, H) un sistema Hamiltoniano y $\Lambda \subset M$ una subvariedad Lagrangiana. Entonces, las siguientes propiedades son equivalentes*

(a) Λ es *invariante* con respecto al flujo del campo Hamiltoniano X_H,

$$X_H(m) \in T_m\Lambda \quad \forall m \in \Lambda;$$

(b) la función Hamiltoniana H es constante a lo largo de Λ,

$$H|_\Lambda = E = const.$$

Demostración. En coordenadas de Darboux (p, x) subordinadas a Λ, tenemos

$$X_H = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p}, \frac{\partial}{\partial x} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial H}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial p} \right\rangle$$

y por tanto X_H es tangente a Λ si y sólo si

$$\frac{\partial H}{\partial x} = 0,$$

lo que es equivalente a $H = H(p)$. Esto significa que $H|_\Lambda = H(0) = const.$ □

***Observación* 1.1.** En el caso cuando la subvariedad Λ es una subvariedad isotrópica con $dim\Lambda < \frac{1}{2} dim M$, las propiedades (a) y (b) en general no son equivalentes.

Sean (M, ω) una variedad simpléctica y $f, g \in C^\infty(M)$. Se define el corchete de Poisson de las funciones f y g por

$$\{f, g\} := L_{X_f} g, \tag{1.3}$$

donde $L_{X_f} g$ denota la derivada de Lie de g a lo largo del campo X_f.

El corchete de Poisson tiene las siguientes propiedades,

- $\{f, g\} = dg(X_f) = \omega(X_f, X_g)$,
- $X_{\{f,g\}} = [X_f, X_g]$.

Localmente, en una carta de Darboux (p, q) alrededor del punto $x \in M$, el corchete de Poisson se expresa como:

$$\{f, g\} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right). \tag{1.4}$$

La expresión (1.4) es la forma del corchete de Poisson que se suele ver en mecánica clásica. En particular, se verifican las siguientes relaciones

$$\{f, q_i\} = \frac{\partial f}{\partial p_i}, \quad \{f, p_i\} = -\frac{\partial f}{\partial q_i},$$

que son precisamente las componentes del campo X_f. Si ahora consideramos las curvas integrales de f, podemos ver que las ecuaciones de Hamilton se pueden escribir en términos del corchete de Poisson de la siguiente forma

$$\dot{q}_i = \{f, q_i\}, \quad \dot{p}_i = \{f, p_i\}.$$

De aquí también obtenemos lo que se conoce como las relaciones de conmutación canónicas $\{p_i, q_j\} = \delta_{ij}$.

Recíprocamente, si $(U, (q, p))$ es una carta en un punto $x \in M$ tal que $\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0$ y $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$ para cada $i, j = 1, \ldots, n$, entonces es una carta de Darboux alrededor de x.

En general un corchete de Poisson en una variedad diferenciable M es una aplicación $\{,\} : C^\infty(M) \times C^\infty(M) \to C^\infty(M)$ que a cada par de funciones asigna su corchete de Poisson, esta aplicación tiene las siguientes propiedades:

1. Es bilineal y antisimétrica,
2. cumple la regla de Leibniz

$$\{f, gh\} = \{f, g\}h + g\{f, h\},$$

3. cumple la identidad de Jacobi

$$\{\{f, g\}, h\} + \{\{g, h\}, f\} + \{\{h, f\}, g\} = 0,$$

De las propiedades 1 y 2 se sigue que la aplicación $C^\infty(M) \ni g \mapsto \{f, g\}$ es una derivación para cada $f \in C^\infty(M)$.

Las propiedades 1 y 3 nos dicen que $(C^\infty(M), \{,\})$ es un álgebra de Lie. En general, a la pareja $(C^\infty(M), \{\cdot, \cdot\})$ se denomina un álgebra de Poisson.

El par $(M, \{\cdot,\cdot\})$ donde $\{\cdot,\cdot\}$ es un corchete de Poisson es llamada una variedad de Poisson.

Una función $C \in C^\infty(M)$ que conmuta con todas, $\{C, f\} = 0$, para toda $f \in C^\infty(M)$, se llama una función de Casimir.

Transformaciones canónicas.- Sean (M, ω) y (M', ω') dos variedades simplécticas. Una aplicación diferenciable $\varphi : M \to M'$ se dice ser canónica ó simpléctica si

$$\varphi^*\omega' = \omega.$$

Notemos que para cada función $H' \in C^\infty(M')$, se tiene

$$\varphi^* i_{X_{H'}}\omega' = i_{X_{H'\circ\varphi}}\omega.$$

Es decir, la transformación canónica φ envía el campo Hamiltoniano $X_{H'}$ en (M', ω') en el campo Hamiltoniano $X_{H'\circ\varphi}$ en (M, ω). Recíprocamente, si tenemos una aplicación diferencial $\varphi : (M, \omega) \to (M', \omega')$ tal que $\varphi^* : TM' \to TM$ satisface la condición $\varphi^*(Ham(M, \omega)) \subset Ham(M', \omega')$, entonces φ es canónica.

1.2. Integrabilidad y Simetría

En esta sección se presenta la noción de cantidad conservada o integral primera de un sistema Hamiltoniano y se estudia la relación que tiene con las simetrías del sistema, mediante el mecanismo descubierto por Emmy Noether, que constituye una de las ideas centrales de toda la Física.

Recordemos que si (M, ω, H) es un sistema Hamiltoniano, una función $f : M \to \mathbb{R}$ se dice que es una integral primera del sistema o una cantidad conservada si es constante a lo largo de las trayectorias del sistema. Esto es, si $f(\mathrm{Fl}^t_{X_H}(x)) = f(x)$ para todo $t \geq 0$ y para todo $x \in M$, donde $\mathrm{Fl}^t_{X_H}$ denota el flujo del sistema Hamiltoniano.

Una función $f : M \to \mathbb{R}$ es una integral primera de (M, ω, H) si y sólo si $\{H, f\}$=0.

Una característica relevante del sistema Hamiltoniano (M, ω, H) es que el propio Hamiltoniano es integral primera del sistema, este hecho se denomina ley de la conservación de la energía.

Una consecuencia de la identidad de Jacobi del corchete de Poisson es:

Si f_1, f_2 son integrales primeras de (M, ω, H), entonces $\{f_1, f_2\}$ es también una integral primera de (M, ω, H). El espacio de todas las integrales primeras, denotado por $\mathrm{Sym}(M, \omega, H)$, es un álgebra de Lie de dimensión infinita y se llama el álgebra de simetrías del sistema Hamiltoniano.

Veamos ahora un resultado central de esta sección, que relaciona integrales primeras con simetrías.

TEOREMA 1.1 (Teorema de Noether)**.** *Sea (M, ω, H) un sistema hamiltoniano y sea $f \in C^\infty(M)$. Si H es constante a lo largo del flujo de X_f, entonces f es una integral primera de (M, ω, H).*

Para entender bien qué son las simetrías del sistema consideremos la siguiente definición:

DEFINICIÓN 1.1. *Sea (M, ω, H) un sistema hamiltoniano y G un grupo. Sea* $\mathrm{Diff}(M)$ *el grupo de difeomorfismos de M. Una G-simetría del sistema (M, ω, H) es una acción*

$$\varphi : G \to Diff(M)$$

$$g \mapsto \varphi_g,$$

tal que $H \circ \varphi_g = H$.

Ahora consideremos el caso en que G sea un grupo de Lie y φ una G-simetría diferenciable de un sistema hamiltoniano (M, ω, H). Si g_t es un subgrupo uniparamétrico de G entonces g_t lleva asociado por la acción un flujo completo $\varphi_t = \varphi_{g_t}$. En el caso en que φ_t sea un flujo generado por un sistema hamiltoniano $F : M \to \mathbb{R}$, entonces, por el teorema de Noether, F es una cantidad conservada del sistema (M, ω, H).

DEFINICIÓN 1.2. *Sea (M, ω, H) un sistema hamiltoniano con dim(M)=2n. Decimos que (M, ω, H) es integrable en el sentido de Liouville si existen $F_1, ..., F_n \in C^\infty(M)$ que satisfacen las condiciones:*

1. son integrales primeras funcionalmente independientes, es decir, $dF_1 \wedge \cdots \wedge dF_n \neq 0$ en un dominio abierto denso en M, y $\{H, F_j\} = 0, j = 1, ...n$;

2. están en involución, esto es, $\{F_i, F_j\} = 0$ para cada i,j=1,...,n,y

3. los campos X_{F_i} son completos para cada i=1,...,n.

Si definimos $F : M \to \mathbb{R}^n$ por $F(x) = (F_1(x), ..., F_n(x))$. Los puntos $x \in M$ tales que $rank(dF_x) = n$ son llamados puntos regulares de F. Los puntos que no son regulares se llaman puntos críticos. Si $x \in M$ es un punto crítico, $F(x)$ se llama valor crítico. Por tanto, llamamos valores regulares a los valores que no son críticos, es decir, a aquellos $a \in \mathbb{R}^n$ tales que si $a = F(x)$, entonces x es un punto regular.

Para formular un resultado básico en la teoría de la integrabilidad de sistemas Hamiltonianos [4], introduciremos la siguiente notación.

Sea $W \subset \mathbb{R}^n_y$ un dominio abierto en el espacio vectorial n-dimensional con coordenadas $y = (y_1, ..., y_n)$ y $\mathbb{T}^n = \mathbb{S}^1 \times ... \times \mathbb{S}^1$ el n-toro con coordenadas cíclicas $\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_n)$ mod 2π . Considere el producto de W y $\mathbb{T}^n$ como una variedad simpléctica modelo $(W \times \mathbb{T}^n, dy \wedge d\alpha)$.

TEOREMA 1.2 (Liouville-Arnold)**.** *Sea*

$$(M, \omega, H, F = (F_1, ..., F_n) : M \to \mathbb{R}^n)$$

un sistema Hamiltoniano integrable en el sentido de Liouville. Sea $c^0 \in F(M) \subset \mathbb{R}^n$ un valor regular de F y $\Lambda_{c^0} \subset F^{-1}(c^0)$ una componente conexa del c^0-conjunto de nivel . Si Λ_{c^0} es compacto, entonces existen:

- *una vecindad abierta W de c^0 en $\mathbb{R}^n_y$;*
- *una vecindad abierta U de Λ_{c^0} en M;*

- *un difeomorfismo* $g : W \times \mathbb{T}^n \to U$

tal que

- g *es simpléctica,*
$$g^*(\omega \mid_U) = dy \wedge d\alpha; \tag{1.5}$$

- *para cada* $c \in W$*, la imágen*
$$\Lambda_c := g(\{c\} \times \mathbb{T}^n) \tag{1.6}$$
es una subvariedad Lagrangiana en (M, ω) *difeomorfa al* n*-toro la cual coincide con el* c*-conjunto de nivel de* $F \mid_U$*,*
$$\Lambda_c = F^{-1}(c) \cap U \approx \mathbb{T}^n \tag{1.7}$$

- *para cada* $c \in W$*,* Λ_c *es invariante con respecto al flujo del sistema Hamiltoniano y lleva un movimiento cuasiperiódico.*

COROLARIO 1.1. *En la vecindad* U*, existen las llamadas coordenadas acción-ángulo* $I = (I_1, ..., I_n)$*,* $\varphi = (\varphi_1, ..., \varphi_n) \bmod 2\pi$ *definidas como*
$$I_i := y_i \circ g^{-1}, \quad \varphi_i = \alpha_i \circ g^{-1} \tag{1.8}$$
para $i = 1, ..., n$*. En estas coordenadas, la forma simpléctica toma la forma*
$$\omega \mid_U = dI \wedge d\varphi$$
y el corchete de Poisson definido por $\omega|_U$ *en* U *tiene las siguientes relaciones de conmutación*
$$\{I_i, \varphi_j\} = \delta_{ij}, \quad \{I_i, I_j\} = \{\varphi_i, \varphi_j\} = 0.$$

Por definición (1.8), las integrales primeras $F_i \mid_U$ son sólo funciones de las variables de acción, $F_i \mid_U = f_i(I_1, .., I_n)$, $i = 1, ..., n$ y por tanto
$$\Lambda_c = \{I_1 = I_1^0, ..., I_n = I_n^0\}.$$
Aquí, $I^0 = (I_1^0, ..., I_n^0) = \text{const}$ esta unicamente definida para c de la ecuación $I \circ g = c$.

COROLARIO 1.2. *La función Hamiltoniana H en el dominio U es de la forma*

$$H\,|_U = h(I_1, .., I_n) \tag{1.9}$$

para alguna función suave h sobre el dominio abierto en $\mathbb{R}^n$. En las variables acción-ángulo $(I,\,\varphi)$, el campo vectorial Hamiltoniano X_H esta representado como

$$X_H\,|_U = \sum_{j=1}^{n} \varpi_j(I_1, .., I_n)\frac{\partial}{\partial \varphi_j}$$

donde $\varpi_j(I) = \frac{\partial h}{\partial I_j}$.

Como una consecuencia, concluimos que para cada $c \in W$, el toro Lagrangiano $\Lambda_c \subset U$ es invariante con respecto al flujo del campo vectorial Hamiltoniano X_H y lleva el movimiento cuasiperiódico con frecuencias $\varpi_1(I), ..., \varpi_n(I)$. Así, el sistema Hamiltoniano correspondiente queda escrito como

$$\dot{I}_i = 0, \quad \dot{\varphi}_i = \varpi_i(I).$$

Para cada $c \in W$, el toro Lagrangiano Λ_c es llamado un toro de Liuville del sistema Hamiltoniano integrable. Por lo tanto, el dominio $U \subset M$ esta trivialmente foliado por toros de Liouville.

Note que en la práctica, en el caso cuando $(M = \mathbb{R}^{2n}_{p,x},\;\; \omega = d(p \cdot dx))$ las variables de acción pueden ser calculadas de la siguiente manera. Supongamos que para cada $c \in W$, uno puede fijar alguna base de 1-ciclos orientados $\gamma_1(c), ..., \gamma_n(c)$ sobre el n-toro Λ_c los cuales dependen suavemente en c. Entonces,

$$I_j(c) = \frac{1}{2\pi}\oint\limits_{\gamma j(c)} p \cdot dx \quad (j = 1, ..., n).$$

Para más detalles ver, por ejemplo, [4].

EJEMPLO 1.2. Considere un sistema Hamiltoniano en el plano $(\mathbb{R}^2, \omega = dp \wedge dx,$ $H = H(p, x))$,

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}.$$

Suponga que este sistema tiene una trayectoria periódica γ_{E_0} la cual vive en el nivel de energía $S_{E_0} = \{(p,x) \in \mathbb{R}^2 \mid H(p,x) = E_0\}$. Entonces, existen un intervalo abierto $W = (E_0 - \delta, E_0 + \delta)$ y una vecindad abierta U de γ_{E_0} tal que

$$\gamma_E := S_E \cap U$$

es también una trayectoria del sistema Hamiltoniano para cada $E \in W$. Parametricamente,

$$\gamma_E = \{p = p(\varphi, E), x = x(\varphi, E)\}$$

donde $p(\varphi + 2\pi, E) = p(\varphi, E)$, $x(\varphi + 2\pi, E) = x(\varphi, E)$ son funciones 2π-periódicas. En este caso, la frecuencia es $\varpi(E) = \frac{2\pi}{T(E)}$, donde el periódo $T(E)$ viene dado por

$$T(E) = \frac{dA(E)}{dE},$$

Aquí

$$A(E) := \text{Area}(D_E) = \int_{D_E} dp \wedge dx = \oint_{\gamma_E} pdx = \int_0^{2\pi} p(\alpha, E)\frac{\partial x(\alpha, E)}{\partial \alpha} d\alpha$$

es el área del dominio $D_E \subset \mathbb{R}^2$ acotado por la curva cerrada γ_E. Así, las variables de acción, en este caso, estan dadas por

$$I = \frac{A(E)}{2\pi}, \quad \varphi = \frac{2\pi t}{T(E)},$$

donde t es el tiempo a lo largo de las trayectorias del sistema Hamiltoniano.

EJEMPLO 1.3. En el espacio fase $(\mathbb{R}^{2n}, \omega = dp \wedge dx)$, considere el oscilador armónico n-dimensional:

$$H = \frac{\varpi_1}{2}(p_1^2 + x_1^2) + ... + \frac{\varpi_n}{2}(p_n^2 + x_n^2)$$

Es claro que este sistema es un sistema Hamiltoniano integrable cuyas integrales primeras estan en involución

$$F_1 = \frac{1}{2}(p_1^2 + x_1^2), ..., F_n = \frac{1}{2}(p_n^2 + x_n^2)$$

Usando el ejemplo previo, calculamos las variables de acción $I_1 = F_1, ..., I_n = F_n$ y por tanto la fórmula (1.9), en este caso, toma la forma

$$h = \varpi_1 I_1 + ... + \varpi_n I_n.$$

CAPÍTULO 2

MODELOS CUÁNTICOS BÁSICOS

En este capítulo discutiremos algunas propiedades de dos modelos cuánticos básicos en física matemática, a saber, el oscilador armónico cuántico y el átomo de hidrógeno. La característica de estos modelos es que sus fórmulas espectrales exactas y semiclásicas coinciden.

2.1. Operadores en espacios de Hilbert

En esta sección recordaremos algunos resultados de la teoría del Análisis Funcional en espacios de Hilbert. Para más información se puede consultar [41].

DEFINICIÓN 2.1. *Sea $\mathcal{H}$ un espacio vectorial sobre $\mathbb{K}$ (con $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ ó $\mathbb{C}$). Una aplicación $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{K}$ se llama producto escalar si cumple las siguientes propiedades:*

$(i) \langle c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \psi_3 \rangle = c_1\langle \psi_1, \psi_3 \rangle + c_2\langle \psi_2, \psi_3 \rangle, c_i \in \mathbb{K}, \psi_i \in \mathcal{H}$

$(ii) \langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \overline{\langle \psi_2, \psi_1 \rangle}$

$(iii) \langle \psi, \psi \rangle > 0, \textit{para todo } \psi \neq 0$

El par $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ se denomina espacio pre-Hilbert.

DEFINICIÓN 2.2. *Un espacio pre-Hilbert $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ que es completo con respecto a la norma $\|\varphi\| := \langle\varphi,\varphi\rangle^{\frac{1}{2}}$ se denomina espacio de Hilbert.*

DEFINICIÓN 2.3. *H es separable si existe un conjunto N numerable y denso en H.*

EJEMPLO 2.1. $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}), N = \{x^k e^{-x^2}, k = 0, 1, 2, \cdots\}$ es un espacio de Hilbert separable.

DEFINICIÓN 2.4. *Sean I un conjunto de índices y $\mathcal{H}$ un espacio pre-Hilbert.*
(i) Una familia $(\psi_i)_{i\in I} \subset \mathcal{H}$ se dice ser ortogonal si $\langle\psi_i,\psi_j\rangle = 0$ para todo $i \neq j$ con $i, j \in I$.
(ii)Se dice ortonormal si es ortogonal y $\|\psi_i\| = 1$ para todo $i \in I$.
(iii) Una familia ortonormal $(\psi_i)_{i\in I} \subset \mathcal{H}$ se dice maximal si no está contenida estrictamente en ninguna otra familia ortonormal.
(iv) Se dice que $(\psi_i)_{i\in I} \subset \mathcal{H}$ es una base ortonormal de $\mathcal{H}$ si es una familia ortonormal maximal.

El siguiente resultado prueba la existencia de bases en espacios de Hilbert.

TEOREMA 2.1. *Sea $\{\varphi_i\}_{i\in I}$ un conjunto numerable en el espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ con las siguientes propiedades:*

- *completo, i.e. $\{\varphi \in H / \langle\varphi,\varphi_i\rangle = 0, \forall i \in I\} = \{0\}$.*
- *ortonormal, i.e. $\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle = \delta_{ij}, \forall\ i, j \in I$.*

Entonces,$\{\varphi_i\}_{i\in I}$ es una base, i.e. $\varphi = \sum_{i\in I} c_i\varphi_i$ es única, donde $c_i := \langle\varphi,\varphi_i\rangle$.

Además se tiene la siguiente desigualdad:

$$\sum_{i\in I} |c_i|^2 = \sum_{i\in I} |\langle\varphi,\varphi_i\rangle|^2 \leq \langle\varphi,\varphi\rangle$$

llamada desigualdad de Bessel.

Sea $\mathcal{H}$ un espacio de Hilbert y $\hat{A} : D(\hat{A}) \to E$ un operador lineal con dominio $D(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$. Asociamos a $\hat{A}$ el operador $\hat{A}_\lambda = \hat{A} - \lambda \hat{I}$., donde λ es un número complejo e $\hat{I}$ es el operador identidad. Denotamos la imágen de $\hat{A}_\lambda$ por $Im(\hat{A}_\lambda)$.

Recordemos que:

(i) Se dice que $\lambda \in \mathbb{C}$ es un *valor regular* de $\hat{A}$ si $\hat{A}_\lambda$ es un operador invertible y acotado. El conjunto de los valores regulares de $\hat{A}$ se denomina el conjunto resolvente de $\hat{A}$ y se denota por $\rho(\hat{A})$.

(ii) Los valores no regulares de $\hat{A}$ se llaman valores espectrales de $\hat{A}$. El conjunto de los valores espectrales de $\hat{A}$ se denomina espectro de $\hat{A}$ y se denota por $Sp(\hat{A})$.

Un número se dice que es valor propio de $\hat{A}$ si $ker(\hat{A}_\lambda) \neq 0$. El conjunto de los valores propios de $\hat{A}$ se llama espectro puntual de $\hat{A}$ y se denota por $\sigma_p(\hat{A})$. Se debe notar que $\sigma_p(\hat{A}) \subset Sp(\hat{A})$.

A continuación definimos la noción de adjunto de un operador.
Sea $\hat{A}$ un operador lineal en el espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ cuyo dominio $D(\hat{A})$ es denso en $\mathcal{H}$. Entonces el operador adjunto de $\hat{A}$, denotado por $\hat{A}^*$, es el operador cuyo dominio $D(\hat{A}^*)$ es

$$D(\hat{A}^*) = \{\varphi \in H / \exists \eta \in H \ tal \ que \ \langle \hat{A}\psi, \varphi \rangle = \langle \psi, \eta \rangle, \forall \psi \in D(\hat{A})\}.$$

Y se define por, $\hat{A}^*\varphi = \eta$, para todo $\varphi \in D(\hat{A}^*)$.

Recordemos que:
(i) El operador $\hat{A}$ se dice autoadjunto o hermitiano si $\hat{A} = \hat{A}^*$.
(ii) El operador $\hat{A}$ se dice normal si $\hat{A}\hat{A}^* = \hat{A}^*\hat{A}$.
(iii) El operador $\hat{A}$ se dice unitario si $\hat{A}\hat{A}^* = \hat{I} = \hat{A}^*\hat{A}$.

En el caso en el que $\hat{A}$ sea un operador autoadjunto: $Sp(\hat{A}) \subset \mathbb{R}$.

EJEMPLO 2.2. Considere en el espacio de Hilbert $(L^2(\mathbb{R}^n), <,>_{L^2})$ donde

$$< \psi_1, \psi_2 >_{L^2} = \int_{\mathbb{R}^n} \psi_1(x)\bar{\psi}_2(x)dx,$$

el operador de Schrodinger

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2}\Delta + V(x), \quad \Delta = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}.$$

Si un potencial $V \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ esta acotado por abajo, $V(x) \geq C, \ x \in \mathbb{R}^n$, entonces $\hat{H}$ es esencialmente autoadjunto sobre $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Más aún, si

$$\lim_{\|x\| \to \infty} V(x) = \infty,$$

entonces existe una base ortonormal $\{\psi_k\} \in \mathbb{N}$ para $L^2(\mathbb{R}^n)$ que consiste de funciones propias de $\hat{H}$ con valores propios $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_k \leq ...$ de multiplicidad finita, $\hat{H}\psi_k = \lambda_k \psi_k$.

2.2. Oscilador Armónico. Operadores de Creación y Aniquilación

En muchos problemas de la Física se está interesado en analizar problemas para los cuales el sistema sólo está levemente fuera del equilibrio. En ese caso el problema generalmente se puede describir como un conjunto de osciladores independientes. Lo último es cierto tanto en Mecánica Clásica como también en Mecánica Cuántica, que es el formalismo que debe usarse para estudiar las oscilaciones de núcleos, moléculas y sólidos.
En esta sección determinaremos las funciones propias y los valores propios asociados del operador de Schrodinger del oscilador armónico unidimensional, este operador viene dado por:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2},$$

donde: $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ y $\hat{x} = x, x \in \mathbb{R}$. Este operador es autoadjunto en el espacio de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ con $D(\mathcal{H}) = C_0^\infty(\mathbb{R})$.

Operadores de creación y aniquilación.- Introduzcamos los operadores $\hat{a}^+$ y $\hat{a}^-$ definidos por:

$$\hat{a}^+ = \frac{\hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2\hbar}}, \quad \hat{a}^- = \frac{\hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2\hbar}}.$$

Los operadores $\hat{a}^+$ y $\hat{a}^-$ son llamados operadores de creación y aniquilación respectivamente y tienen las siguientes propiedades:

LEMA 2.1. *El conmutador entre $\hat{a}^+$ y $\hat{a}^-$ viene dado por:*

$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = I \tag{2.1}$$

En términos de $\hat{a}^+$ y $\hat{a}^-$, $\hat{H}$ viene dado por:

$$\hat{H} = \hbar\left(\hat{a}^+\hat{a}^- + \frac{1}{2}I\right) \tag{2.2}$$

El conmutador entre $\hat{H}$ y $\hat{a}^+$ (y entre $\hat{H}$ y $\hat{a}^-$) viene dado por:

$$[\hat{H}, \hat{a}^+] = \hbar\hat{a}^+, \quad [\hat{H}, \hat{a}^-] = -\hbar\hat{a}^- \tag{2.3}$$

Para $n \in \mathbb{N}$ se verifica:

$$[\hat{H}, (\hat{a}^+)^n] = \hbar n(\hat{a}^+)^n \tag{2.4}$$

Demostración. Las fórmulas (2.1)-(2.3) se verifican directamente. La fórmula (2.4) se obtiene de la regla general:

$$[\hat{H}, \hat{A}_1 \circ \hat{A}_2] = [\hat{H}, \hat{A}_1] \circ \hat{A}_2 + \hat{A}_1 \circ [\hat{H}, \hat{A}_2]$$

la cual implica:

$$[\hat{H}, (a^+)^n] = [\hat{H}, \hat{a}^+ \circ (\hat{a}^+)^{n-1}] = [\hat{H}, \hat{a}^+] \circ (\hat{a}^+)^{n-1} + \hat{a}^+ \circ [\hat{H}, (\hat{a}^+)^{n-1}].$$

□

COROLARIO 2.1. *Sea $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R})$ una función propia de $\hat{H}$ con valor propio λ_0, esto es, $\hat{H}\psi_0 = \lambda_0\psi_0$. Entonces*

$$\psi_k = (\hat{a}^+)^k\psi_0, \quad k = 1, 2, 3, ...$$

es también una función propia,

$$\hat{H}\psi_k = \lambda_k \psi_k,$$

donde $\lambda_k = \lambda_0 + \hbar k$.

TEOREMA 2.2. *Las funciones propias y valores propios de* $\hat{H}$ *son:*

$$\psi_n(x) = \frac{1}{(\pi\hbar)^{1/n}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{x^2}{2\hbar}} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{n}}\right), \quad \lambda_n = \hbar\left(n + \frac{1}{2}\right), n = 0, 1, 2, ...$$

donde $H_n(y)$ *son polinomios de Hermite definidos por:*

$$H_n(y) := \left(2y - \frac{d}{dy}\right)^n (\varphi), \quad \varphi = 1.$$

Además, $\{\psi_n\}_{n=0}^{\infty}$ *es una base ortonormal, esto es,* $\langle \psi_n, \psi_m \rangle_{L^2} = \delta_{nm}$

Demostración. Se debe observar que existe el estado de vacío cuántico ψ_0, el cual verifica lo siguiente:

$$(\hat{a}^-)\psi_0 = 0,$$

y $\|\psi_0\| = 1$, luego: $\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(x + \hbar\frac{d}{dx}\right)\psi_0 = 0$.
De esta última igualdad tenemos que $\frac{d}{dx}\psi_0 = -\frac{x}{\hbar}\psi_0$, cuya solución es $\psi_0 = ce^{-\frac{x^2}{2\hbar}}$.
Como $\|\psi_0\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} c^2 e^{-\frac{x^2}{2\hbar}} dx = 1$ y ya que $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\hbar}} dx = \sqrt{\pi a}$, entonces $c = \frac{1}{(\pi\hbar)^{1/4}}$. Por lo tanto:

$$\psi_0 = \frac{1}{(\pi\hbar)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2\hbar}}.$$

Como $\hat{H} = \hbar\left(\hat{a}^+\hat{a}^- + \frac{1}{2}I\right)$, entonces $\hat{H}\psi_0 = \frac{\hbar}{2}\psi_0$ y ya que $[\hat{H}, \hat{a}^+] = \hbar\hat{a}^+$ del Corolario (2.1) se sigue que:

$$\hat{H}\psi_n = \lambda_n\psi_n, \text{ donde } \lambda_n = \hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \text{ y } \psi_n = c_n(\hat{a}^+)^n\psi_0.$$

Para determinar las funciones propias consideremos lo siguiente:

$$\hat{a}^+\left(e^{-\frac{x^2}{2\hbar}} \cdot \varphi\right) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(x - \hbar\frac{d}{dx}\right) e^{-\frac{x^2}{2\hbar}}\varphi = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} e^{-\frac{x^2}{2\hbar}}\left(2x - \hbar\frac{d}{dx}\right)\varphi,$$

que recursivamente nos da:

$$(\hat{a}^+)^n\left(e^{-\frac{x^2}{2\hbar}} \cdot \varphi\right) = \frac{1}{\sqrt{(2\hbar)^n}} e^{-\frac{x^2}{2\hbar}}\left(2x - \hbar\frac{d}{dx}\right)^n \varphi.$$

Finalmente, haciendo $\varphi = 1$ y $y = \frac{x}{\sqrt{\hbar}}$ tenemos que:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{(\pi\hbar)^{1/4}} \frac{c_n}{\sqrt{2^n}} e^{-\frac{x^2}{2\hbar}} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{\hbar}}\right).$$

Entonces la multiplicidad de cada λ_n es igual a 1. Por propiedades de los operadores autoadjuntos, se tiene la ortogonalidad $\langle \psi_n, \psi_k \rangle_{L^2} = 0$ si $n \neq k$. □

Caso 2-dimensional.- En esta sección determinaremos los valores propios y las funciones propias del Hamiltoniano asociado a dos osciladores armónicos independientes. Sea

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \frac{\varpi_1}{2}\left(\hat{p}_1^2 + \hat{x}_1^2\right) + \frac{\varpi_2}{2}\left(\hat{p}_2^2 + \hat{x}_2^2\right), \tag{2.5}$$

donde $\hat{p}_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}, i = 1, 2, \omega_1, \omega_2 > 0$.

TEOREMA 2.3. *Las funciones propias de $\hat{H}$, i.e. $\psi = \psi(x_1, x_2) \in L^2(\mathbb{R}^2), ||\psi||_{L^2} = 1$ tal que $\hat{H}\psi = \lambda\psi$, son:*

$$\psi_{n_1,n_2}(x_1, x_2) = \frac{1}{(\pi\hbar)^{1/2}} \frac{1}{\sqrt{2^{n_1+n_2} n_1! n_2!}} e^{\frac{-(x_1^2+x_2^2)}{2\hbar}} H_{n_1}\left(\frac{x_1}{\sqrt{\hbar}}\right) H_{n_2}\left(\frac{x_2}{\sqrt{\hbar}}\right), \tag{2.6}$$

cuyos valores propios vienen dados por:

$$\lambda_{n_1,n_2} = \varpi_1\hbar\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \varpi_2\hbar\left(n_2 + \frac{1}{2}\right). \tag{2.7}$$

Demostración. Notemos que $[\hat{H}_1, \hat{H}_2] = 0$, luego $[\hat{H}, \hat{H}_i] = 0, i = 1, 2$.
Además se tiene que:

$$\hat{H}_1\psi_1 = \lambda^{(1)}\psi_1, \lambda^{(1)} \in \mathbb{R},$$

$$\hat{H}_2\psi_2 = \lambda^{(2)}\psi_2, \lambda^{(2)} \in \mathbb{R},$$

esto implica que:

$$\hat{H}_1(\psi_1 \cdot \psi_2) = (\hat{H}_1\psi_1) \cdot \psi_2 = \lambda^{(1)}\psi_1 \cdot \psi_2,$$

$$\hat{H}_2(\psi_1 \cdot \psi_2) = \psi_1 \cdot (\hat{H}_2\psi_2) = \lambda^{(2)}\psi_1 \cdot \psi_2,$$

Finalmente, sumando ambas igualdades: $(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)(\psi_1 \cdot \psi_2) = (\lambda^{(1)} + \lambda^{(2)})\psi_1 \cdot \psi_2$. □

2.3. Álgebra de Simetría y Resonancia

Aquí describiremos un álgebra de simetría cuántica $\mathrm{Sym}(\hat{H})$ del operador de Schrodinger

$$\hat{H} = \varpi_1 h(a_1^+ a_1^- + \frac{1}{2}I) + \varpi_2 h(a_2^+ a_2^- + \frac{1}{2}I)$$

correspondiente al oscilador armónico 2-dimensional con frecuencias $\varpi_1 > 0$, $\varpi_2 > 0$. Recuerde que $\mathrm{Sym}(\hat{H})$ consiste de todos los operadores $\hat{A}$ que conmutan con $\hat{H}$, $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ y por la identidad de Jacobi, para todo $\hat{A}_1, \hat{A}_2 \in \mathrm{Sym}(\hat{H})$ se tiene $[\hat{A}_1, \hat{A}_2] \in \mathrm{Sym}(\hat{H})$. Por tanto $\mathrm{Sym}(\hat{H})$ es un álgebra de Lie.

Tenemos la siguiente propiedad: si $\hat{H}\psi = \lambda\psi$ y $\hat{A} \in \mathrm{Sym}(\hat{H})$, entonces $\tilde{\psi} = \hat{A}\psi$ es una nueva función propia, $\hat{H}\tilde{\psi} = \lambda\tilde{\psi}$ cuando $\hat{A}\psi \neq c\psi$. Por lo tanto, la estructura de álgebra de simetría está relacionada con la degeneración de las funciones propias de $\hat{H}$.

Por razones de cálculo, introduciremos los operadores de creación y aniquilación normalizados:

$$\hat{b}_j^+ := \sqrt{h} a_j^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x}_j - i\hat{p}_j)\,,$$
$$\hat{b}_j^- := \sqrt{h} a_j^- = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x}_j + i\hat{p}_j)$$

para $j = 1, 2$. Entonces, tenemos las relaciones de conmutación:

$$[\hat{b}_j^-, \hat{b}_s^+] = h\delta_{js} I.$$

las cuales implican

$$[\hat{b}_j^-, (\hat{b}_j^+)^p] = hp(\hat{b}_j^+)^{p-1}, \tag{2.8}$$

$$[\hat{b}_j^+, (\hat{b}_j^-)^p] = -hp(\hat{b}_j)^{p-1} \tag{2.9}$$

para todo $p \in \mathbb{Z}_+$ y $j = 1, 2$.

Introducimos además los siguientes operadores

$$\hat{N}_1 := \hat{b}_1^+ \hat{b}_1^- = \hat{b}_1^- \hat{b}_1^+ - h\hat{I}, \tag{2.10}$$

$$\hat{N}_2 := \hat{b}_2^+ \hat{b}_2 = \hat{b}_2^- \hat{b}_2^+ - h\hat{I}. \tag{2.11}$$

Es claro que

$$[\hat{N}_1, \hat{N}_2] = 0$$

y $\hat{N}_1, \hat{N}_2$ conmuta con $\hat{H}$, i.e. $\hat{N}_1, \hat{N}_2 \in \mathrm{Sym}(\hat{H})$. Uno puede probar, que en el caso no resonante, cuando ϖ_1 y ϖ_2 son $\mathbb{Z}$-independientes, el *álgebra de simetría* $\mathrm{Sym}(\hat{H})$ es *conmutativa* con generadores $\hat{N}_1, \hat{N}_2$. Nosotros estamos interesados en el caso opuesto.

El Caso Resonante. Supongamos que existen algunos $k_1, k_2 \in \mathbb{Z}_+$ tal que

$$\frac{\varpi_1}{\varpi_2} = \frac{k_1}{k_2}$$

y por lo tanto podemos asumir que $\varpi_1 = k_1$ y $\varpi_2 = k_2$.

En este caso, decimos que tratamos con una $k_1 : k_2$*-resonancia*. En términos de los operadores (2.10), (2.11), el operador de Schrodinger $\hat{H}$ está representado por

$$\hat{H} = k_1\hat{N}_1 + k_2\hat{N}_2 + h(k_1 + k_2)\hat{I}. \tag{2.12}$$

Introduzcamos también, los operadores

$$\hat{B}_+ := (\hat{b}_1^+)^{k_2} \cdot (\hat{b}_2^-)^{k_1}, \quad \hat{B}_- := (b_1^-)^{k_2} \cdot (b_2^+)^{k_1}. \tag{2.13}$$

TEOREMA 2.4. *En el caso de una $k_1 : k_2$-resonancia, los operadores*

$$\hat{B}_+,\ \hat{B}_-, \hat{N}_1, \hat{N}_2 \tag{2.14}$$

generan el álgebra de simetría $\mathrm{Sym}(\hat{H})$,

$$[\hat{H}, \hat{N}_1] = [\hat{H}, \hat{N}_2] = 0, \quad [\hat{H}, B_\pm] = 0. \tag{2.15}$$

y satisfacen las relaciones de conmutación

$$[\hat{N}_1, \hat{B}_+] = hk_2\hat{B}_+, \quad [\hat{N}_2, \hat{B}_+] = -hk_1\hat{B}_+, \tag{2.16}$$

$$[\hat{N}_1, \hat{B}_-] = -hk_2\hat{B}_-, \quad [\hat{N}_2, \hat{B}_-] = hk_1\hat{B}_-, \tag{2.17}$$

$$[\hat{N}_1, \hat{N}_2] = 0, \tag{2.18}$$

$$[\hat{B}_+, \hat{B}_-] = \rho(\hat{N}_1, \hat{N}_2) - \rho(\hat{N}_1 + hk_2 I, \hat{N}_2 - hk_1 I), \tag{2.19}$$

donde

$$\rho(\hat{N}_1, \hat{N}_2) := \prod_{l=1}^{k_2} (\hat{N}_1 - h(k_2 - l)\hat{I}) \cdot \prod_{s=1}^{k_1} (\hat{N}_2 + h(k_1 - s + 1)\hat{I}). \tag{2.20}$$

COROLARIO 2.2. *En el caso resonante, el álgebra de simetría del oscilador armónico cuántico es no conmutativo.*

Probaremos el Teorema 2.4 en pasos.

Paso 1. Primero comprobaremos las relaciones (2.16), (2.17). Usando (2.8) y (2.9), calculamos

$$\begin{aligned} [\hat{N}_1, \hat{B}_+] &= [\hat{b}_1^+ \hat{b}_1^-, \hat{B}_+] = [\hat{b}_1^+, \hat{B}_+]\hat{b}_1^- + \hat{b}_1^+[\hat{b}_1^-, \hat{B}_+] \\ &= \hat{b}_1^+[\hat{b}_1^-, (\hat{b}_1^+)^{k_2}](\hat{b}_2^-)^{k_1} = hk_2(\hat{b}_1^+)^{k_2}(\hat{b}_2^-)^{k_1} \\ &= hk_2\hat{B}_+ \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} [\hat{N}_2, \hat{B}_+] &= [\hat{b}_2^+ \hat{b}_2^-, \hat{B}_+] = [\hat{b}_2^+, \hat{B}_+]\hat{b}_2^- + \hat{b}_2^+[\hat{b}_2^-, \hat{B}_+] \\ &= (\hat{b}_1^+)^{k_2}[\hat{b}_2^+, (\hat{b}_2^-)^{k_1}]\hat{b}_2^- = -hk_1(\hat{b}_1^+)^{k_2}(\hat{b}_2^-)^{k_1} \\ &= -hk_1\hat{B}_+. \end{aligned}$$

Paso 2. Las relaciones (2.15) se siguen de (2.16), (2.17),

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{B}_\pm] &= k_1[\hat{N}_1, \hat{B}_\pm] + k_2[\hat{N}_2, \hat{B}_\pm] \\ &= \pm hk_1k_2\hat{B}_\pm \mp hk_2k_1\hat{B}_\pm = 0. \end{aligned}$$

Paso 3. Para verificar (2.19), (2.20), antes que nada, permitasenos señalar algunar propiedades algebraicas de los operadores que son polinomios homogeneos de los operadores de creación y aniquilación. Fijando $\hat{b}^+ = \hat{b}_j^+$, $\hat{b}^- = \hat{b}_j^-$ $(j = 1, 2)$, consideramos los operadores

$$Y^{(p)} := (\hat{b}^+)^p \cdot (\hat{b}^-)^p, \quad \bar{Y}^{(p)} := (\hat{b}^-)^p \circ (\hat{b}^+)^p, \quad N := \hat{b}^+ b^-$$

para $p \in \mathbb{Z}_+$.

LEMA 2.2. *Tenemos las representaciones*

$$Y^{(p)} = \prod_{k=1}^{p} (\hat{N} - h(p-k)\hat{I}), \tag{2.21}$$

$$\bar{Y}^{(p)} = \prod_{k=1}^{p} (\hat{N} - h(p-k)\hat{I}). \tag{2.22}$$

Demostración. En particular,

$$Y^{(0)} = I, \ Y_1 = \ \hat{N}.$$

Usando (2.9), concluímos que

$$[(\hat{b}^+)^{p-1}, \hat{b}^-] = -h(p-1)(\hat{b}^+)^{p-2}$$

y entonces, calculando

$$\begin{aligned} Y^{(p)} &:= (b^+)^p \cdot (b^-)^p = b^+(b^+)^{p-1} \cdot b^- \cdot (b^-)^{p-1} = \\ &= b^+ b (b^+)^{p-1}(b^-)^{p-1} + b^+[(b^+)^{p-1}, b^-](b^-)^{p-1} \\ &= \hat{N} Y^{(p-1)} - h(p-1) Y^{(p-1)} = (\hat{N} - h(p-1)\hat{I}) Y^{(p-1)}. \end{aligned}$$

Así, esto implica

$$\begin{aligned} Y^{(p)} &:= (b^+)^p \cdot (b^-)^p = b^+(b^+)^{p-1} \cdot b^- \cdot (b^-)^{p-1} = \\ &= b^+ b^- (b^+)^{p-1}(b^-)^{p-1} + b^+[(b^+)^{p-1}, b^-](b^-)^{p-1} \\ &= \hat{N} Y^{(p-1)} - h(p-1) Y^{(p-1)} = (\hat{N} - h(p-1)I) Y^{(p-1)}. \end{aligned}$$

De manera similar verificamos las identidades (2.22). Tomando en cuenta la identidad $\hat{b}^- \cdot \hat{b}^+ = \hat{N} + h\hat{I}$ y la fórmula (2.8):

$$[(\hat{b}^-)^{p-1}, \hat{b}^+] = h(p-1)(\hat{b}^-)^{p-2}$$

verificamos

$$\begin{aligned} \bar{Y}^{(p)} &= (\hat{N} + hp\hat{I})\bar{Y}^{(p-1)} = (N + hpI)(N + h(p-1)I)\bar{Y}^{(p-2)} \\ &= \prod_{s=0}^{p-1} (\hat{N} + h(p-s)\hat{I}) = \prod_{s=1}^{p} (\hat{N} + h(p-s+1)\hat{I}). \end{aligned}$$

□

Paso 4. Ahora, usando los operadores $Y_1^{(p)}, \hat{N}_1$ y $Y_2^{(p)}$, $\hat{N}_2$ definidos como

$$Y_1^{(p)} := (\hat{b}_1^+)^p \cdot (\hat{b}_1^-)^p,\ \bar{Y}_1^{(p)} := (\hat{b}_1^-)^p \circ (\hat{b}_1^+)^p, \quad \hat{N}_1 = \hat{b}_1^+ \hat{b}_1^-,$$

$$Y_2^{(p)} := (\hat{b}_2^+)^p \cdot (\hat{b}_2^-)^p,\ \bar{Y}_2^{(p)} := (\hat{b}_2^-)^p \circ (\hat{b}_2^+)^p\ , \quad \hat{N}_2 = \hat{b}_2^+ \hat{b}_2^-,$$

por el Lema 2.2, tenemos

$$\begin{aligned}
\hat{B}_+ \circ \hat{B}_- &= (\hat{b}_1^+)^{k_2} \cdot (\hat{b}_2^-)^{k_1} \cdot (\hat{b}_1^-)^{k_2} \cdot (\hat{b}_2^+)^{k_1} \\
&= (\hat{b}_1^+)^{k_2} \cdot (\hat{b}_1^-)^{k_2} \cdot (\hat{b}_2^-)^{k_1} \cdot (\hat{b}_2^+)^{k_1} = Y_1^{(k_2)} \circ \bar{Y}_2^{(k_1)} \\
&= \prod_{l=1}^{k_2} (\hat{N}_1 - h(k_2 - l)\hat{I}) \cdot \prod_{s=1}^{k_1} (\hat{N}_2 + h(k_1 - s + 1)\hat{I}).
\end{aligned}$$

Más aún,

$$\begin{aligned}
\hat{B}_- \circ \hat{B}_+ &= (\hat{b}_1^-)^{k_2} \cdot (\hat{b}_2^+)^{k_1} \cdot (\hat{b}_1^+)^{k_2} \cdot (b_2^-)^{k_1} \\
&= (\hat{b}_1^-)^{k_2} \cdot (\hat{b}_1^+)^{k_2} \cdot (\hat{b}_2^+)^{k_1} \cdot (\hat{b}_2^-)^{k_1} = \bar{Y}_1^{(k_2)} \circ Y_2^{(k_1)} \\
&= \prod_{s=1}^{k_2} (\hat{N}_1 + h(k_2 - s + 1)\hat{I}) \cdot \prod_{l=1}^{k_1} (\hat{N}_2 - h(k_1 - l)\hat{I}).
\end{aligned}$$

Así, estas relaciones implican

$$\begin{aligned}
[\hat{B}_+, \hat{B}_-] &= \prod_{l=1}^{k_2} (\hat{N}_1 - h(k_2 - l)\hat{I}) \cdot \prod_{s=1}^{k_1} (\hat{N}_2 + h(k_1 - s + 1)\hat{I}) \\
&- \prod_{s=1}^{k_2} (\hat{N}_1 + h(k_2 - s + 1)\hat{I}) \cdot \prod_{l=1}^{k_1} (\hat{N}_2 - h(k_1 - l)\hat{I}).
\end{aligned}$$

Esto prueba (2.19), (2.20). ■

COROLARIO 2.3. *El álgebra de simetría (2.16)-(2.19) tiene dos operadores Casimir*

$$\hat{C}_0 = k_1 \hat{N}_1 + k_2 \hat{N}_2, \tag{2.23}$$

$$\hat{C}_1 = \hat{B}_+ \hat{B}_- - \rho(\hat{N}_1, \hat{N}_2). \tag{2.24}$$

EJEMPLO 2.3. (1 : 1 resonancia). En este caso,

$$\rho(\hat{N}_1, \hat{N}_2) = N_1 \left(N_2 + hI\right)$$

y el álgebra de simetría es

$$[\hat{N}_1, \hat{B}_\pm] = \pm h\hat{B}_\pm, \quad [\hat{N}_2, \hat{B}_\pm] = \mp h\hat{B}_\pm, \quad [\hat{B}_+, \hat{B}_-] = h(\hat{N}_1 - \hat{N}_2).$$

EJEMPLO 2.4. (2 : 1 resonancia) En este caso,

$$\rho(\hat{N}_1, \hat{N}_2) = \hat{N}_1\hat{N}_2^2 + 3h\hat{N}_1\hat{N}_2 + 2h^2\hat{N}_1$$

y el álgebra de simetría está dada por las relaciones de conmutación

$$[\hat{N}_1, \hat{B}_\pm] = \pm h\hat{B}_\pm, \quad [\hat{N}_2, \hat{B}_\pm] = \mp 2h\hat{B}_\pm,$$

$$[\hat{B}_+, \hat{B}_-] = 4h\hat{N}_1\hat{N}_2 - h\hat{N}_2^2 + h^2(\hat{N}_2 + 2\hat{N}_1)$$

Límite Semiclásico. Mostraremos que en el límite $\hbar \to 0$, las fórmulas para los operadores $\hat{B}_+$, $\hat{B}_-, \hat{N}_1, \hat{N}_2$ dan los generadores del álgebra de simetría del oscilador armónico clásico con dos grados de libertad asociado a la resonancia $k_1 : k_2$.

Considere el espacio fase $(\mathbb{R}^4_{p,x}, \{,\})$, $p = (p_1, p_2), x = (x_1, x_2)$ equipado con el corchete de Poisson canónico

$$\{f, g\} = \sum_{j=1}^{2} \left(\frac{\partial f}{\partial p_j}\frac{\partial g}{\partial x_j} - \frac{\partial f}{\partial x_j}\frac{\partial g}{\partial p_j} \right),$$

en particular, $\{p_j, x_s\} = \delta_{js}$.

La cuantización semiclásica establece la correspondencia

$$p_j \mapsto \hat{p}_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}, \quad x_j \mapsto \hat{x}_j = x_j$$

con $[\hat{p}_j,\ \hat{x}_s] = -i\hbar I\delta_{js}$.

A cada símbolo $f = f(p, x, \hbar)$, le asociamos un operador de Weyl $\hat{f} = f(\hat{p}, \hat{x}, h)$ (ver Sección 4.1) tal que en el límite semiclásico $\hbar \to 0$, tenemos $\frac{i}{h}[,] \longrightarrow \{,\}$ y

$$\frac{i}{\hbar}[f(\hat{p}, \hat{x}), g(\hat{p}, \hat{x})] = \{f, g\}(\hat{p}, \hat{x}) + O(\hbar).$$

En términos de los operadores de creación y aniquilación $\hat{b}_j^+, \hat{b}_j^-$, tenemos $\frac{i}{\hbar}[\hat{b}_j^-, \hat{b}_j^+] = iI$ y en la forma compleja, la cuantización semiclásica toma la forma

$$z_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_j + ip_j) \mapsto \hat{b}_j^-, \quad \bar{z}_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_j - ip_j) \mapsto \hat{b}_j^+,$$

donde $\{z_j, \bar{z}_s\} = i\delta_{js}$. Mas aún, los operadores en (2.14) provienen de la cuantización semiclásica de Weyl,

$$B_+ := (\bar{z}_1)^{k_2} \cdot (z_2)^{k_1} \mapsto \hat{B}_+,\ B_- := (z_1)^{k_2} \cdot (\bar{z}_2)^{k_1} \mapsto \hat{B}_-,$$

$$N_j :=| z_j |^2 \mapsto \hat{N}_j.$$

Por la fórmula (2.20), tenemos la siguiente expansión

$$\rho(\hat{N}_1, \hat{N}_2) = \rho(\hat{N}_1, \hat{N}_2) \mid_{\hbar=0} + \hbar\left(-\frac{k_2(k_2-1)}{2}\hat{N}_1^{k_2-1}\hat{N}_2^{k_1} + \frac{k_1(k_1+1)}{2}\hat{N}_1^{k_2}\hat{N}_2^{k_1-1}\right) + O(\hbar^2)$$

y por tanto

$$[\hat{B}_+, \hat{B}_-] = \hbar\left(-k_2^2\hat{N}_1^{k_2-1}\hat{N}_2^{k_1} + k_1^2\hat{N}_1^{k_2}\hat{N}_2^{k_1-1}\right) + O(\hbar^2).$$

Así, de aquí y de las relaciones (2.16)-(2.18), en el límite semiclásico, concluímos que el oscilador armónico clásico en $k_1 : k_2$-resonancia,

$$H = \frac{k_1}{2}(p_1^2 + x_1^2) + \frac{k_2}{2}(p_2^2 + x_2^2)$$

tiene el álgebra de simetría clásica la cuál está dada por las relaciones de los corchetes de Poisson (ver también, [31], [30], [13]) :

$$\{N_1, B_+\} = ik_2B_+, \quad \{N_2, B_+\} = -ik_1B_+,$$

$$\{N_1, B_-\} = -ik_2B_-, \quad [N_2, B_-] = k_1B_-$$

$$[N_1, N_2] = 0,$$

$$\{B_+, B_-\} = i\left(-k_2^2N_1^{k_2-1}N_2^{k_1} + k_1^2N_1^{k_2}N_2^{k_1-1}\right).$$

Se sigue de (2.23), (2.24), que las correspondientes funciones de Casimir son

$$C_0 = k_1N_1 + k_2N_2, \quad C_1 = B_+B_- - N_1^{k_2}N_2^{k_1}.$$

2.4. Átomo de Hidrógeno

Comencemos con el modelo simple de un electron solitario en $\mathbb{R}^3$ moviendose en el potencial externo V generado por un núcleo (el cual asumimos que esta fijo en el origen). Si uno sólo toma en cuenta la fuerza electrostática, entonces V es dado por el potencial de Coulomb y el correspondiente Hamiltoniano viene dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{\alpha}{r} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta - \frac{\alpha}{|x|}, \alpha > 0 \tag{2.25}$$

donde: $r = |x| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$ y $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_2}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_3})$.
Usando el método de los operadores de creación y aniquilación modificado, en esta sección hallaremos los valores propios del operador $\hat{H}$.

Se definen:

$$\hat{A}_1 := \frac{|x|}{x}(\hat{p}^2 - I), \ \hat{A}_2 := \hat{x} \circ \hat{p} - i\hbar I \quad y \quad \hat{A}_3 := \frac{|x|}{x}(\hat{p}^2 + I). \tag{2.26}$$

Observece que el problema espectral para el operador de Schrodinger:

$$\hat{H}\psi = \lambda\psi, \quad \|\psi\|_{L^2} = 1 \tag{2.27}$$

es equivalente a lo siguiente

$$\hat{H}_\lambda\psi = 0, \tag{2.28}$$

donde

$$\hat{H}_\lambda = \left(\frac{1}{2} - \lambda\right)\hat{A}_3 + \left(\frac{1}{2} + \lambda\right)\hat{A}_1 - \alpha\hat{I}. \tag{2.29}$$

Para ver esto, es suficiente multiplicar la ecuación (2.27) por r.

LEMA 2.3. *Los operadores $\hat{A}_1, \hat{A}_2$ y $\hat{A}_3$ forman el álgebra de Lie $\mathfrak{so}(2,1)$, i.e.;*

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = -i\hbar\hat{A}_3, [\hat{A}_2, \hat{A}_3] = i\hbar\hat{A}_1 \quad y \quad [\hat{A}_3, \hat{A}_1] = -i\hbar\hat{A}_2. \tag{2.30}$$

Demostración. Calculemos el corchete entre $\hat{A}_1$ y $\hat{A}_2$:

$$\begin{aligned}
[\hat{A}_1, \hat{A}_2] &= \left[\frac{|x|}{x}\hat{p}^2 - \frac{|x|}{2}, x \circ p - i\hbar I\right] = \left[\frac{|x|}{2}\hat{p}^2, x \circ \hat{p}] - [\frac{|x|}{2}, x \circ \hat{p}\right] \\
&= \frac{|x|}{x}[\hat{p}^2, x] \circ \hat{p} + \frac{1}{2}[x, x \circ p] \circ \hat{p}^2 + \frac{1}{2}\hat{x} \circ [\hat{p}, |x|] \\
&= \frac{|x|}{2}(-2i\hbar\hat{p} \circ \hat{p}) + \frac{1}{2}i\hbar|x| \circ \hat{p}^2 + \frac{1}{2}\hat{x} \circ (-i\hbar\frac{x}{|x|}) \\
&= i\hbar(-|x|\hat{p} \circ \hat{p} + \frac{1}{2}|x| \circ \hat{p}^2 - \frac{1}{2}\hat{x} \circ \frac{\hat{x}}{|x|}) \\
&= i\hbar(-\frac{1}{2}|x|\hat{p}^2 - \frac{|x|}{2}) = -i\hbar\frac{|x|}{2}(\hat{p}^2 + I) = -i\hbar\hat{A}_3,
\end{aligned}$$

donde hemos usado las siguientes fórmulas:

$[\hat{p}^2, x] = -2i\hbar\hat{p}, \quad [\hat{p}, |x|] = -i\hbar\frac{x}{|x|}, \quad [|x|, \hat{x} \circ \hat{p}] = i\hbar|x|,$

$[\hat{p}^2, |x|] = -2i\hbar\left(\frac{x}{|x|} \circ p - \frac{1}{|x|}\right), \quad \left[\hat{p}_j, \frac{\hat{x}_j}{|x|}\right] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{x_j}{|x|}\right)$

Análogamente se prueba las últimas dos relaciones en (2.30). □

COROLARIO 2.4. *Dados los operadores:*

$$\hat{A}_+ := i(\hat{A}_1 + i\hat{A}_2) \quad y \quad \hat{A}_- := -i(\hat{A}_1 - i\hat{A}_2) \tag{2.31}$$

se tiene que

$$[\hat{A}_3, \hat{A}_\pm] = \pm\hbar\hat{A}_\pm. \tag{2.32}$$

Ahora mostraremos que los operadores $\hat{A}_\pm$ en (2.31) juegan el rol de los operadores de creación y aniquilación y nos permiten hallar el espectro del operador $\hat{A}_3$. Primero, observamos que

$$\hat{A}_3\varphi_0 = h\varphi_0, \quad \varphi_0 := \exp(-\frac{|\, x\,|}{h}), \tag{2.33}$$

donde φ_0 es un estado de vacío cuántico. Esta igualdad se puede ver fácilmente de la representación del Laplaciano en coordenadas esféricas:

$$\Delta = \frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})\right) + ...$$

Definimos las funciones

$$\varphi_{n-1} = c_n(\hat{A}_+)^{n-1}\varphi_0, \quad n = 1, 2, 3, ... \tag{2.34}$$

donde las constantes de normalización c_n son elegidas de tal manera que $\|\, \varphi_n \,\|_{L^2} = 1$.

LEMA 2.4. *Las funciones φ_n en (2.34) son las funciones propias de $\hat{A}_3$ correspondientes a los valores propios $\hbar n$,*

$$\hat{A}_3\varphi_{n-1} = \hbar n\varphi_{n-1} \ (n = 1, 2, ...) \tag{2.35}$$

Demostración. Este hecho se sigue de (2.33) y de la relación de conmutación

$$[\hat{A}_3, (\hat{A}_+)^p] = p\hbar(\hat{A}_+)^p.$$

la cual es consecuencia de (2.32). En efecto,

$$\begin{aligned}\hat{A}_3\varphi_{n-1} &= c_n\hat{A}_3(\hat{A}_+)^{n-1}\varphi_0 = c_n(\hat{A}_+)^{n-1}\hat{A}_3\varphi_0 + c_n[\hat{A}_3, (\hat{A}_+)^{n-1}]\varphi_0 \\ &= c_n\left(\hbar(\hat{A}_+)^{n-1}\varphi_0 + (n-1)\hbar(\hat{A}_+)^{n-1}\varphi_0\right) = \hbar n\varphi_{n-1}.\end{aligned}$$

□

Ahora mostraremos que las soluciones del problema espectral:

$$\hat{H}_\lambda\psi := \left[(\frac{1}{2} - \lambda)\hat{A}_3 + (\frac{1}{2} + \lambda)\hat{A}_1 - \alpha\right]\psi = 0, \tag{2.36}$$

$$\parallel \psi \parallel_{L^2} = 1$$

puede ser reconstruído del dato espectral del operador $\hat{A}_3$. Para ese objetivo, aplicaremos una transformación unitaria a $\hat{H}_\lambda$ para excluir la dependencia de $\hat{A}_1$. Considere la siguiente familia 1-paramétrica de los operadores unitarios

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{h}t\hat{A}_2\right)$$

y defina

$$\hat{H}_\lambda(t) := U(t)\hat{H}_\lambda U^{-1}(t). \tag{2.37}$$

Entonces, es claro que las soluciones de (2.36) y

$$\hat{H}_\lambda(t)\tilde{\psi} = 0 \tag{2.38}$$

estan relacionadas por medio de la transformación unitaria, $\tilde{\psi} = U(t)\psi$.

Primero necesitamos el siguiente resultado técnico.

LEMA 2.5. *Para cualesquiera $\lambda, t \in \mathbb{R}$, el operador $\hat{H}_\lambda(t)$ en (2.37) toma la forma:*

$$\hat{H}_\lambda(t) = \left((\frac{1}{2}-\lambda)\operatorname{ch} t + (\frac{1}{2}+\lambda)\operatorname{sh} t\right)\hat{A}_3 + \left((\frac{1}{2}-\lambda)\operatorname{sh} t + (\frac{1}{2}+\lambda)\operatorname{ch} t\right)\hat{A}_1 - \alpha I \quad (2.39)$$

Demostración. Primero, observamos que

$$\hat{H}_\lambda(t) = \left[(\frac{1}{2}-\lambda)\hat{A}_3(t) + (\frac{1}{2}+\lambda)\hat{A}_1(t) - \alpha\hat{I}\right] \quad (2.40)$$

donde $\hat{A}_j(t) := U(t)\hat{A}_j U^{-1}(t), \quad j = 1, 2, 3$. Es claro que, para cada t, estos operadores satisfacen las mismas relaciones de conmutación que para $t = 0$, en particular,

$$[\hat{A}_1(t), \hat{A}_2(t)] = -i\hbar\hat{A}_3(t), \quad [\hat{A}_3(t), \hat{A}_2(t)] = -i\hbar\hat{A}_1(t).$$

Notece que $\hat{A}_2(t) = \hat{A}_2$. De aquí y tomando en cuenta que $\frac{d}{dt}\hat{U}(t) = -\frac{i}{\hbar}\hat{A}_2\hat{U}(t)$ y $\frac{d}{dt}\hat{U}^{-1}(t) = \frac{i}{\hbar}\hat{U}^{-1}(t)\hat{A}_2$, derivamos que

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}_1(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[\hat{A}_1(t), \hat{A}_2(t)] = \hat{A}_3(t), \\ \frac{d\hat{A}_3(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[\hat{A}_3(t), \hat{A}_2(t)] = \hat{A}_1(t). \end{aligned}$$

Así, estas ecuaciones tienen las soluciones

$$\hat{A}_1(t) = \operatorname{ch} t\hat{A}_1 + \operatorname{sh} t\hat{A}_3, \quad \hat{A}_3(t) = \operatorname{sh} t\hat{A}_1 + \operatorname{ch} t\hat{A}_3,$$

las cuales junto con la representación (2.22) conducen a (2.39). □

Ahora estamos en posición de describir las soluciones del problema espectral (2.36).

Fije $\lambda < 0$, entonces la relación

$$(\lambda - \frac{1}{2})\operatorname{sh} t = (\lambda + \frac{1}{2})\operatorname{ch} t$$

se mantiene para el siguiente valor de t:

$$e^t = \sqrt{-2\lambda} \Leftrightarrow t = \ln(\sqrt{-2\lambda}).$$

Así, bajo tal valor de t, el problema espectral (2.38) toma la forma:

$$\left(\sqrt{-2\lambda}\hat{A}_3 - \alpha I\right)\tilde{\psi} = 0.$$

Luego las soluciones correspondientes $(\lambda, \tilde{\psi})$ vienen dadas por

$$\lambda = \lambda_n = -\frac{\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}, \tag{2.41}$$

y $\tilde{\psi} = \varphi_{n-1}$, donde $n = 1, 2, 3....$ Así, la fórmula da los valores propios (el espectro discreto) del operador de Schrodinger $\hat{H}$ (2.25) correspondiente al átomo de Hidrógeno. Las correspondientes funciones propias tienen la representación:

$$\psi_n = c_n \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\ln(\sqrt{-2\lambda_n})\hat{A}_2\right) \circ (\hat{A}_+)^{n-1}\varphi_0.$$

***Observación* 2.1.** Si $\lambda > 0$, entonces existe una solución de la ecuación:

$$\left(\lambda - \frac{1}{2}\right) cht = \left(\lambda + \frac{1}{2}\right) sht$$

la cual esta dada por $e^t = \sqrt{2\lambda}$. La ecuación (2.38) toma la forma

$$\sqrt{2\lambda}\hat{A}_1\tilde{\psi} - \alpha\tilde{\psi} = 0$$

y no tiene soluciones en L^2. Este caso corresponde al espectro contínuo.

CAPÍTULO 3

MÉTODO WKB PARA LA EVOLUCIÓN CUÁNTICA

El método WKB es un método estándar en la teoría de la aproximación semiclásica la cual nos permite construir algunas soluciones del problema de evolución para la ecuación de Schrodinger, o siendo más generales, para ecuaciones diferenciales que dependen del parámetro pequeño $\hbar$ de una manera particular. Para más detalles, uno puede consultar [35].

3.1. Problema de Cauchy para la Ecuación de Schrodinger

Sea

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + V(x),\ \ x \in \mathbb{R}^n \tag{3.1}$$

el operador de Schrodinger con potencial $V(x) \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$. Considere el siguiente problema de Cauchy:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \tag{3.2}$$

$$\psi(x,t)\mid_{t=0} = e^{\frac{iS_0(x)}{\hbar}} \varphi_0(x), \tag{3.3}$$

donde el valor inicial es definido por una fase $S_0 \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ y una amplitud $\varphi_0 \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$.

En general, no es fácil hallar la solución exacta de (3.2), (3.3) por lo que una alternativa es buscar soluciones aproximadas del problema de Cauchy cuando $\hbar \to 0$.

Para esto se propone el ansatz WKB:

$$\psi^{\mathrm{WKB}}(x,t) = e^{\frac{iS(x,t)}{\hbar}} \varphi(x,t). \tag{3.4}$$

Ahora, usando las fórmulas de conmutación de la función exponencial con los operadores $\hat{p}_t = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ y $\hat{p}_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}$, obtenemos

$$\hat{p}_t(e^{\frac{iS}{\hbar}}\varphi) = e^{\frac{iS}{\hbar}} \left(\frac{\partial S}{\partial t}\varphi - i\hbar\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right), \quad \hat{p}_j(e^{\frac{iS}{\hbar}}\varphi) = e^{\frac{iS}{\hbar}} \left(\frac{\partial S}{\partial x_j}\varphi - i\hbar\frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right),$$

$$\hat{p}_j^2(e^{\frac{iS}{\hbar}}\varphi) = e^{\frac{iS}{\hbar}} \left((\frac{\partial S}{\partial x_j})^2\varphi - i\hbar(2\frac{\partial S}{\partial x_j}\frac{\partial \varphi}{\partial x_j} + \frac{\partial^2 S}{\partial x_j^2}\varphi) - \hbar^2\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j^2} \right).$$

Sustituyendo el ansatz WKB (3.4) y las relaciones anteriores en la ecuación (3.2) y agrupando los términos de orden $\hbar^0, \hbar^1, \hbar^2$ obtenemos:

$$e^{\frac{iS}{\hbar}} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2}(\frac{\partial S}{\partial x})^2 + V(x) \right)\varphi - i\hbar\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x}\cdot\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right)\varphi \right) \right]$$
$$- \hbar^2\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = 0.$$

Aquí usamos las notaciones $\frac{\partial S}{\partial x} = \nabla S = (\frac{\partial S}{\partial x_1}, ..., \frac{\partial S}{\partial x_n})$ y

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 := \parallel \nabla S \parallel^2 = \sum_{j=1}^n (\frac{\partial S}{\partial x_j})^2, \quad \frac{\partial S}{\partial x}\cdot\frac{\partial \varphi}{\partial x} := \sum_{j=1}^n \frac{\partial S}{\partial x_j}\frac{\partial \varphi}{\partial x_j}$$

y $\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} := (\frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_j})$.

Así, llegamos al resultado semiclásico estándar: Si S y φ satisfacen:

- la ecuación de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2}(\frac{\partial S}{\partial x})^2 + V(x) = 0, \tag{3.5}$$

$$S\mid_{t=0} = S_0(x), \tag{3.6}$$

- la ecuación de transporte

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right)\varphi = 0, \tag{3.7}$$

$$\varphi\mid_{t=0} = \varphi_0(x). \tag{3.8}$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n, \quad t \in [0, T]$,

entonces ψ^{WKB} (3.4) satisface el problema de Cauchy (3.2), (3.3) modulo $O(\hbar^2)$ cuando $\hbar \to 0$,

$$ih\frac{\partial \psi^{\text{WKB}}}{\partial t} = \hat{H}\psi^{\text{WKB}} + O(\hbar^2), \tag{3.9}$$

$$\psi^{\text{WKB}}\mid_{t=0} = e^{\frac{iS_0(x)}{h}}\varphi_0(x). \tag{3.10}$$

La idea de la aproximación semiclásica es que las soluciones de los problemas (3.5), (3.6) y (3.7), (3.8) quedan completamente determinados por las trayectorias del sistema Hamiltoniano clásico con Hamiltoniano $H = \frac{p^2}{2} + V(x)$ asociado al operador de Schrodinger. En general, estas trayectorias existen para una escala de tiempo finita, $T < \infty$.

El método de solución de estas ecuaciones será desarrollado con más detalle en las siguientes secciones.

3.2. Ecuación de Hamilton-Jacobi

Sea $H = H(p, x, t)$ una función suave sobre el espacio fase extendido ($\mathbb{R}^{2n}_{p,x} \times \mathbb{R}, \ \omega = dp \wedge dx$). Vamos a asociar a esta función la ecuación de Hamilton-Jacobi dependiente del tiempo para $S = S(x, t)$:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(\frac{\partial S}{\partial x}, x, t\right) = 0. \tag{3.11}$$

Dada una función suave (fase inicial) $S_0 = S_0(x)$ in $\mathbb{R}^n$, fijamos una condición inicial para la ecuación de Hamilton-Jacobi (3.11) por:

$$S\mid_{t=0}= S_0(x). \tag{3.12}$$

Recordemos que la idea de la solución de la ecuación no lineal (3.11) con derivadas parciales se reduce al estudio del sistema no autónomo de ecuaciones diferenciales ordinarias, i.e. el sistema Hamiltoniano asociado

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(p,x,t)}{\partial x}, \quad \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H(p,x,t)}{\partial p} \tag{3.13}$$

con valor inicial

$$p\mid_{t=0}= p^0(\alpha) = \frac{\partial S_0(\alpha)}{\partial \alpha}, \quad x\mid_{t=0}= x^0(\alpha) = \alpha, \tag{3.14}$$

donde $\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_n) \in \mathbb{R}^n$.

Denote por $t \mapsto (p(t,\alpha), x(t,\alpha))$ la solución (trayectoria) del problema de Cauchy (3.13), (3.14). Asuma que existe una $T > 0$ tal que para cada $t \in [0,T]$, la trayectoria de (3.13) esta definida para todo $\alpha \in \mathbb{R}^n$ y la aplicación

$$\mathbb{R}^n \ni \alpha \mapsto x(t,\alpha) \in \mathbb{R}^n \tag{3.15}$$

es uno a uno y su Jacobiano no es cero,

$$J(t,\alpha) := \det\left(\frac{\partial x_i(t,\alpha)}{\partial \alpha_j}\right) \neq 0 \quad \forall (t,\alpha) \in [0,T] \times \mathbb{R}^n. \tag{3.16}$$

Entonces, por el teorema de la Función Implícita, existe una función inversa suave

$$x \mapsto \alpha(t,x) \in \mathbb{R}^n, \; t \in [0,T] \tag{3.17}$$

así, $x(t,\alpha(t,x)) = x$.

LEMA 3.1. *Bajo las hipótesis anteriores, existe una solución $S = S(x,t)$ del problema de Cauchy (3.11), (3.12) para $t \in [0,T]$ dada por la fórmula*

$$S(x,t) = \left[S_0(\alpha) + \int_0^t \left(p(\tau,\alpha)\cdot\frac{\partial x(\tau,\alpha)}{\partial \tau} - H(p(\tau,\alpha), x(\tau,\alpha), \tau)\right) d\tau\right]\Big|_{\alpha=\alpha(t,x)} \tag{3.18}$$

Demostración. Sea $(p(t,\alpha), x(t,\alpha))$ sulución al problema de Cauchy (3.13), (3.14) para $t \in [0,T]$. Definimos una función $\Phi = \Phi(\alpha, t)$ que satisface las relaciones

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = p(t,\alpha) \cdot \frac{\partial x(t,\alpha)}{\partial t} - H(p(t,\alpha), x(t,\alpha), t),$$

$$\Phi(\alpha, 0) = S_0(\alpha).$$

Sea

$$S(x,t) := \Phi(\alpha(x,t), t).$$

Por definición, tenemos las siguientes propiedades

$$\frac{\partial S}{\partial x} = \frac{\partial \alpha}{\partial x} \left(\frac{\partial \Phi(\alpha,t)}{\partial \alpha} \mid_{\alpha=\alpha(x,t)} \right), \tag{3.19}$$

$$\frac{\partial x(t,\alpha)}{\partial t} = -\frac{\partial x(t,\alpha)}{\partial \alpha} \left(\frac{\partial \alpha(t,x)}{\partial t} \right) \mid_{x=x(t,\alpha)}, \tag{3.20}$$

$$\frac{\partial S}{\partial x} = p(t,\alpha) \mid_{\alpha=\alpha(x,t)} . \tag{3.21}$$

De (3.19), (3.20), (3.21) se tiene la siguiente identidad

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha}{\partial t} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha} &= \frac{\partial \alpha}{\partial t} \cdot (\frac{\partial x}{\partial \alpha})^T \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right) \\ &= -\frac{\partial x}{\partial t} \cdot \frac{\partial S}{\partial x} = -\frac{\partial x}{\partial t} \cdot p \end{aligned} \tag{3.22}$$

Usando (3.21) y (3.22), verificamos

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} &= \frac{\partial \Phi(\alpha(x,t),t)}{\partial t} = \frac{\partial \alpha}{\partial t} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha} \mid_{\alpha=\alpha(x,t)} + \frac{\partial \Phi}{\partial t} \mid_{\alpha=\alpha(x,t)} \\ &= -\frac{\partial x}{\partial t} \cdot p + p \cdot \frac{\partial x}{\partial t} - H(p(t,\alpha), x(t,\alpha), t) \mid_{\alpha=\alpha(x,t)} \\ &= -H\left(\frac{\partial S}{\partial x}, x, t \right). \end{aligned}$$

□

Observe que en el caso autónomo, cuando el Hamiltoniano es independiente del tiempo $H = H(p,x)$,

$$\dot{p} = -\frac{\partial H(p,x)}{\partial x}, \qquad \dot{x} = \frac{\partial H(p,x)}{\partial p} \tag{3.23}$$

tenemos $H(p(\tau,\alpha),x(\tau,\alpha)) = E(\alpha)$ y la solución (3.18) toma la forma

$$S(x,t) = \left.\left[S_0(\alpha) + \int_0^t p(\tau,\alpha)\cdot\frac{\partial x(\tau,\alpha)}{\partial\tau}d\tau - E(\alpha)t\right]\right|_{\alpha=\alpha(t,x)}. \tag{3.24}$$

En particular, en el caso cuando

$$H(p,x) = \frac{\| p\|^2}{2} + V(x), \tag{3.25}$$

la formula (3.24) se escribe como

$$S(x,t) = \left.\left[S_0(\alpha) - 2\int_0^t V(x(\tau,\alpha))d\tau + E(\alpha)t\right]\right|_{\alpha=\alpha(t,x)} \tag{3.26}$$

la cual es una solución del problema de Cauchy (3.5), (3.6).

En el caso autónomo, las hipótesis del Lema 3.1 pueden ser reformuladas de manera geométrica de la siguiente forma. El valor inicial (3.14) define la siguiente subvariedad n-dimensional en el espacio fase:

$$\Lambda_0 := \left\{p = \frac{\partial S_0(\alpha)}{\partial\alpha}, x = \alpha\right\},$$

donde $\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_n) \in \mathbb{R}^n$ son parámetros. Es claro que esta subvariedad es Lagrangiana,

$$\begin{aligned}\omega\left(\frac{\partial}{\partial\alpha_i}, \frac{\partial}{\partial\alpha_j}\right) &= \frac{\partial p^0(\alpha)}{\partial\alpha_i}\cdot\frac{\partial x^0(\alpha)}{\partial\alpha_j} - \frac{\partial x^0(\alpha)}{\partial\alpha_i}\cdot\frac{\partial p^0(\alpha)}{\partial\alpha_j}\\ &= \frac{\partial p_j^0(\alpha)}{\partial\alpha_i} - \frac{\partial p_i^0(\alpha)}{\partial\alpha_j} = \frac{\partial^2 S_0(\alpha)}{\partial\alpha_i\partial\alpha_j} - \frac{\partial^2 S_0(\alpha)}{\partial\alpha_j\partial\alpha_i} = 0.\end{aligned}$$

Sea $Fl^t_{X_H} : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}^{2n}$ el flujo del sistema Hamiltoniano (3.23) para un tiempo t. La suposición anterior implica que la trayectoria de X_H comenzando en cada punto de la subvariedad inicial $\Lambda_0 \subset \mathbb{R}^{2n}$ esta bien definida para todo $t \in [0,T]$ y por lo tanto el flujo mueve la subvariedad Lagrangiana inicial a la subvariedad Lagrangiana definida por

$$\Lambda_t := Fl^t_{X_H}\Lambda_0 = \{p = (p(t,\alpha), x = x(t,\alpha), \quad \alpha \in \mathbb{R}^n\}.$$

La característica principal de la familia $\{\Lambda_t\}$ es que la subvariedad Λ_t proyecta difeomorficamente sobre el x-espacio $\mathbb{R}^n_x$ para cada $t \in [0,T]$. El primer $T_0 > T$ para el cual esta propiedad se rompe se llama momento de aparición de puntos focales. Como un resultado, una solución del problema de Cauchy (3.11), (3.12) sólo existe sobre $[0,T]$ para $T < T_0$.

EJEMPLO 3.1. Para el caso $n = 1$, considere $H = \frac{p^2}{2}$ y $S_0 = -\frac{x^2}{2}$. Las trayectorias del sistema Hamiltoniano

$$\dot{p} = 0, \ \dot{x} = p$$

con valor inicial $p \mid_{t=0} = -\alpha$, $x \mid_{t=0} = \alpha$ están dadas por $p(t, \alpha) = -\alpha$, $x(t, \alpha) = \alpha(1 - t)$. Como $\frac{\partial x}{\partial \alpha} = (1-t) \neq 0$ para todo $(t, \alpha) \in [0, T] \times \mathbb{R}$ con $T < 1$, tenemos que $\alpha(t, x) = \frac{x}{1-t}$. En este caso, $T_0 = 1$ y la solución del problema de Cauchy

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 = 0,$$

$$S \mid_{t=0} = -\frac{x^2}{2},$$

viene dada por

$$S(x, t) = -\frac{x^2}{2(1-t)}$$

para $0 \leq t < 1$. Geométricamente, la curva inicial $\Lambda_0 := \{p = -\alpha, x = \alpha\}$ en el plano (p, x) es transformada bajo el flujo del sistema Hamiltoniano en la línea $\Lambda_t = \{\ p = -\alpha,$ $x = (1-t)\alpha\}$ la cual se convierte en el eje p en el momento $t = T_0 = 1$.

3.3. Ecuación de Transporte

Considere el problema de Cauchy para la ecuación de Transporte

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right) \varphi = 0, \tag{3.27}$$

$$\varphi \mid_{t=0} = \varphi_0(x), \tag{3.28}$$

donde $S = S(x, t)$ es la solución (3.26) de la ecuación de Hamilton-Jacobi (3.11) con valor inicial (3.12). Esta ecuación diferencial parcial lineal puede resolverse por el método característico.

Para recordar este método, primero consideremos una ecuación diferencial lineal de primer orden de tipo general:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + a(x, t) \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} + c(x, t)\varphi = 0, \tag{3.29}$$

$$\varphi \mid_{t=0} = \varphi_0(x), \tag{3.30}$$

donde $a(x,t) = (a_1(x,t), ..., a_n(x,t))$ es un campo vectorial dependiente del tiempo sobre $\mathbb{R}^n$ y $c \in C^\infty(\mathbb{R}^{n+1})$. Considere el sistema dinámico asociado al campo vectorial a:

$$\frac{dx}{dt} = a(x,t), \tag{3.31}$$

$$x \mid_{t=0} = \alpha \tag{3.32}$$

y supongamos que se verifica la siguiente hipótesis dinámica:

(DH) existe una solución $x(t,\alpha)$ de (3.31), (3.32) definida para todo $t \in [0,T]$ y toda $\alpha \in \mathbb{R}^n$. Más aún, la ecuación $x = x(t,\alpha)$ es soluble con respecto a α, para cada $t \in [0,T]$ fijo, y la función $\alpha(x,t)$ es suave en (x,t) .

Observemos que la condición de solubilidad local es precisamente:

$$\det \frac{\partial x(t,\alpha)}{\partial \alpha} \neq 0. \tag{3.33}$$

Haciendo el cambio de variables $(x,t) \mapsto (\alpha,t)$ y sustituyendo $\tilde{\varphi}(\alpha,t) = \varphi(x(t,\alpha),t)$ en (3.29),(3.30), obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\varphi}(\alpha,t) + c((x(t,\alpha),t)\varphi = 0,$$

$$\tilde{\varphi} \mid_{t=0} = \varphi_0(\alpha).$$

Así, obtenemos la solución del problema original (3.29),(3.30)

$$\varphi(x,t) = \left[\varphi_0(\alpha)\exp\left(-\int_0^t c((x(\tau,\alpha),\tau)d\tau\right)\right]\Bigg|_{\alpha=\alpha(x,t)}. \tag{3.34}$$

Ahora, regresemos a la ecuación de Transporte (3.7), la cual es un caso particular de (3.29) con

$$a = \frac{\partial S(x,t)}{\partial x} \text{ y } c = \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left(\frac{\partial^2 S(x,t)}{\partial x^2}\right). \tag{3.35}$$

En este caso, si $(p(t,\alpha), x(t,\alpha))$ es una solución del sistema Hamiltoniano con Hamiltoniano (3.25) y el valor inicial (3.14), entonces por (3.21) tenemos

$$\frac{\partial x(t,\alpha)}{\partial t} = p(t,\alpha) = \frac{\partial S(x,t)}{\partial x} \mid_{x=x(t,\alpha)} \tag{3.36}$$

y por lo tanto la componente $x(t,\alpha)$ es una solución de (3.31), (3.32) con el campo vectorial a definido en (3.35). Así, llegamos al siguiente resultado

LEMA 3.2. *Bajo la hipótesis **(DH)**, la solución de la ecuación de transporte (3.27), (3.28) viene dada por*

$$\varphi(x,t) = \left[\varphi_0(\alpha)\exp\left(-\frac{1}{2}\int_0^t \operatorname{tr}\left(\frac{\partial^2 S(x(\tau,\alpha),\tau)}{\partial x^2}\right)d\tau\right)\right]\Bigg|_{\alpha=\alpha(x,t)} \tag{3.37}$$

para $t \in [0,T]$.

Bajo la condición (3.33), como consecuencia de la fórmula (3.37), también derivamos la siguiente representación para la solución de la ecuación de transporte

$$\varphi(x,t) = \left[\frac{\varphi_0(\alpha)}{\sqrt{\det\frac{\partial x(t,\alpha)}{\partial\alpha}}}\right]\Bigg|_{\alpha=\alpha(x,t)}. \tag{3.38}$$

En efecto, aplicando a (3.36) , el procedimiento de variación en α, obtenemos

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial x(t,\alpha)}{\partial\alpha}\right) &= \frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{\partial x(t,\alpha)}{\partial t}\right) = \frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{\partial S(x(t,\alpha),t)}{\partial x}\right)\\ &= \frac{\partial^2 S(x(t,\alpha),t)}{\partial x^2}\left(\frac{\partial x(t,\alpha)}{\partial t}\right)\end{aligned}$$

y por lo tanto por la fórmula de Liouville

$$\det\frac{\partial x(t,\alpha)}{\partial\alpha} = \exp\left(\operatorname{tr}\int_0^t \frac{\partial^2 S(x(\tau,\alpha),\tau)}{\partial x^2}d\tau\right).$$

3.4. Paquetes de onda WKB

Resumiendo los resultados de las secciones previas, llegamos al siguiente hecho.

TEOREMA 3.1. *Bajo la suposición **(DH)**, el problema de Cauchy (3.2), (3.3) para la ecuación de Schrödinger tiene la siguiente solución WKB mod h^2*

$$\psi^{\mathrm{WKB}}(x,t) = \left(\exp\frac{i}{\hbar}\left[S_0(\alpha) - 2\int_0^t V(x(\tau,\alpha))d\tau + E(\alpha)t\right]\cdot\left[\frac{\varphi_0(\alpha)}{\sqrt{\det\frac{\partial x(t,\alpha)}{\partial\alpha}}}\right]\right)\Bigg|_{\alpha=\alpha(t,x)}, \tag{3.39}$$

para $t \in [0,T]$*, donde* $x(t,\alpha)$ *es la solución de*

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\nabla V(x),$$

$$x\mid_{t=0} = \alpha, \quad \dot{x}\mid_{t=0} = \nabla S(\alpha)$$

y $E(\alpha) := \frac{1}{2} \parallel S(\alpha) \parallel^2 + V(\alpha)$.

EJEMPLO 3.2. (Partícula libre) Considere el problema de Cauchy (3.2), (3.3) con $V = 0$ y $S_0 = -\frac{x^2}{2}$. Utilizando los resultados del Ejemplo 3.1 y la fórmula (3.39), obtenemos la solución

$$\psi^{\mathrm{WKB}}(x,t) = \frac{e^{-\frac{ix^2}{2h(1-t)}}}{(1-t)^{\frac{1}{2}}}\varphi_0(\frac{x}{1-t}).$$

CAPÍTULO 4

CUANTIZACIÓN SEMICLÁSICA

En este capítulo, presentamos uno de los principales resultados de la tesis en relación a la representación integral de Karasev para cuasimodos [24] [25]. En particular, damos una prueba completa y detallada de la llamada fórmula de conmutación, la cual practicamente no puede ser hallada en la literatura.

4.1. Cuasimodos. Definición y propiedades generales

Primero recordemos algunos hechos de la teoría espectral de operadores [41]. Sea $\hat{A}$ un operador autoadjunto cerrado en un espacio de Hilbert $(\mathcal{H}, <, >)$ con dominio de definición denso $D(\hat{A})$. El conjunto regular o resolvente de $\hat{A}$ se define por

$$\rho(\hat{A}) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \hat{A} - \lambda I \textit{ es biyectivo con inversa acotada}\}.$$

Notemos que $\rho(\hat{A})$ es abierto en $\mathbb{C}$.

Para cada $\lambda \in \rho(\hat{A})$, el operador acotado $R_\lambda(\hat{A}) = (\hat{A} - \lambda I)^{-1}$ se dice que es la *resolvente* de $\hat{A}$ en λ. El conjunto $\mathrm{Sp}(\hat{A}) = \sigma(\hat{A}) := \mathbb{C} \setminus \rho(\hat{A})$ es llamado el *espectro* de $\hat{A}$.

El espectro a su vez se divide en los siguientes tres conjuntos disjuntos:

- *El espectro puntual o espectro discreto* $\sigma_p(\hat{A})$ que consiste de todos los $\lambda \in \mathbb{C}$ tales que $R_\lambda(\hat{A})$ no existe, esto es, $\lambda \in \sigma_p(\hat{A})$ significa que λ es un *valor propio* de $\hat{A}$, $Au = \lambda u$, para un cierto *vector propio* $u \in D(\hat{A})$, $\| u \| = 1$;
- *el espectro contínuo* $\sigma_c(\hat{A})$, definido como el conjunto de λ tal que $R_\lambda(\hat{A})$ existe y esta definido sobre un conjunto denso en $\mathcal{H}$ pero $R_\lambda(\hat{A})$ no es acotado;
- el *espectro residual* $\sigma_r(\hat{A})$, que contiene a los $\lambda \in \mathbb{C}$ tales que $R_\lambda(\hat{A})$ existe (puede ser acotado o no) pero el dominio de $R_\lambda(\hat{A})$ no es denso en $\mathcal{H}$.

Ahora, supongamos que $\hat{A}$ es un *operador autoadjunto*, esto es, $\hat{A} = \hat{A}^*$ o equivalentemente, $\hat{A}$ es simétrico y $D(\hat{A}) = D(\hat{A}^*)$. En este caso, el espectro $\mathrm{Sp}(\hat{A}) \subseteq \mathbb{R}$ es real y cerrado. Un operador simétrico $(\hat{A}, D(\hat{A}))$ se dice que es *esencialmente autoadjunto* si su clausura $(\bar{\hat{A}}, D(\bar{\hat{A}}))$ es autoadjunta.

Además tenemos el siguiente hecho para un operador autoadjunto $\hat{A}$: si $\lambda \in \mathrm{Sp}(\hat{A})$, entonces existe una sucesión $\{u_n\}$ en $D(\hat{A}) \subseteq \mathcal{H}$ tal que $\|(\hat{A} - \lambda I)u_n \| \to 0$ cuando $n \to \infty$. Esto implica que el espectro residual de $\hat{A}$ es vacío, y $\sigma(\hat{A}) = \sigma_p(\hat{A}) \cup \sigma_c(\hat{A})$.

Un resultado conocido en teoría espectral [41] garantiza que para un operador autoadjunto $\hat{A}$ si $\lambda \notin \mathrm{Sp}(\hat{A})$, entonces

$$\| (\hat{A} - \lambda I)^{-1} \| \leq \frac{1}{\mathrm{dist}(\lambda, \mathrm{Sp}(\hat{A}))}. \tag{4.1}$$

DEFINICIÓN 4.1. *Sea $\hat{A}$ un operador autoadjunto en un espacio de Hilbert $(\mathcal{H}, \langle , \rangle)$ y $0 < \varepsilon \ll 1$, un parámetro pequeño. Un ε-cuasimodo del operador $\hat{A}$ es un par (λ, u) donde $\lambda \in \mathbb{R}$ y $u \in D(\hat{A}) \subseteq \mathcal{H}$ que satisfacen*

$$\| (\hat{A}u - \lambda u \| \leq \varepsilon, \tag{4.2}$$

$$\| u \| = 1. \tag{4.3}$$

LEMA 4.1. *Si* (λ, u) *es un* ε*-cuasimodo de* $\hat{A}$*, entonces la distancia entre el espectro de* $\hat{A}$ *y* λ *es de orden* ε*, es decir,*

$$\mathrm{Sp}(\hat{A}) \cap [\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon] \neq \varnothing. \tag{4.4}$$

Demostración. Supongamos que $\lambda \notin \mathrm{Sp}(\hat{A})$, entonces por definición tenemos

$$\| (\hat{A} - \lambda I)^{-1} \| = \sup_{v \neq 0} \frac{\| (\hat{A} - \lambda I)^{-1} v \|}{\| v \|} \geqslant \frac{\| (\hat{A} - \lambda I)^{-1} v' \|}{\| v' \|}, \tag{4.5}$$

donde $v' = (\hat{A} - \lambda I)u$. De (4.1) se sigue que

$$\begin{aligned} \mathrm{dist}(\lambda, \mathrm{Sp}(\hat{A})) &\leq \frac{1}{\| (\hat{A} - \lambda I)^{-1} \|} \\ &\leq \frac{\| v' \|}{\| (\hat{A} - \lambda I)^{-1} v' \|} = \| (\hat{A} - \lambda I) u \| \leq \varepsilon. \end{aligned}$$

□

***Observación* 4.1.** En otras palabras, la condición (4.4) significa que existe un $\mu \in \mathrm{Sp}(\hat{A})$, tal que $| \lambda - \mu | \leq \varepsilon$. Pero no siembre es verdad que u esta cerca de un vector propio de $\hat{A}$. Enfatizamos aquí que no asumimos que el espectro sea discreto.

En esta parte, nuestro objetivo es presentar algunos métodos de construcción de cuasimodos para *operadores* $\hbar$*-pseudodiferenciales de Weyl*. Recuerde que para una función suave $H = H(p, x)$ en $\mathbb{R}^{2n}_{p,x}$ que satisface la condición

$$| H^{(k)}(p, x) | \leq C_k (1 + \| x \| + \| p \|)^r,$$

para cualquier multiíndice k, uno puede asociar un operador de Weyl $\hat{H} = H(-ih\frac{\partial}{\partial x}, x)$ cuyo dominio de definición es el espacio de Schwartz (ver, por ejemplo, [18], pag 377) y el cual es esencialmente autoadjunto en el espacio de Hilbert estándar $(L^2(\mathbb{R}^n), \langle , \rangle_{L^2})$, donde

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle_{L^2} = \int_{\mathbb{R}^n} \psi_1(x) \bar{\psi}_2(x) dx.$$

Así, el problema de la cuantización semiclásica es construir un cuasimodo $(\lambda, \psi \in L^2)$ de $\hat{H}$ mod$(\hbar^N)$ para $N > 1$, es decir,

$$\| (\hat{H} - \lambda) \psi \|_{L^2} = O(\hbar^N),$$

$$\| \psi \|_{L^2} = 1 + O(\hbar).$$

Como mencionamos previamente, un método general para construir tales cuasimodss es el operador canónico de Maslov [36], [37]. Nuestro objetivo es discutir algunos aspectos analíticos y geométricos del método alternativo al método de Maslov basado en la representación integral para cuasimodos debido a Karasev [24], [25].

4.2. Operador de Schrodinger Unidimensional

Empezamos con el análisis de un caso estándar: el operador de Schrodinger unidimensional en el límite semiclásico,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dx^2} + U(x), \quad \hbar \to 0, \tag{4.6}$$

donde el potencial $U \in C^\infty(\mathbb{R})$ esta acotado por abajo por una constante [35], [39], [20], [19] . Entonces, $\hat{H}$ es esencialmente autoadjunto sobre $C_0^\infty(\mathbb{R})$.

Considere el correspondiente sistema Hamiltoniano sobre el plano $\mathbb{R}^2_{p,x}$:

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \tag{4.7}$$

donde el Hamiltoniano $H = \frac{p^2}{2} + U(x)$ es el símbolo de Weyl de $\hat{H}$. Asuma que un conjunto abierto $\mathcal{O}$ en $\mathbb{R}^2_{p,x}$ esta trivialmente foliado por trayectorias periódicas $\{\gamma_E\}_{E\in\Delta}$ del sistema Hamiltoniano (4.7) , donde

$$\gamma_E \subseteq S_E := \{(p,x) \mid H(p,x) = E\}$$

es una componente compacta conexa regular del conjunto de nivel de energía E de H. Paramétricamente tenemos

$$\gamma_E = \{p = p(\alpha, E), x = x(\alpha, E) \;\; 0 \le \alpha \le 2\pi\}, \tag{4.8}$$

donde

$$p(\alpha, E) = p(\alpha + 2\pi, E), \qquad x(\alpha, E) = x(\alpha + 2\pi, E)$$

son funciones 2π-periódicas en α determinadas por las soluciones

$$P(t,E) = p(\alpha, E)\mid_{\alpha=\varpi(E)t}, \qquad X(t,E) = x(\alpha, E)\mid_{\alpha=\varpi(E)t}$$

del sistema Hamiltoniano (4.7) con valor inicial

$$P(t,E)\mid_{t=0}= \sigma_1(E),\ X(t,E)\mid_{t=0}= \sigma_2(E),$$

donde $\Delta \ni E \mapsto \sigma(E) = (\sigma_1(E), \sigma_2(E)) \in \mathcal{O}$ es una curva suave transversal al campo vectorial Hamiltoniano $X_H = (-\frac{\partial H}{\partial x}, \frac{\partial H}{\partial p})$ e intersecta a cada trayectoria en un punto. El periodo $T(E) = \frac{2\pi}{\varpi(E)}$ de γ_E está dado por

$$T(E) = \frac{dA(E)}{dE},$$

donde

$$A(E) := \int_{D(E)} dp \wedge dx = \oint_{\gamma_E} pdx$$

es el área del dominio $D(E) \subset \mathbb{R}^2$ acotado por γ_E. Así, en el dominio $\mathcal{O} \approx (a_1, a_2) \times \mathbb{S}^1$, uno puede introducir las llamadas coordenadas de acción-ángulo $(I, \alpha \bmod 2\pi)$ definadas por

$$I = A(E), \quad \alpha = \frac{2\pi t}{T(E)}.$$

En estas coordenadas, el Hamiltoniano H depende sólo de I. Observe que en términos del potencial V, las condiciones de la existencia de las trayectorias periódicas se verifican como sigue. Para $E \in \Delta$, la componente conexa regular γ_E del conjunto de nivel de energía E es una trayectoria periódica si el potencial satisface la propiedad:

$$x_- = \text{mín}\{x \mid (p,x) \in \gamma_E\} \ \text{ and } x_+ = \text{máx}\{x \mid (p,x) \in \gamma_E\}$$

son raíces distintas de $V(x) = E$ y $V'(x_-) < 0$ y $V'(x_+) > 0$.

Como es bien conocido [35], [39], [20], [19] , la cuantización semiclásica de las trayectorias periódicas γ_E en $\mathbb{R}^2$ del sistema Hamiltoniano (4.7) produce los siguientes cuasimodos $(\lambda_k, \psi_k) \bmod \hbar^2$ del operador de Schorodinger 1-dimensional $\hat{H}$, donde los valores propios asintóticos son dados por $\lambda_k = E_k$ y $E = E_k$ satisface la regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld

$$\frac{A(E)}{2\pi} = \hbar\left(k + \frac{m}{4}\right), \tag{4.9}$$

donde $k \in \mathbb{Z}$ es un número cuántico que satisface $k \sim \frac{1}{\hbar}$ y $m = m_\gamma \in \mathbb{Z}$ es el índice de Maslov de la curva cerrada orientada en $\mathbb{R}^2$. El cuasimodo ψ_k puede representarse de diferentes maneras (ver, por ejemplo, [35]). Aquí, describimos ψ_k usando un ansatz integral para cuasimodos debido a Karasev [25], [24] lo cual está basado en una idea de Heller [21] sobre la representación de autoestados como superposición de paquetes de onda Gaussiana. Una aproximación similar que explota la noción de estados coherentes fué sugerida en [20], [19], [39].

Ahora , fijando un nivel de energía $E \in \Delta$, introduciremos los siguientes objetos asociados a la trayectoria periódica $\gamma = \gamma_E$. Usando la parametrización (4.8), denifimos una función suave J ("Jacobiano") no nula y 2π-periódica en α por

$$J(\alpha) := \frac{\partial\left(x(\alpha, E) + ip(\alpha, E)\right)}{\partial\alpha} \neq 0, \tag{4.10}$$

con

$$J(\alpha + 2\pi) = J(\alpha). \tag{4.11}$$

La propiedad de no degeneración se sigue de la regularidad de la curva parametrizada γ (i.e. la velocidad de γ es dintinta de cero en cada punto). Así, podemos introducir la aplicación $j : \gamma \to \mathbb{S}^1 \hookrightarrow \mathbb{C}$ como

$$j := \frac{J^2}{\mid J \mid^2}$$

la cual aplica la curva paramétrica cerrada γ en el círculo unitario $\mathbb{S}^1$ del plano complejo. En este caso, es posible hablar del winding number $\mathrm{wn}(\gamma)$ a lo largo de γ el cual representa el número de vueltas que la curva γ hace en el sentido positivo (del reloj) alrededor del origen cuando el parámetro α va de 0 a 2π. Explicitamente, introducimos la 1-forma sobre γ por

$$\mu := -j^*\left(\frac{dz}{2\pi iz}\right). \tag{4.12}$$

LEMA 4.2. *Se verifican las siguientes relaciones*

$$m_\gamma := \oint_\gamma \mu = -2\,\mathrm{wn}(\gamma) \in 2\mathbb{Z} \tag{4.13}$$

y

$$J(\alpha) =\mid J(\alpha) \mid \exp(-i\pi \int_{\alpha_0}^{\alpha} \mu) \cdot e^{i\phi_0}. \tag{4.14}$$

Aquí, la integral se toma sobre un segmento de la curva γ con los puntos extremos correspondiendo a los valores α_0 y α.

Demostración. Tenemos $J(\alpha) =\mid J(\alpha) \mid e^{i\phi(\alpha)}$, donde $\phi(\alpha) = \operatorname{Arg} J(\alpha)$. Entonces, por definición (4.12), tenemos

$$\mu = -\left(\frac{J^2}{\mid J \mid^2}\right)^* \left(\frac{dz}{2\pi i z}\right) = \frac{-2id\phi}{2\pi i} = -\frac{d\phi}{\pi}.$$

Se sigue que

$$J(\alpha) =\mid J(\alpha) \mid \exp(-i\pi \int_{\alpha_0}^{\alpha} \mu),$$

y por la condición de periodicidad (4.11), concluimos que

$$\exp(-i\pi \int_{\alpha_0}^{\alpha+2\pi} \mu) = \exp(-i\pi \int_{\alpha_0}^{\alpha} \mu)$$

y por lo tanto $\exp(-i\pi \int_{\alpha}^{\alpha+2\pi} \mu) = 1$. Esto implica que

$$\int_{\alpha}^{\alpha+2\pi} \mu = \int_0^{2\pi} \mu = 2s, \quad s \in \mathbb{Z}$$

para cada α. Finalmente,

$$m_\gamma = \oint_\gamma \mu = -2 \int_0^{2\pi} \phi'(\alpha) d\alpha = -2\,\mathrm{wn}(\gamma) \in 2\mathbb{Z}.$$

□

EJEMPLO 4.1. Consideremos el Hamiltoniano del oscilador armónico unidimensional:

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2}.$$

Las trayectorias del oscilador armónico con energía E admiten la siguiente parametrización,

$$\gamma_E = \{p = (E)^{\frac{1}{2}} \cos \alpha, \quad x = (E)^{\frac{1}{2}} \operatorname{sen} \alpha \ \}. \tag{4.15}$$

En consecuencia el Jacobiano es:

$$J(\alpha) := i(E)^{\frac{1}{2}} (\cos \alpha - i \operatorname{sen} \alpha) = i(E)^{\frac{1}{2}} e^{-i\alpha}.$$

Así, en este caso,

$$\mu = \frac{d\alpha}{\pi} \ \text{ y } \quad m_\gamma = 2. \tag{4.16}$$

Note que como una consecuencia de (4.14) tenemos la representación

$$J^{\frac{1}{2}}(\alpha) =\mid J(\alpha) \mid^{\frac{1}{2}} \exp(-\frac{i\pi}{2} \int_{\alpha_0}^{\alpha} \mu) \cdot e^{\frac{1}{2} i\phi_0},$$

y por tanto, esta función no es 2π-periodica en α debido a

$$J^{\frac{1}{2}}(\alpha + 2\pi) = \exp(-\frac{i\pi}{2} \oint_\gamma \mu) J^{\frac{1}{2}}(\alpha) = \exp(-\frac{i\pi}{2} m_\gamma) J^{\frac{1}{2}}(\alpha). \tag{4.17}$$

Por ejemplo, si $m_\gamma = 2$, entonces $J^{\frac{1}{2}}(\alpha + 2\pi) = -J^{\frac{1}{2}}(\alpha)$.

Regresando a nuestro análisis general, ahora asociaremos a la órbita periódica $\gamma = \gamma_E$ una función suave con valores complejos $S(x, \alpha) \in C^\infty(\mathbb{R}_x \times \mathbb{R}_\alpha) \otimes \mathbb{C}$ llamada fase y que está dada por

$$S(x, \alpha) := p(\alpha)(x - x(\alpha)) + \frac{i}{2}(x - x(\alpha))^2 + \int_{\alpha_0}^{\alpha} pdx.$$

La fase $S(x, \alpha)$ tiene las siguientes propiedades:

$$\operatorname{Im} S(x, \alpha) \geq 0, \tag{4.18}$$

$$\operatorname{Im} S(x, \alpha) = 0 \Leftrightarrow x = x(\alpha), \tag{4.19}$$

$$S(x, \alpha + 2\pi) = S(x, \alpha) + \oint_\gamma pdx. \tag{4.20}$$

Usando los datos anteriores, podemos definir para un α fijo la función:

$$\Gamma_\alpha(x, \hbar) := J^{\frac{1}{2}}(\alpha) e^{\frac{iS(x,\alpha)}{\hbar}} = J^{\frac{1}{2}}(\alpha) exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{\alpha_0}^{\alpha} pdx \right) \cdot exp \left[\frac{i}{\hbar} p(\alpha)(x - x(\alpha)) - \frac{1}{2\hbar}(x - x(\alpha))^2 \right]$$

donde el último factor se llama *paquete de Gauss.*

Entonces, por las propiedades (Pr1), (Pr2), tenemos

$$\Gamma_\alpha(x,\hbar) \mid_{x=x(\alpha)} = O(1),$$

$$\Gamma_\alpha(x,\hbar) \mid_{x\neq x(\alpha)} = O(\hbar^\infty)$$

cuando $\hbar \to 0$. En otras palabras, estas relaciones muestran que en el límite semiclásico, haciendo variar α, $\Gamma_\alpha(x,h)$ esta localizada en x sobre el intervalo $[x_-, x_+]$ el cual es la proyección de la curva $\gamma \subset \mathbb{R}^2_{p,x}$ sobre el eje x.

La siguiente observación explica el significado de la regla de cuantización (4.9) en términos de la dependencia de $\Gamma_\alpha(x,\hbar)$ en α.

LEMA 4.3. *El paquete de Gauss $\Gamma_\alpha(x,\hbar)$ es 2π-periodica en α,*

$$\Gamma_{\alpha+2\pi}(x,\hbar) = \Gamma_\alpha(x,\hbar)$$

para todo x y $\hbar$ si y sólo si la órbita periódica $\gamma = \gamma_E$ satisface la regla de cuantización (4.9),

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\oint_\gamma \left(pdx - \frac{\pi\hbar}{2}\mu\right) \in \mathbb{Z}.$$

Demostración. Usando (4.20), (4.17), verificamos que

$$\begin{aligned}
\Gamma_{\alpha+2\pi}(x,\hbar) &= J^{\frac{1}{2}}(\alpha+2\pi)e^{\frac{iS(x,\alpha+2\pi)}{\hbar}} \\
&= \exp(-\frac{i\pi}{2}m_\gamma)\exp(\frac{i}{h}\oint_\gamma pdx)J^{\frac{1}{2}}(\alpha)e^{\frac{iS(x,\alpha)}{\hbar}} \\
&= \exp 2\pi i(-\frac{1}{4}m_\gamma + \frac{1}{2\pi h}\oint_\gamma pdx)\Gamma_\alpha(x,\hbar),
\end{aligned}$$

esto prueba la afirmación. □

Como corolario del Lema 4.3, derivamos el siguiente resultado [25].

COROLARIO 4.1. *Si la trayectoria periódica* $\gamma = \gamma_{E_k}$ *(o su nivel de energía* $E = E_k$ *) es cuantizada, en el sentido que la regla de cuantización (4.9) sostiene, entonces uno puede definir el operador* $K_\gamma : C^\infty(\gamma) \otimes \mathbb{C} \longrightarrow C^\infty(\mathbb{R}_x) \otimes \mathbb{C}$ *dado por*

$$K_\gamma(\varphi)(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{2\pi} \Gamma_\alpha(x,\hbar)\varphi(\alpha)\frac{d\alpha}{2\pi} \tag{4.21}$$

y tiene la propiedad $K_\gamma(\varphi) \in L^2(\mathbb{R}_x)$ *con*

$$\| K_\gamma(\varphi) \|_{L^2} = \int_0^{2\pi} | \varphi(\alpha) |^2 \frac{d\alpha}{2\pi} + O(\hbar) \tag{4.22}$$

cuando $\hbar \to 0$.

La prueba de (4.22) se basa en la aplicación del método de fase estacionaria (ver [35]). Observe que el espacio $C^\infty(\gamma)$ se identifica precisamente con las funciones suaves 2π-periodicas sobre $\mathbb{R}$.

Observe que el lado derecho de (4.21) es precisamente una integral sobre la curva orientada cerrada γ con respecto a la medida normalizada $d\sigma = \frac{d\alpha}{2\pi}$ (ver, Sección 3).

Así, llegamos a nuestro resultado principal para la construcción de cuasimodos para el operador de Schrödinger unidimensional.

TEOREMA 4.1. *Cada órbita periódica cuantizada* $\gamma = \gamma_{E_k}$ *induce el cuasimodo* $(\lambda = E_k,\ \psi = K_\gamma(1))$ *de* $\hat{H} \mod \hbar^2$.

Una prueba detallada de este hecho se presenta en la siguiente sección para un caso más general (caso multidimensional) para una más amplia clase de operadores de Weyl . Aquí, presentamos una derivación directa de los cuasimodos ilustrando las ideas principales de la construcción.

Como hemos mencionado en la introducción, la idea es trasladar el problema espectral inicial para el operador $\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x})$ (un operador de Weyl de los generadores $\hat{p} = -ih\frac{d}{dx}$, $\hat{x} = x$ del álgebra de Heiseberg) al problema espectral $\hat{L}_\gamma \varphi = \lambda\varphi$ en el espacio de Hilbert $L^2(\gamma)$ de las funciones de cuadrado integrable sobre el conjunto compacto, i.e. sobre la curva cerrada γ. El operador $\hat{L} = \hat{L}_\gamma$ será representado por una función de Weyl de los siguientes operadores

$$\hat{\mathcal{P}} := p(\alpha) - i\hbar\hat{D}, \tag{4.23}$$

$$\hat{\mathcal{X}} := x(\alpha) - \hbar\hat{D}, \tag{4.24}$$

donde

$$\hat{D} := \left(J^{-1}\frac{d}{d\alpha} + \frac{1}{2}\frac{d}{d\alpha}(J^{-1})\right). \tag{4.25}$$

Notemos que

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathcal{X}}] = -i\hbar\hat{I}, \tag{4.26}$$

por lo que los operadores (4.23) y (4.24) también son generadores del álgebra de Heisenberg.

Más aún, por cálculo directo se puede verificar

$$\hat{p}(\hat{K}_\gamma(\varphi)) = \hat{K}_\gamma(\hat{\mathcal{P}}(\varphi)), \tag{4.27}$$

$$\hat{x}(\hat{K}_\gamma(\varphi) = \hat{K}_\gamma(\hat{\mathcal{X}}(\varphi)), \tag{4.28}$$

para todo $\varphi \in C^\infty(\gamma)$. Supongamos que V es una función polinomial o analítica. Entonces, se sigue de (4.27), (4.28), que para el operador de Schrodinger $\hat{H}$ (4.6), tenemos la fórmula de conmutación

$$\hat{H} \circ \hat{K}_\gamma = \hat{K}_\gamma \circ \hat{\mathbb{L}}_\gamma, \tag{4.29}$$

donde

$$\hat{\mathbb{L}}_\gamma = \frac{\hat{\mathcal{P}}^2}{2} + V(\hat{\mathcal{X}}) \tag{4.30}$$

es un operador de Weyl actuando sobre funciones en α . El siguiente paso es obtener una aproximación al operador $\hat{\mathbb{L}}_\gamma$ de orden $\hbar^2$. Primero, observemos que

$$\frac{\hat{\mathcal{P}}^2}{2} = \frac{p^2(\alpha)}{2} - \frac{i\hbar}{2}\left(p(\alpha)\circ\hat{D} + \hat{D}\circ p(\alpha)\right) - \frac{\hbar^2}{2}\hat{D}^2.$$

Tomando el desarrollo de Taylor del potencial V en los puntos $x(\alpha)$:

$$V(x) = V(x(\alpha)) + V'(x(\alpha))(x - x(\alpha)) + \frac{1}{2}V''(x(\alpha))(x - x(\alpha))^2 + O((x - x(\alpha))^3),$$

tenemos que la cuantización simétrica $x - x(\alpha) \mapsto -\hbar\hat{D}$ implica que

$$V(\hat{\mathcal{X}}) = V(x(\alpha)) - \frac{\hbar}{2}\Big(V'(x(\alpha)) \circ \hat{D} + \hat{D} \circ V'(x(\alpha))\Big) \\ + \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{V''(x(\alpha)) \circ \hat{D}^2 + \hat{D}^2 \circ V''(x(\alpha))}{2}\right) + O(\hbar^3). \tag{4.31}$$

De esto se sigue que $\hat{\mathbb{L}}_\gamma = \hat{L}_\gamma + O(\hbar^2)$, donde

$$\hat{L}_\gamma = \left(\frac{p^2(\alpha)}{2} + V(x(\alpha)\right) \\ - \frac{i\hbar}{2}\left(\frac{(p(\alpha) - iV'(x(\alpha)) \circ \hat{D} + \hat{D} \circ (p(\alpha) - iV'(x(\alpha)}{2}\right) \tag{4.32}$$

Ahora, tomando en cuenta que $\gamma = \gamma_{E_k}$ es una órbita periódica del sistema Hamiltoniano, tenemos $p(\alpha) = \varpi \frac{dx}{d\alpha}$ y $V'(x(\alpha)) = -\varpi \frac{dp}{d\alpha}$ y por lo tanto

$$(p(\alpha) - iV'(x(\alpha)) = \varpi \frac{d(x(\alpha) + ip(\alpha)}{d\alpha} = \varpi J(\alpha).$$

Finalmente, obtenemos

$$\hat{L}_\gamma = E_k - \frac{i\hbar}{2}\varpi \frac{d}{d\alpha}.$$

De aquí se sigue que $\varphi = 1$ es una función propia del operador $\hat{L}_\gamma$ asociado al valor propio $\lambda = E_k$.

EJEMPLO 4.2. Considere el operador de Schrodinger asociado al oscilador harmónico

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2}.$$

De acuerdo al ejemplo 4.1, la cuantización de las órbitas periódicas (4.15) y (4.16) dan

$$E_k = \hbar(k + \frac{1}{2})$$

los cuales coinciden con los valores exactos de los valores propios de $\hat{H}$ (ver, Sección 2.4). Más aún, se sigue de (4.31), (4.32) que, en el caso $V = \frac{x^2}{2}$, todos los restos de orden $\hbar^2, \hbar^3$ se anulan y por lo tanto la fórmula integral para cuasimodos (4.21) da las funciones propias exactas $\psi_k(x) = K_{\gamma_{E_k}}(1)(x)$ de $\hat{H}$. Explícitamente

$$\psi_k(x) = \frac{(2E_k)^{\frac{1}{4}}}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \int_0^{2\pi} exp\left(\frac{i}{\hbar}\left[\hbar k\alpha - \frac{E_k}{2} sen2\alpha + (2E_k)^{1/2} xcos\alpha\right]\right) \cdot$$
$$\cdot exp\left(\frac{-(x-(2E_k)^{1/2}sen\alpha)^2}{2\hbar}\right)\frac{d\alpha}{2\pi}.$$

Es interesante notar que existen varios modelos integrables conocidos cuys cuasimodos semiclásicos coinciden con los valores propios exactos, uno de estos es el problema de Kepler (ver, además, Sección 2.4).

4.3. Cuantización semiclásica de toros cuasiperiódicos

En esta sección vamos a generalizar los resultados sobre la construcción de cuasimodos de la sección anterior para el caso multidimensional. El método semiclásico tradicional para construir cuasimodos es el Método del operador canónico de Maslov [35]. Nuestro propósito es dar una exposición detallada de un enfoque alternativo desarrollado por Karasev [25], [24], basado en una representación integral sobre subvariedades lagrangianas. La idea de este enfoque fué desarrollado a partir del trabajo de Heller [21] sobre superposición de estados de Gauss. Algunos resultados en esta dirección se pueden encontrar en [29], [39].

Antes de formular los resultados principales introduciremos algunas definiciones y estableceremos la notación.

4.3.1. Objetos Principales y sus Propiedades

Jacobiano.- Consideremos el sistema Hamiltoniano $(\mathbb{R}^{2n}, \omega = dp \wedge dx, H(p,x))$. Sea $\Lambda \subset \mathbb{R}^{2n}$ una subvariedad regular compacta y lagrangiana difeomorfa a un n-toro, es decir

$$\omega|_\Lambda = 0, \tag{4.33}$$

$$\Lambda = \{p = p(\alpha), x = x(\alpha)\} \approx \mathbb{T}^n = \mathbb{S}^1 \times \ldots \times \mathbb{S}^1$$

donde $p(\alpha) = p(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ y $x(\alpha) = x(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ son funciones vectoriales suaves 2π-periódicas en cada $\alpha_j (j = 1, \ldots, n)$. La condición (4.33) es equivalente a:

$$\frac{\partial p}{\partial \alpha_i} \cdot \frac{\partial x}{\partial \alpha_j} - \frac{\partial p}{\partial \alpha_j} \cdot \frac{\partial x}{\partial \alpha_i} = 0 \ \forall i, j.$$

Ahora, fijemos una forma de volumen (medida) normalizada en Λ:

$$d\sigma = \frac{1}{(2\pi)^n} \chi(\alpha) d\alpha_1 \wedge \ldots \wedge d\alpha_n.$$

donde $\chi > 0$ es una función suave positiva en Λ y

$$\int_\Lambda d\sigma = 1.$$

Definamos la matriz $M(\alpha)$ de dimensión $n \times n$ por:

$$M(\alpha) = (M_{kj}(\alpha)) := \left(\frac{\partial (x_k(\alpha) + ip_k(\alpha))}{\partial \alpha_j} \right).$$

$M(\alpha)$ es suave, 2π-periódica en cada α_j y no singular, es decir:

$$J(\alpha) := \det M(\alpha) \neq 0, \tag{4.34}$$

donde $J(\alpha)$ es llamado Jacobiano.

Además, se define la función matricial $N = N(\alpha)$ en Λ por

$$N(\alpha) := (M^T(\alpha))^{-1} = M^{-T}(\alpha), \tag{4.35}$$

en particular $\sum_{j=1}^n N_{ij}(\alpha) \left(\frac{\partial (x_k(\alpha) + ip_k(\alpha))}{\partial \alpha_j} \right) = \delta_{ik}$.

Notece que en el caso unidimensional $n = 1, N(\alpha) = J^{-1}(\alpha)$.

La fórmula de Liouville para determinantes implica el siguiente

LEMA 4.4. *El Jacobiano $J(\alpha)$ satisface las relaciones*

$$J^{-1} \frac{\partial J}{\partial \alpha_k} = -tr \left(N^{-1} \frac{\partial N}{\partial \alpha_k} \right) \equiv tr \left(M^{-1} \frac{\partial M}{\partial \alpha_k} \right) \tag{4.36}$$

para $k = 1, \ldots, n$.

Donde, $\frac{\partial M}{\partial \alpha_k} := \left(\frac{\partial M_{ij}}{\partial \alpha_k} \right)$.

Divergencia de campos. Sea

$$v = v_j(\alpha)\frac{\partial}{\partial \alpha_j}$$

un campo vectorial en Λ en coordenadas locales. Se define un operador diferencial de primer orden ${}^{\sigma}v : C^{\infty}(\Lambda) \to C^{\infty}(\Lambda)$ adjunto con respecto a $d\sigma$ como

$${}^{\sigma}v := -v - \operatorname{div}^{\sigma}(v),$$

donde $\operatorname{div}^{\sigma}v$ denota la divergencia de v respecto a σ y está dada por

$$\operatorname{div}^{\sigma}(v) := \frac{\partial v_j(\alpha)}{\partial \alpha_j} + \frac{1}{\chi}v_j(\alpha)\frac{\partial \chi}{\partial \alpha_j},$$

la cual cumple la propiedad

$$div^{\sigma}(gv) = v(g) + g div^{\sigma}(v),$$

para todo $g \in C^{\infty}(\Lambda)$.

LEMA 4.5. *Para $\varphi_1, \varphi_2 \in C^{\infty}(\Lambda)$ arbitrarios, se cumplen*

$$\int_{\Lambda} \varphi_1(\alpha) \cdot v(\varphi_2)(\alpha) d\sigma = \int_{\Lambda} ({}^{\sigma}v(\varphi_1)(\alpha)) \cdot (\varphi_2)(\alpha) d\sigma \tag{4.37}$$

y

$$\frac{1}{2}(v -{}^{\sigma} v) = v + \frac{1}{2}div^{\sigma}(v). \tag{4.38}$$

Demostración. Se tiene la igualdad

$$(\varphi_1\chi v_i)\frac{\partial}{\partial \alpha_i}(\varphi_2) = \frac{\partial}{\partial \alpha_i}(\varphi_1\chi v_i\varphi_2) - \chi v_i\frac{\partial}{\partial \alpha_i}(\varphi_1)\cdot\varphi_2 - \chi\left(\frac{1}{\chi}v_i\frac{\partial}{\partial \alpha_i}\chi\right)\varphi_1\varphi_2 - \chi\left(\frac{\partial v_i}{\partial \alpha_i}\right)\varphi_1\varphi_2$$

la cual implica:

$$\varphi_1\chi v(\varphi_2) = \frac{\partial}{\partial \alpha_i}(\varphi_1\chi v_i\varphi_2) - \chi\left(v(\varphi_1) + \frac{1}{\chi}v(\chi)\varphi_1 + \frac{\partial v_i}{\partial \alpha_i}\varphi_1\right)\varphi_2.$$

Esta igualdad e integración por partes prueba (4.37).

La fórmula (4.38) es por definición de ${}^{\sigma}v$. □

Consideremos los siguientes campos vectoriales

$$\partial_j := N_{jk}(\alpha)\frac{\partial}{\partial \alpha_k}, \quad j = 1, ..., n. \tag{4.39}$$

Es claro que estos campos vectoriales forman una base $\{\partial_j\}_{j=1}^n$.

Observece que en el caso $n = 1$, la fórmula (4.39) toma la forma $\partial = \frac{1}{J}\frac{d}{d\alpha}$.

En el caso $\chi = 1$, se puede verificar que se tiene las representaciones

$$div^\sigma(\partial_j) = \frac{\partial N_{jk}(\alpha)}{\partial \alpha_k}, \tag{4.40}$$

$$^\sigma\hat{\partial}_j = -\partial_j - \frac{\partial N_{jk}(\alpha)}{\partial \alpha_k}. \tag{4.41}$$

COROLARIO 4.2. *Para cada $g \in C^\infty(\Lambda)$, tenemos*

$$\int_\Lambda \partial_j(g)d\sigma = -\int_\Lambda div^\sigma(\partial_j)gd\sigma, \tag{4.42}$$

donde

$$div^\sigma(\partial_j) = \frac{\partial N_{jk}(\alpha)}{\partial \alpha_k} + \frac{1}{\chi}N_{jk}(\alpha)\frac{\partial \chi}{\partial \alpha_k}. \tag{4.43}$$

Además

$$^\sigma\hat{\partial}_j = -N_{jk}(\alpha)\frac{\partial}{\partial \alpha_k} - \frac{\partial N_{jk}(\alpha)}{\partial \alpha_k} - \frac{1}{\chi}N_{jk}(\alpha)\frac{\partial \chi}{\partial \alpha_k}.$$

Sea $\{\eta_j\}_{j=1}^n$ la base dual de (4.39) en Λ. Notemos que las 1-formas η_j son cerradas y están dadas por

$$\eta_j := d(x_j + ip_j) = M_{jk}(\alpha)d\alpha_k.$$

LEMA 4.6. *Los campos vectoriales $\partial_1, ..., \partial_n$ (4.39) conmutan, es decir:*

$$[\partial_i, \partial_j] = 0 \quad \forall i, j.$$

Demostración. Usando la fórmula de Cartan para la diferencial exterior d:

$$d\eta(X, Y) = X(\eta(Y)) - Y(\eta(X)) - \eta([X, Y])$$

para campos vectoriales arbitrarios X, Y y una 1-forma η en Λ, obtenemos

$$0 = d\eta_s(\partial_i, \partial_j) = -\eta_s([\partial_i, \partial_j]).$$

□

El Campo Vectorial v_H. Para cada $H \in C^\infty(\Lambda)$, se puede asociar el campo vectorial complejo v_H en Λ definido por

$$v_H := \left(H_{p_j} - iH_{x_j}\right)\partial_j = \left(H_{p_j} - iH_{x_j}\right) N_{jk}\frac{\partial}{\partial \alpha_k}, \tag{4.44}$$

donde se denota $H_{p_j}(\alpha) := \frac{\partial H}{\partial p_j}(p(\alpha), x(\alpha))$, $H_{x_j}(\alpha) := \frac{\partial H}{\partial x_j}(p(\alpha), x(\alpha))$.

De la propiedad $div^\sigma(gv) = v(g) + g div^\sigma(v)$ para la divergencia, tenemos

$$\operatorname{div}^\sigma(v_H) = \left(H_{p_j} - iH_{x_j}\right)\operatorname{div}^\sigma(\partial_j) + \partial_j\left(H_{p_j} - iH_{x_j}\right). \tag{4.45}$$

Tenemos la siguiente observación. Sea $F = (F_{js}(\alpha))$ la matriz $n \times n$ que es 2π-periodica en α_j y definida por las relaciones:

$$[\partial_j, v_H] = F_{js}\partial_s. \tag{4.46}$$

LEMA 4.7. *Se cumplen las identidades*

$$\operatorname{tr} F = \partial_j\left(H_{p_j} - iH_{x_j}\right), \tag{4.47}$$

$$J^{-1}v_H(J) = -\operatorname{tr}(N^{-1}v_H(N)) \equiv \operatorname{tr}(M^{-1}v_H(M)), \tag{4.48}$$

$$\frac{1}{J}v_H(J) + (H_{p_k} - iH_{x_k})\operatorname{div}^\sigma \partial_k = \frac{1}{\chi}v_H(\chi). \tag{4.49}$$

Demostración. Las primeras dos igualdades (4.47) y (4.48) son consequencia directa de (4.44), (4.36) y $[\partial_i, \partial_j] = 0$. Vamos a probar (4.49). De la fórmula (4.45) tenemos

$$\partial_j\left(H_{p_j} - iH_{x_j}\right) = \operatorname{div}^\sigma(v_H) - \left(H_{p_j} - iH_{x_j}\right)\operatorname{div}^\sigma(\partial_j).$$

De esta igualdad y la fórmula (4.47), derivamos que

$$\operatorname{tr} F = \operatorname{div}^\sigma(v_H) - \left(H_{p_j} - iH_{x_j}\right)\operatorname{div}^\sigma(\partial_j). \tag{4.50}$$

Usando la indentidad

$$\mathbf{i}_{[X,Y]}\eta = L_X(\mathbf{i}_Y\eta) - \mathbf{i}_Y(L_X\eta),$$

obtenemos que

$$\mathbf{i}_{[\partial_j, v_H]}d\alpha_s = L_{\partial_j}((\mathbf{i}_{v_H}d\alpha_s) - \mathbf{i}_{v_H}(L_{\partial_j}d\alpha_s).$$

Notemos que

$$\mathbf{i}_{[\partial_j, v_H]} d\alpha_s = F_{jk} N_{ks},$$

$$L_{\partial_j}(\mathbf{i}_{v_H} d\alpha_s) = \partial_j (H_{p_k} - iH_{x_k}) \cdot N_{ks} + (H_{p_k} - iH_{x_k}) \cdot \partial_j N_{ks},$$

$$\mathbf{i}_{v_H}(L_{\partial_j} d\alpha_s) = v_H(N_{js}).$$

Entonces, se tiene

$$F_{jk} N_{ks} = \partial_j (H_{p_k} - iH_{x_k}) \cdot N_{ks} + (H_{p_k} - iH_{x_k}) \cdot \partial_j N_{ks} - v_H(N_{js}). \tag{4.51}$$

Tomando en cuenta que $\partial_j N_{ks} = N_{jm} \frac{\partial N_{ks}}{\partial \alpha_m}$ y

$$\partial_j N_{ks} \cdot M_{s's} = N_{jm} \frac{\partial N_{ks}}{\partial \alpha_m} M_{s's},$$

y multiplicando la igualdad (4.51) por $M_{s's}$ y sumando para s, obtenemos que

$$F_{js'} = \partial_j (H_{p_{s'}} - iH_{x_{s'}}) + (H_{p_k} - iH_{x_k}) N_{jm} \frac{\partial N_{ks}}{\partial \alpha_m} M_{s's} - M_{s's} v_H(N_{js}).$$

Finalmente, tomando en esta igualdad $j = s'$, sumando para j y usando las fórmulas (4.43), (4.47) y (4.48) derivamos la fórmula (4.49)

$$\frac{1}{J} v_H(J) = -(H_{p_k} - iH_{x_k}) \operatorname{div}^\sigma \partial_k + \frac{1}{\chi} v_H(\chi).$$

$\square$

Conmutación con la Función Exponencial. Ahora derivaremos una fórmula de conmutación con la función exponencial. Se define la fase S como una función suave en $\mathbb{R}^n_x \times \mathbb{R}^n_\alpha$:

$$S(x, \alpha) := \langle p(\alpha), (x - x(\alpha)) \rangle + \frac{i}{2} \|x - x(\alpha)\|^2 + \int_{\alpha_0}^{\alpha} \langle p, dx \rangle. \tag{4.52}$$

Sea $\nabla_\alpha S = \frac{\partial S}{\partial \alpha} = \left(\frac{\partial S}{\partial \alpha_1}, \ldots, \frac{\partial S}{\partial \alpha_n} \right)$ donde

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_j} = -i \sum_{k=1}^{n} (x_k - x_k(\alpha)) \frac{\partial (x_k(\alpha) + ip_k(\alpha))}{\partial \alpha_j}.$$

Notemos que

$$\nabla_\alpha S = -iM^T(\alpha)(x - x(\alpha)).$$

Lo cual implica que

$$(x - x(\alpha)) = iN(\alpha)\nabla_\alpha S,$$

donde la matriz $N(\alpha)$ esta dada en (4.35). Por otro lado, para $\nabla_x S = \frac{\partial S}{\partial x} = \left(\frac{\partial S}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial S}{\partial x_n}\right)$ se deduce

$$\nabla_x S = p(\alpha) - i(x - x(\alpha)).$$

Entonces

$$\nabla_x S = p(\alpha) - N(\alpha)\nabla_\alpha S,$$

$$x = x(\alpha) + iN(\alpha)\nabla_\alpha S.$$

De aquí, para los operadores vectoriales $\hat{p} = \hat{p}_x = -i\hbar\nabla_x, \hat{x} = x$, obtenemos las igualdades vectoriales

$$\hat{p}\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}\right) = e^{\frac{iS}{\hbar}}\left(p(\alpha) - N(\alpha)\frac{\partial S}{\partial \alpha}\right) = \left(p(\alpha) + i\hbar N(\alpha)\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)e^{\frac{iS}{\hbar}},$$

$$\hat{x}\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}\right) = e^{\frac{iS}{\hbar}}\left(x(\alpha) + iN(\alpha)\frac{\partial S}{\partial \alpha}\right) = \left(x(\alpha) + \hbar N(\alpha)\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)e^{\frac{iS}{\hbar}},$$

ó bien

$$\hat{p}_j\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}\right) = \left(p_j(\alpha) + i\hbar N_{jk}(\alpha)\frac{\partial}{\partial \alpha_k}\right)e^{\frac{iS}{\hbar}},$$

$$\hat{x}_j\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}\right) = \left(x_j(\alpha) + \hbar N_{jk}(\alpha)\frac{\partial}{\partial \alpha_k}\right)e^{\frac{iS}{\hbar}},$$

para $j = 1, \ldots, n$.

De aquí se obtiene el siguiente resultado

LEMA 4.8. *Para $\hat{p}_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}$ y $\hat{x}_j = x_j$, se cumplen las siguientes identidades*

$$\hat{p}_j\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}\right) = \left(p_j(\alpha) + i\hbar\partial_j\right)e^{\frac{iS}{\hbar}}, \tag{4.53}$$

$$\hat{x}_j\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}\right) = \left(x_j(\alpha) + \hbar\partial_j\right)e^{\frac{iS}{\hbar}}, \tag{4.54}$$

para $j = 1, \ldots, n$, donde los campos vectoriales ∂_j se definen por (4.39).

4.3.2. Operador Integral de Karasev

Usando el Jacobiano $J : \Lambda \to \mathbb{C}$ (4.34) se define la 1-forma cerrada en Λ:

$$\mu := -\left(\frac{J^2}{|J|^2}\right)^* \left(\frac{dz}{2\pi iz}\right). \tag{4.55}$$

DEFINICIÓN 4.2. *La clase de cohomología de μ es llamada clase de Maslov de la subvariedad Lagrangiana Λ.*

Para cada $i = 1, 2, ..., n$, definimos el 1-ciclo fundamental γ_i en Λ como la curva dada por

$$\gamma_j = \{\alpha_1 = 0, \dots, 0 \leq \alpha_j \leq 2\pi, \dots, \alpha_n = 0\}.$$

DEFINICIÓN 4.3. *Se define el índice de Maslov del 1-ciclo γ_i en Λ por*

$$m_j = \oint_{\gamma_j} \mu.$$

Se puede probar que $m_i \in 2\mathbb{Z}$.

Análogamente, como en el caso unidimensional, se demuestra que bajo la condición de cuantización

$$\frac{1}{2\pi h} \oint_{\gamma_i} \left(\langle p, dx\rangle - \frac{\pi h}{2}\mu\right) \in \mathbb{Z}(j = 1, \dots, n) \tag{4.56}$$

la función $J^{\frac{1}{2}}(\alpha)e^{\frac{iS(x,\alpha}{\hbar}}$ es 2π-periódica en cada α_j.

Se define el operador $K_\Lambda : C^\infty(\Lambda) \to C^\infty(\mathbb{R}^n_x)$ por

$$\begin{aligned} K(\varphi)(x) &= \frac{1}{(2\pi h)^{\frac{n}{2}}} \int_\Lambda J^{\frac{1}{2}}(\alpha)e^{\frac{iS(x,\alpha)}{\hbar}}\varphi(\alpha)d\sigma \\ &= \frac{1}{(2\pi h)^{\frac{n}{2}}} \int_0^{2\pi} \cdots \int_0^{2\pi} J^{\frac{1}{2}}(\alpha)e^{\frac{iS(x,\alpha)}{\hbar}}\varphi(\alpha)\frac{d\alpha_1 \wedge \ldots \wedge d\alpha_n}{(2\pi)^n}. \end{aligned} \tag{4.57}$$

Usando (4.37) y las fórmulas (4.40) y (4.41), deducimos la siguiente fórmula básica

$$\begin{aligned} \int_\Lambda J^{\frac{1}{2}}(\alpha)\partial_j\left(e^{\frac{iS(x,\alpha)}{\hbar}}\right)\varphi(\alpha)d\sigma &= \int_\Lambda J^{\frac{1}{2}}(\alpha)e^{\frac{iS(x,\alpha)}{\hbar}}[{}^\sigma\hat{\partial}_j - \frac{1}{2J}\partial_j J]\varphi(\alpha)d\sigma \\ &= \int_\Lambda J^{\frac{1}{2}}(\alpha)e^{\frac{iS(x,\alpha)}{\hbar}}[-\partial_j - \frac{\partial N_{jk}}{\partial\alpha_k} - \frac{1}{2J}\partial_j J]\varphi(\alpha)d\sigma. \end{aligned}$$

LEMA 4.9. *Para* $\hat{p}_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}$ *y* $\hat{x}_j = x_j$ *se tiene*

$$\hat{p}_j(\hat{K}(\varphi)) = \hat{K}(\hat{\mathcal{P}}_j(\varphi)),$$

$$\hat{x}_j(\hat{K}(\varphi)) = \hat{K}(\hat{\mathcal{X}}_j(\varphi)),$$

donde los operadores diferenciales en $C^\infty(\Lambda)$ *estan dados por*

$$\hat{\mathcal{P}}_j := p_j(\alpha) - i\hbar\hat{D}_j,$$

$$\hat{\mathcal{X}}_j := x_j(\alpha) - \hbar\hat{D}_j$$

y

$$\hat{D}_j := -{}^{\sigma}\hat{\partial}_j + \frac{1}{2J}\partial_j J = \partial_j + \frac{\partial N_{jk}}{\partial\alpha_k} + \frac{1}{2J}\partial_j J \tag{4.58}$$

para $j = 1, \ldots, n$.

Demostración. De la fórmula (4.53) tenemos:

$$\hat{p}_j K(\varphi) = \int_\Lambda J^{\frac{1}{2}}\hat{p}_j\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}\right)\varphi d\sigma = \int_\Lambda (p_j(\alpha) + i\hbar\partial_j)\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}\right)J^{\frac{1}{2}}(\alpha)\varphi(\alpha)d\sigma.$$

Sea $I_j := \int_\Lambda \partial_j\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}\right)J^{\frac{1}{2}}\varphi d\sigma$. Por cálculo directo tenemos:

$$\partial_j\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}\right)\left(J^{\frac{1}{2}}\varphi\right) = \partial_j\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}\cdot J^{\frac{1}{2}}\cdot\varphi\right) - \left(J^{\frac{1}{2}}e^{\frac{iS}{\hbar}}\right)\left[\partial_j\varphi + \frac{1}{2}\frac{\partial_j J}{J}\varphi\right]. \tag{4.59}$$

Usando (4.42) y (4.59) tenemos:

$$I_j = \int_\Lambda \partial_j\left(e^{\frac{iS}{\hbar}}J^{\frac{1}{2}}\varphi\right)d\sigma - \int_\Lambda J^{\frac{1}{2}}e^{\frac{iS}{\hbar}}\left[\partial_j\varphi + \frac{1}{2}\frac{\partial_j J}{J}\varphi\right]d\sigma = -K\left(\partial_j\varphi + div(\partial_j) + \frac{1}{2}\frac{\partial_j J}{J}\varphi\right).$$

De esto se sigue la demostración del lema, tomando en cuenta que ${}^{\sigma}(\partial_j) = \frac{\partial N_{jk}}{\partial\alpha_k}$ y que en este caso $\chi = 1$. □

***Observación* 4.2.** En el caso $n = 1$, la fórmula (4.58) coincide con (4.25).

4.3.3. Resultados Principales

Primero, usando las notaciones de la subseccion anterior, vamos a formular un resultado sobre el operador de conmutación. Este tipo de resultados se presentan en [24], [25] y [29]. Nuestro principal aporte es dar una derivación detallada de los resultados sobre el operador de conmutación que es muy difícil de encontrar en la literatura.

Dado un símbolo $H \in C^{\infty}(\mathbb{R}^{2n}_{p,x})$, por $\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x})$ entenderemos un operador pseudo-diferencial en el sentido de Weyl, es decir, cuantizacion simétrica [43]. Por ejemplo, en el caso del operador de Schrodinger, se tiene la función

$$H(p, x) = \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2} p_j^2 + V(x)$$

y el operador pseudo-diferencial que le corresponde es:

$$\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + V(x)$$

TEOREMA 4.2. *Sean $(\Lambda, d\sigma, H)$ una terna que consiste de*

- *una subvariedad regular Lagrangiana compacta $\Lambda \subset \mathbb{R}^{2n}$ difeomorfa al n-toro,*

$$\Lambda = \{p = p(\alpha), x = x(\alpha)\} \approx \mathbb{T}^n;$$

- *una forma de volumen normalizada en Λ,*

$$d\sigma = \frac{\chi}{(2\pi)^n} d\alpha_1 \wedge ... \wedge d\alpha_n;$$

- *el simbolo $H \in C^{\infty}(\mathbb{R}^{2n}_{p,x})$ de un operador $\hbar$-pseudodiferencial de Weyl $\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x})$.*

Si Λ satisface la condicion de cuantización, entonces para cada $\varphi \in C^{\infty}(\Lambda)$, se tiene que

$$\hat{H}(\hat{K}(\varphi)) = \hat{K}\left(H \mid_{\gamma} \varphi - i\hbar \hat{b}_H(\varphi) + O(\hbar^2)\right), \tag{4.60}$$

y

$$\| \hat{K}(\varphi) \|_{L^2(\mathbb{R})} = \| \varphi \|_{L^2(\Lambda)} + O(\hbar). \tag{4.61}$$

Donde $\hat{K}$ es el operador integral de Karasev (4.57), $\hat{b}_H : C^\infty(\Lambda) \to C^\infty(\Lambda)$ es el operador lineal definido por

$$\hat{b}_H := v_H + \frac{1}{2}\operatorname{div}^\sigma(v_H) + \frac{1}{2\chi}v_H(\chi) \tag{4.62}$$

y el campo vectorial v_H sobre Λ esta dado por (4.44),

$$v_H =< \frac{\partial H}{\partial p} - i\frac{\partial H}{\partial x}, M^{-T}(\alpha)\frac{\partial}{\partial \alpha} > .$$

Como una consequencia de este Teorema, se puede derivar el siguiente resultado sobre cuasimodos.

TEOREMA 4.3. *Supongamos que bajo las hipotesis del Teorema 4.2, se cumplen las condiciones*

- *el Hamiltoniano H es constante a lo largo de Λ,*

$$H\mid_\Lambda = E = \text{const}; \tag{4.63}$$

- *la medida*

$$d\sigma = \frac{1}{(2\pi)^n} d\alpha_1 \wedge ... \wedge d\alpha_n$$

  es X_H-invariante,

$$\operatorname{div}^\sigma(X_H \mid \Lambda) = 0 \tag{4.64}$$

  Entonces ($\psi = K(1)$, $\lambda = E$) es un cuasimodo de $\hat{H}$ $\operatorname{mod} O(\hbar^2)$.

***Observación* 4.3.** Por el Lema 1.1, la condición (4.63) es equivalente a la invarianza de Λ con respecto al flujo del campo vectorial Hamiltoniano $X_H = -\frac{\partial H}{\partial x}\cdot\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial p}\cdot\frac{\partial}{\partial x}$,

$$X_H(p,x) \in T_{(p,x)}\Lambda \quad \forall (p,x) \in \Lambda. \tag{4.65}$$

Por lo tanto, la afirmación del Teorema 4.3 es verdad bajo las condiciones (4.65) y (4.64).

Más aún, en el caso unidimensional $n = 1$, las condiciones (4.63) y (4.64) se cumplen automáticamente si $\Lambda = \gamma$ es una trayectoria periódica de X_H.

4.3.4. Demostracion de los Resultados Principales

Vamos a presentar la prueba del Teorema 4.2 en varios pasos.

Expancion de operadores de Weyl. Definimos los operadores vectoriales

$$\mathcal{A} := (p(\alpha), x(\alpha)) = (p_1(\alpha), ..., p_n(\alpha), x_1(\alpha), ..., x_n(\alpha)), \tag{4.66}$$

y

$$\mathcal{B} := \left(-i\hat{D}, -\hat{D}\right) = \left(-i\hat{D}_1, ..., -i\hat{D}_n, -\hat{D}_1, ..., -\hat{D}_n\right), \tag{4.67}$$

donde los operadores $\hat{D}_j$ se definen por $\hat{D}_j := \partial_j + \frac{\partial N_{jk}}{\partial \alpha_k} + \frac{1}{2J}\partial_j J$. Se tiene

$$[[\mathcal{B}, \mathcal{A}], \mathcal{A}] = 0.$$

Para el operador de Weyl $H(\mathcal{A} + \hbar\mathcal{B})$, se tiene la expansión en $\hbar$ (ver, por ejemplo, [22],[23], [33] y el APÉNDICE A)

$$\begin{aligned} H(\mathcal{A} + h\mathcal{B}) &= H(p(\alpha), x(\alpha)) \\ &+ \hbar\left(< \nabla H(\mathcal{A}), \mathcal{B} > + \frac{1}{2}\left(\mathrm{tr}(d^2 H(\mathcal{A}) \cdot [\mathcal{B}, \mathcal{A}])\right)\right) + O(\hbar^2). \end{aligned} \tag{4.68}$$

***Observación* 4.4** (Cuantización de Weyl)**.** La fórmula (4.68) se sigue de [22], [23] y del siguiente argumento. Se tienen las identidades:

$$\partial_a H(\hat{A}) \circ \hat{B}_a = \frac{1}{2}\left(\partial_a H(\hat{A}) \circ \hat{B}_a + \hat{B}_a \circ \partial_a H(\hat{A})\right) + \frac{1}{2}\left[\partial_a H(\hat{A}), \hat{B}_a\right]$$

y

$$\left[\partial_a H(\hat{A}), \hat{B}_a\right] = -\left[\hat{B}_a, \hat{A}_b\right]\partial^2_{a,b} H(\hat{A}).$$

Así obtenemos la fórmula de simetrización

$$\frac{1}{2}\left(\langle H(\hat{A}), \hat{B}\rangle + \langle \hat{B}, H(\hat{A})\rangle\right) = \langle H(\hat{A}), \hat{B}\rangle + \frac{1}{2} tr\left([\hat{B}, \hat{A}] d^2 H(\hat{A})\right).$$

En base a la fórmula (4.68), se deriva

LEMA 4.10. *Para el operador de Weyl $\hat{H}$ se tiene la siguiente $\hbar$-expansión*

$$\begin{aligned} H(\mathcal{A}+h\mathcal{B}) &= H(p(\alpha),x(\alpha)) \\ &- i\hbar\left(v_H + \frac{1}{2}\operatorname{div}^\sigma(v_H)\right) + O(\hbar^2). \end{aligned} \tag{4.69}$$

Demostración. Vamos a desarrollar el coeficiente del término $\hbar$ en la expansión (4.68). Tomando en cuenta que $\hat{D}_j := \partial_j + \frac{\partial N_{jk}}{\partial \alpha_k} + \frac{1}{2J}\partial_j J$, se tiene

$$\begin{aligned} &< \nabla H(\mathcal{A}), \mathcal{B} >= -i < (H_p - iH_x), \hat{D} > \\ &= -i\left(v_H + (H_{p_k} - iH_{x_k})\operatorname{div}^\sigma(\partial_k) + \frac{1}{2J}v_H(J)\right). \end{aligned}$$

Además,

$$\begin{aligned} [\mathcal{B},\mathcal{A}] &= \begin{bmatrix} -i[\hat{D},p(\alpha)] & -i[\hat{D},x(\alpha)] \\ -[\hat{D},p(\alpha)] & -[\hat{D},x(\alpha)] \end{bmatrix} \\ &= -\begin{bmatrix} iN(\frac{\partial p}{\partial \alpha})^T & iN(\frac{\partial x}{\partial \alpha})^T \\ N(\frac{\partial p}{\partial \alpha})^T & N(\frac{\partial x}{\partial \alpha})^T \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Por otra parte

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\left(\operatorname{tr}(d^2H(\mathcal{A})\cdot[\mathcal{B},\mathcal{A}])\right) \\ &= -\frac{1}{2}\operatorname{tr}\left(\begin{bmatrix} iN(\frac{\partial p}{\partial \alpha})^T & iN(\frac{\partial x}{\partial \alpha})^T \\ N(\frac{\partial p}{\partial \alpha})^T & N(\frac{\partial x}{\partial \alpha})^T \end{bmatrix}\begin{bmatrix} H_{pp} & H_{px} \\ H_{xp} & H_{xx} \end{bmatrix}\right) \\ &= -\frac{1}{2}\operatorname{tr}\left(N\left(i(\frac{\partial p}{\partial \alpha})^T H_{pp} + (\frac{\partial x}{\partial \alpha})^T H_{xx} + i(\frac{\partial x}{\partial \alpha})^T H_{xp} + (\frac{\partial p}{\partial \alpha})^T H_{px}\right)\right). \end{aligned}$$

De aquí, usando la igualdad

$$\frac{\partial(iH_p + H_x)}{\partial \alpha} = i(\frac{\partial p}{\partial \alpha})^T H_{pp} + (\frac{\partial x}{\partial \alpha})^T H_{xx} + i(\frac{\partial x}{\partial \alpha})^T H_{xp} + (\frac{\partial p}{\partial \alpha})^T H_{px},$$

y por la fórmula (4.45), se tiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\left(\operatorname{tr}(d^2H(\mathcal{A})\cdot[\mathcal{B},\mathcal{A}])\right) &= -\frac{1}{2}\operatorname{tr}\left(N\cdot(\frac{\partial(iH_p+H_x)}{\partial\alpha})^T\right) \\ &= -\frac{i}{2}\frac{\partial}{\partial \alpha_j}(H_{p_k} - iH_{x_k})N_{kj} \\ &= -\frac{i}{2}\left(\operatorname{div}^\sigma(v_H) - (H_{p_k} - iH_{x_k})\operatorname{div}^\sigma(\partial_k)\right). \end{aligned}$$

Finalmente, se deduce que

$$< \nabla H(\mathcal{A}), \mathcal{B} > + \frac{1}{2}\left(\mathrm{tr}(d^2 H(\mathcal{A}) \cdot [\mathcal{B}, \mathcal{A}])\right) =$$
$$= -i\left(v_H + \frac{1}{2}\,\mathrm{div}^\sigma(v_H) + \frac{1}{2}((H_{p_k} - iH_{x_k})\,\mathrm{div}^\sigma(\partial_k)) + \frac{1}{J}v_H(J)\right).$$

Pero, la suma de los dos últimos términos en la parte derecha de esta igualdad es cero, puesto que (4.49) implica que

$$(H_{p_k} - iH_{x_k})\,\mathrm{div}^\sigma(\partial_k)) + \frac{1}{J}v_H(J) = \frac{1}{\chi}v_H(\chi).$$

Entonces, esta observación junto con la fórmula (4.68), implica (4.69). □

Pruebas de los Teoremas 4.2 y 4.3

Como consecuencia del Lema 4.9 tenemos el siguiente lema (ver el Apéndice 2):

LEMA 4.11. *Bajo las hipoteses del Teorema 4.2, para todo $\varphi \in C^\infty(\Lambda)$, se cumple*

$$H(\hat{p}, \hat{x})K(\varphi) = K(H(\mathcal{A} + h\mathcal{B})(\varphi)).$$

Finalmente, el Lema 4.11 junto con el Lema 4.10 prueban el Teorema 4.2.

La demostración del Teorema 4.3 es una consecuencia directa del Teorema 4.2 y el siguiente Lema.

LEMA 4.12. *Si el campo Hamiltoniano X_H de una funcion $H \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n}_{p,x})$ es tangente a Λ, entonces*

$$X_H\,|_\Lambda = v_H = \left(H_{p_j} - iH_{x_j}\right)\partial_j. \tag{4.70}$$

Demostración. La condición (4.70) se escribe como

$$\left(H_{p_j} - iH_{x_j}\right)\partial_j = \left(-\frac{\partial H}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial p_j} + \frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial}{\partial x_j}\right)|_\Lambda$$

Evaluando ambos mienbros de la igualdad en las formas $\eta_s = d(x_s + ip_s)$ y tomando en cuenta que

$$\eta_s(\partial_j) = \delta_{sj}, \quad \eta_s(\frac{\partial}{\partial p_j}) = i\delta_{sj} \text{ y } \eta_s(\frac{\partial}{\partial x_j}) = \delta_{sj},$$

se tiene:

$$\eta_s(X_H|_\Lambda) = \eta_s\left[\left(-\frac{\partial H}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial p_j} + \frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial}{\partial x_j}\right)|_\Lambda\right] = (H_{p_s} - iH_{x_s})|_\Lambda$$

y,

$$\eta_s[(H_{p_j} - iH_{x_j})\partial_j] = (H_{p_s} - iH_{x_s})|_\Lambda$$

Así, $\eta_s(X_H|_\Lambda) = \eta_s[(H_{p_j} - iH_{x_j})\partial_j]$. Como $\{\eta_s\}$ es base de $T^{\mathbb{C}}\Lambda$, de esta igualdad se tiene $X_H|_\Lambda = v_H$ $\square$

CAPÍTULO 5

APLICACIONES

En este capítulo se aplican los resultados presentados en 4.2 y 4.3 para obtener cuasimodos para varios modelos de la mecánica cuántica. Como primera situación, donde el método semiclasico es más aplicado, presentamos el caso integrable, sin embargo nuestro interés está relacionado con casos no integrables también.

5.1. Sistemas Integrables

Sea $\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x})$ un operador de Weyl. Consideremos el espacio fase $\mathbb{R}^{2n}_{(x,p)}$ con el corchete de Poisson canónico:

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial p} \cdot \frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial g}{\partial p} \cdot \frac{\partial f}{\partial x}.$$

Supongamos que: el sistema Hamiltoniano $(\mathbb{R}^{2n}_{p,x}, \omega = dp \wedge dx, H = H(p, x))$ con H el símbolo de $\hat{H}$, es *integrable en el sentido de Liouville,* es decir, el sistema Hamiltoniano admite n-integrales primeras $F_1, \ldots, F_n \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ en involución, es decir,

$$\{H, F_i\} = 0, \tag{5.1}$$

$$\{F_i, F_j\} = 0 \tag{5.2}$$

para todo $i, j = 1, \ldots, n$, y *funcionalmente independientes* en $\mathbb{R}^{2n}$ es decir, el *conjunto regular* de $F = (F_1, \ldots, F_n) : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}^n$, definido por

$$N := \{(p, x) \in \mathbb{R}^{2n} \mid d_{(p,x)}F_1 \wedge ... \wedge d_{(p,x)}F_n \neq 0\}$$

es un abierto denso en $\mathbb{R}^{2n}$. El conjunto $\Sigma = \mathbb{R}^{2n} \setminus N$ es llamado el *conjunto singular* de F, que es la unión de subconjuntos Σ_k, definidos por

$$\Sigma_k = \{(p, x) \mid \operatorname{corank}(d_{(p,x)}F) = k\}, \quad k = 1, ..., n.$$

Sea

$$F^{-1}(c) := \{(p, x) \in \mathbb{R}^{2n} \mid F_1(p, x) = c_1, \ldots, F_n(p, x) = c_n\}.$$

el conjunto de nivel de F.

Para cada $c \in F(N)$, el conjunto de nivel regular tiene las siguientes propiedades:

- $F^{-1}(N)$ es una *subvariedad n-dimensional* en $\mathbb{R}^{2n}$ que es *invariante* con respecto al flujo de los campos Hamiltonianos $X_H, X_{F_1}, \ldots, X_{F_n}$;
- el sistema Hamiltoniano X_H admite una forma de volumen $d\sigma_c$ que es invariante y viene definida por

  $$d\sigma_c = \eta_1 \wedge ... \wedge \eta_n,$$

  donde $\eta_1, ..., \eta_n$ son 1-formas en $F^{-1}(c)$ tales que $\eta_i(X_{F_j}) = \sigma_{ij}$.

Por el Teorema de Liouville-Arnold, para cada *valor regular* $c = (c_1, ..., c_n) \in F(N) \subset \mathbb{R}^n$, una *componenta conexa* Λ_c del conjunto de nivel $F^{-1}(c)$ tiene las siguientes propiedades:

(a) $\Lambda_c \subset \mathbb{R}^{2n}$ es un subvariedad *Langrangiana*, *invariante* con respecto al flujo del campo Hamiltoniano X_H,

$$X_H(p,x) \in T_{(p,x)}\Lambda_c \quad \forall (p,x) \in \Lambda_c;$$

y el Hamiltoniano H es constante a lo largo de Λ_c

$$H\mid_{\Lambda_c} = E(c) = \text{const}\,.$$

(b) Si Λ_c es *compacto*, entonces Λ_c es difeomorfo al n-toro $\mathbb{T}^n$ y las trayectorias de $X_H\mid_{\Lambda_c}$ son *cuasi-periodicas* con frecuencias $\omega_1(c), ..., \omega_n(c)$, es decir,

$$X_H\mid_{\Lambda_c} = \omega_1(c)\frac{\partial}{\partial\alpha_1} + ... + \omega_n(c)\frac{\partial}{\partial\alpha_n},$$

donde $\alpha_i(\operatorname{mod} 2\pi)$ son las coordenadas cíclicas en el toro $\mathbb{T}^n = \mathbb{S}^1 \times ...\mathbb{S}^1$. Este toro cuasiperiódico Λ_c se llama el *toro de Liouville* del sistema Hamiltoniano integrable.

Además, alrededor de Λ_c es posible definir un conjunto especial de coordenadas llamadas coordenadas de acción-ángulo. De forma más precisa, existen: un entorno abierto U de Λ_c, un entorno abierto W de c en $\mathbb{R}^n_y$ y un difeomorfismo $g : W \times \mathbb{T}^n \to U$ tal que

$$\Lambda_c := g(\{c\} \times \mathbb{T}^n) = F^{-1}(c) \cap U \qquad \forall c \in W, \tag{5.3}$$

y g es simplectica

$$g^*(dp \wedge dx) = dy \wedge d\alpha = \sum_{i=1}^{n} dy_i \wedge d\alpha_i.$$

Entonces tenemos una familia n-parametrica de toros de Liouville Λ_c parametrizados de manera suave por $c \in W$. Cuando se cumple la propiedad (5.3) se dice que el dominio U está *trivialmente foliado por toros de Liouville sobre* W. En este caso se definen las coordenadas de acción-ángulo $I = (I_1, ..., I_n)$, $\varphi = (\varphi_1, ..., \varphi_n)$ en el dominio U como

$$I_i = y_i \circ g^{-1}, \quad \varphi_i = \alpha_i \circ g^{-1} \pmod{2\pi}. \tag{5.4}$$

Entonces estas fórmulas definen la transformación simpléctica (canónica) $(p, x) \mapsto (I, \varphi)$,

$$dp \wedge dx = dI \wedge d\varphi = \sum_{i=1}^{n} dI_i \wedge d\varphi_i. \tag{5.5}$$

Fijemos una base de 1-ciclos en Λ_c:

$$\gamma_i(c) := g\left(\{c\} \times \{\alpha_1 = 0, ..., 0 \le \alpha_i < 2\pi, ..., \alpha_n = 0\}\right).$$

Entonces las coordenadas de acción en el dominio U se definen por:

$$I_i(c) = \frac{1}{2\pi} \oint\limits_{\gamma_i(c)} < p, dx > \quad (i = 1, ..., n). \tag{5.6}$$

Entonces $I_1, .., I_n$ son integrales primeras de X_H y $I_i\mid_{\Lambda_c} = \text{const}$.

Observamos que la función inversa de (5.4) define una parametrización del toro de Liouville:

$$\Lambda_I = \{p = p(I, \varphi),\ x = x(I, \varphi)\}$$

que dependen suavemente de $I \in W$. La reparametrización del toro se define por

$$\Lambda_c = \Lambda_{I(c)}. \tag{5.7}$$

Por las condiciones (5.1), (5.2), se deduce que las integrales primeras $F_1, ..., F_n$ y el Hamiltoniano H en coordenadas (I, φ) en el dominio U sólo dependen de las coordenadas de acción,

$$F_i\mid_U = \mathcal{F}_i \circ I = \mathcal{F}_i(I_1, .., I_n), \tag{5.8}$$

$$H\mid_U = \mathcal{H} \circ I = \mathcal{H}(I_1, .., I_n). \tag{5.9}$$

Aqui $\mathcal{F}_i$ y $\mathcal{H}$ son funciones suaves definidas en un abierto de $\mathbb{R}^n$. De la propiedad (5.5) tenemos que los campos Hamiltonianos de las funciones de acción satisfacen

$$\mathbf{i}_{X_{I_j}} d\varphi_i = \delta_{ji} \tag{5.10}$$

y por tanto sus flujos son 2π-periódicos. La importancia de las fórmulas (5.8), (5.9) es el siguiente lema, cuya demostración se deduce precisamente de (5.8) y (5.9).

LEMA 5.1. *El campo Hamiltoniano X_H es combinación lineal de los campos Hamiltonianos $X_{I_1}, .., X_{I_n}$:*

$$X_H = \sum_{j=1}^{n} \varpi_j(I) X_{I_j}. \tag{5.11}$$

Como una consecuencia de este Lema tenemos que:

$$\omega_j(c) = \varpi_j(I(c)), \quad j = 1, .., n \tag{5.12}$$

son las frecuencias de movimiento cuasi-periódico a lo largo de cada toro Λ_c, que pueden ser calculados por las siguientes fórmulas:

$$\varpi_j(I) = \frac{\partial \mathcal{H}(I_1, .., I_n)}{\partial I_j}. \tag{5.13}$$

Finalmente, usando coordenadas de ángulo, en el dominio U se puede definir la n-forma

$$\Omega = \frac{1}{(2\pi)^n} d\varphi_1 \wedge ... \wedge d\varphi_n$$

que tiene como propiedad que su restricción a cada toro de Liouville define una forma de volumen en Λ_c, es decir,

$$d\sigma_c = \Omega \mid_{\Lambda_c} \tag{5.14}$$

es una n-forma no degenerada.

LEMA 5.2. *La n-forma Ω es invariante con respecto al flujo del campo Hamiltoniano X_H,*

$$L_{X_H}\Omega = 0.$$

La prueba es una consequencia de (5.10).

Ahora se puede aplicar el Teorema 4.3 para derivar el siguiente resultado sobre cuantización semiclásica de toros de Liouville [36].

PROPOSICIÓN 5.1. *Supongamos que el simbolo H de un operador de Weyl $\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x})$ define un sistema Hamiltoniano integrable en el sentido de Liouville y admite un dominio abierto $U \subset \mathbb{R}^{2n}_{p,x}$ que esta trivialmente foliado por toros de Liouville $\{\Lambda_c\}_{c \in W}$. Entonces, el operador $\hat{H}$ tiene la siguiente serie de cuasimodos (ψ_k, λ_k), $k = (k_1, ..., k_n) \in \mathbb{Z}^n$, mod $\hbar^2$:*

$$\lambda_k = \mathcal{H}(I_1, .., I_n) \mid_{I_j = \hbar k_j + \frac{\mu_j(c(k))}{4}}, \tag{5.15}$$

$$\psi_k(x) = \frac{1}{(2\pi h)^{\frac{n}{2}}} \int_{\Lambda_{c(k)}} J^{\frac{1}{2}}(\alpha) e^{\frac{iS(x,\alpha)}{h}} d\sigma_{c(k)}, \tag{5.16}$$

donde

$$m_j(c) := \oint\limits_{\gamma_j(c)} \mu \tag{5.17}$$

es el índice de Maslov del 1-ciclo (orientado) $\gamma_j(c)$ del toro Λ_c, los números cuánticos satisfacen la condición $k_j \sim \frac{1}{\hbar}$ y $c = c(k)$ es solución de las ecuaciones para $c \in W$:

$$I_j(c) = \hbar \left(k_j + \frac{m_j(c))}{4} \right), \quad j = 1, ..., n \tag{5.18}$$

para el número cuántico k dado, que satisface la condición $k_j \sim \frac{1}{\hbar}$ cuando $\hbar \to 0$.

5.2. Calculo del Indice de Maslov

En esta sección, se presentan varias maneras para calcular el índice de Maslov. Para mas detalles ver, por ejemplo, [3], [35], [29], [14].

Sea $\Lambda = \{p = p(\alpha),\ x = x(\alpha)\}$ una subvariedad Lagrangiana en el espacio fase ($M = \mathbb{R}^{2n}, \omega = dp \wedge dx$).

Asociemos a Λ el Jacobiano $J : \Lambda \to \mathbb{C}$ definido por $J(\alpha) := \det \left(\frac{\partial (x_k(\alpha) + i p_k(\alpha))}{\partial \alpha_j} \right)$. Antes de continuar, vamos a discutir el sentido geométrico de J.

Sean $T^{\mathbb{C}}\Lambda$ y $T^{\mathbb{C}}_{\Lambda}M$ las complexificaciones del haz tangente de Λ y haz tangente $T_\Lambda M$ del espacio fase restringido a Λ. Una *polarización de Kähler* [1], es el subhaz Π de $T^{\mathbb{C}}M$ definido por

$$\Pi := \text{Span}\{Z_j = \frac{\partial}{\partial x_j} + i \frac{\partial}{\partial p_j}, \quad j = 1, \ldots, n\} \tag{5.19}$$

junto con su adjunto complejo

$$\bar{\Pi} := \text{Span}\{\bar{Z}_j = \frac{\partial}{\partial x_j} - i \frac{\partial}{\partial p_j}, \quad j = 1, \ldots, n\}. \tag{5.20}$$

Las restricciones de Π y $\bar{\Pi}$ a los puntos de Λ las vamos a denotar por $\Pi_\Lambda \subset T^{\mathbb{C}}_{\Lambda}M$ y $\bar{\Pi}_\Lambda \subset T^{\mathbb{C}}_{\Lambda}M$. Notemos que:

$$\Pi \cap \bar{\Pi} = \Pi \cap T^{\mathbb{C}}\Lambda = \bar{\Pi} \cap T^{\mathbb{C}}\Lambda = \{0\}. \tag{5.21}$$

Consideremos ahora las distribuciones reales Lagrangianas en TM

$$\mathcal{P} := \mathrm{Span}\{\frac{\partial}{\partial p_1}, \ldots, \frac{\partial}{\partial p_n}\} \text{ y } \mathcal{Q} := \mathrm{Span}\{\frac{\partial}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial}{\partial x_n}\}.$$

En general,

$$T\Lambda \cap \mathcal{P} \neq \{0\}, \quad T\Lambda \cap Q \neq \{0\}, \tag{5.22}$$

pero

$$\Pi \cap \mathcal{P}^{\mathbb{C}} = \bar{\Pi} \cap \mathcal{P}^{\mathbb{C}} = \{0\} \tag{5.23}$$

y

$$\Pi \cap \mathcal{Q}^{\mathbb{C}} = \bar{\Pi} \cap \mathcal{Q}^{\mathbb{C}} = \{0\}.$$

La propiedad (5.21) implica la descomposición

$$T^{\mathbb{C}}_{\Lambda} M = T^{\mathbb{C}}\Lambda \oplus \Pi. \tag{5.24}$$

Entonces la descomposición (5.24) implica un morfimo (complejo) de haces vectoriales que se define como la proyección

$$T^{\mathbb{C}}\Lambda \to \mathcal{P}^{\mathbb{C}} \textit{ a largo de } \Pi. \tag{5.25}$$

Por la propiedad (5.23), esta proyección es un isomorfismo.

LEMA 5.3. *El Jacobiano del isomorfismo (5.25) de haces vectoriales se define por la fórmula*

$$\mathbf{j}_u = \frac{\det \omega(u \otimes Z)}{\det \omega(\frac{\partial}{\partial p} \otimes Z)}, \tag{5.26}$$

donde $u = (u_j)$ *es una base arbitraria de campos vectoriales (locales) en* Λ*,* $Z = \{Z_i = \frac{\partial}{\partial x_j} + i\frac{\partial}{\partial p_j}\}$ *es la base en* Π *y* $\frac{\partial}{\partial p} = \{\frac{\partial}{\partial p_j}\}$ *base de* $\mathcal{P}$*. Por* $\omega(u \otimes Z)$ *se denota la* $(n \times n)$*-matriz con las entradas* $\omega(u_j, Z_k)$*. Además, la aplicación* $\frac{\mathbf{j}_u}{|\mathbf{j}_u|} : \Lambda \to \mathbb{S} \subset \mathbb{C}$ *es independiente de la elección de la base* $u = (u_j)$ *y satisface*

$$\frac{J}{\mid J \mid} = (-i)^n \frac{\mathbf{j}_u}{\mid \mathbf{j}_u \mid}, \tag{5.27}$$

donde el Jacobiano J *se define por* $J(\alpha) := det\left(\frac{\partial(x_k(\alpha) + ip_k(\alpha))}{\partial \alpha_j}\right)$*.*

Demostración. Por (5.25), para la base $v = \{v_j = \frac{\partial}{\partial p_j}\}$ de $\mathcal{P}$ se tiene la descomposición

$$v_k = C_{kk'}u_{k'} + (\textit{elemento de } \Pi).$$

Tomando en cuenta que la distribución Π es Lagrangiana, de esta descomposición se deduce que la matriz $C = (C_{jk})$ de proyección (5.25) esta dada por

$$C(u) = \omega(u \otimes Z) \cdot \omega(v \otimes Z)^{-1}.$$

Observece que la matriz $\omega(v \otimes Z)^{-1}$ no es singular por la propiedad (5.23) . Entonces,

$$\mathbf{j}_u = \det C(u) = \frac{\det \omega(u \otimes Z)}{\det \omega(v \otimes Z)}.$$

Bajo un cambio de la base $u \mapsto \tilde{u}$ de $T\Lambda$:

$$\tilde{u}_k = T_{kk'}u_{k'},$$

donde $T = (T_{jj'})$ es la función matricial de transición en Λ, se tiene

$$\mathbf{j}_{\tilde{u}} = \det T \cdot \mathbf{j}_u.$$

Esto prueba la independencia de $\frac{\mathbf{j}_u}{|\mathbf{j}_u|}$ de la elección de la base. Finalmente vamos a verificar la fórmula (5.27). Usando la parametrización de Λ, fijemos la base (u_j) como

$$u_j = \frac{\partial p_s}{\partial \alpha_j}\frac{\partial}{\partial p_s} + \frac{\partial x_s}{\partial \alpha_j}\frac{\partial}{\partial x_s}.$$

Entonces,

$$\begin{aligned}\omega(u_j \otimes Z_k) &= \omega(\frac{\partial p_s}{\partial \alpha_j}\frac{\partial}{\partial p_s} + \frac{\partial x_s}{\partial \alpha_j}\frac{\partial}{\partial x_s}, \frac{\partial}{\partial x_k} + i\frac{\partial}{\partial p_k}) \\ &= \frac{\partial p_k}{\partial \alpha_j} - i\frac{\partial x_k}{\partial \alpha_j} = iM_{kj},\end{aligned}$$

donde M_{kj} son las entradas de la matriz $M = \left(\frac{\partial(x_k(\alpha)+ip_k(\alpha))}{\partial \alpha_j}\right)$ y además

$$\omega(\frac{\partial}{\partial p_j} \otimes Z_k) = \delta_{kj}.$$

$\square$

COROLARIO 5.1. *En terminos de* $\mathbf{j}_u$*, la forma* μ *en (4.55) esta dada por*

$$\mu = (-1)^n \left(\frac{\mathbf{j}_u^2}{\mid \mathbf{j}_u^2 \mid^2} \right)^* \left(\frac{dz}{2\pi i z} \right) \tag{5.28}$$

Entonces, fijando una base u, se puede usar la fórmula (5.28) para el cálculo del indice de Maslov.

***Observación* 5.1.** En general, una polarización de Kähler Π se define como una distribución de subespacios complejos en $T^{\mathbb{C}}M$ que satisface la siguiente condición: la restricción de la forma $\frac{1}{2i}\omega(\cdot, \bar{\cdot})$ es definida positiva (ver, [29]). Por ejemplo, uno puede definir la polarización de Kähler

$$\Pi = Span\{A_{jj'}\frac{\partial}{\partial p_{j'}} + \frac{\partial}{\partial q_j}, j = 1, ..., n\}$$

parametrizada por la matriz simétrica $n \times n$ $A = (A_{jj'})$ que satisface $ImA > 0$. △

Entonces, los resultados del Lema 5.3 siguen siendo ciertos para tal elección de la polarización de Käler Π. Más aún, la definición de la clase de Maslov es independiente de la matriz A [29].

Caso Integrable. Sea $(\mathbb{R}^{2n}_{p,x}, \omega = dp \wedge dx, H = H(p, x))$ un sistema Hamiltoniano integrable que posee el conjunto de integrales primeras en involución $F = (F_1, ..., F_n)$. Sea $\Lambda_c \subseteq F^{-1}(c)$ una componente conexa del conjunto de nivel. Entoces se puede fijar una base $u = (u_j)$ en Λ_c, tomando las restricciones de campos Hamiltonianos de $F_1, ..., F_n$ a Λ_c,

$$u_j = X_{F_j} \mid_{\Lambda_c}, \; j = 1, ..., n. \tag{5.29}$$

Usando que

$$X_{F_j} = - < \frac{\partial F_j}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial p} > + < \frac{\partial F_j}{\partial p}, \frac{\partial}{\partial x} >$$

calculamos

$$\omega(u \otimes Z) = -\left(\frac{\partial F_j}{\partial x_k} + i\frac{\partial F_j}{\partial p_k} \right)$$

y

$$\mathbf{j}_u = (-1)^n \det \left(\frac{\partial F_j}{\partial x_k} + i\frac{\partial F_j}{\partial p_k} \right) \mid_{\Lambda_c} . \tag{5.30}$$

Entonces, en el caso integrable se puede calcular el índice de Maslov en términos de las integrales primeras usando las fórmulas (5.28) y (5.30).

Por otro lado, es útil recordar una relación del índice de Maslov con el winding number [29], [14] . Consideremos el determinante de la matriz asociada de $F = (F_1, ..., F_n\ )$:

$$\Delta := \det\left(\frac{\partial F_j}{\partial x_k} + i\frac{\partial F_j}{\partial p_k}\right) : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{C}.$$

Tenemos que

$$\Delta(p, x) \neq 0 \Leftrightarrow (p, x) \in N,$$

luego se define la función

$$\frac{\Delta}{\mid \Delta \mid} : N \to \mathbb{S}^1 \subset \mathbb{C}. \tag{5.31}$$

Sea $\gamma = \{p = p(s), x = x(s), 0 \leq s \leq 1\} \subset N$ una curva parametrizada cerrada en el conjunto regular, $p(1) = p(0)$, $x(1) = x(0)$. Sea $\mathrm{wn}(\gamma)$ el winding number de la función (5.31) alrededor de γ. Entonces si $\gamma \subset \Lambda_c \subset N$, el índice de Maslov $m(\gamma)$ de la curva γ se calcula por la fórmula [14] :

$$m(\gamma) := \oint_\gamma \mu = 2\,\mathrm{wn}(\gamma) = \frac{1}{\pi}\left[\mathrm{Arg}\,\Delta(1) - \mathrm{Arg}\,\Delta(0)\right], \tag{5.32}$$

donde $s \mapsto \mathrm{Arg}\,\Delta(s) := \mathrm{Arg}\,\Delta(p(s), x(s))$ es continua.

Como una consecuencia: si γ es contractible en N, entonces $\mu(\gamma) = 0$.

EJEMPLO 5.1. En el caso $n = 1$, tenemos un sistema Hamiltoniano definido por un campo Hamiltoniano $X_H = \mathbb{J}\nabla H$ en el plano $\mathbb{R}^2$. Aqui $\mathbb{J} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. El conjunto regular $N = \mathbb{R}^2 \diagdown \Sigma$ es el complemento del conjunto singular

$$\Sigma = \{(p, x) \in \mathbb{R}^2 \mid X_H(p, x) = 0\}$$

que consiste de los puntos fijos (criticos) del sistema. Sea $\gamma = \{p = p(t), x = x(t)\}$ una *trayectoria periódica* de X_H, entonces

$$\Delta(t) = \left(\frac{\partial H}{\partial x} + i\frac{\partial H}{\partial p}\right)|_{p=p(t), x=x(t)}\ .$$

En este caso, se tiene [14] :

$$m(\gamma) = 2\,\mathrm{ind}\,\gamma, \tag{5.33}$$

donde $\mathrm{ind}\,\gamma$ es el índice de Poincare de la trayectoria periódica γ [16] . Recordamos que un punto crítico $(p^0, x^0) \in \Sigma$ es

- elíptico, si $\det(\mathbb{J}d^2H)\mid_{(p^0,x^0)} > 0$;
- hiperbólico, si $\det(\mathbb{J}d^2H)\mid_{(p^0,x^0)} < 0$.

Supongamos que Σ consiste solo de puntos fijos aislados elípticos e hiperbólicos. Entonces, por (5.33) se tiene

$$m(\gamma) = 2(n_+ - n_-), \tag{5.34}$$

donde n_+ y n_- son los números de los puntos fijos elipticos e hiperbolicos acotados por γ [16]. En particular, para el oscilador armónico $H = \frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2}$, la fórmula (5.34) implica que $m(\gamma) = 2$. △

5.3. Modelos con $\mathbb{S}^1$-Simetría

Consideremos el operador de Schrodinger en $\mathbb{R}^2$

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2}\Delta + U(\| x \|), \quad x \in \mathbb{R}^2, \tag{5.35}$$

donde el potencial $U(\| x \|)$ depende de la variable radial. El sistema Hamiltoniano en el espacio fase $(\mathbb{R}^4_0 = \mathbb{R}^2_p \times (\mathbb{R}^2_x \setminus \{0\}), \omega = dp_1 \wedge dx_1 + dp_2 \wedge dx_2)$ que corresponde a este operador de Schrodinger se define por el Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + U(\| x \|).$$

Este sistema Hamiltoniano es integrable y tiene las siguientes integrales primeras

$$F_1 = H, \quad F_2 = p_1x_2 - p_2x_1$$

las cuales verifican que $\{F_1, F_2\} = 0$. La segunda integral es una aplicación momento cuyo campo Hamiltoniano

$$X_{F_2} = (x_2, -x_1, p_2, -p_1)$$

es el generador infinitesimal de una acción de $\mathbb{S}^1$ (la rotacion) en el espacio fase $\mathbb{R}^4$. El conjunto singular de $F = (F_1, F_2)$ viene dado por

$$\Sigma = \{(p_1, p_2, x_1, x_2) \in \mathbb{R}_0^4 \mid U'(\| x \|) > 0,\ p_1 = -(U'(\| x \|)^{\frac{1}{2}} x_2, \quad p_2 = (U'(\| x \|)^{\frac{1}{2}} x_1\}.$$

Para calcular las coordenadas acción-ángulo vamos a usar las coordenadas polares definidas por una transformación canónica $(p_1, p_2, x_1, x_2) \mapsto (p_r, p_\phi, r, \phi)$ en $\mathbb{R}_0^4$:

$$x_1 = r \operatorname{sen} \phi, \qquad x_2 = r \cos \phi,$$

$$p_1 = p_r \operatorname{sen} \phi + \frac{\cos \phi}{r} p_\phi,\ \ p_2 = p_r \cos \phi - \frac{\operatorname{sen} \phi}{r} p_\phi.$$

Entonces $F_2 = p_\phi$ y el Hamiltoniano toma la forma

$$F_1 = H = \frac{p_r^2}{2} + U_{\text{eff}}(r, p_\phi),$$

donde

$$U_{\text{eff}}(r, p_\phi) = U(r) + \frac{p_\phi^2}{2r^2}.$$

Supongamos que un domonio abierto en $N = \mathbb{R}_0^4 \setminus \Sigma$ esta trivialmente foliado por 2-toros de Liouville, esto implica que el potencial efectivo $U_{\text{eff}}(r, c_2)$ debe cumplir lo siguiente: existe un dominio abierto W en $\mathbb{R}^2$ tal que para cada $c = (c_1, c_2) \in W$ existen dos soluciones $r = r_{1,2}(c)$ de la ecuación $U_{\text{eff}}(r, c_2) = c_1$ con la propiedad:

$$r \in [r_1(c), r_2(c)] \Longrightarrow U_{\text{eff}}(r, c_2) \leq c_1.$$

En otras palabras, el conjunto de nivel $\frac{p_r^2}{2} + U_{\text{eff}}$ es compacto. Entonces bajo esta condición los toros 2-dimensionales de Liouville se definen como

$$\begin{aligned}\Lambda_c &= \{H = c_1,\ p_\phi = c_2\ \} \\ &= \{\frac{p_r^2}{2} + U_{\text{eff}}(r, c_2) = c_1\} \times \{p_\phi = c_2\}.\end{aligned}$$

Fijemos una base de 1-ciclos $\gamma_1(c)$ y $\gamma_2(c)$ de Λ_c por

$$\gamma_1(c) = \{p_r = \pm[2(c_1 - U_{\text{eff}}(r, c_2))]^{\frac{1}{2}}, \quad r_1(c) \leq r \leq r_2(c)\} \times \{p_\phi = c_2, \phi = 0\},$$

$$\gamma_2(c) = \{p_r = 0, r = r_1(c)\} \times \{p_\phi = c_2, \ 0 \leq \phi \leq 2\pi\}.$$

Por la fórmula (5.6), se definen las variables de acción

$$I_1(c) = \frac{1}{\pi} \int_{r_1(c)}^{r_2(c)} [2(c_1 - U_{\text{eff}}(r, c_2))]^{\frac{1}{2}} dr, \tag{5.36}$$

$$I_2(c) = c_2. \tag{5.37}$$

Entonces por la Proposición 5.1, el espectro semiclásico del operador de Schrodinger (5.35) en este caso se define como

$$\lambda_k = c_1(k), \quad k = (k_1, k_2) \in \mathbb{Z}^2, \tag{5.38}$$

donde la función $c_1 = c_1(k)$ esta definida como una solucion de la ecuación

$$\frac{1}{\pi} \int_{r_1(c_1,,hk_2)}^{r_2(c_1,hk_2)} [2(c_1 - U_{\text{eff}}(r, hk_2))]^{\frac{1}{2}} dr = h\left(k_1 + \frac{m_1(c)}{2}\right), \tag{5.39}$$

para los números enteros dados $k_1 \sim \frac{1}{h}$ y $k_2 \sim \frac{1}{h}$. Aqui $m_1(c)$ es el índice de Maslov de la curva $\gamma_1(c)$ y se usó el hecho de que el indice de Maslov de la curva $\gamma_2(c)$ es cero, $m_2(c) = 0$ (ver, por ejemplo, [14]), entonces $c_2 = hk_2$.

EJEMPLO 5.2. (Modelo de tipo Coulomb). Consideremos el potencial

$$U = -\frac{1}{\| x \|} + \frac{\varepsilon}{2 \| x \|^2}, \qquad \varepsilon > 0.$$

Si $\varepsilon = 0$, obtenemos el potencial de Coulomb que corresponde al modelo de Kepler en el plano. Entonces el potencial efectivo está dado por

$$U_{\text{eff}}(r, c_2) = -\frac{1}{r} + \frac{(c_2^2 + \varepsilon)}{2r^2}.$$

Luego para todo $c = (c_1, c_2) \in W$ donde

$$W = \{c = (c_1, c_2) \mid 0 < -c_1 < \frac{1}{2(\varepsilon + c_2^2)}, \quad -\infty < c_2 < \infty\}$$

existen las coordenadas de acción-ángulo. Usando las fórmulas (5.36), (5.37), se deduce que

$$c_1 = -\frac{1}{2}\left(I_1 + (I_2^2 + \varepsilon)^{\frac{1}{2}}\right)^{-2}, \tag{5.40}$$

$$c_2 = I_2. \tag{5.41}$$

De aqui y la fórmula (5.13), derivamos que

$$\frac{\varpi_1(I)}{\varpi_2(I)} = \frac{I_2}{(\varepsilon + I_2^2)^{\frac{1}{2}}}.$$

Por (5.38) y (5.39) se tiene que el espectro semiclásico del operador de Schrodinger en este caso, esta dado por

$$\lambda_k = -\frac{1}{2}\left(I_1 + (I_2^2 + \varepsilon)^{\frac{1}{2}}\right)^{-2} |_{I_1 = h\left(k_1 + \frac{1}{2}\right),\ I_2 = hk_2}\ .$$

$\triangle$

5.4. Sistemas de tipo adiabático

En esta parte vamos a aplicar los resultados de la Sección 4.3 a algunas clases de sistemas que no son necesariamente integrables.

Sistemas de Tipo Adiabático. Supongamos que tenemos un operador de Weyl del tipo [26]:

$$\hat{H} = H\left(-ih\frac{\partial}{\partial x}, x, -i\varepsilon h\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \tag{5.42}$$

donde $h \ll 1$ y $\varepsilon \ll 1$ son parámetros pequeños y $x = (x_1, \ldots, x_r), y = (y_1, \ldots, y_s)$.

Consideremos los operadores $\hat{p} = (\hat{p}_1, \ldots, \hat{p}_r)$ y $\hat{\xi} = (\hat{\xi}_1, \ldots, \hat{\xi}_s)$ definidos como

$$\hat{p}_j = -ih\frac{\partial}{\partial x_j},\ \hat{x}_j = x_j,$$

$$\hat{\xi}_{j'} = -i\varepsilon h\frac{\partial}{\partial y_{j'}},\ \hat{y}_{j'} = y_{j'},$$

y que forman un álgebra de Heisenberg

$$[\hat{p}_j, \hat{x}_m] = -ih\delta_{jm}I, \tag{5.43}$$

$$[\hat{p}_j, \hat{\xi}_{m'}] = [\hat{p}_j, \hat{y}_{m'}] = 0, \tag{5.44}$$

$$[\hat{\xi}_{j'}, \hat{y}_{m'}] = -i\varepsilon h\delta_{j'm'}I. \tag{5.45}$$

Entonces se tiene el modelo adiabático

$$\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x}, \hat{\xi}, \hat{y}), \tag{5.46}$$

donde $\hat{p}, \hat{x}$ se llaman las variables rápidas y $\hat{\xi}, \hat{y}$ son las variables lentas. El modelo clásico que corresponde a (5.46), (5.43)-(5.45) consiste del espacio fase $\mathbb{R}^{2s}_{\xi,y} \times \mathbb{R}^{2r}_{p,x}$ equipado con el corchete de Poisson que depende de ε:

$$\{p_j, x_m\} = \delta_{jm}, \tag{5.47}$$

$$\{p_j, \xi_{j'}\} = \{p_j, y_{j'}\} = 0 \tag{5.48}$$

$$\{\xi_{j'}, y_{m'}\} = \varepsilon\delta_{j'm'} \tag{5.49}$$

y el sistema Hamiltoniano en $\mathbb{R}^{2s}_{\xi,y} \times \mathbb{R}^{2r}_{p,x}$ con respecto al corchete de Poisson (5.47)-(5.49) y Hamiltoniano $H = H(p, x, \xi, y)$:

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \tag{5.50}$$

$$\dot{\xi} = -\varepsilon\frac{\partial H}{\partial y}, \quad \dot{y} = \varepsilon\frac{\partial H}{\partial \xi}. \tag{5.51}$$

El sistema es llamado *Sistema Hamiltoniano con variables rápidas y lentas* [4],[5],[6].

Observe que la forma simpléctica que corresponde a (5.47)-(5.49) es igual a

$$\omega = dp \wedge dx + \frac{1}{\varepsilon}d\xi \wedge dy.$$

EJEMPLO 5.3. (Hamiltoniano Molecular). En la teoía de Born-Openheimer (ver, por ejemplo, [2]), el estado cuántico de una molécula que consiste de electrones ligeros y núcleo pesado se describe por el operador de Schrödinger

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2}\Delta_x - \frac{\varepsilon^2 h^2}{2}\Delta_y + U(x, y),$$

donde $\varepsilon^2 \approx \frac{m_e}{m_n} \ll 1$ con m_c y m_n la masa del electrón y el núcleo, respectivamente. Entonces este operador se presenta en la forma (5.46). $\triangle$

EJEMPLO 5.4. (Potenciales de variación rápida). Consideremos el operador de Schrödinger

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2}\Delta_x - \frac{h^2}{2}\Delta_Y + U(x, \varepsilon Y),$$

donde Y esta variando lentamente en la dirección de Y. Después del cambio $y = \varepsilon Y$, obtenemos un operador que tiene la forma de (5.46). $\triangle$

***Observación* 5.2.** Una definición más precisa del operador de Weyl $\hbar$-pseudodiferencial ε-dependiente $\hat{H}$ en (5.42) se presenta a continuación. Considere el símbolo (el Hamiltoniano) $H = H(p, x, \xi, y)$.

Bajo un reescalamiento de la variable $\xi \mapsto \Xi := \frac{\xi}{\varepsilon}$, en las nuevas variables, obtenemos el símbolo ε-dependiente

$$\mathcal{H}_\varepsilon\left(p, x, \Xi, y\right) := H\left(p, x, \varepsilon\Xi, y\right)$$

y la estructura simpléctica ε-dependiente $\omega = dp \wedge dx + d\Xi \wedge dy$. Aplicando el procedimiento de cuantización estándar

$$p_j \mapsto \hat{p}_j = i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}, \quad x_j \mapsto \hat{x}_j,$$
$$\Xi_k \mapsto \hat{\Xi}_k = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y_k}, \quad y_k \mapsto \hat{y}_k,$$

llegamos a las relaciones de conmutación canónicas y a la siguiente representación del operador $\hat{H}$ en (5.42):

$$\hat{H} = \mathcal{H}_\varepsilon(\hat{p}, \hat{x}, \hat{\Xi}, \hat{y}) \equiv H(\hat{p}, \hat{x}, \varepsilon\hat{\Xi}, \hat{y}).$$

De la definición estándar de operador de Weyl $\hbar$-pseudodiferencial deducimos la siguiente fórmula explícita para $\hat{H}$ que incluye la dependencia de ε:

$$(\hat{H}\psi)(x, y) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\frac{1}{\varepsilon^s}\int \dots \int \exp\left[\frac{i}{\hbar}p \circ (x - x') + \frac{i}{\hbar\varepsilon}\xi \circ (y - y')\right] \cdot$$
$$H\left(p, \frac{x + x'}{2}, \xi, \frac{y + y'}{2}\right)\psi(x', y')dx'dy'dpd\xi.$$

$\triangle$

Por otra parte, podemos pensar sobre el sistema Hamiltoniano (5.50), (5.51), como una perturbación del siguiente sistema en $\mathbb{R}^{2s}_{p,x}$ que depende de las variables (ξ, y) como parámetros

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \tag{5.52}$$

$$\dot{\xi} = 0, \quad \dot{y} = 0. \tag{5.53}$$

Para el caso $s = r = 1$, el problema de cálculo de cuasimodos para el operador de Weyl $\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x}, \hat{\xi}, \hat{y})$ de tipo adiabático se reduce a encontrar una familia ε-paramétrica de toros Lagrangianos en el espacio fase $\mathbb{R}^2_{\xi,y} \times \mathbb{R}^2_{p,x}$ equipado con el corchete de Poisson definido por (5.47)-(5.49) que sean casi-invariantes mod-$\hbar^N$ con respecto al flujo del sistema (5.50)-(5.51) en el siguiente sentido: para cada $f \in C^\infty(\mathbb{R}^{2s}_{\xi,y} \times \mathbb{R}^{2r}_{p,x})$ tal que $f|_{\Lambda_c(\varepsilon)} = const$ se tiene que $X_H(f) = O(h^N)$, cuando $\varepsilon \to 0$. Esto se logra bajo algunas hipótesis de simetría para el sistema (5.52), (5.53) que nos permiten aplicar resultados de formas normales presentados en [6].

Toros Lagrangianos Casi-Invariantes. Finalmente tenemos que ver que se pueden aplicar los resultados del Teorema 4.3 a la familia $\{\Lambda_c(\varepsilon)\}$ para construir cuasimodos de (5.46) cuando $h \to 0, \varepsilon \to 0$. . Este caso se llama caso no-integrable porque el sistema Hamiltoniano(clásico) (5.50), (5.51) que corresponde al operador (5.46) no es necesariamente integrable en el sentido de Liouville.

Vamos a construir una familia ε-parametrica de *toros Lagrangianos* $\Lambda_c(\varepsilon)$ *casi-invariantes* mod ε^N con respecto al flujo del sistema (5.50), (5.51), de la siguiente manera: para cada $f \in C^\infty(\mathbb{R}^{2s}_{\xi,y} \times \mathbb{R}^{2r}_{p,x})$ tal que $f\,|_{\Lambda_c(\varepsilon)}=$ const se tiene que $X_H(f) = O(\varepsilon^N)$, cuando $\varepsilon \to 0$. Entonces, para construir $\Lambda_c(\varepsilon)$ tenemos que usar los resultados sobre formas normales del sistema perturbado (5.50), (5.51), los cuales detallamos a continuación.

Formas Normales. El sistema (5.50), (5.51) es un sistema Hamiltoniano con respecto a la funcion $H = H(p, x, \xi, y)$ y el cochete de Poisson $\{,\} = \{,\}_0 + \varepsilon\{,\}_1$ sobre $\mathbb{R}^{2s} \times \mathbb{R}^{2r}$, donde

$$\{f,g\}_0 := \frac{\partial f}{\partial p}\cdot\frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial x}\cdot\frac{\partial g}{\partial p},$$
$$\{f,g\}_1 := \frac{\partial f}{\partial \xi}\cdot\frac{\partial g}{\partial y} - \frac{\partial f}{\partial y}\cdot\frac{\partial g}{\partial \xi}.$$

El tensor de Poisson correspondiente es $\Pi = \Pi_0 + \varepsilon\Pi_1$ con

$$\Pi_0 = \frac{\partial}{\partial p}\wedge\frac{\partial}{\partial x}, \quad \Pi_1 = \frac{\partial}{\partial \xi}\wedge\frac{\partial}{\partial y}.$$

El campo Hamiltoniano del sistema (5.50), (5.51) se presenta como un campo perturbado $X_H = X_H^{(0)} + \varepsilon X_H^{(1)}$, donde

$$X_H^{(0)} = -\frac{\partial H}{\partial x}\cdot\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial p}\cdot\frac{\partial}{\partial x}$$

es el campo vectorial del sistema no perturbado (5.52), (5.53) y

$$X_H^{(1)} = -\frac{\partial H}{\partial y}\cdot\frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial H}{\partial \xi}\cdot\frac{\partial}{\partial y}$$

es un campo de pertubacion.

Hipótesis de simetría. Asumimos que el sistema no perturbado (5.52), (5.53) admite un dominio abierto invariante $M \subseteq \mathbb{R}^{2s}_{p,x}\times\mathbb{R}^{2r}_{\xi,y}$ tal que el flujo $\mathrm{Fl}^t_{X_H^{(0)}}$ de $X_H^{(0)}$ es periódico sobre M con función de frecuencia $\varpi \in C^\infty(M)$, $\varpi > 0$. Esto quiere decir que $\mathrm{Fl}^{t+T(m)}_{X_H^{(0)}}(m) = \mathrm{Fl}^t_{X_H^{(0)}}(m)$ para todo $t\in\mathbb{R}$ y $m \in M$. Aquí $T = \frac{2\pi}{\varpi}$ es la función del periodo. Entonces, el flujo del campo vectorial

$$\Upsilon := \frac{1}{\varpi}X_H^{(0)} \tag{5.54}$$

es 2π periódico y por tanto Υ es un *generador infinitesimal de la* $\mathbb{S}^1$*-acción* sobre M.

Recordemos los siguientes hechos sobre la $\mathbb{S}^1$-acción, (ver [7])

- Un campo tensorial A sobre M se dice ser $\mathbb{S}^1$-invariante si $(\mathrm{Fl}^t_\Upsilon)^*A = A$, o, equivalentemente, $L_\Upsilon A = 0$;
- Para cualquier campo tensorial A (por ejemplo, un campo vectorial o formas diferenciales) sobre M denote por $< A >$ su $\mathbb{S}^1$-promedio definido por [7] :

$$< A > = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}(\mathrm{Fl}^t_\Upsilon)^* A dt.$$

Así, el promedio $< A >$ es un campo tensorial $\mathbb{S}^1$-invariante del mismo tipo que el original A.

Es claro que la función de frecuencia ϖ y el Hamiltoniano H son $\mathbb{S}^1$-invariante. Mas aún, por la relación periódo-energía para flujos Hamiltonianos periódicos, tenemos la identidad [10], [15]:

$$(d_pH + d_xH) \wedge (d_p\varpi + d_x\varpi) = 0, \tag{5.55}$$

donde d_p y d_x denota la derivada exterior parcial sobre M con respecto a las *variables rápidas* p y x, respectivamente. Además es fácil ver de la relación (5.55) que la $\mathbb{S}^1$-acción es canonica con respecto al corchete $\{,\}_0$. Por otro lado, como mostraremos abajo (ver Lema 5.4), la $\mathbb{S}^1$-acción no preserva el corchete de Poisson lento $\{,\}_1$, en general. Esto significa que el campo vectorial perturbado $X_H^{(1)}$ no necesariamente es $\mathbb{S}^1$-invariante. Este hecho plantea el problema de normalización: mediante la clase de aplicaciones cercanas a la identidad sobre M, transformar el campo vectorial Hamiltoniano X_H a una forma normal $\mathbb{S}^1$-invariante de un orden deseado en ε.

Recordemos algunos resultados conforme a [6].

LEMA 5.4. *(Aplicación momento) La $\mathbb{S}^1$-acción asociada al flujo periódico de $X_H^{(0)}$ es Hamiltoniano con respecto al corchete de Poisson rápido $\{,\}_0$,*

$$\Upsilon = X_J^{(0)}, \tag{5.56}$$

donde la aplicación momento $J \in C^\infty(M)$ viene dada por

$$J = \frac{1}{\omega}\mathbf{i}_{X_H^{(0)}} < p, dx >_{\mathbb{S}^1} . \tag{5.57}$$

Más aún,

$$< \frac{\partial J}{\partial \xi^i} >=< \frac{\partial J}{\partial y^i} >= 0 \quad para \quad i = 1, ..., s. \tag{5.58}$$

COROLARIO 5.2. *Las diferenciales dH y dJ son linealmente independientes sobre M si y sólo si*

$$< d_\xi H > + < d_y H > \neq 0. \tag{5.59}$$

Ahora, usando la aplicación momento J (5.57) y el *operador integrante*

$$\mathcal{S}(A) := \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}(t-\pi)(\mathrm{Fl}_\Upsilon^t)^* A dt,$$

definimos la 1-forma $\Theta = \Theta_i^\xi d\xi^i + \Theta_i^y dy^i$ sobre M con coeficientes

$$\Theta_i^\xi := \mathcal{S}(\frac{\partial J}{\partial \xi^i}), \quad \Theta_i^y := \mathcal{S}(\frac{\partial J}{\partial y^i}), \tag{5.60}$$

El operador integrante S tiene la siguiente propiedad $<\mathcal{S}(A)>=\mathcal{S}(<A>)=0$ [6]. Esta propiedad implica que

$$<\Theta_i^\xi>=<\Theta_i^y>=0 \tag{5.61}$$

para $i=1,...,s$. Aquí y en el resto del texto, la suma sobre índices repetidos se sobreentenderá. Introducimos los siguientes campos vectoriales sobre M:

$$\mathrm{hor}_i^\xi := \frac{\partial}{\partial \xi^i} + X^{(0)}_{\Theta_i^\xi}, \quad \mathrm{hor}_i^y := \frac{\partial}{\partial y^i} + X^{(0)}_{\Theta_i^y}. \tag{5.62}$$

LEMA 5.5. *Se verifican las siguientes identidades*

$$\mathcal{L}_{\mathrm{hor}_i^\xi} J = \mathcal{L}_{\mathrm{hor}_i^y} J = 0, \tag{5.63}$$

$$[\mathrm{hor}_i^\xi, \Upsilon] = [\mathrm{hor}_i^y, \Upsilon] = 0, \tag{5.64}$$

para todo $i=1,...,s$.

Por lo tanto, se sigue de (5.63) y (5.64) que los campos vectoriales en (5.62) son $\mathbb{S}^1$-invariantes y que la aplicación momento J es una integral primera común. El siguiente corolario del lema nos da una definición alternativa de hor_i^ξ y hor_i^y.

COROLARIO 5.3. *Los campos vectoriales en (5.62) coinciden con los $\mathbb{S}^1$-promedios de los campos vectoriales coordenados asociados a las variables lentas,*

$$\mathrm{hor}_i^\xi =< \frac{\partial}{\partial \xi^i} >, \quad \mathrm{hor}_i^y =< \frac{\partial}{\partial y^i} > \tag{5.65}$$

para todo $i=1,...,s$.

Consideremos la siguiente descomposición del haz tangente a M

$$TM = \mathbb{V} \oplus \mathbb{H}, \tag{5.66}$$

donde $\mathbb{V} = \mathrm{Span}\{\frac{\partial}{\partial p}, \frac{\partial}{\partial x}\}$ *es la distribución vertical y* $\mathbb{H}$ *la distribución horizontal sobre* M *generada por los campos vectoriales* hor_i^{ξ} *y* hor_i^{y} *en (5.65). La distribución horizontal* $\mathbb{H}$ *es llamada la conexión de Hannay-Berry [12], [6].*

Se dice que un dominio abierto N en M es *admisible* si su clausura $\bar{N}$ es compacta e invariante con respecto a la $\mathbb{S}^1$-acción. Por una transformación cercana a la identidad entenderemos una familia suave de funciones $\mathcal{T}_\varepsilon : N \to M$, $\varepsilon \in (-\varepsilon_0, \varepsilon_0)$ tal que $\mathcal{T}_0 = \mathrm{id}$ y $\mathcal{T}_\varepsilon$ es un difeomorfismo sobre su imágen.

LEMA 5.6. *El* $\mathbb{S}^1$*-promedio de la forma simpléctica original*

$$\omega = dp \wedge dx + \frac{1}{\varepsilon} d\xi \wedge dy$$

está dada por la fórmula

$$\begin{aligned} < \omega >= \omega - d\Theta &= d\left(< dpdx + \frac{1}{\varepsilon}\xi dy >_{\mathbb{S}^1} \right) \\ &= d\left(pdx + \frac{1}{\varepsilon}\xi dy - \Theta \right), \end{aligned} \tag{5.67}$$

donde la 1-forma $\Theta = \Theta_i^{\xi} d\xi^i + \Theta_i^{y} dy^i$ *es dada por (5.60). Más aún, si* $N \subset M$ *es un dominio admisible, entonces para* $\varepsilon \neq 0$ *suficientemente pequeño, el* $\mathbb{S}^1$*-promedio* $< \omega >$ *es una forma simpléctica sobre* N*, y existe una transformación cercana a la identidad* $\Phi_\varepsilon : N \to M$ *la cual es un simplectomorfismo entre* ω *y* $< \omega >$,

$$\Phi_\varepsilon^* \omega =< \omega > . \tag{5.68}$$

Denote por

$$\{f, g\}^{\mathrm{inv}} = \Pi^{\mathrm{inv}}(df, dg)$$

el corchete de Poisson no degenerado asociado a la forma simpléctica $< \omega >$ sobre N. Introducimos el siguiente campo bivectorial $\mathbb{S}^1$-invariante sobre M:

$$\Psi := \mathrm{hor}_i^{\xi} \wedge \mathrm{hor}_i^{y} \tag{5.69}$$

el cual es sólo el levantamiento horizontal del tensor de Poisson sobre $\mathbb{R}^{2k}_{\xi,y}$ con respecto a la descomposición (5.66).

LEMA 5.7. *El corchete de Poisson* $\{,\}^{\mathrm{inv}}$ *es* $\mathbb{S}^1$*-invariante y tiene la expresión*

$$\{F,G\}^{\mathrm{inv}} = \{F,G\}_0 + \varepsilon\Psi(dF,dG) + O(\varepsilon^2)$$

y

$$\Pi^{\mathrm{inv}} = \Pi_0 + \varepsilon\Psi + O(\varepsilon^2).$$

Más aún , la $\mathbb{S}^1$*-acción es Hamiltoniana relativo a* $\{,\}^{\mathrm{inv}}$ *con la misma aplicación momento* J *,*

$$\Upsilon = X_J^{(0)} = \mathbf{i}_{dJ}\Pi^{\mathrm{inv}}. \tag{5.70}$$

Finalmente, llegamos al siguiente resultado sobre las formas normales.

TEOREMA 5.1. *[6] Para* ε *suficientemente pequeño, existe una transformación cercana a la identidad* $\mathcal{T}_\varepsilon : N \to M$ *con las siguientes propiedades:*

(a) $\mathcal{T}_\varepsilon$ *es un isomorfismo de Poisson entre los corchetes de Poisson* $\{,\}^{\mathrm{inv}}$ *y* $\{,\}$*;*

(b) el Hamiltoniano transformado es de la forma

$$\tilde{H} = H \circ \mathcal{T}_\varepsilon = H + \varepsilon < K > +O(\varepsilon^2),$$

donde K *viene dado por*

$$K := \frac{1}{2}\left(\mathcal{S}(\frac{\partial J}{\partial \xi^i})\frac{\partial H}{\partial y^i} - \mathcal{S}(\frac{\partial J}{\partial y^i})\frac{\partial H}{\partial \xi^i}\right).$$

Ahora, considere el sistema Hamiltoniano $\mathbb{S}^1$-invariante

$$(N, \{,\}^{\mathrm{inv}}, \tilde{H}^{(1)} = H + \varepsilon < K >). \tag{5.71}$$

Entonces, por (5.70) tenemos

$$\{\tilde{H}^{(1)}, J\}^{\mathrm{inv}} = 0. \tag{5.72}$$

En este caso,

$$\mathcal{T}_\varepsilon^* X_H = \mathbf{i}_{d\tilde{H}} \Pi^{\text{inv}} = \mathbf{i}_{d\tilde{H}^{(1)}} \Pi^{\text{inv}} + O(\varepsilon^2), \tag{5.73}$$

$$\tilde{H} = \tilde{H}^{(1)} + O(\varepsilon^2). \tag{5.74}$$

Caso $r = k = 1$. Supongamos que H and J son independientes sobre $N \subset R^4$ (condición 5.59). Entonces, por (5.72) el sistema Hamiltoniano con 2-grados de libertad

$$(N, < \omega >= d\left(pdx + \frac{1}{\varepsilon}\xi dy - \Theta\right),\ \tilde{H}^{(1)} = H + \varepsilon < K >,\ J) \tag{5.75}$$

es *integrable en el sentido de Liouville* . Si los conjuntos de nivel

$$\tilde{\Lambda}_c(\varepsilon) := \{(p, x, \xi, y) \in N \mid \tilde{H}^{(1)} = H + \varepsilon < K >= c_1,\ J = c_2\} \tag{5.76}$$

son compactos y conexos , entonces obtenemos una familia de toros de Liouville $\{\tilde{\Lambda}_c(\varepsilon)\}$. Supongamos que esta familia es una foliación trivial sobre N.

LEMA 5.8. *Para cada toro $\tilde{\Lambda}_c(\varepsilon)$, se verifican las siguientes propiedades:*

- *$\tilde{\Lambda}_c(\varepsilon)$ es invariante módulo ε^2 con respecto al flujo del campo vectorial Hamiltoniano $\mathcal{T}_\varepsilon^* X_H$;*

$$L_{\mathcal{T}_\varepsilon^* X_H} \tilde{H}^{(1)} = O(\varepsilon^2) \quad y\ L_{\mathcal{T}_\varepsilon^* X_H} J = O(\varepsilon^2) \tag{5.77}$$

- *para el Hamiltoniano $\tilde{H} = H \circ \mathcal{T}_\varepsilon$, tenemos*

$$\tilde{H} \mid_{\tilde{\Lambda}_\varepsilon(c)} = c_1 + O(\varepsilon^2); \tag{5.78}$$

- *existe una 2 form $\tilde{\Omega}$ sobre N tal que*

$$\tilde{\Omega} \mid_{\tilde{\Lambda}_\varepsilon(c)} = d\tilde{\sigma}_c = \frac{1}{2\pi} d\alpha_1 \wedge d\alpha_2$$

es una forma de área sobre $\tilde{\Lambda}_\varepsilon(c)$, donde $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2) \mod 2\pi$, y

$$L_{\mathcal{T}_\varepsilon^* X_H} \tilde{\Omega} = O(\varepsilon^2).$$

Demostración. La prueba del lema se sigue de (5.73), (5.74), (5.72)-(5.76). □

Cuantización Semiclásica de 2-toros $\Lambda_\varepsilon(c)$. Como una consecuencia del Lema 5.8, derivamos la siguiente información sobre el sistema Hamiltoniano original (5.50), (5.51) . El campo vectorial Hamiltoniano X_H tiene la representación

$$X_H = X_{F_1} + O(\varepsilon^2), \tag{5.79}$$

donde

$$X_{F_1} = \mathbf{i}_{dF_1}\Pi \tag{5.80}$$

y

$$\{F_1, F_2\} = 0. \tag{5.81}$$

Aquí

$$F_1 := \tilde{H}_1 \circ \mathcal{T}_\varepsilon^{-1} = (H + \varepsilon < K >) \circ \mathcal{T}_\varepsilon^{-1}, \tag{5.82}$$

$$F_2 := J \circ \mathcal{T}_\varepsilon^{-1}. \tag{5.83}$$

LEMA 5.9. *El sistema Hamiltoniano original X_H sobre*

$$\left(\mathbb{R}^2_{\xi,y} \times \mathbb{R}^2_{p,x},\ \omega = dp \wedge dx + \frac{1}{\varepsilon} d\xi \wedge dy\right)$$

es aproximada $\operatorname{mod} \varepsilon^2$ *por el sistema Hamiltoniano integrable*

$$(\mathbb{R}^2_{\xi,y} \times \mathbb{R}^2_{p,x},\ \omega, F_1),$$

donde el dominio abierto invariante $M \subset \mathbb{R}^4$ está trivialmente foliado por los toros de Liouville

$$\Lambda_\varepsilon(c) = \mathcal{T}_\varepsilon^{-1}(\tilde{\Lambda}_\varepsilon(c)) = \{(p, x, \xi, y) \in M \mid F_1 = c_1,\ F_2 = c_2\}. \tag{5.84}$$

Más aún, la 2-forma $\Omega = (\mathcal{T}_\varepsilon)_* \tilde{\Omega}$ satisface que

$$\Omega \mid_{\Lambda_c(\varepsilon)} = d\sigma_c \tag{5.85}$$

es una forma de área sobre $\Lambda_c(\varepsilon)$ y $L_{X_H}\Omega = O(\varepsilon^2)$.

Finalmente, aplicando el Teorema 4.3, llegamos al siguiente hecho: la regla de cuantización para la familia de toros Lagrangianos $\{\Lambda_c(\varepsilon)\}$ en (5.84) da una serie de cuasimodos $\mathrm{mod}\, O(\varepsilon^2 + h^2)$ del operador adiabático $\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x}, \hat{\xi}, \hat{y})$.

Con mayor precisión, este procedimiento es descrito como sigue. Primero, echemos un vistazo a la regla de cuantización. Tenemos dos maneras como calcular las variables de acción.

(i) Usando los toros de Liouville del sistema Hamiltoniano integrable (5.71), definimos la siguiente familia 2-paramétrica de toros Lagrangianos

$$\tilde{\Lambda}_c(\varepsilon) := \{\tilde{H}^{(1)} = H + \varepsilon < K >= c_1, J = c_2\}$$

en el espacio fase $N \subset \mathbb{R}^4$ con forma simpléctica deformada $< \omega >= d\left(pdx + \frac{1}{\varepsilon}\xi dy - \Theta\right)$.

(ii) Usando las funciones F_1, F_2 en (5.82), (5.83) sobre el espacio fase original, definimos el toro Lagrangiano

$$\Lambda_c(\varepsilon) := \{F_1 = H + O(\varepsilon^2) = c_1,\ F_2 = J + \varepsilon J^{(1)} + O(\varepsilon^2) = c_2\} \tag{5.86}$$

en el espacio fase $M \subset \mathbb{R}^4$ con la forma simpléctica original $\omega = d\left(pdx + \frac{1}{\varepsilon}\xi dy\right)$. Aquí $J^{(1)}$ es la correción del invariante adiabático J de primer orden [6].

De acuerdo a la construcción de arriba, estas familias estan relacionadas por el simplectomorfismo $\mathcal{T}_\varepsilon : N \to M$, $< \omega >= \mathcal{T}_\varepsilon^* \omega$:

$$\mathcal{T}_\varepsilon(\ \Lambda_c(\varepsilon)) =\ \tilde{\Lambda}_c(\varepsilon).$$

Fije una base de 1-ciclos $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_1(c, \varepsilon)$ y $\tilde{\gamma}_2 = \tilde{\gamma}_2(c)$ sobre el toro $\tilde{\Lambda}_c(\varepsilon)$ como sigue: El 1-ciclo $\tilde{\gamma}_2$ se elige como una órbita de la $\mathbb{S}^1$-acción que pasa por un punto en $\tilde{\Lambda}_c(\varepsilon)$. Teniendo en cuenta que el generador infinitesimal Υ (5.70) es un campo vectorial Hamiltoniano de J relativa a la estructura simpléctica $< \omega >$, concluimos que la acción a lo largo de $\tilde{\gamma}_2$ es solo J,

$$\frac{1}{2\pi}\oint_{\tilde{\gamma}_2}(pdx + \frac{1}{\varepsilon}\xi dy - \Theta) = \frac{1}{2\pi}\oint_{\tilde{\gamma}_2} pdx = J.$$

La correspondiente variable de ángulo φ es sólo el tiempo a lo largo del campo vectorial Hamiltoniano Υ.

Puesto que la función $\tilde{H}^{(1)}$ es $\mathbb{S}^1$-invariante, en el sistema de coordenada (J, φ, ξ, y) tiene la forma $\tilde{H}^{(1)} = \tilde{H}^{(1)}(J, \xi, y)$. La suposición de compacidad (ii) significa que, para un valor fijo de J, el conjunto de nivel de

$$\tilde{H}_J^{(1)}(\xi, y) = \tilde{H}^{(1)}(J, \xi, y) = H(J, \xi, y) + \varepsilon < K > (J, \xi, y) \tag{5.87}$$

es una curva cerrada en el (ξ, y)-plano. Por lo tanto, el segundo 1-ciclo $\tilde{\gamma}_1$ sobre $\tilde{\Lambda}_c(\varepsilon)$, lo definimos como

$$\tilde{\gamma}_1 = \{\tilde{H}_{c_2}^{(1)}(\xi, y) = c_1\}.$$

Ahora, llevamos los 1-ciclos sobre los toros $\Lambda_c(\varepsilon)$ poniendo

$$\gamma_1 := \mathcal{T}_\varepsilon^{-1}(\tilde{\gamma}_1) = \{H_{c_2}(\xi, y) + O(\varepsilon^2) = c_1\}, \tag{5.88}$$

$$\gamma_2 := \mathcal{T}_\varepsilon^{-1}(\tilde{\gamma}_2). \tag{5.89}$$

Para entender cómo la regla de cuantización depende del parámetro adiabático ε, necesitamos reescribir esto en términos de la primitiva de la forma simpléctica. Tomando en cuenta que la transformación $\mathcal{T}_\varepsilon$ es un simplectomorfismo, concluimos que la regla de cuantización sobre el toro $\Lambda_c(\varepsilon)$ se escribe en la forma

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{\{\tilde{H}^{(1)}(c_2, \xi, y) = c_1\}} (\xi dy - \varepsilon \Theta) = \varepsilon h(k_1 + \frac{m_1}{4}), \tag{5.90}$$

$$J = c_2 = h(k_2 + \frac{m_2}{4}), \tag{5.91}$$

donde m_i es el índice de Maslov del 1-ciclo γ_i, $i = 1, 2$, los números cuánticos $k_1, k_2 \in \mathbb{Z}$ satisfacen $k_1 \sim \frac{1}{\varepsilon h}$ y $k_2 \sim \frac{1}{h}$ cuando $\varepsilon \to 0$, $h \to 0$. Sea $c_1 = c_1(k_1, k_2, \varepsilon)$ una solución de (5.90) para $c_2 = h(k_2 + \frac{m_2}{4})$. Entonces, un valor propio aproximado $\mathrm{mod}\, O(\varepsilon^2 + h^2)$ del operador adiabático $\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x}, \hat{\xi}, \hat{y})$ es

$$\lambda_{k_1, k_2}(\varepsilon) = c_1(k_1, k_2, \varepsilon).$$

El correspondiente cuasimodo viene dado por la fórmula integral (5.16) sobre $(\Lambda_c(\varepsilon), d\sigma_c = \Omega\mid_{\Lambda_c(\varepsilon)})$, donde la fase ε-dependiente está dada por

$$S(x,y,\alpha,\varepsilon) := \int_{\alpha_0}^{\alpha} (< p, dx > + \frac{1}{\varepsilon} < \xi, dy >) + < p_\varepsilon(\alpha), (x - x_\varepsilon(\alpha) > + \frac{1}{\varepsilon} < \xi_\varepsilon(\alpha), (y - y_\varepsilon(\alpha) >$$
$$+ \frac{i}{2}\left(\| x - x_\varepsilon(\alpha) \|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \| y - y_\varepsilon(\alpha) \|^2 \right). \tag{5.92}$$

Aquí,

$$\Lambda_c(\varepsilon) = \{p = p(\alpha,\varepsilon), x = x(\alpha,\varepsilon), \xi = \xi(\alpha,\varepsilon), y = y(\alpha,\varepsilon)\}$$

es una representación paramétrica del 2-toro Lagrangiano con coordenadas cíclicas $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$ mod 2π. El correspondiente Jacobiano ε-dependiente es

$$J_\varepsilon(\alpha) = det M(\alpha,\varepsilon),$$

$$M(\alpha,\varepsilon) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial\alpha_1}(ip(\alpha,\varepsilon) + x(\alpha,\varepsilon)) & \frac{\partial}{\partial\alpha_2}(ip(\alpha,\varepsilon) + x(\alpha,\varepsilon)) \\ \frac{\partial}{\partial\alpha_1}(i\xi(\alpha,\varepsilon) + y(\alpha,\varepsilon)) & \frac{\partial}{\partial\alpha_2}(i\xi(\alpha,\varepsilon) + y(\alpha,\varepsilon)) \end{bmatrix}. \tag{5.93}$$

Entonces, $\det J_\varepsilon(\alpha) \neq 0$ para $\varepsilon \geq 0$ suficientemente pequeño. Así, el operador integral ε-dependiente en (5.16), toma la forma:

$$K_{\Lambda_c(\varepsilon)}(\varphi)(x,y) = \frac{c(\varepsilon)}{2\pi\hbar} \int_{\Lambda_c(\varepsilon)} (J_\varepsilon(\alpha))^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}S(x,y,\alpha,\varepsilon)} \varphi(\alpha) d\sigma_c(\varepsilon),$$

donde la constante de normalización $c(\varepsilon)$ se escoge de tal manera que se satisfaga la condición (4.61). Para el operador $\hbar$-pseudodiferencial ε-dependiente $\hat{H} = H\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, x, -i\hbar\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}, y\right)$, la fórmula de conmutación (4.60) se verifica, donde el campo vectorial v_H sobre $\Lambda_c(\varepsilon)$ esta definida por la fórmula modificada (4.62):

$$v_H := \left\langle \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial p} - i\frac{\partial H}{\partial x} \\ \varepsilon\left(\frac{\partial H}{\partial \xi} - i\frac{\partial H}{\partial y}\right) \end{pmatrix}, M^{-T}(\alpha,\varepsilon)\frac{\partial}{\partial\alpha} \right\rangle. \tag{5.94}$$

Los resultados anteriores se siguen del argumento de reescalamiento presentado en la Observación 5.2.

Más aún, observe que la fórmula (5.94) para el campo vectorial ε-dependiente v_H puede ser calculado de la siguiente manera. Fije una polarización de Kähler Π asociada a la matriz A de tamaño 2×2. Considere la proyección $pr_\Pi : \mathbb{C}^4 \to T^{\mathbb{C}}\Lambda_c(\varepsilon)$ a lo largo de Π de acuerdo a la descomposición (5.24). Entonces, tenemos

$$v_H = pr_\Pi(X_H).$$

La fórmula (5.94) es obtenida con la siguiente elección de la polarización de Kähler

$$A = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & \frac{i}{\varepsilon} \end{pmatrix},$$

que corresponde a la fase ε-dependiente S en (5.92)

Finalmente, probamos que el Lema 0.1 y el Teorema 0.1 se siguen de los argumentos expuestos arriba. La existencia de un sistema Hamiltoniano integrable $(\mathbb{R}^4, \omega, H^{new}, F^{new})$ en el Lema 0.1 se sigue del Lema 5.9, donde $H^{new} = \tilde{H}^{(1)} \circ \mathcal{T}_\varepsilon^{-1}$ y $F^{new} = J \circ \mathcal{T}_\varepsilon^{-1}$. El correspondiente toro de Liouville $\Lambda_c(\varepsilon)$ con forma de volumen $d\sigma_c$ son definidos por (5.84) y (5.85), respectivamente. Se sigue que $H|_{\Lambda_c(\varepsilon)} = c_1 + O(\varepsilon^2)$ y $div^{\sigma_c(\epsilon)}(v_H) = O(\varepsilon^2)$. Esto junto con el Teorema 4.2 prueba el Teorema 0.1.

APÉNDICE A

Expansión de Funciones de Operadores

Siguiendo [33], obtenemos una derivación de la fórmula (4.68)(ver, también, [22],[23]).

Sea $f(z)$ una función analítica. Entonces la fución $f(A)$ de un operador A se define por la fórmula

$$f(A) = (2\pi i)^{-1} \int_c dz f(z) R(z, A),$$

donde el contorno c se toma alrededor de las singularidades de la resolvente $R(z, A) = (z - A)^{-1}$.

En el resto de la sección usaremos las siguientes abreviaciónes

$$(2\pi i)^{-1} \int_{c_1} \cdots (2\pi i) \int_{c_n} \cdots \equiv \int',$$

$$R(z, A + B) \equiv R(z) = (z - A - B)^{-1},$$

y

$$R(z, A) \equiv R_0(z) = (z - A)^{-1}.$$

Asumiremos además que el desarrollo de Taylor de $f(z)$ existe.

Tenemos la siguiente identidad:

$$\begin{aligned} R(z) &= (z - A - B)^{-1} \\ &= (z - A)^{-1}(z - A)(z - A - B)^{-1} \\ &= (z - A)^{-1}[(z - A - B) + B](z - A - B)^{-1} \\ &= (z - A)^{-1} + (z - A)^{-1}B(z - A - B)^{-1} \\ &= R_0(z) + R_0(z)BR(z) \end{aligned}$$

Con esta identidad y la definición de la función de un operador obtenemos:

$$\begin{aligned} f(A+B) &= \int' dzf(z)R(z) \\ &= \int' dzf(z)(R_0(z) + R(z)BR_0(z)) \\ &= \int' dzf(z)R_0(z) + \int' dzf(z)R(z)BR_0(z) \\ &= f(A) + \int' dzdz_1dz_2f(z)(z - z_1)^{-1}(z - z_2)^{-1}R(z_1)BR_0(z_2) \end{aligned}$$

Usando

$$(z - z_1)^{-1}(z - z_2)^{-1} = \left((z - z_1)^{-1} - (z - z_2)^{-1}\right)(z_1 - z_2)^{-1}$$

e integrando sobre z,

$$f(A+B) = f(A) + \int' dz_1dz_2\frac{f(z_1) - f(z_2)}{z_1 - z_2}R(z_1)BR_0(z_2)$$

Finalmente, haciendo el desarrollo de Taylor de $f(z_1)$ en z_2, i.e.

$$f(z_1) = f(z_2) + f^{'}(z_2)(z_1 - z_2) + \frac{1}{2!}f^{''}(z_2)(z_1 - z_2)^2 + \cdots$$

obtenemos

$$f(A+B) = f(A) + \int' dz_1dz_2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(z_1 - z_2)^{n-1}}{n!}f^{(n)}(z_2)R(z_1)BR_0(z_2)$$

Debido a la posición de $R(z_1)$ y $R(z_0)$ con respecto a B, integrando con respecto a z_1 obtenemos un factor $(A + B)$ a la izquierda de B por cada potencia de z_1; e integrando con respecto a z_2 obtenemos un factor A a la derecha de B por cada potencia de z_2, adicionalmente la $f^{(n)}(z_2)$ da un factor $f^{(n)}(A)$ a la derecha de B.

Esto es, en la fórmula,

$$f(A+B) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} C^n f^{(n)}(A). \tag{A.1}$$

los coeficientes C^n obedecen la relación de recursión:

$$C^n = (A+B)C^{n-1} - C^{n-1}A \quad o \quad C^n = [A, C^{n-1}] + BC^{n-1}. \tag{A.2}$$

De donde obtenes los valores particulares:

$$C^0 = 1, \quad C^1 = B, \quad C^2 = [A, B] + B^2. \tag{A.3}$$

$$C^3 = [A, [A, B]] + [A, B^2] + B[A, B] + B^3. \tag{A.4}$$

Suponiendo que $[A, [A, B]] = 0$ y usando las fórmulas (A.3) y (A.4) y tomando $A = \mathcal{A}$ y $B = \hbar\mathcal{B}$ obtenemos:

$$C^0 = 1, \quad C^1 = \hbar\mathcal{B}, \quad C^2 = \hbar[\mathcal{A}, \mathcal{B}] + O(\hbar^2), \quad C^3 = \hbar[\mathcal{A}, \mathcal{B}] + O(\hbar^2), \quad C^n = O(\hbar^2), n \geq 0.$$

Estas igualdades implican:

$$f(\mathcal{A} + \hbar\mathcal{B}) = f(\mathcal{A}) + \hbar\left(\mathcal{B}f'(\mathcal{A})\right) + \frac{\hbar}{2}[\mathcal{A}, \mathcal{B}]f''(\mathcal{A}) + O(\hbar^2) \tag{A.5}$$

Por los mismos argumentos se verifica (4.68) cuando $\mathcal{A} = (\mathcal{A}_1, ..., \mathcal{A}_n)$.

APÉNDICE B

Prueba del Lema 4.11

En el caso analítico la prueba está basada en el Lema 4.9 y el siguiente resultado algebraico.

Sean $\mathcal{H}_1$ y $\mathcal{H}_2$ espacios de Hilbert y

$$\hat{\mathcal{F}}_1, ..., \hat{\mathcal{F}}_n : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_1,$$

$$\hat{\mathcal{G}}_1, ..., \hat{\mathcal{G}}_n : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_2,$$

$$\hat{\mathcal{K}} : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2,$$

algunos operadores lineales que satisfacen las relaciones:

$$\hat{\mathcal{F}}_j \circ \hat{\mathcal{K}} = \hat{\mathcal{K}} \circ \hat{\mathcal{G}}_j \quad para \quad j = 1, ..., n \tag{B.1}$$

Sea

$$H(\xi_1, ..., \xi_n) = \sum_{|s|=0}^{N} c_s \xi_1^{s_1} \cdot ... \cdot \xi_n^{s_n},$$

una función polinomial (símbolo).

Consideremos el operador de Weyl:

$$H(\hat{\mathcal{F}}_1, ..., \hat{\mathcal{F}}_n) = c_0 I + \sum_{|s|>0} c_s \frac{s_1! \cdots s_{2n}!}{|s|!} \cdot \sum_{\sigma \in S_n} \hat{\mathcal{F}}^{s_1}_{\sigma(1)} \cdot ... \cdot \hat{\mathcal{F}}^{s_n}_{\sigma(n)}.$$

PROPOSICIÓN B.1. *Se verifica la siguiente igualdad:*

$$H(\hat{\mathcal{F}}_1, ..., \hat{\mathcal{F}}_n) \circ \hat{\mathcal{K}} = \hat{\mathcal{K}} \circ H(\hat{\mathcal{G}}_1, ..., \hat{\mathcal{G}}_n). \tag{B.2}$$

Demostración. Primero observemos que si la identidad (B.2) se verifica para algunos polinomios H_1 y H_2, entonces también es cierta para $H = H_1 + H_2$.

Por lo tanto sólo debemos probar (B.2) para $H = \xi_1^{k_1} \cdot ... \cdot \xi_n^{k_n}$.

Para verificar (B.2), usando la propiedad (B.1) deducimos

$$\hat{\mathcal{F}}_j^{k_j} \circ \hat{\mathcal{K}} = \hat{\mathcal{F}}_j^{k_j-1} \circ (\hat{\mathcal{F}}_j \circ \hat{\mathcal{K}}) = \hat{\mathcal{F}}_j^{k_j-1} \circ (\hat{\mathcal{K}} \circ \hat{\mathcal{G}}_j) = (\hat{\mathcal{F}}_j^{k_j-1} \circ \hat{\mathcal{K}}) \circ \hat{\mathcal{G}}_j = ... = \hat{\mathcal{K}} \circ \hat{\mathcal{G}}_j^{k_j}$$

y por tanto

$$\hat{\mathcal{F}}_1^{k_1} \circ ... \circ \hat{\mathcal{F}}_n^{k_n} \circ \hat{\mathcal{K}} = \hat{\mathcal{K}} \circ \hat{\mathcal{G}}_1^{k_1} \circ ... \circ \hat{\mathcal{G}}_n^{k_n}.$$

□

De la misma manera, podemos probar (B.2) para el caso cuando H es una función analítica.

Bibliografía

[1] R. Abraham, J. Marsden: Foundations of Mechanics, 2nd edition. Addison-Wesley, (1987).

[2] R.F.V. Anderson. The Weyl Functional Calculus. J.of Functional Analysis, vol.4, (1969), 240-267

[3] V. I. Arnold, On the characteristic class occurring in the quantization conditions, Functional Anal. Appl. vol.1, no.1 (1967), 1-13.

[4] V. I. Arnold. Mathematical methods of classical mechanics, Springer-Verlag, 2nd edition, 1989.

[5] V. I. Arnold, V. V. Kozlov, and A. I. Neishtadt, Mathematical Aspects of Classical and Celestial Mechanics (Encyclopedia of Math. Sci., vol. 3, Dynamical Systems III, Springer- Verlag, Berlin-New York, (1988).

[6] M. Avendaño-Camacho, J. A. Vallejo, and Yu. Vorobiev. Higher Order Corrections to Adiabatic Invariants of Generalized Slow-Fast Hamiltonian Systems. J. Math. Phys. 54, 1-15 (2013).

[7] M. Avendaño-Camacho, Yu. Vorobiev. Homological equations for tensor fields and periodic averaging. Russian. J. Math. Phys. 18 no. 3, (2011), 243-257.

[8] V. M. Babich. Eigenfunctions concentrated near closed geodesics. Sem. Math. V. A. Steklov Math. Inst. Leningrad, vol. 9, Plenum Press, New York, 1968.

[9] V. M. Babich and V. S. Buldyrev, Asymptotic Methods in Problems of Diffraction of Short Waves, Nauka, Moscow, 1972.

[10] L. Bates and J. Sniatycki, On the period-energy relation. Proc. of Amer. Math. vol. 114, no. 3, 1992

[11] V. V. Belov and S. Yu. Dubrokhotov. Canonical Maslov operator on isotropic manifolds with complex germ and its applications to spectral problems. Dokl. Akad. Nauk SSSR, 298, No. 5, 1037-1042 (1988).

[12] M. V. Berry and J. H. Hannay, Classical Nonadiabatic Angle, J. Phys. A 21,(1988), 325-331.

[13] K.Efstathiou. Metamorphoses of Hamiltonian systems with symmetry. Springer, Berlin,2005

[14] J.A. Foxman and J.M.Robbins. The Maslov index and nondegenerate singularities of integrable systems. IOP Publishing Ltd and London Mathematicle Society, Nonlinearity, vol. 18, no.6, 2005

[15] W. Gordon, On the relation between period and energy in periodic dynamical systems, J. Math. Mech. 19 (1969), 111-114.

[16] J.Guckenheimer and P. Holmes. Nonlinear oscillations, dynamical systems, and bifurcations of vector fields. Springer. 1983

[17] V. Guillemin and S. Sternberg. Symplectic techniques in physics, Cambridge University Press, 1984.

[18] V.Guillemin and S. Sternberg. Semi-classical analysis, International Press of Boston, 2013.

[19] G.A. Hagedorn and S. L. Robinson. Bohr-Sommerfeld quantization rules in the semiclassical limit. Journal of Physics. A, Mathematical and General. v. 31(50), (1998) 10113-10129

[20] G. A. Hagedorn, Semiclassical Quantum Mechanics I., Comm. Math. Phys., Vol. 71, (1980), 77-93.

[21] E. J. Heller. Time dependent approach to semiclassical dynamics, J. Chem. Phys. 62, (1975), 1544-1555.

[22] M.V. Karasev. Expansion of functions of noncommuting operators. Dokl. Akad. Nauk SSSR, 1974,Vol. 214, no.6, pp.1254-1257

[23] M.V.Karasev and V.P. Maslov. Nonlinear Poisson brackets. Geometry and quantization. AMS , Transl. Math. Monographs, vol.119, 1993.

[24] M. V. Karasev. Connections over Lagrangian submanifolds and certain problems of semi-classical approximation. J. Sov. Math. 59 (1992), 1053-1062

[25] M. V. Karasev. Simple Quantizations Formula, in "Symplectic Geom. and Math. Phys., "Actes du colloque en l'honneur de J.-M. Souriau, pp. 234 244 Birkha user, Boston, 1991.

[26] M. V. Karasev. New Global Asymptotics and Anomalies in the Problem of Quantization of the Adiabatic Invariant. Functional Anal. Appl. 24, 104-114 (1990).

[27] M. V. Karasev, Adiabatics Using the Phase Space Translations and Small Parameter Dynamics, Russ. J. of Math. Phys.22 (1), 20-25 (2015).

[28] M. V. Karasev and Yu. Vorobjev. Adapted connections, Hamilton dynamics, geometric phases, and quantization over isotropic submanifolds. in: Coherent Transform, Quantization, and Poisson Geometry (M. V. Karasev, ed), Amer. Math. Soc., Providence, R. I. (1998), pp. 1-202.

[29] M. V. Karasev and Yu. M. Vorobjev. Integral representations over Isotropic Submanifolds and Equations of Zero Curvature. Adv. Math., vol.135, no.2, (1998), 220-286.

[30] M. V. Karasev, “Quantum Geometry of Nano-Space,” Russ. J. Math. Phys. 15 (3),(2008), 417–420 .

[31] M. V. Karasev. Noncommutative Algebras,Nano-Structures, and Quantum Dynamics Generated by Resonances. III. Russian Journal of Mathematical Physics, Vol. 13, No. 2, (2006), 131–150.

[32] M. V. Karasev. Contribution to the Symplectic Structure in the Quantization Rule due to Noncommutativity of Adiabatic Parameters. RJMP, vol. 23, No.2 (2016), 207-218.

[33] K. Kumar. Expansion of a Function of Noncommuting Operators. Jornal of Mathematical Physics 6, 1923 (1965)

[34] R. G. Littlejohn and S. Weigert, Adiabatic motion of a neutral spinning particle in an inhomogeneous magnetic field, Phys. Rev. A 48, 924-940 (1993).

[35] V.P. Maslov and M. Fedoriuk. Semiclassical approximation in quantum mechanics. Reidel. 1981

[36] V. P. Maslov, Perturbation Theory and Asymptotic Methods, Publ. Moscow State Univ., Moscow, 1965; French transl., Dunod, Paris, 1972.

[37] V. P. Maslov, Complex WKB-Method, Moscow, Nauka, 1976; English transl., Birkhauser, Basel-Boston, 1994.

[38] V. P. Maslov, Operator Methods, Nauka, Moscow, 1973; English transl., Mir, Moscow, 1976.

[39] T. Paul and A. Uribe, A construction of quasi-modes using coherent states, Ann. Inst. H. Poincare 59:4 (1993), 357 381.

[40] J. V. Ralston. On the construction of quasimodes associated with stable periodic orbits. Comm. Math. Phys. vol. 51 (1976), 219-242.

[41] M.Reed and B.Simon, Methodes of Modern Mathematical Physics, I-IV: Functional Analysis, Academic Press 1972

[42] S.Teufel. Adiabatic Perturbation Theoryin Quantum Dynamics. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2003

[43] M. Zworski, Semiclassical Analysis, American Mathematical Society, Rhode Island USA, 2012.