



UNIVERSIDAD DE PAMPLONA

FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS

ESTUDIO NO ESTÁNDAR DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

TRABAJO DE GRADO PRESENTADO POR LINDA ROCIO MORENO ZULUAGA
PARA OBTENER EL GRADO DE FÍSICA

DIRIGIDO POR DR. JAIRO ALONSO MENDOZA SUÁREZ

Programa de Física Universidad de Pamplona

2022

Dedicatoria

*A mis padres y hermana,
quienes son mi apoyo incondicional.*

Agradecimientos

En primer instancia a todos los docentes que me acompañaron durante este proceso compartiendo sus conocimientos, mostrándome una forma diferente de ver el mundo, motivando y enriqueciendo mi conocimiento. En especial a mi tutor por su constante ayuda, paciencia, dedicación y guía en el desarrollo de este trabajo.

A mis compañeros por su ayuda incondicional durante este proceso; finalmente a mi familia y amigos pues su amor y apoyo fue el motor que me permitió culminar mis estudios y el presente trabajo.

Resumen

El desarrollo de este proyecto tiene como meta exponer la mecánica Bohmiana como una interpretación alternativa a la interpretación estándar, mediante una revisión bibliográfica exhaustiva presentando de manera general el formalismo matemático no relativista de esta y evidenciando el amplio campo de investigación donde actualmente se está haciendo uso de la interpretación para explicar fenómenos cuánticos cada vez más complejos (inclusive en el ámbito relativista), aunque las teorías cuánticas estándar y de Bohm tienen diferentes formalismos, ambas dan exactamente las mismas predicciones para todos los fenómenos, la mecánica de Bohm da una explicación de los fenómenos cuánticos en términos de partículas puntuales guiadas por funciones de onda ofrece una solución útil en diferentes campos de investigación, ya sea desarrollando algoritmos de trayectoria cuántica eficientes o proporcionando una explicación basada en la trayectoria de fenómenos cuánticos complicados.

Se presenta el formalismo matemático de la mecánica Bohmiana haciendo desarrollos en detalle, en particular se deducen las ecuaciones del potencial cuántico y de las ecuaciones de trayectoria; se da un primer ejemplo encontrando una ecuación diferencial ordinaria que permite establecer trayectorias de partícula libre, luego se desarrolla un ejemplo más complejo sobre interferencia y trayectorias cuánticas llegando a la simulación del experimento de doble rendija. Finalmente se presenta las aplicaciones actuales encontradas en la literatura a este formalismo, así como las objeciones; por último se hace una pequeña disertación del trabajo realizado.

Índice general

Dedicatoria	2
Agradecimientos	3
Resumen	4
1. Introducción	8
2. Marco Teórico	11
2.1. Interpretación Estándar o de Copenhague	11
2.1.1. Postulados de la Mecánica Cuántica Estándar	11
2.2. Objeciones a la Interpretación Estándar	14
2.3. Interpretación Causal o de Broglie-Bohm	17
2.3.1. Historia	17
2.3.2. Formulación	18
2.3.3. Postulados de la mecánica Bohmiana	20
3. Partículas y ondas	23
3.1. Dispersión estacionaria de estados en una dimensión	25
3.2. Derivación de una Nueva EDO	28
3.3. Una comprensión basada en la trayectoria de la interferencia cuántica	31
3.3.1. Interferencia y trayectorias cuánticas	31
3.3.2. Ejemplos simples de interferencia cuántica con paquetes de onda Gaussianas	38
3.3.3. Dinámica de superposiciones coherentes de paquetes de ondas	42

4. Aplicaciones de la mecánica Bohmiana	48
4.1. Campos de investigación	49
4.2. Aplicación a problemas generales	57
5. Objeciones a la interpretación causal	64
6. Conclusión	67
Bibliografía	71

Índice de figuras

3.1. Cálculo de trayectorias usando la ecuación (3.17), usando como valores iniciales $m = 20$, $E = 40$, $V = 0$, $x'(0) = 0,5$ y $x''(0) = 0$	30
3.2. Representación de la evolución en el tiempo de la colisión de dos paquetes de onda Gaussianas(3.28) con $v_\rho = 10m/s$ y $v_S = 1m/s$. Se interpreta de la siguiente manera: (a) Antes de la colisión, (b) Las ondas superpuestas completamente y (c) Después de la colisión	45
3.3. Modelación de las trayectorias cuánticas Bohmianas de la colisión de dos paquetes de onda Gaussianas usando la ecuación (3.42) con $v_\rho = 10m/s$ y $v_S = 1m/s$	46
4.1. Sistema óptico-atómico de tres niveles para un átomo en un pozo triple de potencial. Tomada de (1)	49
4.2. Aparición de la alfombra de Talbot en el campo cercano (izquierda), representación Bohmiana (derecha). Tomada de (1; 2)	59

Capítulo 1

Introducción

La mecánica cuántica es un campo donde se permite más de una interpretación competente, estas interpretaciones tienen diferentes formalismos que llevan a las mismas predicciones numéricas, los cuales están respaldados experimentalmente. En general cuando esto se presenta, una o más interpretaciones o formalismos se van descartando con pruebas experimentales; sin embargo, en el caso de la mecánica cuántica los formalismos son más complejos. La interpretación estándar (o denominada interpretación de Copenhague) por casi un siglo ha sido la interpretación que se toma como referente y ha sobresalido en comparación a las otras interpretaciones y formalismos de la mecánica cuántica.

El formalismo matemático de la mecánica cuántica ha sido confirmado experimentalmente; puede predecir y explicar fenómenos físicos como las líneas espectrales de los elementos químicos, se puede predecir el espectro de emisión del cuerpo negro en términos de la emisión y absorción de la radiación cuantizada, al mismo tiempo la mecánica cuántica puede explicar las propiedades ondulatorias de la materia vistas en experimentos de difracción(3; 4). Los formalismos sumamente exitosos de la teoría se aceptan en principio sin una interpretación física clara, la interpretación en términos físicos se crea después y es objeto de continuos debates.

Aunque la interpretación estándar de la mecánica cuántica ha tenido gran éxito, su formalismo usual como una teoría de la física es considerada por algunos físicos como una interpretación que no describe exactamente la realidad del mundo cuántico (5; 6; 7; 8), por tanto, se busca hacer nuevos formalismos con una descripción más

precisa de la realidad cuántica, la explicación de algunos fenómenos como el colapso de la función de onda, el experimento de la doble rendija y la no-localidad de la teoría permiten establecer otras interpretaciones diferentes a la estándar, incluso en el contexto de la predicción de probabilidades de mediciones no está claro si la función de onda $\psi(x, t)$ es la representación de un sistema individual o de un ensamble de sistemas similares (interpretación estadística).

Como algunas características de la interpretación estándar se consideran fundamentalmente cuestionables, existe la motivación para investigar otras alternativas, de hecho la consideración estándar de la mecánica cuántica ha sido mejorada desde su concepción; hay comunidades de físicos estudiando la cuantización de la teoría de la relatividad, lo que implica conceptualizar de forma más precisa alrededor de la medición (a lo que existe gran controversia).

La pregunta básicamente es ¿Fuera de la interpretación estándar, existen otras teorías cuánticas que reproduzcan los experimentos que soportan la mecánica cuántica?

La controversia que rodea los fundamentos de la mecánica cuántica está alrededor de diversas preguntas como ¿qué debería de ser capaz de hacer una teoría? Y ¿por qué? Seguidores de la interpretación estándar reclaman que es suficiente que la teoría genere buenas predicciones de cantidades observables, argumentan que si no es posible observar una estructura más detallada (principio de incertidumbre) ¿qué valor tiene buscar una teoría física que lo describa? Esta identificación de qué se debe discutir con qué es real, y qué es real con qué puede ser observado, se ha denotado como un punto de vista positivista; e inclusive con este punto de vista existe motivación para buscar una interpretación alternativa de la mecánica cuántica o un formalismo alternativo, esta motivación puede ser por ejemplo encontrar una versión de la mecánica cuántica que pueda manejar la pregunta ¿por qué el observador no es independiente del experimento?

Los físicos que van en contra del punto de vista positivista (vista realista), buscan una teoría cuántica que proporcione una descripción ontológica de la materia en una escala cuántica, por ejemplo la descripción de qué es realmente un objeto en ausencia de un observador a escala cuántica; el electrón realmente qué es, dónde está localizado, cómo se mueve y qué fuerza lo guía. Una aproximación realista no

identifica qué puede ser medido con qué existe, dejando espacio para la existencia de objetos no observables(6).

Los objetos no observables se han definido como variables ocultas, ya que, contienen información no contenida en la mecánica cuántica estándar. Se creía que no se podía considerar un fenómeno cuántico realista usando variables ocultas, sin embargo, Bell clarificó la teoría de variables ocultas logrando que la consideración de fenómenos cuánticos, usando la no localidad de variables ocultas fuera aceptada (9).

En el cuadro (1.1) se muestra algunas de las teorías que a través de la historia han buscado interpretar la mecánica cuántica, los autores mas representativos y las principales características de las diferentes teorías, como el ser o no determinista, la interpretación a la función de onda y el papel del observador

INTERPRETACIONES DE LA MECÁNICA CUÁNTICA						
Interpretación	Autores	¿Determinista?	¿Función de onda real?	¿Variables ocultas?	¿Colapso de la función de onda?	¿Rol del Observador?
Interpretación de Copenhague (3)	Niels Bohr, Werner Heisenberg, 1927	NO	NO	NO	sin respuesta	sin respuesta
Interpretación de Bohm (6)	Louis de Broglie, 1927; David Bohm 1952	SI	SI	SI	NO	ninguna
Mecánica estocástica (10)	Edward Nelson, 1966	NO	NO	NO	NO	ninguna
Interpretación estadística (11)	Max Born, 1926	sin respuesta	NO	indefinido	No	ninguna
Interpretación de universos paralelos (12)	Hugh Everett, 1957	SI	SI	NO	NO	ninguna
Historias consistentes (13)	Robert B. Griffiths, 1984	indefinido	indefinido	NO	NO	interpretativa
Interpretación de Von Neumann (14)	Von Neumann, 1932; Wheeler, Winger	NO	SI	NO	SI	causal
Teorías de colapso objetivo (15)	Ghirardi-Rimini-Weber, 1986	NO	SI	NO	SI	ninguna

Cuadro 1.1: Tabla comparativa de las diferentes interpretaciones de la mecánica cuántica.

Capítulo 2

Marco Teórico

2.1. Interpretación Estándar o de Copenhague

El formalismo de la mecánica cuántica estándar se basa en 5 axiomas. En este capítulo se presenta una discusión formal de estos axiomas y cómo se pueden usar para extraer información cuantitativa sobre micro sistemas físicos. Estos axiomas resultan de experimentos y presentan la mínima cantidad de suposiciones necesarias para desarrollar la teoría de la mecánica cuántica; su validez no se puede determinar directamente, solo son posibles declaraciones inferenciales, si la teoría funciona entonces los axiomas serán válidos (3)

2.1.1. Postulados de la Mecánica Cuántica Estándar

De acuerdo a la mecánica clásica el estado de una partícula se especifica en cualquier tiempo t , por dos variables dinámicas, la posición $\vec{r}(t)$ y el momento $\vec{p}(t)$. Cualquier otra cantidad física relevante al sistema puede ser calculada en términos de esas dos variables dinámicas; se puede predecir los valores de las variables en un tiempo t' (tiempo posterior) conociendo las variables en un tiempo t (tiempo anterior), usando por ejemplo el Hamiltoniano $\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}$ y $\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}$.

La contraparte de esto en la mecánica cuántica se especifica por axiomas, que permiten entender:

- ¿Cómo es descrito matemáticamente un estado cuántico en un tiempo dado t ?

- ¿Cómo calculará diferentes cantidades físicas de un estado cuántico?
- Conociendo el estado del sistema en un tiempo t ¿Cómo encontrar el estado en cualquier tiempo posterior t' , mejor dicho, ¿cómo describir la evolución del tiempo de un sistema?

Axioma 1: Estado de un sistema

El estado de cualquier sistema físico está especificado en cada tiempo t , por un vector estado $|\Psi(t)\rangle$ en el espacio de Hilbert \mathcal{H} ; $|\Psi(t)\rangle$ contiene toda la información necesaria sobre el sistema, cualquier superposición de estados, es también un vector. El vector estado $|\Psi(t)\rangle$ corresponde a una función diferenciable, cuadráticamente integrable, definida en las coordenadas espaciales del espacio de Hilbert \mathcal{H} . $|\Psi(t)\rangle$ está normalizada cuando la integral del cuadrado de la función de onda sobre todo el espacio \mathcal{H} es igual a 1. Las coordenadas espaciales para una sola partícula se define en \mathbb{R}^3 , para n partículas sería \mathbb{R}^{3n} se puede mostrar que para el espacio \mathcal{H} cuyos elementos son funciones, estas propiedades se pueden construir. El producto interno en el espacio de Hilbert \mathcal{H} se define por (3)

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int_{\text{espacio}} \Psi^* \Phi dx, \quad \forall \Psi, \Phi \in \mathcal{H}, \quad (2.1)$$

donde Ψ^* es el complejo conjugado de la función Ψ .

Axioma 2: Observables y operadores

A cada cantidad física medible A (observable o variable dinámica), le corresponde un operador lineal Hermítico \hat{A} con valores propios reales y cuyos vectores propios forman una base completa del espacio vectorial en cuestión. Si denotamos la posición y el momento clásicos por x y p respectivamente, entonces las cantidades observables $Q(x, p, t)$ representadas por operadores que se forman al remplazar p con $-i\hbar\nabla$, es decir $\hat{Q} = \hat{Q}(x, -i\hbar\nabla, t)$. Si las coordenadas y el momento de la k^{th} partícula de un sistema mecánico cuántico está caracterizado por los operadores \hat{x}_k y \hat{p}_k , llegando a la relacion de conmutacion 2.2 (3)

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}. \quad (2.2)$$

Axioma 3: Medición y autovalores de operadores

La medición de un observable A se puede presentar formalmente por la acción de \hat{A} sobre un vector estado $|\Psi(t)\rangle$. La única posible solución a esa medición es un valor propio a_n (valor real y n es el número de estados del sistema $n = 1, 2, 3, \dots$) del operador \hat{A} . Si el resultado de medir A en el estado $|\Psi(t)\rangle$ es a_n , el estado del sistema inmediatamente después de la medición es $|\Psi_n\rangle$:

$$\hat{A}|\Psi(t)\rangle = a_n|\Psi_n\rangle, \quad (2.3)$$

donde $a_n = \langle\Psi_n|\Psi(t)\rangle$. a_n , es la componente de $|\Psi(t)\rangle$ cuando se proyecta sobre $|\Psi_n\rangle$ (3).

Axioma 4: Resultados probabilísticos de la medición

Espectro discreto: cuando se mide un observable A de un sistema en el estado $|\Psi(t)\rangle$, la probabilidad de obtener uno de los valores propios no degenerados a_n correspondientes a \hat{A} está dada por:

$$P_n(a_n) = |\langle\Psi_n|\Psi\rangle|^2 = |a_n|^2, \quad (2.4)$$

donde $|\Psi_n\rangle$ es el estado propio de \hat{A} con autovalor a_n . Si el autovalor a_n es m -degenerado P_n se convierte

$$P_n(a_n) = \sum_{j=1}^m |\langle\Psi_n^j|\Psi\rangle|^2 = \sum_{j=1}^m |a_n^{(j)}|^2, \quad (2.5)$$

la medición cambia el estado del sistema de $|\Psi(t)\rangle$ a $|\Psi_n\rangle$. Si el sistema ya está en un estado propio $|\Psi_n\rangle$ de \hat{A} , una medición de A llevará al valor propio correspondiente a_n : $\hat{A}|\Psi_n\rangle = a_n|\Psi_n\rangle$.

Espectro continuo: la relación $P_n(a_n) = |\langle\Psi_n|\Psi\rangle|^2 = |a_n|^2$ válida para espectros discretos, se puede extender para determinar la densidad de probabilidad de que la medición de \hat{A} en un sistema con un estado inicial $|\Psi\rangle$ de como resultado un valor entre a y $a + da$.

$$\frac{P_n(a_n)}{da} = |\Psi(a)|^2 \quad (2.6)$$

Por ejemplo la densidad de probabilidad de encontrar una partícula entre x y $x + dx$ está dada por $\frac{dP(x)}{dx} = |\Psi(x)|^2$ (3).

Axioma 5: Evolución en el tiempo de un sistema

La evolución en el tiempo del vector estado $|\Psi(t)\rangle$ del sistema está dominada por la ecuación dependiente del tiempo de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad (2.7)$$

donde \hat{H} es el operador Hamiltoniano correspondiente a la energía total del sistema. Se debe especificar una función de onda inicial que evolucionará de acuerdo a la ecuación de Schrödinger o la ecuación relativista, dependiendo del contexto del problema; estas especificaciones se construyen típicamente usando una combinación de la intuición física y la experiencia con la mecánica cuántica; no existe una declaración axiomática sobre cómo se debe escoger la función de onda inicial, pero existen opciones aceptadas como los paquetes Gaussianos.

La relación entre el vector de estado $|\Psi\rangle$ y las cantidades físicas reales medidas es la probabilidad de obtener un autovalor a_n , como se define en la ecuación 2.4 (si la función de onda está normalizada $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$) (3).

2.2. Objeciones a la Interpretación Estándar

La justificación de este trabajo de grado se basa en desarrollar un estudio alternativo de la mecánica cuántica, que le permite a un estudiante de física tener una visión más amplia de los conceptos alrededor de esta teoría, se soporta en el estudio de otras interpretaciones que buscan dar explicación a los fenómenos que la mecánica clásica no interpretaba y condujeron a la formulación cuántica. En particular la teoría que más aceptación tiene en la comunidad científica después de la interpretación estándar es la interpretación causal de Broglie–Bohm.

Después de haber presentado en la sección anterior los axiomas de la mecánica cuántica, en esta sección presento las objeciones a esta interpretación que dan más solidez al interés por realizar un nuevo estudio de la mecánica cuántica.

La mayor objeción es como interpretar el colapso de la función de onda bajo la

medición; el colapso hace referencia al proceso por el cual la función de onda cambia de

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\Psi_n\rangle, \quad |\Psi\rangle \Rightarrow |\Psi_n\rangle; \quad (2.8)$$

al solucionar la ecuación de Schrödinger (o las ecuaciones de Pauli, Dirac o Klein-Gordon, dependiendo del problema) se parte del vector de onda $|\Psi\rangle$ y al cuantizarse cae en un estado n definido, por tanto, no es consistente con la evolución del tiempo en un sistema (la formulación teórica aparece en este documento en el axioma 5 del capítulo 2 marco teórico). No está claro porqué cualquier tipo de interacción bajo la medición causará precisamente este cambio en la función de onda, particularmente porque los axiomas establecidos por la teoría cuántica no definen claramente qué tipo de arreglo experimental constituye la medición(6).

El requerimiento de que la función de onda se someta a este colapso solo cuando está bajo medición, que representa un tipo de interacción que se debe definir, pero que se puede presumir que involucra algún tipo de interacción que se realiza en la escala clásica, por lo tanto, se puede presuponer una escala clásica donde la materia se debe comportar fundamentalmente diferente a la escala cuántica. Esta interacción clásica será la que logre distinguir los procesos de medición de los procesos puramente cuánticos y permitirá redefinir el axioma 5. Sin embargo, la presuposición de la escala clásica no es ideal, idealmente la escala clásica y la física clásica emergerán de la teoría cuántica. Una aproximación para este problema es usar la interpretación estadística, de acuerdo a esta la función de onda no representa un sistema individual, sino un ensamble de sistemas similares; cuando la función de onda colapsa bajo medición no existe dificultad con la evolución de la función de onda de Schrödinger de un sistema singular; en vez de describir la evolución individual del tiempo de un sistema singular, la interpretación estadística dice que cualquier medición lleva información sobre que elemento o ensamble de sistemas ha sido observado. Mediciones adicionales están entonces predichas correctamente por el colapso de la función de onda, que representa ahora otro ensamble del cual sus elementos tienen propiedades especificadas en la primera medición; sin embargo, si la teoría cuántica se basa en el estudio de sistemas, ¿de qué están compuestos estos sistemas? Se está asumiendo entonces la inexistencia de cosas individuales, de las cuales se componen hipotéticamente los ensambles ¿estableciendo en esencia que sistemas individuales no pueden

ser representados satisfactoriamente? La interpretación estadística entonces reemplaza el problema del colapso de la función de onda con un problema diferente pero igualmente significativo para crear insatisfacción dentro de los físicos que buscan construir entendimiento alrededor del mundo cuántico, aún más teniendo en cuenta el hecho de que existen sistemas individuales observables como el electrón(6; 16).

Otra objeción del punto de vista estándar es que la teoría requiere cualquier tipo de interacción de medición para que se logre plantear de manera aceptable, no es una característica de la teoría matemática, es una consecuencia del positivismo filosófico. Esto lleva a la identificación de, qué existe y con qué puede ser observado y por tanto a la conclusión que, si dos operadores no conmutan, la correspondencia física observable no tiene una existencia simultánea; si algunas o todas las cantidades no existen independientemente de la observación, entonces parecerá que es necesario un observador clásico para la creación del universo o del subsistema relevante, colapsando en un estado ambiguo de existencia. Pero si un observador clásico no es necesario, entonces en esta teoría sería necesario especificar qué tipo de sistema constituye un sistema medible y dibujar el límite clásico/cuántico, lo cual no se ha logrado hacer para la teoría estándar y no se ha hecho a nivel axiomático mientras se asume la escala clásica a este nivel (17; 6).

Como resultado de la aproximación positivista en combinación con el principio de la incertidumbre, la pregunta de qué posición y momento tiene un sistema en un tiempo dado es despreciable, esto también pasa en el efecto túnel. La idea de que estas cuestiones estén constituidas es difícil de aceptar por el simple hecho de usar la intuición clásica incluso en la mecánica cuántica; en otros campos, si no se logra encontrar la respuesta a una pregunta, no se dice que esa pregunta es despreciable, esto da motivación para cuestionar la interpretación estándar. Es posible abandonar la afirmación positivista y decir que los observables no conmutativos existen independientemente de la observación pero que sus valores no se pueden saber debido al principio de la incertidumbre, en este caso sería necesaria una teoría que describa esta estructura subyacente. De hecho, existen varias formulaciones de la teoría cuántica consideradas válidas pues reproducen resultados de la mecánica cuántica y ofrecen diferentes interpretaciones del formalismo cuántico y en algunos casos diferentes formalismos. Aquellos que no dependen de la presencia de un observador

para que la función de onda colapse se conocen como la formulación del observador independiente.

Existen diferencias distintivas entre los axiomas de la interpretación estándar y otras teorías físicas, como en la teoría de la relatividad especial. Desde principios físicos tales como la invariancia de la teoría bajo cambios del marco de referencia inercial. En la teoría cuántica no se tiene axiomas igualmente físicos e intuitivos. En los axiomas de la interpretación estándar no existen suposiciones sobre la realidad cuántica en si misma; Bohr pensó que los sistemas cuánticos no son separables del contexto de medición en el que son observados, por tanto, que no hay una manera inequívoca para referirse a la “realidad cuántica”. Cualquier descripción axiomática de la realidad cuántica conlleva a una formulación matemática de la mecánica cuántica y no tendrá sentido si no puede referirse a un contexto de medición específico. Esto fue reforzado por Bohr: “si no se puede observar un sistema cuántico en la ausencia del contexto de medición, y como las propiedades del sistema parecen depender tan fuertemente del contexto de medición, entonces cualquier realidad cuántica inherente, subyacente no se puede observar, por lo que no vale la pena incluirla en la teoría física” (8).

Desde la perspectiva de la interpretación estándar la existencia de las dos, partícula (con una posición y momento bien definidos en cualquier momento) y onda (con una existencia física real) es inadmisibles.

2.3. Interpretación Causal o de Broglie-Bohm

2.3.1. Historia

Einstein inició el enfoque de onda piloto antes del nacimiento de la mecánica cuántica, buscando explicar la interferencia que involucraban fotones usando el campo electromagnético como una guía para el movimiento de los fotones; la noción del campo electromagnético como guía no funciona, pero la noción de que el fotón fuera guiado parecía una idea prometedora, Max Born exploró la posibilidad de que la función de onda fuera esta guía para un sistema de electrones (18).

Una investigación de Louis de Broglie en 1924 inspiró a Schrödinger y lo llevó a plantear la ecuación de Schrödinger dando paso a los inicios de la mecánica ondulato-

ria en 1926; por otra parte en 1927 de Broglie encontró una ecuación de movimiento de partículas equivalente a la ecuación guía para una función de onda escalar, explicando cómo este movimiento podría interpretar los fenómenos de interferencia cuántica. Rápidamente Wolfgang Pauli encontró un problema con el hallazgo de Broglie respecto a la dispersión inelástica, dejando a un lado el enfoque de la onda piloto. Hasta que David Bohm, insatisfecho con la interpretación estándar, redescubrió la teoría de la onda piloto de De Broglie en 1952 (8), naciendo así lo que hoy se conoce como la teoría de Broglie-Bohm, los teóricos que apoyaban la interpretación estándar la consideraron inaceptable debido a la forma explícita de la no localidad (19), en menor medida otros teóricos la acogieron y la usaron como base de sus investigaciones, por ejemplo John Bell que inspiró su teorema en el trabajo de Bohm; se preguntó si la no localidad obvia de la teoría podría eliminarse. Desde la década de 1990, ha habido un renovado interés en formular extensiones de la teoría de Broglie-Bohm, intentando reconciliarla con la relatividad especial y la teoría cuántica de campos, además de otras características como el espín o las geometrías espaciales curvas (5).

2.3.2. Formulación

La mecánica Bohmiana se basa en la existencia tanto de la partícula como de la onda Ψ . La onda evoluciona de acuerdo a la ecuación de Schrödinger y se propaga en el espacio y en el tiempo; la partícula se mueve continuamente y es guiada por la onda, esto permite entender los sistemas cuánticos de manera similar a los sistemas clásicos, en términos de conjuntos de trayectorias a través del espacio de configuración del sistema; una característica que facilita la adaptación al marco conceptual cuántico mediante conceptos ya conocidos (17).

Dentro de la mecánica Bohmiana, la función de onda Ψ proporciona al sistema cuántico información dinámica sobre cada punto del espacio de configuración asociado en cada momento. Esta información está codificada en su fase, como se puede ver a través de la relación de transformación $\Psi(\vec{r}, t) = \rho^{\frac{1}{2}}(\vec{r}, t) e^{\frac{iS(\vec{r}, t)}{\hbar}}$, donde ρ y S son la densidad de probabilidad y la fase de Ψ , respectivamente, siendo ambas cantidades de valor real.

Bohm empezó con una solución de la forma WKB (aproximación Wentzel-Kramers-

Brillouin)¹, insertando Ψ de forma polar en la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi, \quad (2.9)$$

donde V es el potencial clásico. Se parte de la ecuación de Schrödinger asumiendo como solución la forma polar de la ecuación de onda $\Psi = Re^{iS/\hbar}$, donde R y S son funciones reales del espacio y tiempo

$$i\hbar \frac{\partial Re^{iS/\hbar}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 (Re^{iS/\hbar}) + VRe^{iS/\hbar},$$

$$i\hbar \frac{\partial R}{\partial t} - R \frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 R - \frac{i\hbar}{m} (\vec{\nabla} R) \cdot (\vec{\nabla} S) - \frac{i\hbar}{2m} R \nabla^2 S + \frac{1}{2m} R (\vec{\nabla} S)^2 + RV,$$

separando la parte real se obtienen la siguiente ecuación

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} = 0, \quad (2.10)$$

la parte imaginaria

$$\frac{\partial R}{\partial t} + \frac{1}{m} (\vec{\nabla} R) \cdot (\vec{\nabla} S) + \frac{1}{2m} R \nabla^2 S = 0,$$

se multiplica por $2R$ y se reescribe como

$$\frac{\partial R^2}{\partial t} + \frac{1}{m} (\vec{\nabla} R^2) \cdot (\vec{\nabla} S) + \frac{1}{m} R^2 \nabla^2 S = 0,$$

se simplifica llegando a

$$\frac{\partial R^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(R^2 \frac{\vec{\nabla} S}{m} \right) = 0. \quad (2.11)$$

La aproximación tradicional de WKB asume que en el límite clásico, el ancho del paquete de onda es mucho mayor a la longitud de onda por lo que el término $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R}$ es mucho más pequeño que el término $\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2$. Por lo que es posible despreciar el término $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R}$ en (2.10); reduciéndose a la ecuación clásica de Hamilton-Jacobi²

¹Método para encontrar soluciones aproximadas a ecuaciones diferenciales lineales con coeficientes variables; la función de onda se escribe como una exponencial cuya amplitud o fase varían lentamente.

²La ecuación de Hamilton-Jacobi es $\frac{\partial S}{\partial t} + H(q, \frac{\partial S}{\partial t}, t) = 0$ donde S es la función principal de Hamilton que depende de las coordenadas generalizada, las constantes de movimiento y el tiempo

que representa una partícula moviéndose con un momento $\vec{P} = \vec{\nabla}S_c$.

$$\frac{\partial S_c}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\vec{\nabla}S_c \right)^2 + V = 0, \quad (2.12)$$

la ecuación (2.12) se puede reescribir de la misma forma que la ecuación clásica de Hamilton-Jacobi simplemente introduciendo un potencial cuántico $Q = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R}$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\vec{\nabla}S \right)^2 + V + Q = 0. \quad (2.13)$$

Interpretando la densidad como $\rho = \Psi^* \Psi = R^2 \frac{\nabla^2 S}{m}$ la ecuación (2.11) es la ecuación de continuidad. Como la distribución de probabilidad de partículas que siguen una trayectoria dada por $\vec{P} = \vec{\nabla}S$. La teoría describe partículas que se mueven a lo largo de trayectorias continuas de momento

$$\vec{P}_Q = \vec{\nabla}S, \quad (2.14)$$

la partícula es guiada por un campo Ψ , el cual obedece la ecuación de Schrödinger, las fuerzas sobre dicha partícula no son solamente las clásicas, existe una fuerza cuántica adicional igual a $F_Q = -\vec{\nabla}Q$ (6; 20).

2.3.3. Postulados de la mecánica Bohmiana

La mecánica Bohmiana se puede enunciar a través de tres postulados que se presentan a continuación, donde se asume una función de onda $\Psi(\vec{r}, t)$ de muchas partículas sin espín (la simetría global de la función de onda proviene de su parte orbital)(1).

- Dinámica de un sistema cuántico

La dinámica de un sistema cuántico no relativista de N partículas está comprendido por una función de onda de muchas partículas $\Psi(\vec{r}, t)$, definida en el espacio de configuración $r = (r_1, r_2, \dots, r_N)$ y el tiempo t , y una trayectoria de muchas partículas $r(t) = (r_1(t), r_2(t), \dots, r_N(t))$ que evoluciona continuamente bajo la guía de la función de onda.

La función de onda es una solución de la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(\sum_{k=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_k} \nabla_k^2 + V(\vec{r}, t) \right) \Psi(\vec{r}, t), \quad (2.15)$$

donde $\hbar^2 \nabla_k^2 / 2m_k$ es el operador de energía cinética de la partícula k (con masa m_k) y el potencial $V(\vec{r}, t)$ incluye todas las interacciones en el sistema (interna y con un potencial escalar externo arbitrario).

Cada componente $\vec{r}_k(t)$ de la trayectoria se obtiene integrando en el tiempo la velocidad de la partícula $\vec{v}_k(\vec{r}(t), t)$ definida a través del campo de velocidad

$$\vec{v}_k(\vec{r}, t) = \frac{\vec{J}_k(\vec{r}, t)}{|\Psi(\vec{r}, t)|^2}, \quad (2.16)$$

donde $\vec{J}_k(\vec{r}, t)$ es la k -ésima densidad de corriente de partículas $\vec{J}_k(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{m_k} \text{Im} [\Psi(\vec{r}, t)^* \nabla_k \Psi(\vec{r}, t)]$ (1; 6).

- Hipótesis del equilibrio cuántico

La posición inicial $\vec{r}(t_0)$ de la trayectoria $\vec{r}(t)$ no se puede conocer con certeza, y se distribuye aleatoriamente de acuerdo con la densidad de probabilidad cuántica $|\Psi(\vec{r}, t_0)|^2$ (1; 6). Su velocidad inicial se define como

$$v_k(t_0) = v_k(\vec{r}(t_0), t_0). \quad (2.17)$$

- Postulado de simetrización de la mecánica cuántica

Si las variables \vec{r}_i y \vec{r}_j se refieren a dos partículas idénticas del sistema, entonces la función de onda de muchas partículas es simétrica

($\Psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, t) = \Psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, t)$) si las partículas son bosones, o es antisimétrica ($\Psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, t) = -\Psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, t)$) si las partículas son fermiones. Todos los demás grados de libertad de las otras partículas permanecen sin cambios. Para las funciones de onda generales, este postulado implica restricciones más complicadas sobre los posibles componentes orbitales y de espín de las funciones de onda.

La posición inicial y la velocidad de una trayectoria particular de muchas partícu-

las $\vec{r}(t)$ no se pueden conocer con certeza. Cuando un experimento se repite varias veces, las posiciones iniciales de un conjunto de trayectorias asociados con la misma función de onda, $\{\vec{r}(t)\}$, deben distribuirse de acuerdo con la hipótesis del equilibrio cuántico, es decir, siguiendo la densidad de probabilidad inicial $|\Psi(\vec{r}, t_0)|^2$. Esta condición se puede escribir matemáticamente como:

$$|\Psi(\vec{r}, t_0)|^2 = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{\alpha=1}^M \prod_{k=1}^N \delta(\vec{r}_k - \vec{r}_k^\alpha(t_0)). \quad (2.18)$$

Observe la presencia de dos índices, $\alpha = 1, \dots, M$ denota un conjunto infinito de trayectorias que explican la incertidumbre inicial y $k = 1, \dots, N$ representa el número total N de partículas. La velocidad inicial de la trayectoria $\vec{r}^{\alpha}(t)$ se determina entonces por $v_k^\alpha(t_0) = v_k(\vec{r}^{\alpha}(t_0), t_0)$ (1; 6).

La mecánica Bohmiana no requiere un postulado adicional para la medición, ya que se trata como un caso particular de la interacción entre partículas.

Los tres postulados anteriores se interpretan como un resumen de los factores básicos necesarios para obtener predicciones en la mecánica Bohmiana para los sistemas de muchas partículas (no relativistas).

Capítulo 3

Partículas y ondas

Uno de los temas en los cuales gira la teoría cuántica es la noción de partícula y onda. En la física clásica, el concepto de partícula es muy útil para la descripción de muchos fenómenos naturales. Una partícula está directamente relacionada con una trayectoria $\vec{r}_i(t)$ que define su posición como una función continua del tiempo, generalmente encontrada como solución de un conjunto de ecuaciones diferenciales. Por ejemplo, los planetas pueden considerarse partículas que orbitan alrededor del sol, cuyas órbitas están determinadas por las leyes gravitatorias clásicas de Newton.

En mecánica clásica, es natural pensar que el número total de partículas (por ejemplo, planetas en el sistema solar) se conserva, y las trayectorias de las partículas deben ser continuas en el tiempo: si una partícula va de un lugar a otro, luego, tiene que pasar por todas las posiciones de la trayectoria entre estos dos lugares. Esta condición se puede resumir con una ley local de conservación(21):

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0, \quad (3.1)$$

donde $\rho(\vec{r}, t)$ es la densidad de las partículas y $\vec{J}(\vec{r}, t)$ es la densidad de corriente de la partícula.

Sin embargo, el número total de planetas en el sistema solar se podría conservar de otra forma (muy diferente). Un fenómeno donde un planeta desapareciera (instantáneamente) de su órbita y apareciera (instantáneamente) en otro punto lejos de

su ubicación original ciertamente conservaría el número de planetas, pero violaría la Ec. (3.1). Entonces se asume que la Ec. (3.1) como una ley para la conservación local de partículas.

Los campos, y particularmente las ondas, también aparecen en muchas explicaciones de los fenómenos físicos. El concepto de campo se introdujo inicialmente para tratar la interacción de partículas distantes. Por ejemplo, existe una interacción entre los electrones de una antena emisora de radio en la cima de una montaña y los de la antena receptora en casa. Tal interacción puede explicarse mediante el uso de un campo electromagnético. Los electrones del transmisor generan un campo electromagnético, una onda de radio, que se propaga por la atmósfera y llega a nuestra antena afectando a sus electrones. Finalmente, un altavoz transforma el movimiento de los electrones en música en casa(20). El ejemplo más simple de una onda es la llamada onda plana:

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}, \quad (3.2)$$

donde la frecuencia angular ω y el vector de onda \vec{k} hacen referencia a los comportamientos temporal y espacial de la onda. En particular, la frecuencia angular ω especifica cuando se repite el comportamiento temporal de dicha onda. El valor de la función de onda $\psi(\vec{r}_1, t_1)$ en la posición \vec{r}_1 y tiempo t_1 es idéntica a $\psi(\vec{r}_2, t_2)$ cuando $t_2 = t_1 + 2n\pi/\omega$ para n entero. Recordando que la frecuencia angular ω está relacionada con la frecuencia lineal mediante la ecuación $\omega = 2\pi\nu$. En forma análoga, el vector de onda \vec{k} determina la repetición espacial de la onda, esto define la longitud de onda λ . El valor de $\psi(\vec{r}_1, t_1)$ en la posición \vec{r}_1 en el tiempo t_1 es idéntico a la función $\psi(\vec{r}_2, t_2)$ cuando se cumple $\vec{k} \cdot \vec{r}_2 = \vec{k} \cdot \vec{r}_1 + 2\pi n$ con n entero. A diferencia de una trayectoria, una onda se define en todas las posiciones y tiempos posibles. Las ondas pueden ser funciones escalares o vectoriales y, por tanto, toman valores reales o complejos. Por ejemplo, en la ecuación (3.2) es una onda escalar compleja de amplitud unitaria. La evolución dinámica de la onda está determinada por una serie de ecuaciones diferenciales. En un ejemplo de transmisión, las ecuaciones de Maxwell definen el campo electromagnético de la onda de radio emitida, que viene dado por dos funciones vectoriales, una para el campo eléctrico y otra para el campo magnético.

Siempre que las ecuaciones diferenciales que gobiernan los campos sean lineales, se puede aplicar el principio de superposición para explicar que sucede cuando dos o más campos (ondas) atraviesan simultáneamente la misma región. El módulo del campo total en cada posición está relacionado con las amplitudes de las ondas individuales. En algunos casos, el módulo de la suma de las amplitudes es menor que la suma del módulo de las amplitudes; esto es una interferencia destructiva. En otros casos, es aproximadamente igual a la suma del módulo de las amplitudes; esto es una interferencia constructiva (17).

3.1. Dispersión estacionaria de estados en una dimensión

A continuación se hace el estudio de un estado base estacionario en una dimensión, solo el eje x , el cual está caracterizado por trayectorias cuánticas en las cuales $\vec{x} = 0$, asumiendo la forma polar de la ecuación de Schrödinger se tiene:

$$\Psi(x) = R(x)e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}, \quad (3.3)$$

donde $R(x)$ y $S(x)$ son funciones reales independientes del tiempo.

La primera derivada es

$$\frac{d\Psi}{dx} = \frac{dR}{dx}e^{i\frac{S}{\hbar}} + R\frac{i}{\hbar}\frac{dS}{dx}e^{i\frac{S}{\hbar}},$$

la segunda derivada

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi}{dx^2} &= \frac{d^2R}{dx^2}e^{i\frac{S}{\hbar}} + \frac{dR}{dx}\frac{i}{\hbar}\frac{dS}{dx}e^{i\frac{S}{\hbar}} + \frac{dR}{dx}\frac{i}{\hbar}\frac{dS}{dx}e^{i\frac{S}{\hbar}} + R\frac{i}{\hbar}\frac{d^2S}{dx^2}e^{i\frac{S}{\hbar}} + R\frac{i}{\hbar}\frac{dS}{dx}\frac{i}{\hbar}\frac{dS}{dx}e^{i\frac{S}{\hbar}}, \\ \frac{d^2\Psi}{dx^2} &= \left[\frac{d^2R}{dx^2} + 2\frac{dR}{dx}\frac{i}{\hbar}\frac{dS}{dx} + R\frac{i}{\hbar}\frac{d^2S}{dx^2} - \frac{R}{\hbar^2}\left(\frac{dS}{dx}\right)^2 \right] e^{i\frac{S}{\hbar}}, \end{aligned}$$

reemplazando en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi,$$

se obtiene

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2 R}{dx^2} + 2 \frac{dR}{dx} \frac{i}{\hbar} \frac{dS}{dx} + R \frac{i}{\hbar} \frac{d^2 S}{dx^2} - \frac{R}{\hbar^2} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 \right] e^{\frac{iS}{\hbar}} + V R e^{\frac{iS}{\hbar}} &= E R e^{\frac{iS}{\hbar}}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{R} \frac{d^2 R}{dx^2} + 2 \frac{i}{R\hbar} \frac{dR}{dx} \frac{dS}{dx} + \frac{i}{\hbar} \frac{d^2 S}{dx^2} - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 \right] + V &= E, \end{aligned} \quad (3.4)$$

separando en la ecuación (3.4) la parte imaginaria se obtiene:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{2mR} \left[2 \frac{dR}{dx} \frac{dS}{dx} + R \frac{d^2 S}{dx^2} \right] &= 0, \\ 2 \frac{dR}{dx} \frac{dS}{dx} + R \frac{d^2 S}{dx^2} &= 0, \end{aligned} \quad (3.5)$$

ahora, separando en la ecuación (3.4) la parte real se obtiene:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2mR} \frac{d^2 R}{dx^2} + \frac{1}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 + V(x) &= E, \\ \frac{1}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 + V(x) + Q(x) &= E. \end{aligned} \quad (3.6)$$

donde

$$Q(x) = -\frac{\hbar^2}{2mR} \frac{d^2 R}{dx^2}, \quad (3.7)$$

la ecuación (3.7) define el denominado potencial cuántico $Q(x)$.

Definiendo la ecuación de movimiento de Bohm

$$p = m\dot{x} \equiv \vec{\nabla} S \equiv \frac{dS}{dx}^1. \quad (3.8)$$

¹El análisis dimensional de la ecuación (3.8) es $[p] = [Kg \frac{m}{s}]$; $[S] = [Kg \frac{m^2}{s}]$

De la ecuación de continuidad (2.11) donde $R^2 = \rho(x) = |\Psi(x)|^2$ es la densidad de probabilidad y $R^2 \frac{\vec{\nabla} S}{m} = \vec{J}$ es la densidad de corriente entonces

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0, \quad (3.9)$$

si ρ no depende del tiempo t se tiene que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0, \quad (3.10)$$

donde $J = \rho \dot{x}$ debe ser una constante, entonces

$$\rho(x) \dot{x} = \text{constante}, \quad (3.11)$$

$$\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x) + Q(x) = E, \quad (3.12)$$

la ecuación (3.11) es la ecuación de continuidad para el flujo de fluido en estado estacionario y la (3.12) es la ecuación de energía total que es la suma de la energía cinética, el potencial clásico y el potencial cuántico.

La ecuación(3.6) es la ecuación estacionaria de Hamilton-Jacobi, la cual determina las fuerzas que gobiernan las trayectorias dinámicas cuánticas; como $x = x(t)$ representa una trayectoria cuántica se puede determinar que la energía total a lo largo de una trayectoria se conserva.

Usando la segunda ley de Newton cuántica $\vec{F} = -\vec{\nabla} V'$ donde $V' = V(x) + Q(x)$

$$F = m\ddot{x} = - \left[\frac{dV}{dx} + \frac{dQ}{dx} \right], \quad (3.13)$$

la ecuación (3.13) es una ecuación diferencial ordinaria (EDO) de orden superior en el tiempo, que requiere condiciones iniciales adicionales no especificadas. A diferencia de la mecánica clásica en la mecánica Bohmiana cuando se cambia la solución $\Psi(x)$, la ecuación (3.13) también cambia y genera trayectorias completamente distintas, debido a la dependencia del Q en el formalismo Bohmiano (22).

3.2. Derivación de una Nueva EDO

A continuación se presenta una formulación matemática de la mecánica cuántica que proporciona algunos beneficios únicos, tanto desde una perspectiva teórica formal, como desde la práctica computacional. En esta etapa, el enfoque principal es la formulación matemática en sí. Aunque el enfoque puede sugerir nuevas ramificaciones interpretativas, la discusión de tales temas (en particular la medición) difiere principalmente para trabajos posteriores. De manera similar en este trabajo se elaboran algunos modelos unidimensionales específicos, lo cual da espacio para que en futuros trabajos se presente una evaluación más detallada de los métodos numéricos que se podrían aplicar. Esto incluye la generalización para aplicaciones multidimensionales como se puede encontrar en la referencia (22).

En lo referente a la onda piloto se pueden plantear interrogantes como: ¿por qué debería en función del campo, operar en principio a lo largo de todo el plano (x, y) ?; ¿solo se podrá utilizar en la práctica en una sola x para una t dada? En la teoría del campo electromagnético (EM), por ejemplo, uno puede, en principio, distribuir múltiples cargas puntuales a través del espacio para percibir los efectos del campo EM donde se desee. En comparación, la onda piloto de Bohm parece bastante inútil. La situación se ve agravada por un hecho bien conocido por los profesionales numéricos, a saber, que la misma función de onda $\Psi(x, t)$ puede usarse para reconstruir un conjunto completo de trayectorias cuánticas, todas cumpliendo a las mismas leyes dinámicas, pero solo una de las cuales se considera físicamente “real”. Esto plantea la siguiente pregunta: ¿es posible considerar el conjunto de trayectorias en sí mismo como la entidad cuántica fundamental, eliminando así la necesidad de una onda piloto por completo? Esta no es una cuestión que Bohm o sus seguidores hayan considerado seriamente desde un punto de vista fundamental. En particular, los primeros cálculos de trayectorias cuánticas siempre se realizaron de una manera consistente con las relaciones lógicamente causales de la propia teoría de Bohm, es decir, $\Psi(x, t)$ se calculó primero, solo después de lo cual se construyó la trayectoria cuántica (o conjunto de trayectorias) a partir de $\Psi(x, t)$. Este enfoque, ahora llamado “analítico”, (7) (23) (24) (25) contrasta radicalmente con las metodologías de trayectoria cuántica “sintéticas” más recientes. teoría magnética cuántico (QTM) (7) (26) (22),

en el que tanto las trayectorias como la función de onda se calculan numéricamente, cada una afectando la propagación de la otra, como los campos eléctrico y magnético en una onda EM.

Definiendo $x = x(x_0, t)$ y $\dot{x} > 0$, bajo estas condiciones la función $x(t)$ satisface las condiciones necesarias para la transformación de coordenadas de t a x y viceversa. La ecuación de transformación es

$$\frac{d}{dx} = \left(\frac{1}{\dot{x}}\right) \frac{d}{dt}, \quad (3.14)$$

reescribimos el potencial cuántico (3.7) en términos de $R(x)$; como $\rho = R^2$ y usando la ecuación (3.11) tenemos que

$$R^2 \dot{x} = a \quad \Rightarrow \quad R = \sqrt{\frac{a}{\dot{x}}}, \quad (3.15)$$

aplicando la ecuación de transformación (3.14)

$$\begin{aligned} \frac{dR}{dx} &= \left(\frac{1}{\dot{x}}\right) \frac{d\left(\frac{a}{\dot{x}}\right)^{\frac{1}{2}}}{dt} = \frac{1}{\dot{x}} \frac{1}{2} \left(\frac{a}{\dot{x}}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(-\frac{\ddot{x}a}{\dot{x}^2}\right) = -\frac{a^{\frac{1}{2}} \ddot{x}}{2\dot{x}^{\frac{5}{2}}}, \\ \frac{d^2R}{dx^2} &= \frac{1}{\dot{x}} \frac{d}{dt} \left(-\frac{a^{\frac{1}{2}} \ddot{x}}{2\dot{x}^{\frac{5}{2}}}\right) = -\frac{a^{\frac{1}{2}}}{2\dot{x}} \frac{d}{dt} \left(\frac{\ddot{x}}{\dot{x}^{\frac{5}{2}}}\right), \\ \frac{d^2R}{dx^2} &= -\frac{a^{\frac{1}{2}}}{2\dot{x}} \left[\frac{\ddot{x} \dot{x}^{\frac{5}{2}} - \ddot{x}^{\frac{5}{2}} \dot{x}^{\frac{3}{2}} \ddot{x}}{\dot{x}^5} \right] = -\frac{a^{\frac{1}{2}}}{2\dot{x}} \left[\frac{\ddot{x}}{\dot{x}^{\frac{5}{2}}} - \frac{5}{2} \frac{\ddot{x}^2}{\dot{x}^{\frac{7}{2}}} \right], \\ \frac{1}{R} \frac{d^2R}{dx^2} &= \left(\frac{\dot{x}}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \left(-\frac{a^{\frac{1}{2}}}{2\dot{x}} \left[\frac{\ddot{x}}{\dot{x}^{\frac{5}{2}}} - \frac{5}{2} \frac{\ddot{x}^2}{\dot{x}^{\frac{7}{2}}} \right]\right) = -\frac{1}{2\dot{x}^{\frac{1}{2}}} \left[\frac{\ddot{x}}{\dot{x}^{\frac{5}{2}}} - \frac{5}{2} \frac{\ddot{x}^2}{\dot{x}^{\frac{7}{2}}} \right], \\ \frac{1}{R} \frac{d^2R}{dx^2} &= -\frac{1}{2} \left[\frac{\ddot{x}}{\dot{x}^3} - \frac{5}{2} \frac{\ddot{x}^2}{\dot{x}^4} \right], \end{aligned}$$

el potencial cuántico obtenido es

$$Q(x) = \frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{\ddot{x}}{\dot{x}^3} - \frac{5}{2} \frac{\ddot{x}^2}{\dot{x}^4} \right]. \quad (3.16)$$

Remplazando en la ecuación (3.12) se obtiene una EDO de tercer orden depen-

diente del tiempo, esta es la nueva EDO

$$\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x) + \frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{\ddot{x}}{\dot{x}^3} - \frac{5}{2} \frac{\ddot{x}^2}{\dot{x}^4} \right] = E. \quad (3.17)$$

La ecuación (3.17) no hace referencia a la función de onda $\Psi(x)$, o sus campos asociados $R(x)$ y $S(x)$. Es una EDO independiente, de tercer orden, no lineal, de valor real, en el tiempo; se puede resolver directamente para obtener trayectorias cuánticas, $x(t)$, para un valor dado de la energía como se muestra en la figura (3.1)². Las trayectorias cuánticas resultantes son idénticas a las de la teoría de Bohm, pero se hallan sin onda piloto o términos cuánticos de conducción externos(22).

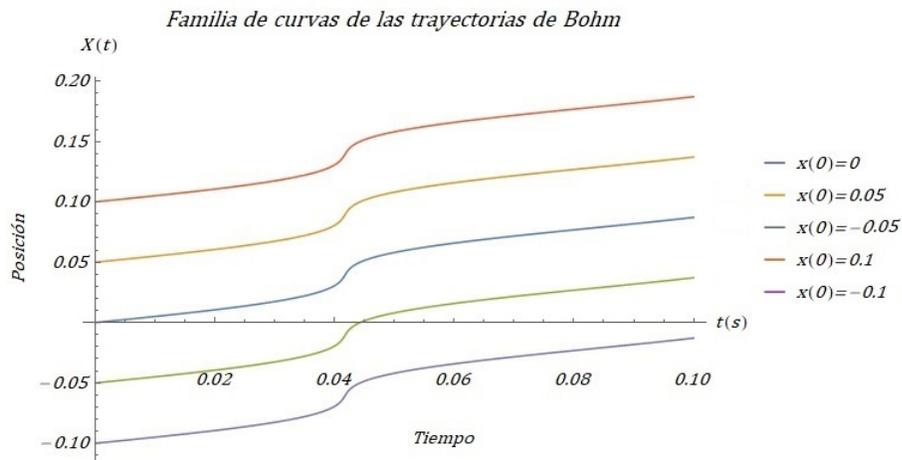


Figura 3.1: Cálculo de trayectorias usando la ecuación (3.17), usando como valores iniciales $m = 20$, $E = 40$, $V = 0$, $x'(0) = 0,5$ y $x''(0) = 0$.

²Los cálculos numéricos se realizaron modelando la ecuación (3.17) para $x(t)$, utilizando Mathematica 10.0 para obtener las trayectorias mostradas en la figura (3.1)

3.3. Una comprensión basada en la trayectoria de la interferencia cuántica

La interferencia cuántica es la consecuencia directa y observable de la superposición coherente³ de campos de probabilidad cuánticos. A diferencia de las ondas clásicas en la mecánica cuántica la interferencia no se asocia a transferencias abruptas de energía.

Cuando existen sistemas entrelazados con múltiple paridad la interferencia es un indicador de la pérdida de coherencia, inducida por la interacción de diferentes subsistemas; el fenómeno de interferencia nace por el principio de superposición, de acuerdo a este principio matemático, los campos de ondas se pueden descomponer y recombinar para producir y explicar los patrones de interferencia, en la naturaleza, los campos de ondas constituyen un todo, por lo que es importante determinar que significa su comportamiento cuando se trabaja con la interferencia cuántica (20).

3.3.1. Interferencia y trayectorias cuánticas

Como la ecuación de Schrödinger es lineal satisface el principio de superposición, entonces, dados Ψ_1 y Ψ_2 que satisfacen la ecuación de Schrödinger por separado, su superposición

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_1(\vec{r}, t) + \Psi_2(\vec{r}, t), \quad (3.18)$$

$\Psi(\vec{r}, t)$ también será una solución válida, la amplitud de la onda Ψ no es una magnitud observable, pero su densidad de probabilidad $\rho = |\Psi|^2$ si lo es. Debido a la conexión entre Ψ y ρ el principio de superposición no se cumple para ρ esto se puede ver calculando la densidad de probabilidad con ψ_i en su forma polar $\Psi_i = \rho_i^{1/2} e^{iS_i/\hbar}$, encontrando

$$\rho = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 = \Psi_1^2 + \Psi_2^2 + \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_1 \Psi_2^*,$$

³Dos ondas son coherentes cuando sus fases son iguales; sus amplitudes se combinan, dando lugar a una onda con una mayor intensidad, que es proporcional a la amplitud de la onda

$$\begin{aligned}
 \rho &= \left(\rho_1^{1/2} e^{iS_1/\hbar}\right)^2 + \left(\rho_2^{1/2} e^{iS_2/\hbar}\right)^2 + \left(\rho_1^{1/2} e^{-iS_1/\hbar} \rho_2^{1/2} e^{iS_2/\hbar}\right) + \left(\rho_1^{1/2} e^{iS_1/\hbar} \rho_2^{1/2} e^{-iS_2/\hbar}\right), \\
 \rho &= \rho_1 \left(e^{iS_1/\hbar} e^{-iS_1/\hbar}\right) + \rho_2 \left(e^{iS_2/\hbar} e^{-iS_2/\hbar}\right) + \sqrt{\rho_1 \rho_2} \left(e^{-iS_1/\hbar} e^{iS_2/\hbar} + e^{iS_1/\hbar} e^{-iS_2/\hbar}\right), \\
 \rho &= \rho_1 \left(e^{i(S_1-S_1)/\hbar}\right) + \rho_2 \left(e^{i(S_2-S_2)/\hbar}\right) + \sqrt{\rho_1 \rho_2} \left(e^{i(S_2-S_1)/\hbar} + e^{-i(S_2-S_1)/\hbar}\right),
 \end{aligned}$$

como $\cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2}$, se llega a,

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 + 2\sqrt{\rho_1 \rho_2} \cos\left(\frac{S_2 - S_1}{\hbar}\right) = \rho_1 + \rho_2 + 2\sqrt{\rho_1 \rho_2} \cos \varphi. \quad (3.19)$$

El término de interferencia ($2\sqrt{\rho_1 \rho_2} \cos \varphi$) en la ecuación (3.19) conecta coherentemente las densidades de probabilidad relacionadas a cada onda parcial. Como ρ describe la distribución estadística asociada con un conjunto de partículas, independientemente de si existe o no alguna interacción de potencial conectándolas. Se puede definir una densidad de probabilidad de corriente como

$$\vec{J} = \frac{1}{m} \text{Re} [\Psi^* \hat{\mathbf{p}} \Psi] = -\frac{i\hbar}{2m} [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*], \quad (3.20)$$

que indica el flujo del conjunto de partículas, con $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ siendo el operador momento. Sustituyendo la ecuación (3.18) en la (3.20) con Ψ_i en su forma polar; al resolver por partes

$$\begin{aligned}
 \Psi^* \nabla \Psi &= (\Psi_1 + \Psi_2)^* \nabla (\Psi_1 + \Psi_2) = (\Psi_1^* + \Psi_2^*) (\nabla \Psi_1 + \nabla \Psi_2), \\
 &= \Psi_1^* (\nabla \Psi_1 + \nabla \Psi_2) + \Psi_2^* (\nabla \Psi_1 + \nabla \Psi_2), \\
 &= \rho_1^{1/2} e^{-iS_1/\hbar} \left[\nabla \rho_1^{1/2} e^{iS_1/\hbar} + \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \nabla S_1 e^{iS_1/\hbar} + \nabla \rho_2^{1/2} e^{iS_2/\hbar} + \frac{i}{\hbar} \rho_2^{1/2} \nabla S_2 e^{iS_2/\hbar} \right] + \\
 &\quad \rho_2^{1/2} e^{-iS_2/\hbar} \left[\nabla \rho_1^{1/2} e^{iS_1/\hbar} + \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \nabla S_1 e^{iS_1/\hbar} + \nabla \rho_2^{1/2} e^{iS_2/\hbar} + \frac{i}{\hbar} \rho_2^{1/2} \nabla S_2 e^{iS_2/\hbar} \right], \\
 &= \rho_1^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2} + \frac{i}{\hbar} \rho_1 \nabla S_1 + \left(\rho_1^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} + \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \rho_2^{1/2} \nabla S_2 \right) e^{\frac{i(S_2-S_1)}{\hbar}} + \\
 &\quad \left(\rho_2^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2} + \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \rho_2^{1/2} \nabla S_1 \right) e^{-\frac{i(S_2-S_1)}{\hbar}} + \rho_2^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} + \frac{i}{\hbar} \rho_2 \nabla S_2,
 \end{aligned}$$

se llega a

$$\begin{aligned}\Psi^* \nabla \Psi &= \rho_1^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2} + \rho_2^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} + \rho_1^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} e^{i\varphi} + \rho_2^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2} e^{-i\varphi} + \\ &\quad \frac{i}{\hbar} [\rho_1 \nabla S_1 + \rho_2 \nabla S_2 + \sqrt{\rho_1 \rho_2} (\nabla S_2 e^{i\varphi} + \nabla S_1 e^{-i\varphi})],\end{aligned}$$

ahora

$$\begin{aligned}\Psi \nabla \Psi^* &= \Psi_1 (\nabla \Psi_1^* + \nabla \Psi_2^*) + \Psi_2 (\nabla \Psi_1^* + \nabla \Psi_2^*), \\ &= \rho_1^{1/2} e^{\frac{iS_1}{\hbar}} \left[\left(\nabla \rho_1^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \nabla S_1 \right) e^{-\frac{iS_1}{\hbar}} + \left(\nabla \rho_2^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_2^{1/2} \nabla S_2 \right) e^{\frac{iS_2}{\hbar}} \right] + \\ &\quad \rho_2^{1/2} e^{\frac{iS_2}{\hbar}} \left[\left(\nabla \rho_1^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \nabla S_1 \right) e^{-\frac{iS_1}{\hbar}} + \left(\nabla \rho_2^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_2^{1/2} \nabla S_2 \right) e^{-\frac{iS_2}{\hbar}} \right], \\ &= \rho_1^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_1 \nabla S_1 + \left(\rho_1^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \rho_2^{1/2} \nabla S_2 \right) e^{-\frac{i(S_2 - S_1)}{\hbar}} + \\ &\quad \left(\rho_2^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \rho_2^{1/2} \nabla S_1 \right) e^{\frac{i(S_2 - S_1)}{\hbar}} + \rho_2^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_2 \nabla S_2,\end{aligned}$$

se llega a

$$\begin{aligned}\Psi \nabla \Psi^* &= \rho_1^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2} + \rho_2^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} + \rho_1^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} e^{-i\varphi} + \rho_2^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2} e^{i\varphi} \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} [\rho_1 \nabla S_1 + \rho_2 \nabla S_2 + \sqrt{\rho_1 \rho_2} (\nabla S_2 e^{-i\varphi} + \nabla S_1 e^{i\varphi})],\end{aligned}$$

tomando en cuenta la ecuación (3.20)

$$\begin{aligned}[\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*] &= \frac{2i}{\hbar} (\rho_1 \nabla S_1 + \rho_2 \nabla S_2) + \rho_1^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}) - \\ &\quad \rho_2^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2} (e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}) + \\ &\quad \frac{i}{\hbar} \sqrt{\rho_1 \rho_2} [e^{i\varphi} (\nabla S_2 + \nabla S_1) + e^{-i\varphi} (\nabla S_1 + \nabla S_2)], \\ &= \frac{2i}{\hbar} (\rho_1 \nabla S_1 + \rho_2 \nabla S_2) + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\rho_1 \rho_2} \nabla (S_2 + S_1) (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) + \\ &\quad \rho_1^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}) - \rho_2^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2} (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}), \\ &= \frac{2i}{\hbar} [\rho_1 \nabla S_1 + \rho_2 \nabla S_2 + \sqrt{\rho_1 \rho_2} \nabla (S_2 + S_1) \cos(\varphi) + \\ &\quad \hbar (\rho_1^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} - \rho_2^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2}) \sin(\varphi)],\end{aligned}$$

finalmente sustituyendo en la ecuación (3.20)

$$\vec{J} = \frac{1}{m} [\rho_1 \nabla S_1 + \rho_2 \nabla S_2 + \sqrt{\rho_1 \rho_2} \nabla (S_2 + S_1) \cos(\varphi) + \hbar (\rho_1^{1/2} \nabla \rho_2^{1/2} - \rho_2^{1/2} \nabla \rho_1^{1/2}) \sin(\varphi)],$$

esto indica que el principio de superposición tampoco se mantiene para \vec{J} ; \vec{J} y ρ se relacionan mediante la ecuación de continuidad.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0, \quad (3.21)$$

que puede deducirse de la ecuación de Schrödinger después de multiplicarla por Ψ^* .

Las líneas a lo largo de las cuales fluye la probabilidad se pueden determinar al sustituir la función total de onda $\Psi = \rho^{1/2} e^{iS/\hbar}$ en la ecuación de Schrödinger

$$\begin{aligned} \Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) &= \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi \right), \\ \rho^{1/2} e^{-iS/\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho^{1/2} e^{iS/\hbar} \right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^{1/2} e^{-iS/\hbar} \nabla^2 \left(\rho^{1/2} e^{iS/\hbar} \right) + V \rho^{1/2} e^{-iS/\hbar} \rho^{1/2} e^{iS/\hbar}, \\ i\hbar \rho^{1/2} \frac{\partial \rho^{1/2}}{\partial t} + i\hbar \rho \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^{1/2} e^{-iS/\hbar} \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} \rho^{1/2} e^{iS/\hbar} \right) + V \rho, \\ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \rho \frac{\partial S}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^{1/2} e^{-iS/\hbar} \vec{\nabla} \cdot \left[\left(\vec{\nabla} \rho^{1/2} \right) e^{iS/\hbar} + \rho^{1/2} \frac{i}{\hbar} \left(\vec{\nabla} S \right) e^{iS/\hbar} \right] + V \rho, \\ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \rho \frac{\partial S}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^{1/2} \left[\nabla^2 \rho^{1/2} + 2 \vec{\nabla} \rho^{1/2} \frac{i}{\hbar} \left(\vec{\nabla} S \right) + \frac{i}{\hbar} \rho^{1/2} \nabla^2 S - \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{\hbar^2} \rho^{1/2} \left(\vec{\nabla} S \right)^2 \right] + V \rho, \\ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \rho \frac{\partial S}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^{1/2} \nabla^2 \rho^{1/2} - \frac{i\hbar}{m} \rho^{1/2} \vec{\nabla} \rho^{1/2} \vec{\nabla} S - \frac{i\hbar}{2m} \rho \nabla^2 S + \\ &\quad \frac{1}{2m} \rho \left(\vec{\nabla} S \right)^2 + V \rho, \end{aligned}$$

de la parte real se obtiene

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho^{\frac{1}{2}}} \nabla^2 \rho^{\frac{1}{2}} &= 0, \\ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V - Q &= 0,\end{aligned}\quad (3.22)$$

donde $Q = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho^{\frac{1}{2}}} \nabla^2 \rho^{\frac{1}{2}}$ es el potencial cuántico; y de la parte imaginaria

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{m} (\vec{\nabla} \rho \vec{\nabla} S + \rho \nabla^2 S) &= 0, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{m} \vec{\nabla} (\rho \vec{\nabla} S) &= 0.\end{aligned}\quad (3.23)$$

La parte imaginaria de la expresión resultante (3.23) es la ecuación de continuidad (3.11) siendo $\vec{J} = \frac{\rho \vec{\nabla} S}{m}$, la parte real (3.22) desde un punto de vista dinámico es la ecuación cuántica de Hamilton-Jacobi, que permite reinterpretar todo el formalismo mecánico-cuántico en términos de los caminos que el sistema puede seguir eventualmente, cuando se considera como una partícula, estos caminos están definidos como solución de la ecuación de movimiento, $\vec{P} = \vec{\nabla} S = m\dot{r}$ y $\vec{\nabla} S = \frac{m\vec{J}}{\rho}$, así

$$\dot{r} = \frac{\vec{\nabla} S}{m} = \frac{\vec{J}}{\rho} = -\frac{i\hbar}{2m\rho} [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*], \quad (3.24)$$

donde S representa una acción cuántica generalizada.

Cuando se considera la ecuación (3.24), se introduce un nuevo elemento conceptual a la mecánica cuántica, trayectorias bien definidas en el espacio tiempo; estas trayectorias son la esencia de la mecánica Bohmiana, una mecánica cuántica basada en las ecuaciones hidrodinámicas (3.23) y la ecuación de movimiento de una partícula (3.24). Gracias a la relación entre partículas y ondas en la mecánica Bohmiana, el momento inicial de la partícula está relacionado con las condiciones iniciales de $\Psi(r, 0)$ por lo tanto no es necesario buscar su valor, las posiciones iniciales se escogen aleatoriamente con la restricción que su distribución está dada por $\rho(r, 0)$.

Como se puede inferir en la ecuación (3.22), la diferencia con respecto a la mecánica clásica es que las trayectorias cuánticas evolucionan bajo la acción del potencial externo V y del potencial cuántico Q , que introduce a la ecuación de movimiento

el contexto de dependencia y no localidad necesarios para que las partículas reproduzcan los patrones de la mecánica cuántica estándar (6; 20). Cuando se considera en un gran número estadístico, la dinámica cuántica se rige por el potencial efectivo total $V_{eff}(r, t) = V(r) + Q(r, t)$.

Una propiedad del potencial cuántico se puede ver cuando se calcula el valor esperado de la energía, que en la mecánica Bohmiana consiste en determinar la energía media del ensamble

$$\bar{E} = \langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{V} \rangle, \quad (3.25)$$

$\langle \hat{T} \rangle$ es el valor esperado de la energía cinética, siendo $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ el operador cinético, cuando se consideran las condiciones polares de la función de onda, se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} \rangle &= \int \Psi^* T \Psi dr, \\ \langle \hat{T} \rangle &= \int R e^{-\frac{iS}{\hbar}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) R e^{\frac{iS}{\hbar}} dr, \\ \langle \hat{T} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int R e^{-\frac{iS}{\hbar}} \vec{\nabla} \cdot \left[\left(\vec{\nabla} R \right) e^{\frac{iS}{\hbar}} + R \vec{\nabla} e^{\frac{iS}{\hbar}} \right] dr, \\ \langle \hat{T} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int R e^{-\frac{iS}{\hbar}} \left[\left(\nabla^2 R \right) e^{\frac{iS}{\hbar}} + \left(\vec{\nabla} R \right) \cdot \left(\vec{\nabla} e^{\frac{iS}{\hbar}} \right) + \vec{\nabla} \cdot \left(R \frac{i}{\hbar} e^{\frac{iS}{\hbar}} \vec{\nabla} S \right) \right] dr, \\ \langle \hat{T} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int R e^{-\frac{iS}{\hbar}} \left\{ \left(\nabla^2 R \right) e^{\frac{iS}{\hbar}} + \left(\vec{\nabla} R \right) \cdot \left(\frac{i}{\hbar} e^{\frac{iS}{\hbar}} \vec{\nabla} S \right) + \right. \\ &\quad \left. \frac{i}{\hbar} \left[\left(\vec{\nabla} R \right) \cdot \left(e^{\frac{iS}{\hbar}} \vec{\nabla} S \right) + R \left(\frac{i}{\hbar} e^{\frac{iS}{\hbar}} \vec{\nabla} S \right) \cdot \vec{\nabla} S + R e^{\frac{iS}{\hbar}} \left(\nabla^2 S \right) \right] \right\} dr, \\ \langle \hat{T} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int R \left\{ \nabla^2 R + \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} R \cdot \vec{\nabla} S + \frac{i}{\hbar} \left[\vec{\nabla} R \cdot \vec{\nabla} S + \frac{i}{\hbar} R \left(\vec{\nabla} S \right)^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. R \nabla^2 S \right] \right\} e^{-\frac{iS}{\hbar}} e^{\frac{iS}{\hbar}} dr, \end{aligned}$$

separando los términos reales e imaginarios

$$\begin{aligned}\langle \hat{T} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int R \left[\nabla^2 R - \frac{R}{\hbar^2} (\vec{\nabla} S)^2 \right] dr - \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{i}{\hbar} \left[2R \vec{\nabla} R \cdot \vec{\nabla} S + R^2 \nabla^2 S \right] dr, \\ \langle \hat{T} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int R \left[\nabla^2 R - \frac{R}{\hbar^2} (\vec{\nabla} S)^2 \right] dr + \frac{\hbar}{2im} \int \left[\vec{\nabla} R^2 \cdot \vec{\nabla} S + R^2 \nabla^2 S \right] dr, \\ \langle \hat{T} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int R \left[\nabla^2 R - \frac{R}{\hbar^2} (\vec{\nabla} S)^2 \right] dr + \frac{\hbar}{2im} \int \vec{\nabla} \cdot (R^2 \vec{\nabla} S) dr,\end{aligned}$$

de la ecuación (3.23) se tiene que

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \cdot \vec{J} &= \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\rho \vec{\nabla} S}{m} \right) = -\frac{\partial \rho}{\partial t}, \\ \int \vec{\nabla} \cdot \vec{J} dr &= \int -\frac{\partial \rho}{\partial t} dr = -\frac{\partial}{\partial t} \int \rho dr = 0.\end{aligned}$$

Ya que la densidad de probabilidad se conserva en todo el espacio, si el sistema está cerrado, la densidad de probabilidad no fluye hacia o desde donde está definido el sistema; esta es la analogía probabilística del principio de la conservación de la energía, entonces recordando que $R^2 = \rho$ se tiene

$$\begin{aligned}\langle \hat{T} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int R \left[\nabla^2 R - \frac{R}{\hbar^2} (\vec{\nabla} S)^2 \right] dr + \frac{\hbar}{2im} \int \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{\nabla} S) dr, \\ \langle \hat{T} \rangle &= \int \left[-\frac{\hbar^2}{2m} R \nabla^2 R + \frac{R^2}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 \right] dr + \frac{\hbar}{2i} \int \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\rho \vec{\nabla} S}{m} \right) dr, \\ \langle \hat{T} \rangle &= \int -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{R^2}{R} \nabla^2 R dr + \int \frac{R^2}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 dr + \frac{\hbar}{2i} \int \vec{\nabla} \cdot \vec{J} dr, \\ \langle \hat{T} \rangle &= \int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} \right) \rho dr + \int \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} \rho dr = \langle Q \rangle + \frac{\langle P^2 \rangle}{2m}.\end{aligned}\tag{3.26}$$

Sustituyendo en la ecuación (3.25)

$$\begin{aligned}
\bar{E} &= \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{V} \rangle, \\
\bar{E} &= \left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle + \langle Q \rangle + \langle \hat{V} \rangle, \\
\bar{E} &= \bar{E}_k + \bar{Q} + \bar{V} = \bar{E}_k + V_{eff}^-,
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Q normalmente, se asigna al rol de la energía potencial cuántica; como se puede observar en la ecuación (3.26) se obtiene del operador cinético y contribuye al valor esperado de la energía cinética cuántica. Q es el responsable de la diferencia entre la dinámica cuántica y la clásica; debido a su naturaleza no local Q contiene información sobre todo el estado cuántico y, por lo tanto, la suministra a la partícula en el punto particular donde se encuentra, también se puede observar que los comportamientos semiclásicos aparecen cuando la parte de la energía asociada al potencial cuántico es suficientemente pequeño(20).

3.3.2. Ejemplos simples de interferencia cuántica con paquetes de onda Gaussianas

El paquete de onda libre Gaussianas

Por simplicidad se considera un paquete de ondas Gaussianas en una dimensión, sin embargo, los resultados se pueden generalizar para más dimensiones, así como para otros tipos de paquetes de ondas.

La evolución del paquete de onda Gaussianas se describe por, como se define en (20)

$$\Psi(x, t) = A_t e^{-\frac{(x-x_t)^2}{4\tilde{\sigma}_t\sigma_0} + \frac{iP(x-x_t)}{\hbar} + \frac{iEt}{\hbar}}, \tag{3.28}$$

donde $A_t = (2\pi\tilde{\sigma}_t^2)^{-1/4}$ y la distribución compleja dependiente del tiempo se define como:

$$\tilde{\sigma}_t = \sigma_0 \left(1 + \frac{i\hbar t}{2m\sigma_0^2} \right), \tag{3.29}$$

donde σ_0 es la distribución inicial del paquete de onda, a partir de la ecuación (3.29),

la distribución del paquete de onda en el tiempo es

$$\sigma_t = |\tilde{\sigma}_t| = \sigma_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_0^2}\right)^2}. \quad (3.30)$$

Debido al movimiento libre $x_t = x_0 + v_P t$ ($v_P = P/m$ es la velocidad de propagación), $x_0 = x(0)$ es el término asociado a las posiciones iniciales en $t = 0$ y $E = P^2/2m$. El centroide del paquete de onda se mueve a lo largo de una trayectoria clásica rectilínea. A partir de la ecuación 3.24 y hallando la fase S en la ecuación 3.28 se obtiene la ecuación de las trayectorias cuánticas dada por: (como se encuentra en la referencia (27))

$$x_t = vt + x(0) \frac{\sigma_t}{\sigma_0},$$

tomando en cuenta la ecuación (3.30)

$$x_t = vt + x(0) \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_0^4}}, \quad (3.31)$$

donde el primero es un término clásico y el segundo uno de fluctuación. Considerando la fuerza del potencial cuántico en una dimensión

$$F_Q(x) = -\frac{dQ}{dx}.$$

Como $F_Q = m\ddot{x}$ entonces

$$-\frac{dQ}{dx} = m\ddot{x},$$

se halla \ddot{x} derivando la ecuación (3.31) respecto al tiempo dos veces

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v + x(0) \frac{\hbar^2 t}{4m^2 \sigma_0^4} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_0^4}\right)^{-1/2}, \\ \frac{d^2x}{dt^2} &= \frac{x(0)\hbar^2}{4m^2 \sigma_0^4} \left[\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_0^4}\right)^{-1/2} - \frac{1}{2} t \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_0^4}\right)^{-\frac{1}{2}-1} \left(\frac{2\hbar^2 t}{4m^2 \sigma_0^4}\right) \right], \\ \frac{d^2x}{dt^2} &= \frac{x(0)\hbar^2}{4m^2 \sigma_0^4 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_0^4}\right)^{1/2}} \left(1 - \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_0^4 + \hbar^2 t^2}\right), \end{aligned}$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{x(0)\hbar^2}{(4m^2\sigma_0^4 + \hbar^2t^2) \left(1 + \frac{\hbar^2t^2}{4m^2\sigma_0^4}\right)^{1/2}},$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{2x(0)\hbar^2}{(4m^2\sigma_0^4 + \hbar^2t^2) \left(4 + \frac{\hbar^2t^2}{m^2\sigma_0^4}\right)^{1/2}},$$

reemplazando en la ecuación (3.3.2)

$$-\frac{dQ}{dx} = m \frac{2\hbar^2x(0)}{(4m^2\sigma_0^4 + \hbar^2t^2) \left(4 + \frac{\hbar^2t^2}{m^2\sigma_0^4}\right)^{1/2}},$$

$$dQ = -m \frac{2\hbar^2x(0)}{(4m^2\sigma_0^4 + \hbar^2t^2) \left(4 + \frac{\hbar^2t^2}{m^2\sigma_0^4}\right)^{1/2}} dx,$$

integrando sobre x_t , evaluado en $t = 0$ donde $x_t(t = 0) = x(0)$ como se puede observar en la ecuación (3.31)

$$\int dQ = -m \int \frac{2\hbar^2x(0)}{(4m^2\sigma_0^4 + \hbar^2t^2) \left(4 + \frac{\hbar^2t^2}{m^2\sigma_0^4}\right)^{1/2}} dx,$$

$$Q = -\frac{m\hbar^2x(0)^2}{(4m^2\sigma_0^4 + \hbar^2t^2) \left(4 + \frac{\hbar^2t^2}{m^2\sigma_0^4}\right)^{1/2}},$$

evaluando en $t = 0$ con $\sigma_t(0) = \sigma_0$ y $x_t = \sigma_t$, estas condiciones se pueden ver mas claramente en (28)

$$Q = -\frac{m\hbar^2\sigma_0^2}{(4m^2\sigma_0^4)(2)},$$

$$Q = -\frac{\hbar^2}{8m\sigma_0^2}.$$
(3.32)

De acuerdo a la ecuación (3.27) el valor esperado de E resulta

$$\bar{E} = \left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle + \left\langle -\frac{\hbar^2}{8m\sigma_0^2} \right\rangle = E_P + E_S,$$
(3.33)

en la ecuación (3.33) se observan dos contribuciones independientes del tiempo; la

primera se asocia a la propagación del paquete de onda y la segunda se relaciona con la distribución y tiene un origen puramente cuántico. Expresando E_S en términos de un momento efectivo ($E_S = P_S^2/2m$)

$$\begin{aligned}\frac{P_S^2}{2m} &= \frac{\hbar^2}{8m\sigma_0^2}, \\ P_S^2 &= \frac{\hbar^2}{4\sigma_0^2}, \\ P_S &= \frac{\hbar}{2\sigma_0},\end{aligned}$$

la cual se asemeja a la relación de incertidumbre de Heisenberg. El paquete de onda se puede asociar a dos velocidades definidas v_P y v_S . De la ecuación (3.30) definiendo una escala de tiempo de tal forma que σ_t queda $\sigma_t = \sigma_0 \sqrt{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2}$;

$$\tau = \frac{2m\sigma_0^2}{\hbar}. \quad (3.34)$$

Considerando la ecuación (3.34), si $t \ll \tau$ el ancho del paquete de onda permanecerá constante en el tiempo ($\sigma_t \approx \sigma_0$); si $t \gg \tau$ el ancho del paquete crecerá linealmente con el tiempo ($\sigma_t \approx \hbar t/2m\sigma_0$). El incremento progresivo de σ_t describe una hipérbola ($|\sigma_t|$ vs t). Cuando no se tiene un tiempo efectivo τ con el cual comparar el tiempo t , como cuando se trabaja con paquetes de ondas generalizadas, se considera el marco de referencia proporcionado por v_P y v_S los cuales se pueden estimar por estado inicial a través de la ecuación (3.26) (20); dentro de este marco de referencia se puede encontrar qué proceso va a determinar la dinámica del paquete de ondas (distribución ($t \ll \tau$) o traslación ($t \gg \tau$)) de la siguiente manera; la ecuación (3.30) se reescribe en términos de v_S

$$\begin{aligned}P_S = mv_S &= \frac{\hbar}{2\sigma_0}, \\ v_S &= \frac{\hbar}{2m\sigma_0}, \\ \sigma_t &= |\tilde{\sigma}_t| = \sigma_0 \sqrt{1 + \left(\frac{v_S t}{\sigma_0}\right)^2},\end{aligned} \quad (3.35)$$

t es el tiempo que le toma al centroide del paquete de ondas en cubrir la distancia

$d = v_P t \approx \sigma_0$, entonces

$$\sigma_t = |\tilde{\sigma}_t| = \sigma_0 \sqrt{1 + \left(\frac{v_S}{v_P}\right)^2}, \quad (3.36)$$

esto nos indica que solo usando la información inicial del paquete de ondas se puede obtener información acerca de su comportamiento dinámico posterior. $t \ll \tau$ es equivalente a tener un paquete de ondas preparado inicialmente con $v_S \ll v_P$ (el movimiento de traslación será más rápido que la distribución); $t \gg \tau$ es equivalente a $v_S \gg v_P$ (el paquete de ondas se distribuye más rápido en comparación a la traslación sobre x).

3.3.3. Dinámica de superposiciones coherentes de paquetes de ondas

Cuando la interferencia se obtiene mediante un proceso de colisión (interferómetro BEC⁴) esta se localizará en el tiempo dentro de cierta región espacial, cuando se obtiene por un proceso de difracción (experimento de doble rendija) la interferencia permanece estacionaria en el tiempo; esto se asocia a la relación entre v_P y v_S , los experimentos de colisión se caracterizan por $v_P \gg v_S$ y los de difracción por $v_P \ll v_S$.

Considerando una superposición coherente generalizada

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2, \quad (3.37)$$

donde Ψ_i son paquetes de ondas Gaussianas normalizadas que se propagan con velocidades opuestas v_P y cuyos centros inicialmente están lo suficientemente separados minimizando la superposición ($\rho_1(\vec{r}, 0)\rho_2(\vec{r}, 0) \approx 0$). La relación v_P/v_S y los factores de peso C_1 y C_2 van a influenciar la topología de las trayectorias cuánticas, como los paquetes de onda se encuentran separados inicialmente, se cumple la relación $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$.

Re-expresando la ecuación (3.37)

$$\Psi = C_1 (\psi_1 + \sqrt{\alpha} \psi_2), \quad (3.38)$$

⁴Condensado de Bose Einstein, BEC por sus siglas en ingles.

siendo $\alpha = (C_2/C_1)^2$; la densidad de probabilidad usando la ecuación (3.38) es

$$\begin{aligned}
 \rho &= |\Psi|^2, \\
 \rho &= |C_1 (\psi_1 + \sqrt{\alpha}\psi_2)|^2, \\
 \rho &= C_1^2 \left| \rho_1^{1/2} e^{iS_1/\hbar} + \sqrt{\alpha}\rho_2^{1/2} e^{iS_2/\hbar} \right|^2, \\
 \rho &= C_1^2 \left[\rho_1 + \alpha\rho_2 + \sqrt{\alpha}\rho_1^{1/2}\rho_2^{1/2} e^{iS_2/\hbar} e^{-iS_1/\hbar} + \sqrt{\alpha}\rho_1^{1/2}\rho_2^{1/2} e^{-iS_2/\hbar} e^{iS_1/\hbar} \right], \\
 \rho &= C_1^2 \left[\rho_1 + \alpha\rho_2 + \sqrt{\alpha}\sqrt{\rho_1\rho_2} (e^{i(-S_1+S_2)/\hbar} + e^{-i(-S_1+S_2)/\hbar}) \right], \\
 \rho &= C_1^2 \left[\rho_1 + \alpha\rho_2 + 2\sqrt{\alpha}\sqrt{\rho_1\rho_2}\cos\phi \right], \tag{3.39}
 \end{aligned}$$

y la densidad de corriente cuántica

$$\vec{J} = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^* \right]. \tag{3.40}$$

Tomando $a = \Psi^* \vec{\nabla} \Psi$ y $b = -\Psi \vec{\nabla} \Psi^*$, resolviendo para a tenemos

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \Psi &= C_1 \left[\left(\vec{\nabla} \rho_1^{1/2} + \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \vec{\nabla} S_1 \right) e^{iS_1/\hbar} + \sqrt{\alpha} \left(\vec{\nabla} \rho_2^{1/2} + \frac{i}{\hbar} \rho_2^{1/2} \vec{\nabla} S_2 \right) e^{iS_2/\hbar} \right], \\
 \Psi^* \vec{\nabla} \Psi &= C_1^2 \left[\rho_1^{1/2} \vec{\nabla} \rho_1^{1/2} + \alpha \rho_2^{1/2} \vec{\nabla} \rho_2^{1/2} + \frac{i}{\hbar} \left(\rho_1 \vec{\nabla} S_1 + \alpha \rho_2 \vec{\nabla} S_2 \right) + \right. \\
 &\quad \left. \sqrt{\alpha} \left(\rho_1^{1/2} \vec{\nabla} \rho_2^{1/2} + \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \rho_2^{1/2} \vec{\nabla} S_2 \right) e^{i(S_2-S_1)/\hbar} + \right. \\
 &\quad \left. \sqrt{\alpha} \left(\rho_2^{1/2} \vec{\nabla} \rho_1^{1/2} + \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \rho_2^{1/2} \vec{\nabla} S_1 \right) e^{-i(S_2-S_1)/\hbar} \right],
 \end{aligned}$$

resolviendo para b

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \Psi^* &= C_1 \left[\left(\vec{\nabla} \rho_1^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \vec{\nabla} S_1 \right) e^{-iS_1/\hbar} + \sqrt{\alpha} \left(\vec{\nabla} \rho_2^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_2^{1/2} \vec{\nabla} S_2 \right) e^{-iS_2/\hbar} \right], \\
 -\Psi \vec{\nabla} \Psi^* &= C_1^2 \left[-\rho_1^{1/2} \vec{\nabla} \rho_1^{1/2} - \alpha \rho_2^{1/2} \vec{\nabla} \rho_2^{1/2} + \frac{i}{\hbar} \left(\rho_1 \vec{\nabla} S_1 + \alpha \rho_2 \vec{\nabla} S_2 \right) - \right. \\
 &\quad \left. \sqrt{\alpha} \left(\rho_1^{1/2} \vec{\nabla} \rho_2^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \rho_2^{1/2} \vec{\nabla} S_2 \right) e^{-i(S_2-S_1)/\hbar} - \right. \\
 &\quad \left. \sqrt{\alpha} \left(\rho_2^{1/2} \vec{\nabla} \rho_1^{1/2} - \frac{i}{\hbar} \rho_1^{1/2} \rho_2^{1/2} \vec{\nabla} S_1 \right) e^{i(S_2-S_1)/\hbar} \right].
 \end{aligned}$$

Remplazando en la ecuación (3.40)

$$\vec{J} = \frac{C_1^2}{m} \left[\rho_1 \vec{\nabla} S_1 + \alpha \rho_2 \vec{\nabla} S_2 + \sqrt{\alpha} \sqrt{\rho_1 \rho_2} \vec{\nabla} (S_1 + S_2) \cos \phi + \hbar \sqrt{\alpha} \left(\rho_1^{1/2} \vec{\nabla} \rho_2^{1/2} - \rho_2^{1/2} \vec{\nabla} \rho_1^{1/2} \right) \sin \phi \right], \quad (3.41)$$

dividiendo la ecuación (3.41) en (3.39) se pueden obtener las trayectorias cuánticas de la ecuación de movimiento

$$\dot{\vec{r}} = \frac{1}{m} \frac{\rho_1 \vec{\nabla} S_1 + \alpha \rho_2 \vec{\nabla} S_2 + \sqrt{\alpha} \sqrt{\rho_1 \rho_2} \vec{\nabla} (S_1 + S_2) \cos \phi}{\rho_1 + \alpha \rho_2 + 2\sqrt{\alpha} \sqrt{\rho_1 \rho_2} \cos \phi} + \sqrt{\alpha} \frac{\hbar \left(\rho_1^{1/2} \vec{\nabla} \rho_2^{1/2} - \rho_2^{1/2} \vec{\nabla} \rho_1^{1/2} \right) \sin \phi}{m \left(\rho_1 + \alpha \rho_2 + 2\sqrt{\alpha} \sqrt{\rho_1 \rho_2} \cos \phi \right)}. \quad (3.42)$$

En la ecuación anterior existen dos contribuciones que están relacionadas a los efectos causados por el intercambio de los paquetes de ondas en el movimiento de las partículas después del proceso de interferencia, la primera contribución se da después del intercambio del módulo o de la fase de los paquetes de onda mientras que la segunda contribución cambia el signo con esta operación. La primera contribución se asocia a la evolución de cada flujo individualmente y a su combinación, dando información sobre el comportamiento asintótico de las trayectorias cuánticas y sobre el proceso de interferencia. La segunda contribución describe los efectos de la interferencia conectados con la asimetría o diferencia de los paquetes de onda; su contribución desaparece si son idénticas y coinciden en $x = 0$, aunque su superposición sea diferente de cero(23; 20).

Caso por colisión

Por simplicidad se asume $\alpha = 1$, con ambos paquetes de onda idénticos y propagándose en direcciones opuestas con la misma velocidad. Ψ_1 se encuentra en la región I y Ψ_2 en la región II (figura(3.2) parte (a)), después de que los paquetes de onda llegan a su punto máximo de interferencia (figura(3.2) parte (b)) en $t_{I\text{máx}}$ Ψ_1 se mueve a la región II y Ψ_2 a la región I (figura(3.2) parte (c)), las densidades de pro-

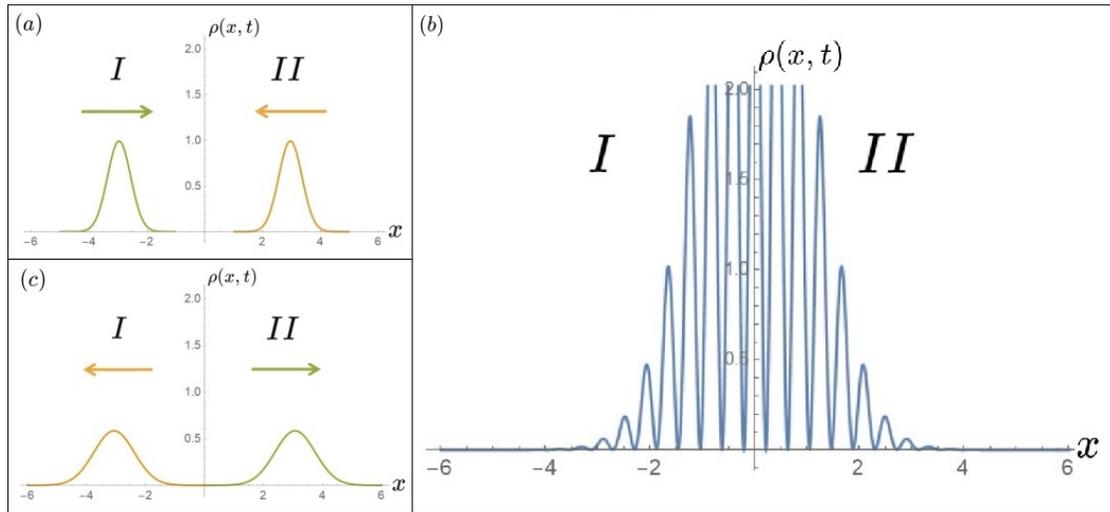


Figura 3.2: Representación de la evolución en el tiempo de la colisión de dos paquetes de onda Gaussianas(3.28) con $v_p = 10m/s$ y $v_s = 1m/s$. Se interpreta de la siguiente manera: (a) Antes de la colisión, (b) Las ondas superpuestas completamente y (c) Después de la colisión

babilidad asociadas a los paquetes de onda representan el comportamiento estadístico de un ensemble de partículas cuánticas, idénticas que no interactúan entre sí, durante el intervalo de tiempo donde los efectos de la interferencia son importantes (cuando las ondas se superponen), las trayectorias Bohmianas evitan cruzarse(29; 20); la mecánica cuántica estadística se caracteriza por mantener la coherencia y transmitirla a la dinámica cuántica correspondiente. El proceso de interferencia se debe interpretar de manera distinta cuando se analiza desde la perspectiva de trayectorias cuánticas, para paquetes de onda idénticos la velocidad de campo se desvanece a lo largo de $x = 0$ en cualquier tiempo t , lo que significa que no hay flujo de densidad de probabilidad entre la región I y II por lo tanto las trayectorias que empiezan en alguna de estas regiones nunca cruzan a la otra, todo proceso se puede entender como un tipo de movimiento de rebote de los paquetes de onda.

Desde un punto de vista dinámico cuando el ensemble inicialmente asociado con uno de los paquetes de onda se comporta asintóticamente con respecto al otro, significa que el signo de la velocidad de campo asociada cambiará después de la colisión; antes de la colisión apunta hacia $x = 0$ (Figura (3.2) parte (a)), después diverge con

respecto a $x = 0$ (figura(3.2) parte (c)) y en $t_{I\acute{m}ax}$ (figura(3.2) parte (b)) no apunta hacia ningún lado, permanece estacionaria. Como en el proceso de dispersión elástica las partículas intercambiarán su distribución de probabilidad elástica.

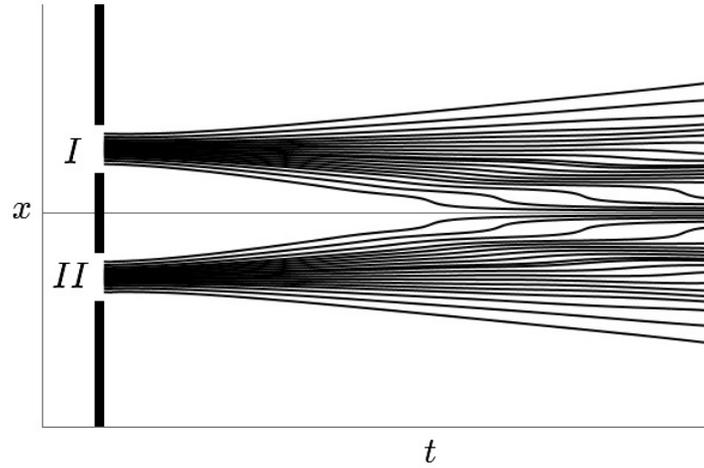


Figura 3.3: Modelación de las trayectorias cuánticas Bohmianas de la colisión de dos paquetes de onda Gaussianas usando la ecuación (3.42) con $v_\rho = 10m/s$ y $v_S = 1m/s$.

Esto se puede apreciar en la figura (3.2) y en la figura (3.3)⁵ después de la colisión los dos ensambles de trayectorias rebotan hacia atrás y siguen el camino que seguirían partículas sin desviación de acuerdo a la ecuación (3.8); este proceso se describe analíticamente así:

$$\dot{\vec{r}}_I \approx \frac{\vec{\nabla}S_1}{m} \quad \text{o} \quad \dot{\vec{r}}_{II} \approx \frac{\vec{\nabla}S_2}{m}, \quad (3.43)$$

asintóticamente ($t \gg t_{I\acute{m}ax}$) la ecuación (3.42) se puede expresar como

$$\dot{\vec{r}} \approx \frac{1}{m} \frac{\rho_1 \vec{\nabla}S_1 + \rho_2 \vec{\nabla}S_2}{\rho_1 + \rho_2}, \quad (3.44)$$

donde se usa la aproximación $\rho_1(\vec{r}, 0)\rho_2(\vec{r}, 0) \approx 0$, entonces la densidad de probabilidad total $\rho = \rho_1 + \rho_2$ es diferente de cero solo en las regiones cubiertas por ρ_1 o por ρ_2 , la región I tendrá $\rho = \rho_2$ y la región II $\rho = \rho_1$. entonces

⁵Modelacion de la ecuación (3.42) en Mathematica 10.0 tomando los valores $v_\rho = 10$ y $v_S = 1$ para encontrar las figuras 3.2 y 3.3

$$\dot{\vec{r}}_I \approx \frac{\vec{\nabla} S_2}{m} \quad \text{y} \quad \dot{\vec{r}}_{II} \approx \frac{\vec{\nabla} S_1}{m}, \quad (3.45)$$

que reproduce la dinámica asintótica observada en la figura 3.3.

Aunque la distribución de probabilidad se transfiere, las partículas permanecen dentro del dominio definido por su correspondiente distribución inicial, la propiedad de no cruce de la mecánica Bohmiana muestra la restricción que existe para el flujo de probabilidad cuántica, que va más allá de la separabilidad de flujos implícitos en el principio de superposición (29; 23).

Caso por difracción

Para este caso la difusión es más rápida que la propagación, esta es la razón por la cual se pueden observar las trayectorias cuánticas del experimento de la doble rendija en la región de Fraunhofer. Este caso se estudia en (20) donde se muestra que la solución asintótica de la ecuación (3.42) es

$$x(t) \approx 2\pi n \frac{\sigma_0}{x_0} (v_S t) \quad \text{con} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3.46)$$

esto es, trayectorias cuánticas cuyas pendientes son cantidades cuantizadas proporcionales a v_S . Cuando la ecuación (3.42) se integra exactamente se observan racimos de trayectorias cuantizadas, que en general están distribuidas alrededor de el valor dado por la ecuación (3.46). Este calculo (la integral) se encuentra en (20)

Capítulo 4

Aplicaciones de la mecánica Bohmiana

El formalismo matemático detrás de la teoría Bohmiana, es suficiente para asegurar, que las predicciones reproduzcan los resultados experimentales para problemas de una sola partícula o de muchos cuerpos, con o sin aparato de medición. Como se mostró en la introducción, existen varias teorías cuánticas (Copenhague, Bohmiana, Colapso espontáneo, muchos mundos, etc.) que son empíricamente equivalentes, al tiempo que proporcionan una comprensión diferente de la naturaleza. Entre todas estas interpretaciones posibles, la teoría Bohmiana proporciona una comprensión, trivial y empíricamente correcta de cualquier tipo de experimento cuántico, en términos de partículas puntuales guiadas por ondas. En este sentido, dado que el papel de la física es proporcionar explicaciones comprensibles sobre lo que parecía incomprendible al principio, cuanto más trivial es una explicación, más comprensible se vuelve (1; 30). La interpretación de Bohm se a utilizado exitosamente en el estudio de múltiples fenómenos, por ejemplo, computacionalmente en la cuantificación de la conductancia de AC, la reacción inversa de la medición cuántica, los momentos altos de la corriente eléctrica, las transiciones de lo clásico a lo cuántico, las desigualdades de Leggett, entre otros; en teoría de campos cuánticos de Bohm se han desarrollado para el campo electromagnético cuantificado libre, los campos cuánticos bosónicos, los campos cuánticos fermiónicos, la electrodinámica cuántica (6; 30; 31; 8).

4.1. Campos de investigación

- **Átomos ultra-fríos (Transporte de ondas de materia):**, los átomos neutros ultrafríos son átomos con temperaturas cercanas a 0 kelvin, típicamente inferior a unas décimas de microkelvins, de modo que su dinámica se rige por la ecuación de Schrödinger (no relativista); Los átomos ultrafríos se han convertido en un sistema fundamental para probar los principios de la mecánica cuántica y la física de la materia condensada. En física de átomos ultrafríos, la mecánica Bohmiana se ha aplicado para investigar el transporte adiabático de un solo átomo entre las trampas externas de un sistema formado por tres trampas idénticas como se ve en la figura 4.1 (32).

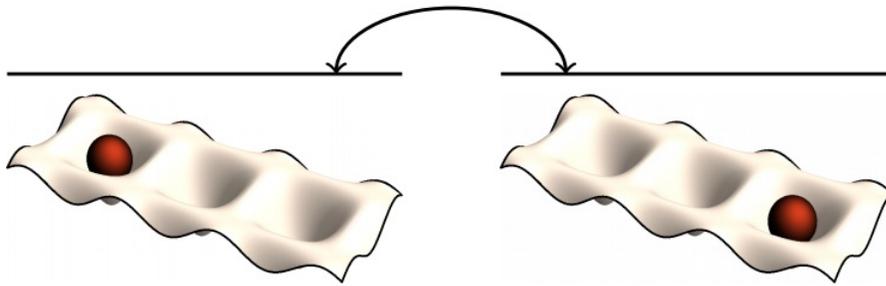


Figura 4.1: Sistema óptico-atómico de tres niveles para un átomo en un pozo triple de potencial. Tomada de (1)

En el régimen adiabático cuando los parámetros del sistema son suavemente variados en el tiempo existe un valor propio de energía del sistema (estado oscuro espacial) que permite transferir adiabáticamente un átomo de un extremo de la trampa al otro sin pasar por la del medio (Fig.4.1 paso espacial adiabático); este tipo de transporte cuántico contradice la ecuación de continuidad que se deriva de la ecuación de Schrödinger; el desarrollo de esta ecuación en términos de trayectorias Bohmianas, indica que las trayectorias aceleran cuando están pasando la trampa del medio mostrando así que la ecuación de continuidad se cumple. Cuando se aumenta el tiempo para el transporte de un paquete de ondas completo, el pico de velocidad de cada trayectoria aumenta, no existe un límite aparente para las velocidades de las trayectorias en la región media de

la trampa, a medida que se acercan al límite de la adiabaticidad perfecta las trayectorias Bohmianas pueden llegar a sobrepasar la velocidad de la luz (33); bajo la ecuación de Dirac esto no es posible, por lo que con la existencia de trayectorias superlumínicas se hace necesaria una corrección relativista para poder describir la dinámica del sistema apropiadamente. El paso adiabático espacial para dos átomos idénticos en un pozo triple de potencial también ha sido discutido en términos de trayectorias Bohmianas, proponiendo métodos eficientes para transportar un hueco, lo cual se podría usar para preparar trampas de dominios sin defectos, para realizar cálculos cuánticos o para diseñar dispositivos atomtrónicos¹. Además, teniendo en cuenta las estadísticas bosónicas o fermiónicas de estos átomos y haciendo uso tanto de la interacción de colisión como de la interacción de intercambio, se han discutido esquemas de transporte de huecos para la implementación de un diodo coherente de un solo hueco y un transistor coherente de un solo hueco(34).

En la física de átomos ultrafríos, las trayectorias Bohmianas se han utilizado para obtener información física sobre el transporte adiabático de átomos individuales, condensados de Bose-Einstein y agujeros en potenciales de pozo triple. Se puede prever que futuras investigaciones en este campo se centren en aplicar algoritmos de Bohm para sistemas mesoscópicos a la dinámica de unos pocos átomos fríos(35).

- **Dinámica molecular no adiabática:** Las transiciones no adiabáticas entre superficies de energía potencial juegan un papel importante en muchos procesos químicos, para estudiar estos procesos es necesario ir más allá de la interacción cuasi-estática electrón-nuclear, juntando la aproximación cuántica y clásica, donde los electrones se describen con la mecánica cuántica (interpretación estándar) y los núcleos con la clásica; esta mezcla de aproximaciones describe muchos fenómenos no adiabáticos, pero cuando existen efectos nucleares cuánticos (decoherencia, interferencia, efecto túnel) esta aproximación presenta limitaciones. La mecánica Bohmiana presenta un método alternativo

¹La atomtrónica es la tecnología emergente que se ocupa de la creación de dispositivos análogos a los circuitos electrónicos pero, en lugar de electrones, se utilizan átomos en estado de condensado Bose-Einstein.

basado en trayectoria para dar una descripción a los efectos nucleares cuánticos, desde que Wyatt presentó en 1999 (36), se han propuesto diferentes esquemas basados en la mecánica Bohmiana para describir la dinámica molecular sobre la base de una representación diabática de la función de onda molecular, los paquetes de ondas que representan el movimiento nuclear se discretizan en un conjunto de trayectorias de Bohm. Estas trayectorias se siguen en el tiempo mediante la integración de ecuaciones de movimiento acopladas que se formulan y resuelven en la imagen lagrangiana del movimiento de fluidos de acuerdo con las ecuaciones de Hamilton-Jacobi. Para el modelo de problemas de colisión de dos estados, incluso con una pequeña cantidad de elementos fluidos, el método predice con precisión el comportamiento oscilatorio complejo de los paquetes de ondas. Basándose en la descomposición adiabática de la función de onda del electrón-nuclear, Tavernelli ha presentado un enfoque adecuado para calcular todas las propiedades de la estructura electrónica necesarias para la propagación de trayectorias cuánticas (37). La ecuación nuclear de movimiento está formulada en términos de la ecuación de Hamilton-Jacobi, la teoría del funcional de densidad y la teoría del funcional de densidad dependiente del tiempo, se utilizan para resolver la estructura electrónica en cada paso de tiempo. El enfoque Bohmiano para la dinámica acoplada electrón-nuclear se deriva, sin depender de una representación base (diabática o adiabática) de la función de onda molecular completa. Los electrones se describen mediante ondas dependientes, a través de la energía potencial total del sistema, y paraméricamente de las trayectorias de los núcleos (38). Las ondas electrónicas se utilizan para calcular las trayectorias Bohmianas de los electrones que se requieren para calcular la fuerza que actúa sobre las variables nucleares. Incluso en el límite clásico, estos enfoques ofrecen una solución al problema de la ramificación de la trayectoria al crear un nuevo tipo de reacción inversa cuántica en el subsistema clásico, un ensamble de trayectorias Bohmianas clásica-cuánticas se crea para una sola función de onda mecánica-cuántica inicial (39). Christov también presenta un método para resolver problemas cuánticos de muchos cuerpos en dinámica molecular donde los grados de libertad tanto electrónicos como nucleares se representan por trayectorias Bohmianas, las ondas guías son solución

de la ecuación de Schrödinger aproximada, evaluada a lo largo de trayectorias electrónicas y nucleares (40).

Con el enfoque Bohmiano para procesos no adiabáticos, las ecuaciones de movimiento que consideran los procesos cuántico de los núcleos se han aplicado solo a moléculas muy pequeñas o sistemas modelo, su extensión a sistemas formados por más átomos sigue siendo cuestionable debido a la inestabilidad con el cálculo del potencial cuántico, como el potencial cuántico lleva información crucial de la naturaleza de los núcleos, esta aproximación puede fallar, existen alternativas basadas en trayectorias cuánticas que evitan el cálculo del potencial cuántico como la mecánica cuántica sin funciones de onda (41) o la extensión del esquema de función de onda condicional (42), las cuales se encuentran bajo estudio y no se han demostrado aún.

- **Interacción luz-materia:** Con la creación constante de láseres a mayores intensidades, aparece una gran cantidad de fenómenos cuánticos, estos procesos necesitan una descripción cuántica de la interacción luz-materia. El átomo de hidrógeno ha sido ampliamente estudiado en una y dos dimensiones, en la mecánica Bohmiana como prototipo para investigar la fotoionización, donde en el modelo de hidrógeno en una dimensión, las trayectorias externas que escapan del núcleo se asocian a la ionización y las trayectorias alrededor del núcleo a la dinámica interna de electrones; este modelo se ha usado para realizar cálculos en el límite de ionización; para el estudio del rol del potencial cuántico en fotoionización y del comportamiento caótico de las trayectorias clásicas y Bohmianas. Christov ha desarrollado un método cuántico tipo Monte Carlo (dependiente del tiempo) basado en trayectorias Bohmianas para simular la dinámica de átomos multielectrónicos en campos ultra fuertes (43), este método se relaciona con el formalismo de la función de onda condicional y reduce el problema de resolver la ecuación de Schrödinger para N-cuerpos a resolver un set de N ecuaciones acopladas pseudo-Schrödinger, cada set produce la dinámica de una trayectoria para todas las partículas, esto se repite para diferentes posiciones iniciales obteniendo la dinámica completa del sistema; este método se puede aplicar para hallar el estado base de un átomo y para estudiar su dinámica bajo un pulso ultraintenso; se ha llevado a estudiar el helio en

tres dimensiones y permite el uso de un potencial efectivo que puede modelar la interacción no local entre electrones introduciendo una correlación en sus estados cuánticos. Las trayectorias Bohmianas se han usado para estudiar la generación armónica de ordenes altos, su espectro se puede calcular de la transformada de Fourier para el dipolo eléctrico inducido en un átomo dentro de un campo oscilatorio, las trayectorias de diferentes partes del paquete de ondas del electrón contribuyen a diferentes partes del espectro armónico (44); las trayectorias que empiezan lejos del núcleo las cuales ionizan y oscilan con la frecuencia del campo representan la frecuencia baja del espectro y las que empiezan cerca del núcleo representan las frecuencias armónicas altas del espectro, Esto ha sido confirmado con potenciales de largo y corto alcance, también se ha determinado que las trayectorias externas afectan de manera no local a las internas. Además, las trayectorias Bohmianas se han utilizado para ilustrar como los electrones absorben el momento angular debido a la polarización de la luz y a su momento angular orbital (45). La mecánica Bohmiana se ha usado también para estudiar la interacción de moléculas con campos electromagnéticos donde la dinámica de efecto túnel de los electrones entre los estados localizados alrededor de cada núcleo de hidrógeno es más rápida que el cambio del campo eléctrico y por tanto es la que modula la ionización; las trayectorias se pueden usar para construir un modelo de dos niveles para la fase relativa de los dos estados localizados que permite predecir la velocidad Bohmiana de las trayectorias dentro de la molécula y obtener la estructura de ionización del subciclo (46). También se ha estudiado la dinámica de ionización de la molécula H_2 en una dimensión para distinguir entre dos clases distintas de ionización dependiendo de si la dinámica de los dos electrones está correlacionada o no.

En conclusión la mecánica Bohmiana se ha utilizado ampliamente para el estudio de fenómenos en el campo de interacciones fuertes luz-materia, las trayectorias Bohmianas se han usado tanto para realizar cálculos como para entender la dinámica de estos sistemas.

- **Nanoelectrónica (de DC a THz):** Los avances en la tecnología han llegado a desarrollar dispositivos que se aproximan cada vez más al límite cuántico por lo que es necesario empezar a describirlos bajo las leyes de la mecánica

cuántica; muchos formalismos han sido utilizados para modelar el transporte cuántico de electrones, la mecánica Bohmiana ha profundizado exitosamente el estudio del transporte de electrones. El estudio de este fenómeno trae consigo el problema de múltiples grados de libertad, para lidiar con esto se han desarrollado aproximaciones basadas en la mecánica de Bohm que tratan el problema de muchos cuerpos; usando un potencial efectivo apropiado, obtenido convolucionando el potencial electrostático con una función Gaussiana, se puede replicar ciertos comportamientos cuánticos usando la física clásica, entonces no se requiere resolver la ecuación de Schrödinger (47). En términos de las trayectorias Bohmianas la dispersión inelástica se modela por un potencial imaginario variable espacialmente, este enfoque está estrechamente relacionado con los términos complejos que aparecen en la formulación condicional de la mecánica Bohmiana y proporciona una nueva perspectiva de los efectos de la dispersión y la decoherencia electrón-fonón. Buscando una herramienta de simulación de dispositivos de electrones más amplia se propuso una generalización de la técnica de simulación de dispositivos Monte Carlo de conjunto clásico para tratar simultáneamente los efectos de coherencia de fase de la mecánica cuántica y las interacciones de dispersión en dispositivos cuánticos (48); El tratamiento cuántico bajo este método restringe el transporte a las regiones del dispositivo donde el potencial cambia en distancias del orden de la longitud de onda de De Broglie de los portadores. Las trayectorias de Bohm asociadas con paquetes de ondas Gaussianas dependientes del tiempo se utilizan para simular el transporte de electrones en la ventana cuántica. Usando mecánica Bohmiana en sistemas de medida multitemporales se debe agregar los grados de libertad del aparato de medida a los del sistema que se va a estudiar y solucionar la ecuación de Schrödinger para el sistema combinado, computacionalmente esto añade complejidad al problema, se puede usar un potencial efectivo para la interacción del sistema del instrumento de medida, esto permite relacionar la medición (amperímetro) de la corriente total con las trayectorias Bohmianas de sistemas eléctricos, la división entre lo transmitido y reflejado viene principalmente de la región activa y no del amperímetro, los efectos de la medición pueden ser despreciables para frecuencias altas (49). La ecuación de Poisson

y la dinámica electrónica se resuelvan de manera autoconsistente, debido a el cálculo de la corriente de desplazamiento y la imposición de la neutralidad total de la carga, esto se logra resolviendo un hamiltoniano de muchas partículas para un conjunto de partículas con interacción de Coulomb dentro de un sistema abierto sin ninguna aproximación perturbativa o de campo medio por medio de un algoritmo de trayectoria condicional (50; 51). En la mecánica de Bohm usando una generalización de los teoremas de Ramo-ShockleyPellegriniel la evaluación de la conservación de la corriente se logró altas frecuencias (52). Oriols y colaboradores han desarrollado un simulador de Monte Carlo cuántico basado en trayectorias Bohmianas que describe el transporte de electrones en dispositivos a nanoescala, para DC y más allá de este régimen (48), este simulador también incluye un paquete basado en el límite semiclásico de la mecánica de Bohm y se ha generalizado incluyendo el transporte de electrones dependiente del espín (53), basados en este algoritmo presentaron un simulador de transporte cuántico de electrones dependiente del tiempo en 3D basado en trayectorias Bohmianas llamado BITLLES, basándose en la Mecánica Bohmiana, resuelve la ecuación de Schrödinger de muchas partículas para cientos de electrones en términos de múltiples ecuaciones de pseudo-Schrödinger de una sola partícula sin perder el Coulomb explícito e intercambiar correlaciones entre electrones (a un nivel comparable a la Teoría Funcional de la Densidad Dependiente del Tiempo) (54). La mecánica de Bohm se esta utilizando activamente en la simulación del transporte de electrones siendo una herramienta que va desde lo interpretativo, hasta aproximaciones al problema de muchos cuerpos en regímenes de alta frecuencia, actualmente se están desarrollando investigaciones para fenómenos más complejos para describir dispositivos moleculares.

- **Más allá del escenario no relativista sin espín:** La mecánica cuántica Bohmiana permite una descripción de la dinámica de las partículas de espín y puede extenderse a otros dominios como la relatividad, la teoría cuántica de campos, la cosmología cuántica o incluso la óptica clásica. Existen dos alternativas para incluir el grado de libertad de espín dentro de la formulación de Bohm; el espín se puede explicar reemplazando la función de onda escalar por

una función con valor de espín cuya dinámica viene dada por la generalización adecuada de la ecuación de Schrödinger, también se puede incluir el espín de la partícula en la dinámica siguiendo un enfoque Bohmiano completo agregando tres ángulos de Euler (α, β, γ) a la función de onda para cada una de las partículas de espín del sistema, de modo que la amplitud y la fase de la función de onda dependen de la posición de las partículas y de los ángulos (55; 6); la sincronización de las trayectorias de las partículas también se ha considerado como un recurso para obtener una formulación cuántica Bohmiana covariante de Lorentz, la no localidad es una de las principales preocupaciones en el desarrollo de una teoría cuántica relativista satisfactoria, Dürr y colaboradores desarrollaron un enfoque que consiste en extraer, de la función de onda, información del comportamiento espacio-tiempo similar al espacio para definir la mecánica de Bohm (56; 57); Nikolić, generaliza la densidad de probabilidad espacial estándar a una densidad de probabilidad espacio-temporal e introduce una función de onda de muchos tiempos para sistemas de muchas partículas, con esto deriva una formulación covariante relativista de la mecánica cuántica para partículas sin espín y con espín (58; 59). En la mecánica cuántica de Bohm relativista el carácter covariante relativista es explícito; la ecuación relativista de Dirac también se ha analizado en términos de trayectorias de Bohm, demostrando que la probabilidad de que un electrón alcance la velocidad de la luz en cualquier momento es igual a cero (57). Se han propuesto diferentes modelos desde la mecánica Bohmiana que describen la creación y aniquilación de partículas que son capaces de reproducir las predicciones cuánticas estándar, por ejemplo, cuando la función de onda condicional asociada con una medida cuántica ya no depende de una de las coordenadas del espacio-tiempo, entonces la partícula correspondiente tiene velocidad cuatridimensional cero, entonces la partícula ya no tiene una trayectoria asociada, está representada por un punto en el espacio-tiempo. Las trayectorias en el espacio-tiempo pueden tener puntos de inicio (creación) y final (aniquilación), que corresponden a posiciones en las que se desvanecen sus cuatro velocidades, esto posibilita la no conservación del número de partículas en los sistemas cuánticos; los campos también podrían tomarse como variables ocultas en la mecánica cuántica de Bohm

(31). La mecánica Bohmiana se ha usado como modelo causal en el estudio de la cosmología cuántica, para una función de onda estacionaria, la formulación de Bohm puede proporcionar una evolución temporal a través de las trayectorias de Bohm; para evitar singularidades por gravedad se ha considerado usar la fuerza cuántica que aparece en la mecánica de Bohm (60; 61). Kocsis y colaboradores, desarrollaron experimentalmente los caminos promedio estadísticamente tomados por fotones individuales en un experimento de doble rendija de Young a través de la técnica de medición débil, mostrando que estas trayectorias promedio coinciden con las correspondientes a las trayectorias cuánticas de Bohm (62). Orefice y colaboradores han estudiado la conexión entre las trayectorias Bohmianas de partículas masivas y las trayectorias ópticas de haces de luz más allá de la aproximación de la óptica geométrica, han demostrado explícitamente que la ecuación de Helmholtz de una onda de óptica clásica, sin aproximaciones, da un conjunto hamiltoniano de ecuaciones de trazado de rayos que tienen en cuenta la interferencia y la difracción, haciendo evidencia que las trayectorias asociadas con estos rayos dependen de la distribución de la amplitud del haz mediante el potencial de onda, que es la fuente de la no localidad (se omite en la aproximación de la óptica geométrica), este potencial de onda es equivalente al potencial cuántico de la teoría de Bohm (63).

4.2. Aplicación a problemas generales

- **Colisión elástica:** El primer acercamiento Bohmiano es el de la dispersión de objetivos localizados realizado por Hirschfelder y colaboradores, donde estudiaron la colisión elástica entre dos partículas que interactúan a través de un potencial cuadrado con simetría esférica (64); Un estudio realizado por Zans y colaboradores llevó a la aparición de una dinámica de vórtice alrededor del objetivo en el tiempo de máxima interacción, este tipo de dinámicas son típicas de cualquier proceso de dispersión elástica independientemente del sistema analizado (23); por otro lado Efthymiopoulos y colaboradores estudiaron la difracción de partículas cargadas por objetivos de material delgado, estimando el tiempo de llegada usando las trayectorias Bohmianas (65; 66). La mecánica

Bohmiana se ha aplicado a el campo de dispersión de la superficie del átomo buscando determinar la relación entre la difracción superficial y las características del arco iris clásico, el papel de la dinámica de vórtices en el proceso de adsorción (29) o el origen dinámico de resonancias de adsorción selectiva por debajo del inicio del caos clásico; usando trayectorias Bohmianas para analizar el caso de superficies periódicas, a medida que aumenta la extensión paralela a la superficie de la onda entrante, la información sobre la periodicidad de la superficie se vuelve más precisa, tal comportamiento es una consecuencia directa de la redistribución de los momentos Bohmianos a lo largo de varios grupos de trayectorias (23); además al observar el comportamiento dinámico del paquete de ondas acercándose a la superficie, las trayectorias que comienzan alrededor de las partes más traseras de la función de onda inicial no alcanzan la superficie, rebotan hacia atrás y las trayectorias con posiciones iniciales más cercanas a la superficie se mueven paralelas a ella hasta que la onda comienza a difractarse; esto se puede asociar con la propiedad de no cruce de Bohm (las trayectorias de Bohm no pueden atravesar el mismo punto espacial al mismo tiempo) (29; 23). Philippidis analizó el experimento de la doble rendija desde la mecánica Bohmiana, consideró dos rendijas Gaussianas, explicó la dinámica de las trayectorias en términos de la topología del potencial cuántico; observando que las trayectorias se mueven a lo largo de regiones donde el potencial es plano y evitan aquellas donde el potencial varía (67); en la topología central plana dos grupos de trayectorias (cada una de una rendija distinta) coexisten sin mezclarse, esto indica que siempre es posible reconocer la rendija por la que pasó la partícula sin necesidad de observarla directamente; datos obtenidos en un experimento de tipo Young con la luz han confirmado la viabilidad de este fenómeno (62); la difracción de rendija también se ha analizado para diferentes tipos de ondas de materia y varios arreglos de rendijas, a medida que aumenta el número de rendijas, se puede notar la aparición de una estructura ordenada, a medida que se aumenta el número de rendijas el patrón de difracción se vuelve un patrón regular como se puede observar en la figura 4.2(alfombra de Talbot); para números enteros pares el patrón está en fase con la rejilla y para enteros impares hay un desplazamiento a mitad de camino (20; 23).

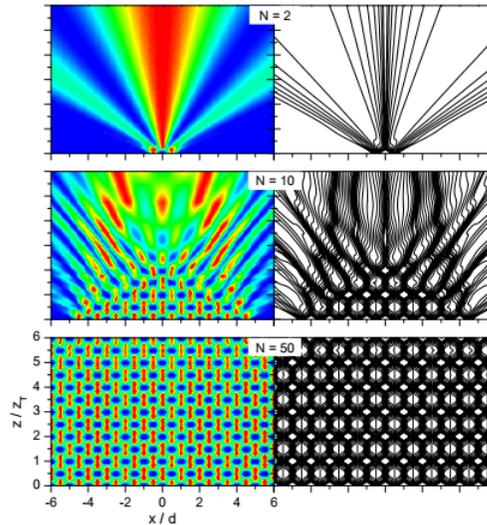


Figura 4.2: Aparición de la alfombra de Talbot en el campo cercano (izquierda), representación Bohmiana (derecha). Tomada de (1; 2)

- El problema de muchos cuerpos:** La solución de Monte Carlo para la ecuación de Schrödinger da una solución aproximada para un problema Hamiltoniano de muchos cuerpos exacto (68), el algoritmo Hartree-Fock aproxima la función de onda de muchas partículas a un determinante de Slater de funciones de onda de una partícula que no interactúan; la teoría funcional de la densidad (DFT) muestra que la densidad de carga se puede utilizar para calcular cualquier observable sin conocer la función de onda (69); con la interpretación de Bohm se han propuesto diferentes métodos para obtener aproximaciones al problema de muchos cuerpos, entre ellos el uso del potencial cuántico Bohmiano para sistemas de muchas partículas, la mezcla de grados de libertad clásicos y cuánticos, el uso de funciones de onda condicionales donde la mecánica Bohmiana propone una función de onda de una sola partícula en el espacio tridimensional y proporciona características de muchas partículas del sistema, la función de onda condicional se construye sustituyendo todos los $N - 1$ grados de libertad de la función de onda de muchas partículas, por sus trayectorias de Bohm dejando una función de onda de una sola partícula con una dependencia del tiempo compleja; existe un intercambio de energía cinética entre las partículas (sistema no adiabático); Además desde la perspectiva Bohmiana con

la ecuación no lineal y no unitaria es posible analizar sistemas no aislados los cuales no se rigen por la ecuación lineal y unitaria de Schrödinger (1).

- **Medidas cuánticas:** La explicación Bohmiana para la medida, se fundamenta en evitar la división entre el sistema cuántico y el instrumento de medición, las partículas que definen el sistema cuántico y las que define el instrumento de medida tienen su propia trayectoria Bohmiana, y todas comparten una función de onda común de muchas partículas, donde, los valores de las mediciones y sus probabilidades se obtienen a partir de las trayectorias que conforman el señalador del instrumento de medida. La información del sistema se obtiene a partir de un análisis estadístico de los datos obtenidos tras la repetición del experimento, las mediciones que son tanto débiles como preseleccionadas y postseleccionadas proporcionan el valor débil, se puede preseleccionar el sistema en un estado físico particular (inicial) y luego hacer una medición débil del impulso que proporciona una distorsión pequeña del sistema, se realiza una medición fuerte (proyectiva) de la posición y se postselecciona los valores débiles de la medición del momento que posteriormente dan una posición determinada; esto da información de la velocidad Bohmiana local de una partícula (70), basándose en esta técnica Kocsis y colaboradores reconstruyeron las trayectorias promedio de los fotones en el experimento de dos rendijas (62); Traversa mostró que la medición de la velocidad Bohmiana utilizando el valor débil (desarrollado por Aharonov (71)) es compatible con el concepto la medida del valor de operadores positivos (POVM) (72), la velocidad Bohmiana medida es un valor débil que se obtiene después de un gran conjunto de resultados experimentales; Lundeen y colaboradores mostraron que la función de onda de una partícula se puede “medir directamente” usando mediciones débiles(73) y Travis mostró que si se aplica la misma técnica débil a un sistema entrelazado, el resultado es precisamente la función de onda condicional derivada de la mecánica Bohmiana (74).
- **Caos cuántico:** El caos cuántico se puede abordar desde la mecánica Bohmiana, la cual permite analizar sistemas cuánticos con las mismas herramientas que se utilizan en la mecánica clásica; Bohm (8), Hiley (55), Dürr(75) y Holland(6) (por separado) propusieron que el concepto de caos de la física clásica puede

generalizarse a sistemas cuánticos mediante trayectorias Bohmianas, donde el caos cuántico surge de la ley dinámica (75). Desde un punto de vista Bohmiano, todas las partículas asociadas con funciones propias están en reposo y los potenciales exhiben movimientos cuánticos al elegir combinaciones lineales de sus funciones propias; la dinámica caótica de un sistema se puede caracterizar midiendo la tasa de intercambio de información entre diferentes partes del sistema dinámico a medida que evoluciona (76), esto se relaciona con la entropía de Kolmogorov-Sinai (KS) (77), este tipo de entropía métrica está relacionada con la tasa de pérdida de información al predecir la evolución futura del sistema mediante el análisis del comportamiento que muestran sus trayectorias; cuando en una región del espacio fase el flujo de trayectorias cuánticas tiene entropía KS positiva entonces la dinámica cuántica es caótica. La existencia del caos clásico no implica que su equivalente cuántico también lo exhiba en términos Bohmianos. Schwengelbeck y Faisal(78), Parmenter y Valentine(79) analizaron la evolución temporal de los exponentes de Lyapunov, encontrando una serie de requisitos que los sistemas cuánticos deben cumplir para presentar una dinámica Bohmiana caótica, el sistema debe tener dos grados de libertad, la función de onda debe ser una superposición de tres estados estacionarios y un par de estos estados estacionarios deben tener energías propias mutuamente desproporcionadas; el análisis Bohmiano del caos cuántico muestra que las inestabilidades cuánticas se derivan de la complejidad del potencial cuántico y no de las inestabilidades clásicas externas (1). Frisk estableció un paralelismo entre el caos Bohmiano y los sistemas hamiltonianos clásicos, vinculó la presencia de vórtices con la presencia de comportamientos caóticos cuánticos; en la mecánica clásica, la dinámica caótica está relacionada con la función potencial y en la mecánica cuántica la no linealidad de la ecuación de guía de Bohm puede llevar a una dinámica caótica (80); Wisniacki (81) y Efthymiopoulos (65) (por separado) concluyeron que el origen del caos Bohmiano se debe a la presencia de vórtices cuánticos² en movimiento (82). El estudio del caos cuántico desde la perspectiva Bohmiana se extiende al problema de la hipótesis del equilibrio cuántico donde el caos es la causa del origen dinámico de la relaja-

²Un vórtice cuántico representa una circulación de flujo cuantificada de una cantidad física, los vórtices cuánticos son un tipo de defecto topológico exhibido en superfluidos y superconductores

ción cuántica, bajo condiciones específicas las trayectorias cuánticas conducen a un acercamiento asintótico en el tiempo, cuando las trayectorias exhiben una dinámica caótica se puede entonces, observar la relajación cuántica (83); la mecánica de Bohm permite poner la mecánica cuántica al nivel de la mecánica estadística clásica, mediante la conservación de la probabilidad a lo largo de las trayectorias; lo cual convierte esta interpretación en una herramienta útil para explorar y analizar el aspecto fundamental relacionado con la hipótesis del equilibrio cuántico y de manera práctica la dinámica de relajación de los sistemas cuánticos (84; 85; 86).

- **Dispersión reactiva:** La mecánica Bohmiana permite el estudio de la dispersión en términos de la dinámica de la evolución de la densidad de probabilidad del sistema. McCullough y Wyatt propusieron el uso del vector de flujo de probabilidad cuántica como herramienta para estudiar la dispersión reactiva, para partículas neutras, calculando el flujo cuántico y representarlo como mapas de flechas, encontraron una explicación dinámica para el efecto centrífugo negativo ; cuando se crea un nodo de densidad de probabilidad, observaron un comportamiento dinámico de vórtice, el flujo gira alrededor del nodo dando lugar a el efecto de remolino cuántico (87); la presencia de vórtices cuánticos se pueden observar en diferentes problemas físicos de dos o más dimensiones, esto se debe a la fusión de diferentes partes de la función de onda en regiones del espacio de configuración; está dinámica se asocia a la presencia de caos en la mecánica Bohmiana. Hirschfelder y colaboradores, analizaron la dispersión producida por una barrera bidimensional cuadrada donde encontraron, los análogos cuánticos de la reflexión total alterada de la luz polarizada perpendicularmente y el desplazamiento longitudinal de Goos-Hänchen, también mostraron que dentro del esquema Bohmiano, el tunelamiento sucede cuando las partículas viajan por encima de la barrera (88). Basándose en la mecánica de Bohm, Dewdney y Hiley reprodujeron algunos de los resultados mostrados por Goldberg sobre la dispersión de barreras y pozos unidimensionales usando trayectorias (55). El método de trayectoria cuántica de la mecánica de Bohm, se ha utilizado de manera alternativa a los métodos numéricos de propagación cuántica para el estudio de la dispersión reactiva incluido el tunelamiento (7).

- **Transición y decoherencia cuántica a clásica:** En la mecánica Bohmiana la ecuación de Hamilton-Jacobi tiene un término adicional, el potencial cuántico contiene información sobre la curvatura topológica de la función de onda en el espacio de configuración; la densidad de probabilidad en el espacio de configuraciones es una función oscilatoria cuya media coincide con la clásica, el potencial cuántico presenta una topología bastante compleja, de modo que el factor que depende de la curvatura de la función de onda no desaparece, la regla de no cruce sigue siendo válida. Las trayectorias nos muestran el comportamiento del sistema a nivel local (subsistema), a un nivel global se ha observado que los patrones de intensidad se acercan a los clásicos (89). La estructura de escalera observada en la función de deflexión cuántica está relacionada con la aparición de los ángulos de Bragg, correspondiendo cada paso a un orden de difracción diferente; a medida que aumenta la masa de la partícula entrante la estructura de escalera se vuelve más compleja, asemejándose a la función de deflexión clásica, sin embargo existen diferencias, las trayectorias en los subsistemas no pueden cruzarse pero intentan imitar el comportamiento clásico, lo que da lugar a una serie de oscilaciones a lo largo de la función de deflexión, solo se puede reproducir la mitad de la función de deflexión clásica, además la función de deflexión cuántica solo puede reproducir globalmente la clásica, pero no dentro de cada subsistema. El entrelazamiento está ligado al intento de lidiar con las oscilaciones que aparecen en el límite clásico, la inseparabilidad entre diferentes grados de libertad conduce a una decoherencia en el sistema (90). Diferentes autores han tratado el problema del entrelazamiento dentro del marco Bohmiano, las trayectorias Bohmianas también se han utilizado para analizar la apariencia de no localidad en la mecánica cuántica (91). La mecánica de Bohm, proporciona una prescripción inequívoca para monitorear el flujo y el intercambio de coherencia cuántica entre el sistema y el entorno mediante la función de onda condicional; se han estudiado diferentes enfoques como métodos mixtos de Bohmiano-clásico (92) y extensiones análogas que hacen uso del enfoque hidrodinámico (86).

Capítulo 5

Objeciones a la interpretación causal

Existen diferentes objeciones a la interpretación de Bohm, acá se nombrarán solo algunos de los obstáculos con los que esta interpretación se ha encontrado, es importante recalcar que muchos de estos obstáculos u objeciones están actualmente bajo investigación constante por teóricos que la consideran digna de su estudio, y de hecho, muchas de las objeciones iniciales se han ido resolviendo a medida que nuevas investigaciones han salido a la luz, por supuesto al aumentar la complejidad de las investigaciones surgen nuevos obstáculos, preguntas y objeciones.

Existe una característica llamativa de la mecánica de Bohm que a menudo se presenta como una objeción: en la mecánica de Bohm la función de onda actúa sobre las posiciones de las partículas pero, al evolucionar de forma autónoma a través de la ecuación de Schrödinger, las partículas no actúan sobre ella. Esto es considerado por algunos Bohmianos, como una pista importante sobre el significado de la función de onda de la mecánica cuántica, la función de onda podría considerarse como un ente matemático sin explicación física, como un objeto que se puede controlar convenientemente; expresando la ley del movimiento análoga a la Hamiltoniana en la mecánica clásica, y que una ecuación de tipo Schrödinger dependiente del tiempo, desde esta perspectiva más profunda (cosmológica), es meramente fenomenológica(93; 56); Otra objeción frecuente desde la perspectiva estándar es la cosmología cuántica, para la cual el sistema cuántico relevante es todo el universo y, por lo tanto, no hay ningún

observador fuera del sistema que provoque el colapso de la función de onda en la medición. En este contexto, los modelos de Bohm han aclarado la cuestión de la inevitabilidad de la presencia de singularidades en las teorías que pretenden llegar de la gravedad cuántica (94).

En el caso de la dispersión, las distribuciones de densidad continua de la función de onda de Schrödinger pueden reproducirse mediante un conjunto de trayectorias que representan eventos de dispersión posteriores. Sin embargo, la mecánica Bohmiana tiene un problema conceptual, si solo se involucran partículas individuales; por ejemplo, Si un electrón atómico está asociado con una función de onda puramente real, la mecánica de Bohm postula que el electrón está en reposo, este es el caso para todos los estados S y para todos los subniveles magnéticos con número cuántico magnético cero. Holland (6) mostró que un electrón en reposo, no puede caer por un potencial cuántico que equilibra el potencial de Coulomb, además el electrón en reposo no podría irradiar, ni producir un momento magnético. Un electrón que descansa fuera del núcleo causaría un fuerte momento dipolar eléctrico y esto contradice las consideraciones de paridad, puesto que, el cuadrado absoluto de una función de onda atómica es par, el operador dipolar impar llevaría a un valor esperado cero del momento dipolar eléctrico y se habrían encontrado fuertes momentos dipolares en los experimentos donde los átomos atraviesan campos eléctricos no homogéneos, los experimentos de dispersión átomo-átomo exhibirían una fuerte interacción dipolo-dipolo que disminuye lentamente al aumentar la distancia entre los átomos, como la interacción habitual de Van-der-Waals. Las fuerzas de largo alcance entre los átomos también influyen fuertemente en las tasas de recombinación utilizadas para simular la proporción de átomos y moléculas en la alta atmósfera, sería imposible no haber observado esos momentos dipolares eléctricos; entonces, el postulado de electrones en reposo debe ser incorrecto. La mecánica de Bohm predice momentos dipolares eléctricos no solo para todos los estados s y subniveles magnéticos con un número cuántico magnético que se desvanece, sino también para todos los demás estados del hidrógeno atómico; si el número cuántico magnético no es cero, la mecánica de Bohm postula que los electrones asociados se mueven en círculos con latitud constante; los centros de estas órbitas no coincidirían con la ubicación del núcleo. También se encuentran discrepancias entre las predicciones de Bohm y los resultados experi-

mentales para moléculas diatómicas que vibran, las funciones de onda que describen las vibraciones moleculares son puramente reales, lo que indica que la distancia entre los dos núcleos debería ser constante y las moléculas individuales no estarían en la distancia de equilibrio; las energías de los niveles vibratorios dependen fuertemente de la distancia de los dos núcleos y los espectros de vibración prueban que todas las moléculas tienen el mismo momento de inercia. Solo para grandes estados vibracionales, la falta de armonía del potencial molecular interno conduce a un aumento pequeño pero observable de la distancia internuclear, así que los núcleos no pueden estar en reposo para moléculas diatómicas en estados vibratoriamente excitados (95).

Capítulo 6

Conclusión

“Siempre pensé que algo estaba fundamentalmente mal con el universo”

Douglas Adams

En la propuesta de este trabajo se planteo como objetivo general realizar un estudio teórico de la interpretación no estándar de la mecánica cuántica, y como objetivos específicos de la interpretación de Bohm, realizar una revisión bibliográfica de artículos y libros; desarrollar el formalismo de esta, comprobar y modelar los cálculos de algunas de las ecuaciones de trayectorias Bohmianas. Considero que estos objetivos se lograron a plenitud, ya que, en el documento se presenta el formalismo de la mecánica Bohmiana (capitulo 2), se hizo una revisión bibliográfica lo más extensa posible y se reprodujo en detalle uno de los cálculos más relevantes en la teoría de Bohm, como lo es la interferencia de ondas Gaussianas asociado al experimento de doble rendija como se ve en el capitulo 3, adicionalmente se presenta de manera general los axiomas de la interpretación estándar y se mencionan algunas de las motivaciones para estudiar una interpretación distinta, permitiendo hacer una comparación entre los axiomas de la mecánica cuántica estándar y la mecánica cuántica Bohmiana.

La mecánica Bohmiana se a utilizado de manera exitosa en muchas áreas de la física y se busca llevar al estudio y descripción de fenómenos cuánticos mucho más complejos; cuando la interpretación no es óptima para el estudio de un fenómeno, las trayectorias como base de investigación lo pueden ser, lo que nos da pie a creer

que la interpretación Bohmiana tal y como está escrita en este documento no es completa ni suficiente para describir toda la física cuántica, pero es una base sólida para el desarrollo de una interpretación de la física cuántica completa; una de las ventajas más importantes de la interpretación estudiada en este documento es la causalidad puesto que a largo plazo esto contribuirá de manera positiva a la intención de crear un puente entre la física clásica y la física cuántica, que ha sido uno de los objetivos desde el nacimiento de la física cuántica, entre otras de sus ventajas está, la explicación Bohmiana de una medida cuántica, que reproduce la evolución temporal unitaria de los sistemas cuánticos con ondas y partículas, y proporciona su propio formalismo para explicar todo tipo de evoluciones no unitarias de las medidas; vale la pena mencionar que, a pesar de la equivalencia empírica entre la mecánica de Bohm y la teoría cuántica estándar, hay una variedad de problemas experimentales que no son interpretados cómodamente en el formalismo cuántico estándar, pero que la mecánica de Bohm puede interpretar de manera más simple. Entre estos se encuentran los tiempos de permanencia y tunelización (96), los tiempos de escape y las posiciones de escape (97), la teoría de la dispersión (98) y el caos cuántico (75). Además, los recursos adicionales presentes en la mecánica de Bohm, en particular la noción de función de onda condicional, han sido útiles para el desarrollo de esquemas de aproximación para tratar aplicaciones cuánticas prácticas (32). “la ruta Bohmiana parece un camino muy saludable y hermoso para tomar mientras se viaja por el territorio cuántico” (1).

Como continuidad de este trabajo, para quienes quieran profundizar en temas específicos, actualmente en la literatura se encuentran las siguientes líneas de investigación asociadas a la mecánica Bohmiana:

- Relativistic Bohmian Mechanics
- A Bohmian version of quantum electrodynamics
- Bohmian Mechanics in curved space-time
- Bohmian Mechanics and space-time singularities
- Bohmian Mechanics for a time-independent wave function of the universe
- Bohmian Mechanics and scattering theory.

- Classical limit of Bohmian Mechanics.
- Time measurements in Quantum Mechanics.
- Identical particles in Bohmian Mechanics.
- Quantum Mechanics in topologically non-trivial spaces.

A lo largo de la historia se han encontrado objeciones a esta interpretación, la mayoría se basan en desinformación o en el simple hecho de que aún no se han abordado. La mecánica Bohmiana aun tiene mucho por investigar y muchas preguntas por resolver, como las interacciones entre el sistema y el instrumento de medición, que lleva a preguntas sobre el entrelazamiento en la vida cotidiana y cómo se pueden controlar de manera óptima los procesos de decoherencia. La literatura que se encuentra actualmente acerca de esta interpretación muestra que hasta el momento esta teoría es consistente, aumentando la complejidad y la cantidad de fenómenos que se estudian con esta interpretación, es claro que aún queda un gran camino por recorrer y muchas preguntas por resolver, pero es innegable el hecho de que va por buen camino.

Con todos los avances tecnológicos y científicos que nos han mostrado un mundo cuántico completamente nuevo sería arrogante creer que una interpretación escrita hace más de 70 años es completa y suficiente para describir fenómenos cuánticos, Pero, si es una buena base para construirla, es necesario el estudio a profundidad de los fenómenos cuánticos para lograr llegar a una interpretación completa y suficiente de la mecánica cuántica.

Feynman explico mediante una analogía lo que hacemos para tratar de entender los fenómenos naturales, comparó la naturaleza con juego de ajedrez donde nosotros somos los espectadores y no sabemos las reglas del juego, bajo la observación podemos ir entendido y encontrando las reglas del juego; en el camino puede ser necesario modificar algunas de las reglas iniciales, "... descubrimos una ley y después encontramos una comprensión más profunda de la misma... Tienes todas las leyes, se ve muy bien y de repente algún fenómeno extraños ocurre..." (99), pues las observaciones se vuelven más complejas, algunas reglas pueden dejar de ser ciertas por completo; esta modificación es natural, la podemos ver con el nacimiento de diferentes campos de investigación de la física, cuando la física clásica dejó de ser suficiente, nació la física

cuántica y de esta nacieron muchos más campos de investigación, y busca facilitar el entendimiento de los fenómenos y llevar a leyes que inicialmente se pueden perciben como complejas y extrañas a leyes lógicas y fáciles de entender “ ... en la física cuando descubres cosas nuevas, parece más simple. En general, parece ser más complicado porque aprendemos sobre una experiencia mayor, a medida que aprendemos sobre más partículas y cosas nuevas, entonces las leyes parecen complicadas nuevamente. pero si te das cuenta todo el tiempo, lo cual es algo maravilloso, que a medida que expandimos nuestra experiencia a regiones cada vez más salvajes, de vez en cuando tenemos estas integraciones en las que todo se une en una unificación que termina siendo mas sencilla de lo que se tenia antes...” (99).

Bibliografía

- [1] A. Benseny, G. Albareda, A. Sanz, J. Mompart, and X. Oriols, “Applied Bohmian Mechanics,” *The European Physical Journal D*, vol. 68, 06 2014.
- [2] A. Sanz and S. Miret-Artés, “A causal look into the quantum talbot effect,” *The Journal of chemical physics*, vol. 126, p. 234106, 07 2007.
- [3] N. Zettili, *Quantum Mechanics Concepts and applications*. Wiley, 2009.
- [4] J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*. 09 2020.
- [5] D. Bohm and H. Stapp, “The undivided universe: An ontological interpretation of quantum theory,” *American Journal of Physics*, vol. 62, pp. 958–960, 09 1994.
- [6] P. Holland, *Quantum Theory of Motion: An account of the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 1993.
- [7] R. Wyatt, *Quantum Dynamics with Trajectories: Introduction to Quantum Hydrodynamics*. Springer, New York, 2005.
- [8] D. Bohm, “A suggested interpretation of the quantum theory in terms of “hidden” variables. i. ii,” *Physical Review, II. Series*, vol. 85, 01 1952.
- [9] J. Bell, *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics*, vol. 57, pp. 196–200. 06 1989.
- [10] A. M. de la Peña, Luis y Cetto, “Teorías estocásticas de la mecánica cuántica,” *Revista Mexicana de Física*, vol. 37, 09 1991.

-
- [11] M. Born, “Statistical interpretation of quantum mechanics,” *Science (New York, N.Y.)*, vol. 122, pp. 675–9, 11 1955.
- [12] B. Dewitt, H. Everett, and N. Graham, “The many-worlds interpretation of quantum mechanics,” 01 1973.
- [13] R. Griffiths, “Consistent histories and the interpretation of quantum mechanics,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 36, pp. 219–272, 07 1984.
- [14] E. Wigner, “Symmetries and reflections, scientific essays,” *American Journal of Physics - AMER J PHYS*, vol. 35, pp. 1169–1170, 12 1967.
- [15] A. Bassi and G. Ghirardi, “Dynamical reduction models,” , vol. 379, pp. 257–426, June 2003.
- [16] C. Colijn, *The de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics and it’s Application to some Simple Systems*. Phd thesis, University of Waterloo, 2003.
- [17] A. S. Sanz and S. Miret-Artés, “Quantum phase analysis with quantum trajectories: A step towards the creation of a Bohmian thinking,” *American Journal of Physics*, vol. 80, pp. 525–533, jun 2012.
- [18] S. Goldstein, *Bohmian Mechanics*. Stanford University, 2021.
- [19] F. Peat and J. Cushing, “Infinite potential: The life and times of david bohm,” *Physics Today*, vol. 50, pp. 77–78, 03 1997.
- [20] A. Sanz and S. Miret-Artes, “A trajectory-based understanding of quantum interference,” *J. Phys. A: Math. Theor.*, vol. 41, 06 2008.
- [21] X. Pladevall, *Applied Bohmian Mechanics: From Nanoscale Systems to Cosmology*. Mompert, J. (Eds.). Jenny Stanford Publishing, 2012.
- [22] B. Poirier, “Bohmian mechanics without pilot waves,” *Chemical Physics*, vol. 370, no. 1, pp. 4–14, 2010. Dynamics of molecular systems: From quantum to classical.

-
- [23] A. Sanz and S. Miret-Artés, “Quantum trajectories in elastic atom-surface scattering: Threshold and selective adsorption resonances,” *The Journal of chemical physics*, vol. 122, p. 14702, 02 2005.
- [24] G. Bowman *Am. J. Phys.*, vol. 70, p. 313, 2002.
- [25] C.-D. Yang *Am. J. Phys.*, vol. 319, p. 444, 2005.
- [26] H. R. B.K. Dey, A. Askar *J. Chem. Phys.*, vol. 109, p. 8770, 1998.
- [27] A. Sanz and S. Miret-Artés, “Aspects of nonlocality from a quantum trajectory perspective: A wkb approach to bohmian mechanics,” *Chemical Physics Letters - CHEM PHYS LETT*, vol. 445, 03 2007.
- [28] G. Groessing, S. Fussy, J. Mesa Pascasio, and H. Schwabl, “An explanation of interference effects in the double slit experiment: Classical trajectories plus ballistic diffusion caused by zero-point fluctuations,” *Annals of Physics*, vol. 327, pp. 421–437, 01 2012.
- [29] A. Sanz, F. Borondo, and S. Miret-Artés, “Particle diffraction studied using quantum trajectories,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 14, p. 6109, 06 2002.
- [30] X. Oriols and J. Mompart. 2019.
- [31] W. Struyve, “Pilot-wave theory and quantum fields,” *Rept. Prog. Phys.*, vol. 73, p. 106001, 2010.
- [32] A. Benseny, J. Bagudà, X. Oriols, and J. Mompart, “Need for relativistic corrections in the analysis of spatial adiabatic passage of matter waves,” *Phys. Rev. A*, vol. 85, 05 2012.
- [33] D. Tausk and R. Tumulka, “Can we make a bohmian electron reach the speed of light, at least for one instant?,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 51, 06 2008.

- [34] A. Benseny, S. Fernández-Vidal, J. Bagudà, R. Corbalán, A. Picón, L. Roso, G. Birkl, and J. Mompart, “Atomtronics with holes: Coherent transport of an empty site in a triple-well potential,” *Phys. Rev. A*, vol. 82, p. 013604, Jul 2010.
- [35] X. Oriols, “Quantum-trajectory approach to time-dependent transport in mesoscopic systems with electron-electron interactions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, p. 066803, Feb 2007.
- [36] C. Lopreore and R. Wyatt, “Quantum wave packet dynamics with trajectories,” *Physical Review Letters - PHYS REV LETT*, vol. 82, pp. 5190–5193, 06 1999.
- [37] B. Curchod, I. Tavernelli, and U. Rothlisberger, “Trajectory-based solution of the nonadiabatic quantum dynamics equations: An on-the-fly approach for molecular dynamics simulations,” *Physical chemistry chemical physics : PCCP*, vol. 13, pp. 3231–6, 02 2011.
- [38] E. Gindensperger, C. Meier, and J. Beswick, “Mixing quantum and classical dynamics using bohmian trajectories,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 113, pp. 9369–9372, 12 2000.
- [39] O. Prezhdo and C. Brooksby, “Quantum backreaction through the bohmian particle,” *Physical review letters*, vol. 86, pp. 3215–9, 05 2001.
- [40] I. Christov, “Molecular dynamics with time dependent quantum monte carlo,” *The Journal of chemical physics*, vol. 129, p. 214107, 01 2009.
- [41] J. Schiff and B. Poirier, “Quantum mechanics without wavefunctions,” *The Journal of chemical physics*, vol. 136, p. 031102, 01 2012.
- [42] G. Albareda, H. Appel, I. Franco, A. Abedi, and A. Rubio, “A correlated electron-nuclear dynamics with conditional wave functions,” *Physical review letters*, vol. 113, 05 2014.
- [43] I. Christov, “Time dependent quantum monte carlo: Principles and perspectives,” *AIP Conference Proceedings*, vol. 1228, 04 2010.

-
- [44] Y. Song, F.-M. Guo, S. Li, J.-G. Chen, S.-L. Zeng, and Y. Yang, “Investigation of the generation of high-order harmonics through bohmian trajectories,” *Phys. Rev. A*, vol. 86, 09 2012.
- [45] A. Picón, A. Benseny, J. Mompert, J. Vázquez de Aldana, L. Plaja, G. Calvo, and L. Roso, “Transferring orbital and spin angular momenta of light to atoms,” *New Journal of Physics*, vol. 12, 08 2010.
- [46] B. A. Takemoto N, “Visualization and interpretation of attosecond electron dynamics in laser-driven hydrogen molecular ion using bohmian trajectorye,” *The Journal of chemical physics*, vol. 134, 02 2011.
- [47] L. Shifren, R. Akis, and D. Ferry, “Correspondence between quantum and classical motion: Comparing bohmian mechanics with a smoothed effective potential approach,” *Physics Letters A*, vol. 274, pp. 75–83, 09 2000.
- [48] X. Oriols, A. Trois, and G. Blouin, “Self-consistent simulation of quantum shot noise in nanoscale electron devices,” *Applied Physics Letters*, vol. 85, pp. 3596–3598, 2004.
- [49] D. Marian, E. Colomé, Z. Zhan, and X. Oriols, “Quantum noise from a bohmian perspective: fundamental understanding and practical computation,” *Journal of Computational Electronics*, vol. 14, 10 2014.
- [50] G. Albareda, J. Sune, and X. Oriols, “Many-particle hamiltonian for open systems with full coulomb interaction: Application to classical and quantum time-dependent simulations of nanoscale electron devices,” *Physical Review B*, vol. 79, pp. 75315–, 02 2009.
- [51] X. Oriols, “Quantum-trajectory approach to time-dependent transport in mesoscopic systems with electron-electron interactions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, p. 066803, Feb 2007.
- [52] A. Alarcón and X. Oriols, “Computation of quantum electron transport with local current conservation using quantum trajectories,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2009, p. P01051, 01 2009.

-
- [53] A. Alarcón, X. Cartoixa, and X. Oriols, “Towards the explicit computation of bohm velocities associated to n-electron wave-functions with arbitrary spin-orientations,” *Physica Status Solidi (c)*, vol. 7, 11 2010.
- [54] G. Albareda, A. Alarcón, F. Traversa, A. Benali, and X. Oriols, “Bitlles: a quantum trajectory simulator for dc, ac, and noise with explicit coulomb and exchange correlations among transport electrons,” 05 2022.
- [55] C. Dewdney, P. Holland, and A. Kyprianidis, “What happens in a spin measurement?,” *Physics Letters A*, vol. 119, pp. 259–267, 12 1986.
- [56] D. Dürr, S. Goldstein, T. Norsen, W. Struyve, and N. Zanghi, “Can bohmian mechanics be made relativistic?,” *Proceedings. Mathematical, physical, and engineering sciences / the Royal Society*, vol. 470, p. 20130699, 02 2014.
- [57] R. Tumulka, “The únromantic picturesóf quantum theory,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 40, p. 3245, 03 2007.
- [58] H. Nikolić, “Relativistic quantum mechanics and the bohmian interpretation,” *Foundations of Physics Letters*, vol. 18, pp. 549–561, 11 2005.
- [59] H. Nikolić, “Making nonlocal reality compatible with relativity,” *International Journal of Quantum Information*, vol. 09, 11 2011.
- [60] F. Shojai and S. Molladavoudi, “Quantum cosmology with varying speed of light and bohmian trajectories,” *General Relativity and Gravitation*, vol. 39, 08 2007.
- [61] N. Pinto-Neto, E. Santini, and F. Falciano, “Quantization of friedmann cosmological models with two fluids: Dust plus radiation,” *Physics Letters A*, vol. 344, pp. 131–143, 05 2005.
- [62] S. Kocsis, B. Braverman, S. Ravets, M. Stevens, R. Mirin, L. Shalm, and A. Steinberg, “Observing the average trajectories of single photons in a two-slit interferometer,” *Science (New York, N.Y.)*, vol. 332, pp. 1170–3, 06 2011.
- [63] A. Orefice, R. Giovanelli, and D. Ditto, “Complete hamiltonian description of wave-like features in classical and quantum physics,” *Foundations of Physics*, vol. 39, pp. 256–272, 03 2009.

-
- [64] J. Hirschfelder and K.-t. Tang, “Quantum mechanical streamlines. iv. collision of two spheres with square potential wells or barriers,” *Chemical Physics - CHEM PHYS*, vol. 65, pp. 470–486, 07 1976.
- [65] N. Delis, C. Efthymiopoulos, and G. Contopoulos, “Quantum vortices and trajectories in particle diffraction,” *International Journal of Bifurcation and Chaos*, vol. 22, 03 2011.
- [66] G. Contopoulos, N. Delis, and C. Efthymiopoulos, “Order in de broglie - bohm quantum mechanics,” *Journal of Physics A-mathematical and Theoretical - J PHYS A-MATH THEOR*, vol. 45, 03 2012.
- [67] C. Philippidis, C. Dewdney, and B. J. Hiley, “Quantum interference and the quantum potencial,” *Il Nuovo Cimento B (1971-1996)*, vol. 52, no. 1, pp. 15–28, 1979.
- [68] M. Nightingale and C. Umrigar, *Quantum Monte Carlo methods in physics and chemistry*, vol. 154. Springer, 1999.
- [69] W. Kohn, “Electronic structure of matter –wave functions and density functionals,” *CHIMIA*, vol. 54, 01 2000.
- [70] H. Wiseman, “Grounding bohmian mechanics in weak values and bayesianism,” *New Journal of Physics*, vol. 9, p. 165, 06 2007.
- [71] Y. Aharonov, D. Albert, and L. Vaidman, “How the result of a measurement of a component of the spin of a spin- 1/2 particle can turn out to be 100,” *Physical review letters*, vol. 60, pp. 1351–1354, 05 1988.
- [72] F. Traversa, G. Albareda, M. Di Ventura, and X. Oriols, “Robust weak-measurement protocol for bohmian velocities,” *Physical Review A*, vol. 87, p. 052124, 05 2013.
- [73] J. Lundeen, B. Sutherland, A. Patel, C. Stewart, and C. Bamber, “Direct measurement of the quantum wavefunction,” *Nature*, vol. 474, pp. 188–91, 06 2011.
- [74] T. Norsen and W. Struyve, “Weak measurement and (bohmian) conditional wave functions,” *Annals of Physics*, vol. 350, 05 2013.

- [75] D. Dürr, S. Goldstein, and N. Zanghi, “Quantum chaos, classical randomness, and bohmian mechanics,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 68, pp. 259–270, 07 1992.
- [76] G. L. Baker and J. P. Gollub, *Chaotic Dynamics: An Introduction*. Cambridge University Press, 2 ed., 1996.
- [77] M. Gutzwiller, *Chaos In Classical and Quantum Mechanics*, vol. 1. 01 1990.
- [78] U. Schwengelbeck and F. Faisal, “Definition of lyapunov exponents and ks entropy in quantum dynamics,” *Physics Letters A*, vol. 199, no. 5, pp. 281–286, 1995.
- [79] R. Parmenter and R. Valentine, “Deterministic chaos and the causal interpretation of quantum mechanics,” *Physics Letters A - PHYS LETT A*, vol. 201, pp. 1–8, 05 1995.
- [80] H. Frisk, “Properties of the trajectories in bohmian mechanics,” *Physics Letters A*, vol. 227, pp. 139–142, 03 1997.
- [81] D. Wisniacki, E. Pujals, and F. Borondo, “Vortex dynamics and their interactions in quantum trajectories,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 40, p. 14353, 11 2007.
- [82] C. Efthymiopoulos, C. Kalapotharakos, and G. Contopoulos, “Nodal points and the transition from ordered to chaotic bohmian trajectories,” *Journal of Physics A Mathematical and Theoretical*, vol. 40, 09 2007.
- [83] A. Valentini and H. Westman, “Dynamical origin of quantum probabilities,” *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 461, 03 2004.
- [84] J. Maddox and E. Bittner, “Quantum dissipation in unbounded systems,” *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, vol. 65, p. 026143, 03 2002.

- [85] S. Garashchuk, V. Dixit, B. Gu, and J. Mazzuca, “The schrodinger equation with friction from the quantum trajectory perspective,” *The Journal of chemical physics*, vol. 138, p. 054107, 02 2013.
- [86] I. Burghardt, K. Møller, G. Parlant, L. Cederbaum, and E. Bittner, “Quantum hydrodynamics: Mixed states, dissipation, and a new hybrid quantum-classical approach,” *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 100, pp. 1153 – 1162, 12 2004.
- [87] E. McCullough and R. Wyatt, “Dynamics of the collinear h+h₂ reaction. i. probability density and flux,” *Chemical Physics - CHEM PHYS*, vol. 54, pp. 3578–3591, 04 1971.
- [88] J. Hirschfelder, A. Christoph, and W. Palke, “Quantum mechanical streamlines. i - square potential barrier,” *The Journal of Chemical Physics*, 01 1975.
- [89] A. Sanz and S. Miret-Artés, “A trajectory description of quantum processes. i. fundamentals,” *Lecture Notes in Physics*, vol. 850, 01 2012.
- [90] D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer, J. Kupsch, I.-O. Stamatescu, and H. Zeh, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, vol.-1. 01 1996.
- [91] T. Durt and Y. PIERSEAU, “Bohm’s interpretation and maximally entangled states,” *Phys. Rev. A*, vol. 66, 11 2002.
- [92] E. Gindensperger, C. Meier, and J. Beswick, “Hybrid quantum/classical dynamics using bohmian trajectories,” *Advances in Quantum Chemistry*, vol. 47, pp. 331–346, 12 2004.
- [93] D. Dürr, S. Goldstein, K. Münch-Berndl, and N. Zanghi, “Hypersurface bohm-dirac models,” *Physical Review A*, vol. 60, 01 1998.
- [94] F. Falciano, N. Pinto-Neto, and W. Struyve, “Wheeler-dewitt quantization and singularities,” *Physical Review D*, vol. 91, 01 2015.
- [95] K. Jung, “Is the de broglie-bohm interpretation of quantum mechanics really plausible?,” *Journal of Physics Conference Series*, vol. 442, pp. 2060–, 06 2013.

-
- [96] C. Leavens, *The “Tunneling-Time Problem” for Electrons*, pp. 111–129. 01 1996.
- [97] M. Daumer, D. Dürr, and S. Goldstein, “Scattering and the role of operators in bohmian mechanics,” 03 1997.
- [98] D. Dürr, S. Goldstein, S. Teufel, and N. Zanghi, “Scattering theory from microscopic first principles,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 279, pp. 416–431, 01 2000.
- [99] R. Feynman, “Horizon: The pleasure of finding things out,” BBC UK, 11 1982.