



UNIVERSITAT DE BARCELONA

Carácter asintótico de la invariancia adiabática

Luis Navarro Veguillas

ADVERTIMENT. La consulta d'aquesta tesi queda condicionada a l'acceptació de les següents condicions d'ús: La difusió d'aquesta tesi per mitjà del servei TDX (www.tdx.cat) i a través del Dipòsit Digital de la UB (diposit.ub.edu) ha estat autoritzada pels titulars dels drets de propietat intel·lectual únicament per a usos privats emmarcats en activitats d'investigació i docència. No s'autoritza la seva reproducció amb finalitats de lucre ni la seva difusió i posada a disposició des d'un lloc aliè al servei TDX ni al Dipòsit Digital de la UB. No s'autoritza la presentació del seu contingut en una finestra o marc aliè a TDX o al Dipòsit Digital de la UB (framing). Aquesta reserva de drets afecta tant al resum de presentació de la tesi com als seus continguts. En la utilització o cita de parts de la tesi és obligat indicar el nom de la persona autora.

ADVERTENCIA. La consulta de esta tesis queda condicionada a la aceptación de las siguientes condiciones de uso: La difusión de esta tesis por medio del servicio TDR (www.tdx.cat) y a través del Repositorio Digital de la UB (diposit.ub.edu) ha sido autorizada por los titulares de los derechos de propiedad intelectual únicamente para usos privados enmarcados en actividades de investigación y docencia. No se autoriza su reproducción con finalidades de lucro ni su difusión y puesta a disposición desde un sitio ajeno al servicio TDR o al Repositorio Digital de la UB. No se autoriza la presentación de su contenido en una ventana o marco ajeno a TDR o al Repositorio Digital de la UB (framing). Esta reserva de derechos afecta tanto al resumen de presentación de la tesis como a sus contenidos. En la utilización o cita de partes de la tesis es obligado indicar el nombre de la persona autora.

WARNING. On having consulted this thesis you're accepting the following use conditions: Spreading this thesis by the TDX (www.tdx.cat) service and by the UB Digital Repository (diposit.ub.edu) has been authorized by the titular of the intellectual property rights only for private uses placed in investigation and teaching activities. Reproduction with lucrative aims is not authorized nor its spreading and availability from a site foreign to the TDX service or to the UB Digital Repository. Introducing its content in a window or frame foreign to the TDX service or to the UB Digital Repository is not authorized (framing). Those rights affect to the presentation summary of the thesis as well as to its contents. In the using or citation of parts of the thesis it's obliged to indicate the name of the author.

Duplicado

FIS.

CARÁCTER ASINTÓTICO DE LA INVARIANCIA ADIABÁTICA

=====

Tesis presentada por D. Luis Navarro
Veguillas, en la Facultad de Ciencias
de la Universidad de Barcelona para
optar al grado de Doctor en Ciencias,
Sección de Físicas.



BIBLIOTECA DE LA UNIVERSITAT DE BARCELONA



0700448358

R. 31.080

Presentamos esta tesis a la consideración del Tribunal, confiando que su opinión sea favorable.

Deseamos hacer constar nuestro agradecimiento al Prof. Dr. D. Luis M. Garrido por su labor de orientación y dirección, que han hecho posible la presentación de este trabajo.

También queremos mencionar la decisiva influencia de los Sres. Catedráticos de la Sección de Físicas de la Facultad de Ciencias de Madrid. La formación que recibimos de ellos nos ha facilitado considerablemente la presente investigación.

No podemos dejar de mencionar, asimismo, el continuo apoyo recibido de los miembros de la Cátedra de Física Matemática, y muy especialmente por parte del Sr. Biel, quien en todo momento nos ha prestado su inestimable colaboración.

Finalmente queremos hacer constar nuestro reconocimiento a la Fundación "Juan March", por una beca concedida durante el periodo de preparación del presente trabajo.

Barcelona, Año 1965.

PRÓLOGO

OBJETO DEL PRESENTE TRABAJO

En el estudio de la Física del Plasma y, más concretamente, en la llamada aproximación del centro guía, se trata el problema del movimiento de partículas cargadas en un campo magnético variable. Los resultados obtenidos se basan en la hipótesis de que la variación de dicho campo es lenta, tanto en el espacio como en el tiempo. Se obtienen magnitudes que son "casi" constantes. El problema principal consiste, por tanto, en el estudio de bajo qué condiciones es posible el establecimiento de dichos invariantes y qué grado de aproximación suministran los distintos procedimientos empleados. Constituye en conjunto lo que se conoce con el nombre de aproximación adiabática.

El teorema adiabático ordinario, el de orden m y el generalizado, no son sino procedimientos para calcular el operador evolución del sistema físico que se estudia. El primero es clásico y suministra, en principio, una buena aproximación. El de orden m , presenta un mayor grado de validez, pero a costa de exigir al hamiltoniano unas condiciones extras que generalmente no tiene. En cambio el teorema adiabático generalizado suministra la aproximación deseada, sin otro

requisito que repetir tantas veces como grado de aproximación se pretenda, el cambio de representación conocido con el nombre de "representación de ejes giratorios".

Al estudiar estos tres teoremas hemos observado detalles de cálculo y de interpretación que nos hicieron pensar en una rigurosa revisión de los mismos. En primer lugar se utilizaban relaciones de orden entre operadores que no presentaban un sentido claro o una definición apropiada. Por otra parte los resultados se realizaban frecuentemente de una manera formal. Así a las series que surgen naturalmente al aplicar los métodos de perturbaciones se les daba un carácter asintótico que no se demuestra. Más bien se utiliza dicho término como remedio para evitar el estudio de la convergencia de las mismas. Finalmente, tratándose de métodos aproximados resulta extraño la poca importancia que se suele dar en los mismos al resto de las series utilizadas.

Nuestro objeto era ampliar el campo de utilización y las posibilidades de la aproximación adiabática. Por las razones citadas anteriormente nos hemos visto en la necesidad de asentar firmemente los fundamentos de la misma antes de abrir nuevas posibilidades. Y ello nos ha sido posible gracias a la observación de que el carácter asintótico y el rigor de los tres teoremas adiabáticos descansa en el de una integral común, salvo pequeños detalles. De este modo hemos dedicado el

primer capítulo al estudio exhaustivo de la misma, apoyándonos en los modernos conocimientos que se poseen sobre las series asintóticas.

Posteriormente, teniendo en cuenta las conclusiones del capítulo primero, nos ha resultado relativamente sencillo presentar una demostración rigurosa, con la ventaja de ser común a los tres teoremas, salvo ligeros matices. En la última parte introducimos un exponente que al tomar distintos valores hace la demostración válida para cada uno de los tres teoremas.

Hemos pensado que la exigencia de un campo lentamente variable podía reducir el campo de aplicabilidad de la aproximación adiabática. Se nos ocurrió entonces que la combinación de las aproximaciones instantánea y adiabática podía dar lugar a otra nueva aproximación que permitiese predecir el estado final del sistema físico considerado. De este modo podríamos estudiar adecuadamente el movimiento de partículas cargadas en campos de variación adiabática aunque el hamiltoniano del sistema estuviera sometido también a alteraciones bruscas. Y, en efecto, en el capítulo tercero presentamos un nuevo método que permite el cálculo del operador evolución en el caso de un sistema físico sometido a variaciones lentas y rápidas alternativas del campo exterior. Al mismo tiempo es-

tudiamos el sentido físico de los términos "lento" y "rápido".

Finalmente hemos considerado que, puesto que existen técnicas de cálculo formal que permiten establecer analogías entre la Mecánica Cuántica y la Mecánica Clásica, podíamos aprovecharlas para elaborar una teoría de la aproximación adiabática de utilidad en el campo clásico. Así, en el capítulo cuarto, presentamos un procedimiento que permite calcular el operador de evolución clásico con el grado de aproximación que se desee. Es el equivalente al teorema adiabático generalizado. Asimismo, como comprobante de la validez del método, hemos obtenido el teorema adiabático ordinario como caso particular de aquél. Posteriormente hemos exigido al hamiltoniano las condiciones extras de anulación de derivadas inicial y finalmente y el teorema generalizado nos ha proporcionado el de orden m en Mecánica Clásica. Con ello creemos haber extendido notablemente el alcance y el sentido de la citada analogía Cuántico-Clásica.

Como síntesis del trabajo presentamos, al final del mismo, un breve resumen de los principales resultados obtenidos, así como una serie de sugerencias en torno a posibles aplicaciones,

En la redacción de la presente tesis hemos incluido un apartado de apéndices en los cuales exponemos las demostraciones y cálculos que no presentan interés directo, bien por

ser conocidos o por representar exclusivamente cálculos desprovistos de sentido físico.

CAPÍTULO I

DESARROLLOS ASINTÓTICOS

INTRODUCCIÓN

Antes de ocuparnos de la presentación de esta nueva parte del Análisis, que podríamos llamar Asintótica, conviene resaltar que su establecimiento como tal es relativamente moderno. Poincaré y Stieltjes^{1,2)} en el año 1886 fueron los introductores de las series asintóticas. No obstante el desarrollo y aplicación de las mismas es un hecho reciente. Existían determinados teoremas y propiedades, pero no se ajustaban a las necesidades actuales. Fue Van der Corput^{3,4,5)} el que a partir del año 1950 inició un estudio profundo y sistemático de los desarrollos asintóticos que posteriormente se ha extendido a múltiples funciones.

No obstante es éste un campo de investigación muy actual en el que aún quedan múltiples puntos por aclarar y aplicar. Incluso el más esencial que pudiera ser el de definir qué es la Asintótica entendida como parte del Análisis que estudia los desarrollos asintóticos. De Bruijn compara la pregunta ¿qué es Asintótica? a esta otra ¿qué es Matemática? Tras analizar el objeto de la primera y presentar los inconvenientes derivados de cualquier limitación del campo de la Asintótica, llega a la conclusión de que "la definición más segura, y no

la más vaga, es ésta: Asintótica es la parte del Análisis que considera problemas del tipo de los que se tratan en este libro" 6).

Nosotros nos proponemos en la primera parte de este capítulo presentar una introducción a los métodos asintóticos, pero limitándonos a las definiciones, teoremas y propiedades que pueden resultar aplicables al problema adiabático.

Sucede muchas veces que al intentar asignar un valor a una cierta magnitud el método de cálculo es tal que se hace prácticamente imposible efectuar dicha operación. En estos casos nos conformamos con aproximaciones apropiadas que suministran una cierta información. Normalmente estos procedimientos presentan un grado de validez que aumenta con el número de operaciones que realizamos. El estudio del error cometido forma parte esencial de cualquier investigación en torno a problemas sobre métodos aproximados. Una situación parecida es la que se nos presenta en los llamados desarrollos asintóticos.

Puede presentarse el caso de que se utilice una serie infinita divergente para el cálculo de una magnitud que, en cierto sentido, puede interpretarse como la "suma" de la serie. El caso más normal es aquél en que tenemos una serie de términos variables cuya "suma" es, por tanto, una función, y la

aproximación suministrada por los primeros términos es tanto mejor cuanto la variable independiente se aproxima a su valor límite (cero o infinito en los ejemplos más corrientes).

En la mayoría de los casos los términos de la serie suelen decrecer al principio rápidamente y después vuelven a crecer. Es ésta la razón por la cual Emde las llama "Series de principio convergente". Pero a las de este tipo se les conoce con el nombre de "series asintóticas" (Poincaré). Como veremos más tarde las series asintóticas pueden ser convergentes o divergentes. Pero antes de seguir adelante, y con objeto de aclarar lo que hemos indicado, estudiamos un ejemplo típico⁷⁾.

Consideremos la serie:

$$S(x) = 1 - 1!x + 2!x^2 - 3!x^3 + \dots = \sum_0^{\infty} (-1)^n n! x^n \quad (1.1)$$

donde

$$n! = \int_0^{\infty} (x-p-t) t^n dt \quad (1.2)$$

La serie indicada es divergente para todo $x \neq 0$. Para valores pequeños de x (por ejemplo 10^{-4}) los primeros términos

decrecen muy rápidamente y luego, hacia el término $n=10^4$, la serie se hace creciente y cada vez más rápidamente. De modo que si nos limitamos a los primeros términos, podríamos asignar a $S(x)$ un valor numérico aproximado. El problema puede ser éste: ¿Qué función de x nos representa aproximadamente estos valores numéricos?

Consideremos

$$\Phi(x) = x S(x) \quad (1.3)$$

Derivando, podremos escribir

$$\Phi'(x) = 1! - 2!x + 3!x^2 - 4!x^3 + \dots = \frac{x - \Phi(x)}{x^2} \quad (1.4)$$

Entonces $\Phi(x)$ satisface la relación

$$x^2 \Phi'(x) + \Phi(x) = x \quad (1.5)$$

con la cual, y teniendo en cuenta que

$$\Phi(0) = 0 \quad (1.6)$$

podemos determinar $\phi(x)$ y por tanto $S(x)$.

Escribamos (1.1), teniendo en cuenta (1.2), en la forma

$$S(x) = \sum_0^{\infty} (-1)^n \int_0^{\infty} (\exp -t) (xt)^n dt \quad (1.7)$$

Si ahora sumamos bajo el signo integral, de modo formal, obtenemos la función

$$f(x) = \int_0^{\infty} (\exp -t) \frac{dt}{1+xt} \quad (1.8)$$

El problema planteado es el siguiente: ¿qué relación tienen $f(x)$ y $S(x)$ y en qué sentido podremos decir que $f(x)$ está representada por la serie divergente (1.1)?

Para tratar de contestar a esta pregunta observemos que

$$\frac{1}{1+xt} = \sum_0^m (-xt)^n + \frac{(-xt)^{m+1}}{1+xt}, \quad (m = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.9)$$

Calculemos ahora la función $R_m(x)$ tal que

$$f(x) = S_m(x) + R_m(x) \quad (1.10)$$

donde hemos utilizado la abreviatura

$$S_m(x) = \sum_{n=0}^m (-1)^n n! x^n = \sum_{n=0}^m (-x)^n \int_0^{\infty} (\exp-t) t^n dt \quad (1.11)$$

De las cuatro últimas igualdades se deduce

$$\begin{aligned} R_m(x) = f(x) - S_m(x) &= \int_0^{\infty} \frac{(\exp-t)}{1+xt} dt - \sum_{n=0}^m (-x)^n \int_0^{\infty} (\exp-t) t^n dt = \\ &= \int_0^{\infty} \frac{(\exp-t)}{1+xt} dt - \int_0^{\infty} (\exp-t) \sum_{n=0}^m (-xt)^n dt = \int_0^{\infty} \frac{(\exp-t)}{1+xt} (-xt)^{m+1} dt \end{aligned} \quad (1.12)$$

Es decir, utilizando la propiedad (1.9) hemos hallado para el resto la expresión

$$R_m(x) = (-x)^{m+1} \int_0^{\infty} \frac{(\exp-t)}{1+xt} t^{m+1} dt \quad (1.13)$$

Para mayor generalidad sea x una variable del plano complejo. Distingamos dos posibilidades:

1ª) La parte real de x no es negativa:

$$\operatorname{Re}(x) \geq 0; \text{ entonces } |1+xt| \geq 1 \text{ y } |1+xt|^{-1} \leq 1.$$

En este caso, teniendo en cuenta (1.2) y (1.3) podemos escribir

$$|R_m(x)| \leq (m+1)! |x|^{m+1}, \operatorname{Re}(x) \geq 0 \quad (1.14)$$

2ª) La parte real de x es negativa:

sea $\phi = \arg x$; es decir

$$\frac{\pi}{2} < \pm \phi \leq \pi \quad \text{y} \quad |1+xt| \geq |\operatorname{sen} \phi|$$

ya que al sumar la unidad a un complejo de parte real negativa, el módulo disminuye pero se conserva igual o superior al seno del ángulo primitivo. O lo que es lo mismo

$$|1+xt|^{-1} \leq |\operatorname{cosec} \phi|$$

De modo que en este caso llegamos a la conclusión

$$|R_m(x)| \leq (m+1)! |x|^{m+1} |\operatorname{cosec} \phi|, \operatorname{Re}(x) < 0 \quad (1.15)$$

En cualquiera de los casos (1.13) (1.14) o (1.15) resulta que, partiendo de una serie divergente, su "suma parcial" la obtenemos mediante una función, de modo que el error cometido al limitar el número de términos es del orden del

primer término despreciado. El resto tiende a cero, además, cuando $x \rightarrow 0$. Y si la parte real de x es no negativa el resto es, en valor absoluto, menor que el primer término despreciado. Si en la serie dada ocurre que $x > 0$, el resto tiene incluso el signo del primer término despreciado. En este caso la serie (1.1) se comporta de un modo similar a una serie alterante convergente. Hay una gran diferencia, no obstante, y es que el menor término de (1.1) representa, según hemos visto, un límite para el grado de aproximación, más allá del cual es imposible pasar.

Y después de analizar este breve ejemplo pasemos a introducir los conceptos fundamentales de la Asintótica, que posteriormente nos serán de gran utilidad.

SÍMBOLOS DE ORDEN

En el ejemplo anterior hemos visto cómo llegamos a la conclusión de que el resto es "del orden" del primer término despreciado. Como las relaciones de orden juegan un papel importante en nuestro trabajo, vamos a establecer las definiciones y propiedades de las mismas, según la notación Bachmann-Landau^{7,8)}.

Suponemos, por razón de las futuras aplicaciones, que la variable independiente x es real, y que su campo de variación es un cierto conjunto \mathcal{R} . Por x_0 designamos a un cierto punto límite de \mathcal{R} . $\phi(x)$ y $\psi(x)$ denotan funciones reales o complejas de x , definidas cuando x pertenece a \mathcal{R} .

Utilizaremos las siguientes definiciones para los símbolos de orden O, o .

a) $\phi = O(\psi)$ en \mathcal{R}

significa que existe una constante A tal que :

$$|\phi| \leq A|\psi| \quad \text{para todo } x \in \mathcal{R}.$$

b) $\phi = o(\psi)$ cuando $x \rightarrow x_0$.

indica que existe una constante A y un entorno U de x_0 , tal que :

$$|\phi| \leq A|\psi| \quad \text{para todo } x \text{ de la intersección de } U \text{ y } \mathcal{R}.$$

c) $\phi = o(\psi)$ cuando $x \rightarrow x_0$.

equivale a que para todo $\varepsilon > 0$ existe un entorno de x_0 , U_ε , tal que :

$$|\phi| \leq \varepsilon |\psi| \quad \text{para todo } x \text{ de la intersección de } U_\varepsilon \text{ y } \mathcal{R}.$$

Si $\psi \neq 0$ en el conjunto \mathcal{R} , las tres definiciones anteriores se pueden establecer mucho más simplemente :

a) $\phi = O(\psi)$ en \mathcal{R} , si $\frac{\phi}{\psi}$ está acotada en \mathcal{R} .

- b) $\phi = O(\psi)$ cuando $x \rightarrow x_0$, si $\frac{\phi}{\psi}$ está acotada cuando $x \rightarrow x_0$.
c) $\phi = o(\psi)$ cuando $x \rightarrow x_0$, si $\frac{\phi}{\psi} \rightarrow 0$ cuando $x \rightarrow x_0$.

Es corriente el caso en que las funciones que aparecen en las relaciones de orden dependen de un parámetro, de varios o también de subíndices. En cada caso, es decir, para cada valor de los parámetros o subíndices tendremos una constante A , o unos entornos U y U_ϵ distintos. Si A , U ó U_ϵ pueden elegirse independientemente de parámetros o subíndices, se dice que las relaciones de orden son válidas uniformemente.

Por su aplicación a nuestro trabajo, el símbolo \underline{O} resulta más interesante que el \underline{o} . Por esta razón nos limitaremos a citar algunas propiedades del primero, que pueden extenderse sin ninguna dificultad al símbolo o .

Propiedades del símbolo de orden O :

En adelante omitimos, por comodidad, las frases "cuando x pertenece a \mathcal{R} " y "cuando $x \rightarrow x_0$ ", entendiéndose que cuando una de ellas figura en la hipótesis, también debe incluirse en el resultado.

I. Si $\phi = O(\psi)$ y $\alpha > 0$

se verifica que $|\phi|^\alpha = O(|\psi|^\alpha)$

La comprobación es trivial. Basta tener en cuenta la definición del símbolo O .

II. Si $\phi_i = O(\psi_i)$, ($i = 1, 2, \dots, n$) y a_i son constantes, se verifica también la relación

$$\sum_i a_i \phi_i = O\left(\sum_i |a_i| |\psi_i|\right)$$

En efecto: si $|\phi_i| \leq A_i |\psi_i|$ (para $i = 1, 2, \dots, n$)

$$|a_i \phi_i| \leq |a_i| |\phi_i| \leq A |a_i| |\psi_i|$$

siendo $A \geq A_i$ para cualquier i . Sumando para todos los valores de i obtenemos el resultado que buscábamos.

Si $n = \infty$, el resultado es también válido cuando las relaciones de orden iniciales sean uniformes en el parámetro i . En este caso se puede encontrar una $A \geq A_i$ ($i = 1, 2, \dots$) que al hacer la suma se podría sacar factor común, llegando a las mismas conclusiones que en el caso anterior.

III. Si $\phi_i = O(\psi_i)$ ($i = 1, 2, \dots, n$), a_i son constantes y existe una Ψ tal que $|\psi_i| \leq \Psi$ para todo i , se verifica

$$\sum_i a_i \phi_i = O(\Psi)$$

En efecto: $|\phi_i| \leq A_i |\psi_i| \leq A_i \psi$.

Tomando una A tal que $A \geq A_i$ para todo i , resulta

$$\sum_i |a_i \phi_i| \leq \sum_i |a_i| |\phi_i| \leq \sum_i A |a_i| \psi \leq A' \psi.$$

A' es una constante definida por $A' = A \sum_i |a_i|$.

Para que esta propiedad sea extensible a $n = \infty$, hemos de exigir que la hipótesis sea válida uniformemente (para poder encontrar $A \geq A_i$ para todo i) y además que $\sum_i |a_i|$ sea convergente (para determinar A').

IV. Si $\phi_i = O(\psi_i)$ ($i = 1, 2, \dots, n$)

se verifica $\prod_i \phi_i = O(\prod_i \psi_i)$

En efecto: $|\phi_i| \leq A_i |\psi_i|$. Si A representa la cota superior de las A_i resulta $|\phi_i| \leq A |\psi_i|$ para todo $1 \leq i \leq n$. Multiplicando las desigualdades obtenidas al dar a i todos los valores posibles se obtiene el resultado apetecido.

Evidentemente esta propiedad no es susceptible de ser extendida al caso $n = \infty$, debido a que aparecería A^n al tomar productos.

Aunque la integración de las relaciones ordinales puede extenderse a casos de variables complejas o abstractas,

nosotros nos limitaremos a integraciones con respecto a variables reales que es el único de interés por la misma naturaleza del problema adiabático, como más tarde veremos.

V. Sea x la variable real y \mathcal{R} el intervalo (a, b) . Supongamos que $\phi = o(\psi)$ cuando $x \rightarrow b$. Si ϕ y ψ no tienen singularidades en \mathcal{R} , se verifica

$$\int_x^b \phi(\tau) d\tau = o\left(\int_x^b |\psi(\tau)| d\tau\right) \quad \text{cuando } x \rightarrow b$$

En efecto: suponemos que la integral $\int_x^b |\psi(\tau)| d\tau$ es convergente, porque de lo contrario ya estaría demostrada la propiedad.

En este caso podemos escribir

$$\left| \int_x^b \phi(\tau) d\tau \right| \leq \int_x^b |\phi(\tau)| d\tau \leq A \int_x^b |\psi(\tau)| d\tau \quad \text{cuando } x \rightarrow b$$

La diferenciación de relaciones de orden está sujeta a condiciones mucho más restrictivas que las expuestas para el caso de integración. Se pueden encontrar en la bibliografía citada. Carecen de interés para nuestro problema y por eso no las incluimos en este breve resumen.

Finalmente, demos una serie de fórmulas que re-

lacionan símbolos de orden. Su demostración es elemental partiendo de las definiciones de los mismos:

VI.

$$O(O(\phi)) = O(\phi)$$

$$O(o(\phi)) = o(O(\phi)) = o(o(\phi)) = o(\phi)$$

$$O(\phi) O(\psi) = O(\psi \phi)$$

$$O(\phi) + o(\phi) = O(\phi) + o(\phi) = O(\phi)$$

Otras propiedades de los símbolos de orden pueden encontrarse en la bibliografía. Especialmente en el libro citado del profesor A. Erdélyi y en los correspondientes de Van der Corput de los cuales hemos tomado fundamentalmente las definiciones anteriores. Para nuestro propósito son suficientes estas seis propiedades de las relaciones ordinales.

DESARROLLOS ASINTÓTICOS

La sucesión de funciones $\{\phi_n\}$ es ~~una~~ ^{una} ~~asintótica~~ ^{asintótica} cuando $x \rightarrow x_0$, si para cada n , se verifica $\phi_{n+1} = o(\phi_n)$, cuando $x \rightarrow x_0$. Si la relación ordinal es uniforme en el subíndice

se dice que se trate de una serie asintótica uniforme en n . Las ϕ_n pueden depender de parámetros y la uniformidad puede darse en los subíndices y en los parámetros simultáneamente.

Se pueden obtener series asintóticas partiendo de otras. Los variados procedimientos que para ello existen se basan en las propiedades de los símbolos de orden que hemos citado en el apartado anterior.

Sea la serie $\sum a_n \phi_n(x)$ donde $\{\phi_n\}$ es una sucesión asintótica, cuando $x \rightarrow x_0$. Diremos que constituye un desarrollo asintótico de N términos de la función $f(x)$, cuando $x \rightarrow x_0$, si se verifica

$$f(x) = \sum_{n=1}^N a_n \phi_n(x) + O(\phi_{N+1}) \text{ cuando } x \rightarrow x_0. \quad (1.16)$$

que abreviadamente indicaremos como

$$f(x) \sim \sum_{n=1}^N a_n \phi_n(x) \quad \text{cuando } x \rightarrow x_0.$$

Cuando el desarrollo asintótico de una función se reduce al primer término, en la bibliografía sobre el tema se las suele llamar representaciones asintóticas.

Evidentemente los casos más interesantes, y más estudiados, son aquéllos en los que $N=1$ o bien $N=\infty$. No

obstante, para nuestras futuras aplicaciones, nosotros consideraremos que N es un número entero cualquiera.

Si un desarrollo asintótico de N términos (N finito) incluye ciertos parámetros, la validez uniforme del mismo se da cuando el resto, en la expresión (1.16), es $O(\phi_{N+1})$ uniformemente en dichos parámetros. Si N es infinito la condición de uniformidad es que la relación $f(x) - \sum_1^M a_n \phi_n = O(\phi_{M+1})$ sea válida uniformemente en los parámetros para valores suficientemente grandes de M .

La condición (1.16) suministra una fórmula de recurrencia para calcular el coeficiente del término n -ésimo de un desarrollo asintótico de la función $f(x)$, cuando $x \rightarrow x_0$. En efecto, de dicha fórmula se deduce

$$a_m = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - \sum_1^{m-1} a_n \phi_n(x)}{\phi_m(x)}, \quad (m=1, 2, \dots, N) \quad (1.17)$$

que no es siempre aplicable debido a las frecuentes singularidades del denominador,

Para un x_0 fijo la fórmula anterior muestra claramente la unicidad de la aproximación asintótica de $f(x)$, dada la sucesión $\{\phi_n(x)\}$. Una demostración más rigurosa y más general es la presentada por H. Jeffreys⁹⁾.

Hay que tener en cuenta que una serie asintóti-

ca no representa unívocamente a una función $f(x)$. Por ejemplo se puede comprobar trivialmente que las funciones

$$(1+x)^{-1}, \quad \frac{1+\exp(-x)}{1+x}, \quad (1+\exp(-\sqrt{x})+x)^{-1}$$

admiten el desarrollo asintótico $\sum_{n=0}^{\infty} c_n x^{-n}$, cuando $x \rightarrow \infty$.

Una sucesión asintótica dada lo que hace es establecer una relación de equivalencia, entre las funciones definidas en \mathcal{R} .

Así $f(x)$ y $g(x)$ son asintóticamente iguales respecto a $\{\phi_n(x)\}$ si se verifica

$$f_n(x) - g_n(x) = O(\phi_{n+1}) \quad \text{cuando} \quad x \rightarrow x_0$$

para todo n de la sucesión $\{\phi_n(x)\}$. De modo que una serie asintótica no representa una función sino exactamente a una clase de funciones asintóticas iguales.

Las operaciones con series asintóticas están gobernadas por un cierto número de reglas que se pueden encontrar en la bibliografía citada sobre el tema. Para nuestro objetivo son interesantes un solo tipo de funciones asintóticas y son éstas a las cuales vamos a limitarnos en la exposición de operaciones y propiedades fundamentales.

SERIES ASINTÓTICAS DE POTENCIAS

La sucesión de funciones $\{x^{-n}\}$, cuando $x \rightarrow \infty$, es, de acuerdo con la definición, asintótica. En efecto,

$$x^{-(n+1)} = o(x^{-n}) \quad \text{cuando} \quad x \rightarrow \infty$$

Toda expresión de la forma

$$f(x) \sim a_0 + \frac{a_1}{x} + \frac{a_2}{x^2} + \dots + \frac{a_N}{x^N}, \quad x \rightarrow \infty \quad (1.18)$$

constituirá, por tanto, un desarrollo asintótico de $f(x)$.

Una serie asintótica de potencias puede multiplicarse por constantes y su carácter asintótico permanece. Dos series asintóticas de este tipo pueden sumarse, multiplicarse e incluso dividirse si el término independiente del denominador no es nulo.

La integración de desarrollos asintóticos en series de potencias es posible siempre que el carácter asintótico sea uniforme en relación con el parámetro de integración. En este caso es posible elegir la constante de las relaciones de orden asociadas independientemente del valor del parámetro,

con lo cual la demostración es análoga a la de una suma finita de series asintóticas.

Los teoremas sobre diferenciación de series asintóticas requieren hipótesis bastante restrictivas, y tienen escaso interés desde el punto de vista del problema físico que nos ocupa.

Los desarrollos asintóticos en series de potencias presentan el inconveniente de que suelen ser válidos en regiones limitadas del espacio; de modo que es relativamente normal el hecho de que una función analítica admita varios desarrollos en series asintóticas de potencias, siendo válido cada uno de ellos en diferentes regiones. Es lo que se ha dado en llamar "fenómeno de Stokes".

Para finalizar esta introducción conviene indicar que toda serie asintótica, y en particular las de potencias, poseen una suma. Nosotros expondremos la demostración general brevemente siguiendo a Van der Corput en la adaptación reciente sugerida por el Profesor Erdély. Incluimos la demostración porque contribuye a esclarecer el sentido en el que la suma puede asociarse incluso a series divergentes.

Puesto que toda subsucesión de una sucesión asintótica $\{\phi_n(x)\}$ es, a su vez, una sucesión asintótica, podemos suponer que en toda serie asintótica los coeficientes a_n son

distintos de cero para toda n . Hemos visto también que $\sum a_n \phi_n$ representa una clase de funciones asintóticas iguales. Para demostrar la existencia de la suma de $\sum a_n \phi_n$, bastará construir un elemento de dicha clase.

Si $\sum a_n \phi_n$ es una serie asintótica finita, la suma

$$a_1 \phi_1 + a_2 \phi_2 + a_3 \phi_3 + \dots + a_N \phi_N$$

tomada en sentido ordinario, puede ser asociada unívocamente a la serie original. De modo que en el caso $N \neq \infty$ el problema es de solución inmediata.

Supongamos, entonces, que se trata de la serie $\sum a_n \phi_n$ en la cual todo $a_n \neq 0$ y $\{\phi_n\}$ constituye una sucesión asintótica infinita.

Sea U_n un entorno de x_0 tal que para todo n , el cierre de U_n pertenece a U_{n-1} , y además

$$|a_{n+1} \phi_{n+1}| \leq \frac{1}{2} |a_n \phi_n| \quad (1.19)$$

para todo x de la intersección de U_n y R . La existencia de tal entorno no necesita prueba especial ya que por ser $\{\phi_n\}$ una sucesión asintótica se verifica

$$a_{n+1} \phi_{n+1} = o(a_n \phi_n) \quad (1.20)$$

Introduzcamos ahora la función continua $\mu_n(x)$ tal que $\mu_n = 0$ para los x que no pertenecen a U_n , mientras que $\mu_n = 1$ para todo x que pertenece a U_n . Que es posible encontrar esta función se deduce del hecho que el cierre de U_{n+1} esté contenido en U_n .

Entonces

$$\begin{aligned} |a_{n+p} \mu_{n+p}(x) \phi_{n+p}(x)| &\leq \frac{1}{2} |a_{n+p-1} \psi_{n+p-1}(x)| \leq \\ &\leq \left(\frac{1}{2}\right)^2 |a_{n+p-2} \phi_{n+p-2}(x)| \leq \dots \leq \left(\frac{1}{2}\right)^p |a_n \phi_n(x)| \end{aligned} \quad (1.21)$$

para todo x común a U_{n+p} y \mathcal{R} , según (1.19).

Pero esta igualdad es lícita en realidad para todo x de U_n , pues aunque en este caso no podemos utilizar (1.19) para todo x de fuera de U_{n+p} , ello no va contra la validez de (1.21) porque en este caso $\mu_{n+p}(x) = 0$.

Consideremos ahora la siguiente función

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \mu_n(x) \phi_n(x) \quad (1.22)$$

Esta serie es convergente para todo x , en virtud de la desigualdad (1.21). Define, por tanto, una función en \mathcal{R} . Realmente la serie (1.22) es finita salvo para aquellos puntos que pertenecen a todas las U_n .

Para que la serie convergente (1.22) represente asintóticamente la suma $\sum a_n \phi_n$ hemos de demostrar que $f(x)$ pertenece a la clase de $\sum a_n \phi_n$, o lo que es lo mismo, que $\sum a_n \phi_n$ es un desarrollo asintótico de $f(x)$, cuando $x \rightarrow x_0$. Para ello hagamos $n = 1, 2, \dots, N$. x pertenecerá a la parte común a U_{N+1} y \mathcal{R} . Entonces será $\mu_n(x) = 1$ para $n = 1, 2, \dots, N$ y según (1.21) y (1.22) resultará

$$\begin{aligned} \left| f - \sum_1^N a_n \phi_n \right| &\leq \sum_{N+1}^{\infty} |a_n \mu_n \phi_n| \leq |a_{N+1} \phi_{N+1}| \sum_{N+1}^{\infty} 2^{N+1-n} = \\ &= 2 |a_{N+1} \phi_{N+1}| = o(\phi_{N+1}) = o(\phi_N) \end{aligned} \quad (1.23)$$

Entonces decimos que la suma asintótica de $\sum a_n \phi_n$ es la clase de todas las funciones asintóticas iguales a $f(x)$.

Los entornos U_n hay que construirlos teniendo en cuenta que x_0 sea el único punto común a todo U_n . De este modo la suma (1.22) se reduce a un polinomio siempre que $x \neq x_0$, que es lo que interesa por razón de sencillez.

Conviene insistir en lo que por la suma de una serie asintótica divergente se entiende. No es una suma en el sentido ordinario porque carecería de significado. Es una función, de las varias que existen, o mejor dicho una clase de funciones que admiten el desarrollo asintótico $\sum a_n \phi_n$ para cualquier número de términos. Ello significa que el resto es del orden del primer término despreciado y por tanto obtendremos la mejor aproximación, no tomando el mayor número posible de términos, sino los suficientes para que el término siguiente sea el de menor módulo.

Naturalmente sería preferible poder asociar a cada serie asintótica una suma única. En general no es posible. No obstante Watson y Nevanlinna han conseguido sumar series asintóticas de potencias mediante funciones analíticas en casos especiales, exigiendo condiciones fuertemente restrictivas a los coeficientes del desarrollo original.

La suma de series asintóticas es quizás el capítulo más importante de la teoría general. Los procedimientos son numerosos y se acostumbra a clasificar la serie según propiedades de sus coeficientes. Una gran información así como numerosos casos prácticos resueltos sobre este tema pueden encontrarse en el libro citado, por el Profesor N. G. de Bruijn⁶⁾.

Cálculo del resto:

Las aproximaciones mediante desarrollos asintóticos tienen su aplicación fundamental en el cálculo de integrales definidas en las que figura un parámetro "grande", en la resolución de ecuaciones diferenciales y en los métodos de iteración.

Cuando se encuentra un desarrollo, la demostración de que éste tiene carácter asintótico se basa en que el resto es del orden del primer término despreciado. Por tanto son problemas análogos al demostrar que la aproximación obtenida es una serie asintótica y el calcular el resto de la misma.

La forma concreta del resto varía según el problema tratado. Cuando el desarrollo se obtiene mediante una integración por partes, el resto viene dado como una integral definida, y frecuentemente, el cálculo del mismo restaura el problema original. Por eso el resto es difícil de precisar y normalmente se dan sus cotas o bien su orden,

En nuestra aplicación física el resto es difícil de calcular, como ya veremos. Ahora bien, el resto es desde el punto de vista físico una medida de la bondad de la aproximación empleada. Entonces nuestro objeto es en primer lugar la aproximación y posteriormente su grado de validez.

Lo que haremos será calcular el orden del resto

pero sin tratar de investigar detalladamente la posibilidad de su mejoramiento o acotación, porque como veremos más adelante la Mecánica Cuántica puede ofrecer un método mucho más sencillo e intuitivo para el cálculo del grado de validez de la aproximación empleada.

APROXIMACIÓN ASINTÓTICA DE LA INTEGRAL

$$F(\tau) = \int_0^1 \left(\exp i T d(\tau) \right) K(\tau) d\tau \quad (1.24)$$

Tratemos ahora de encontrar un desarrollo de $F(\tau)$ en serie de potencias de $\frac{1}{T}$. Suponemos que $F(\tau)$ es una función real y T un parámetro positivo que representa una cantidad "grande". Cuando estudiemos las aplicaciones físicas precisaremos la naturaleza de T .

Según Stokes, Kelvin y Erdélyi⁷⁾ la mayor contribución al valor de la integral (1.24) surge de las proximidades de los puntos extremos del intervalo de integración y de aquellos puntos intermedios para los cuales la fase resulta estacionaria, es decir, de los que verifican $\frac{d}{d\tau} \alpha(\tau) = 0$.

En primera aproximación la contribución de los

puntos de fase estacionaria, si existe alguno, es más importante que la contribución de los extremos del intervalo. Pero si $\alpha(\tau)$ no admite puntos estacionarios en el intervalo $0 \leq \tau \leq 1$, la integración por partes de $F(\tau)$ proporciona una buena aproximación como vamos a demostrar.

Si hubiera puntos de fase estacionaria la integral admitiría un desarrollo algo diferente. El método de Stokes de la fase estacionaria^{7,9)} sirve para calcular la contribución a la integral de estos puntos. Basta recurrir a un desarrollo especial de $K(\tau)$ y $\alpha(\tau)$ en las proximidades de los mismos.

Como veremos más tarde el problema de la existencia de puntos estacionarios es la traducción matemática del hecho de que el espectro de la energía sea degenerado.

Nosotros supondremos que no lo es. Si existe la degeneración el método de estudio es distinto, no por la dificultad de cálculo de la integral (1.24), sino porque ello lleva consigo la negación de algunas de las hipótesis sobre las que se apoya la teoría del teorema adiabático ordinario.

Introduzcamos la derivada primera de $\alpha(\tau)$:

$$\omega(\tau) \equiv \frac{d}{d\tau} \alpha(\tau) \quad (1.25)$$

Integrando (1.24) por partes resulta:

$$\begin{aligned}
 F(\tau) &= \frac{1}{iT} \left[(\exp iTd(\tau)) \frac{\kappa(\tau)}{\omega(\tau)} \right]_0^1 - \frac{1}{iT} \int_0^1 (\exp iTd(\tau)) \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\kappa(\tau)}{\omega(\tau)} \right) d\tau = \\
 &= \frac{1}{iT} \left[(\exp iTd(\tau)) \frac{\kappa(\tau)}{\omega(\tau)} \right]_0^1 - \left(\frac{1}{iT} \right)^2 \left[(\exp iTd(\tau)) \frac{1}{\omega(\tau)} \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\kappa(\tau)}{\omega(\tau)} \right) \right]_0^1 + \dots \quad (1.26)
 \end{aligned}$$

Si continuamos integrando $N-1$ veces, llegamos a obtener un desarrollo de $F(\tau)$ en serie de potencias de $\frac{1}{T}$:

$$F(\tau) = \sum_{n=1}^{N-1} S_n + R_N \quad (1.27)$$

donde

$$S_n = (-1)^{n+1} \left(\frac{1}{iT} \right)^n \left[(\exp iTd(\tau)) \frac{\kappa(\tau)}{\omega(\tau)} \right]_0^1, \quad (n=1, 2, \dots) \quad (1.28)$$

y

$$R_n = \left(-\frac{1}{iT} \right)^n \int_0^1 (\exp iTd(\tau)) \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\kappa(\tau)}{\omega(\tau)} \right) d\tau, \quad (n=1, 2, \dots) \quad (1.29)$$

El símbolo $\frac{\kappa(\tau)}{\omega(\tau)}$ representa:

$${}_n \left(\frac{K(\tau)}{\omega(\tau)} \right) \equiv \frac{1}{\omega(\tau)} \left\{ \frac{d}{d\tau} \left[\frac{1}{\omega(\tau)} \left(\frac{d}{d\tau} \dots \frac{1}{\omega(\tau)} \frac{d}{d\tau} \left(\frac{K(\tau)}{\omega(\tau)} \right) \right) \right] \right\} \quad (1.30)$$

← n-1 derivadas →

conviniendo en que

$${}_1 \left(\frac{K(\tau)}{\omega(\tau)} \right) = \frac{K(\tau)}{\omega(\tau)} \quad (1.31)$$

para que la notación resulte apropiada.

Pasemos a estudiar el carácter del desarrollo así obtenido. Para ello vamos a comparar el resto con el primer término despreciado. Suponemos que $\omega(\tau)$ y $K(\tau)$ cumplen las siguientes condiciones (1.32):

- 1) $\omega(\tau) \neq 0$ en el intervalo $0 \leq \tau \leq 1$.
- 2) $\omega(\tau)$ y sus sucesivas derivadas son continuas y finitas en el intervalo citado.
- 3) $K(\tau)$ y sus sucesivas derivadas son continuas y finitas en el intervalo $0 \leq \tau \leq 1$.

Como veremos en las aplicaciones, las hipótesis anteriores son muy generales, si se trata de estudiar concretamente el caso en que la única degeneración posible es la accidental al "cruzado" de los niveles.

En virtud de las condiciones (1.32) ${}_n \left(\frac{K(\tau)}{\omega(\tau)} \right)$ está acotado para todo n y todo τ del intervalo $(0, 1)$. Por

tanto, según (1.28) para cada n , existirá un cierto número A_n , real y positivo, tal que

$$|S_n| \leq \frac{A_n}{T^n} \quad (1.33)$$

para todo $0 \leq \tau \leq 1$.

Del mismo modo podemos llegar a la conclusión de que la expresión

$$\frac{d}{d\tau} \left(\frac{\kappa(\tau)}{\omega(\tau)} \right) \quad (1.34)$$

para todo n , está acotada. Entonces, puesto que $\alpha(\tau)$ es una función real, será posible encontrar, para cada n , un cierto número B_n , real y positivo, tal que

$$\left| \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\kappa(\tau)}{\omega(\tau)} \right) \right| \leq \omega(\tau) B_n \quad (1.35)$$

para todo $0 \leq \tau \leq 1$.

Sustituyendo (1.35) en (1.29), resulta

$$\begin{aligned} |R_n| &\leq \left(\frac{1}{T} \right)^n \left| \int_0^1 (\exp i T \alpha(\tau)) \omega(\tau) B_n d\tau \right| = \\ &= \left(\frac{1}{T} \right)^{n+1} B_n \left| \exp i T \alpha(1) - \exp i T \alpha(0) \right| = C_n \frac{1}{T^{n+1}} \quad (1.36) \end{aligned}$$

siendo C_n un número real independiente de τ , por estar acotado el módulo de la exponencial.

Si comparamos las expresiones (1.33) y (1.36) llegamos fácilmente a la conclusión de que, con las condiciones generales impuestas a $K(\tau)$ y $\omega(\tau)$, el resto es del orden del primer término despreciado. De modo que podemos escribir

$$R_n = O(S_{n+1})$$

$$R_n = O(S_{n+1}) = o(S_n) \quad , \text{ si } T \rightarrow \infty \quad (1.37)$$

De este modo hemos obtenido un desarrollo en serie asintótica de potencias de $\frac{1}{T}$ para la integral (1.24). Y además se da la uniformidad con respecto al parámetro τ porque en virtud de las condiciones (1.32) las cotas máximas lo son para todo valor de τ , dentro del intervalo $(0, 1)$. La aproximación mínima que se consigue es del orden de $\frac{1}{T}$, es decir,

$$F(T) = 0 + O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (1.38)$$

CASOS PARTICULARES

Existen dos casos particulares, de gran interés por sus aplicaciones físicas, en los cuales podemos tomar el valor cero para $F(\tau)$ con un mayor grado de aproximación.

a) Supongamos que la función $K(\tau)$ es tal que, ella y sus m primeras derivadas con relación a τ se anulan en los instantes inicial y final. Quiere decirse que, en dichos instantes de tiempo, se anula

$${}_n \left(\frac{K(\tau)}{\omega(\tau)} \right) \quad \text{para} \quad n = 1, 2, \dots, m+1 \quad (1.39)$$

En este caso, según se deduce de (1.28),

$$S_n = 0 \quad \text{para} \quad n = 1, 2, \dots, m+1 \quad (1.40)$$

En este caso la aproximación (1.38) es

$$F(\tau) = 0 + O \left(\frac{1}{\tau^{m+2}} \right) \quad (1.41)$$

Es decir, exigiendo condiciones particulares a la función $K(\tau)$ hemos logrado mejorar la aproximación asintótica para $F(\tau)$.

b) Sea ahora $K(\tau)$ una función cuyo módulo es del orden de $\left(\frac{1}{\tau}\right)^m$. Como el módulo de la función exponencial está acotado y lo mismo sucede con $K(\tau)$, $\omega(\tau)$ y las derivadas de ambas funciones, la fórmula (1.28), en virtud de las propiedades de los símbolos de orden, se podrá escribir

$$S_n = o\left(\frac{1}{\tau^n}\right) o\left(\frac{1}{\tau^m}\right) = o\left(\frac{1}{\tau^{m+n}}\right) \quad (1.42)$$

Y en particular

$$S_1 = o\left(\frac{1}{\tau}\right) o\left(\frac{1}{\tau}\right)^m = o\left(\frac{1}{\tau^{m+1}}\right) \quad (1.43)$$

Con lo cual la aproximación (1.38) se convierte en

$$F(\tau) = o + o\left(\frac{1}{\tau^{m+1}}\right) \quad (1.44)$$

En el próximo capítulo estudiaremos cómo del desarrollo asintótico general se deduce inmediatamente el teorema adiabático ordinario. Y de los dos casos particulares expresados, que han surgido al exigir condiciones "extras" a la función $K(\tau)$, se llega al carácter asintótico de la invariancia de orden m y de la generalizada.

Por la importancia que tiene en el problema físico que vamos a estudiar, conviene tener presente que si bien en los dos casos particulares presentados hemos exigido condiciones restrictivas a la función $K(\tau)$ existe una gran diferencia entre ambos procedimientos.

En el caso a), al imponer la anulación de $K(\tau)$ y sus primeras derivadas en los instantes $\tau=0$ y $\tau=1$ estamos exigiendo unas determinadas condiciones esenciales a la función. Su variación ya no puede ser caprichosa y si logramos asociar algún atributo físico^a la función $K(\tau)$, lo que estamos haciendo es exigir que dicha magnitud física cumpla unos determinados requisitos.

En el caso b), por el contrario, no exigimos nada esencial a la función $K(\tau)$. Tan sólo un orden de magnitud. La función $K(\tau)$ puede haberse obtenido a su vez por un desarrollo similar al empleado para $F(\tau)$ y lo único que hemos indicado en el apartado b) es la posibilidad de repetir el procedimiento, mejorando la aproximación.

La diferencia entre las condiciones a) y b) resultarán evidentes cuando planteemos el problema físico y sustituyamos las funciones abstractas empleadas hasta ahora, por observables de un sistema físico concreto.

CAPÍTULO II

APLICACIÓN AL PROBLEMA ADIABÁTICO

INTRODUCCIÓN

La aproximación adiabática estudia la evolución de un sistema, cuando ocurre en un tiempo muy grande, lo cual equivale a decir que se trata de evolución lenta del Hamiltoniano.

El teorema adiabático normal se debe, en su demostración original, a Born y Fock¹⁶⁾. Posteriormente se han descubierto la invariancia de orden m y la generalizada^{11, 12)}. En ambos casos lo que se persigue es obtener una buena aproximación del operador evolución, si bien una se distingue radicalmente de la otra como tendremos ocasión de señalar.

En todos los casos, se recurre a una imagen de interacción. Se llega a una ecuación de Schrödinger con un término perturbativo pequeño. Al calcular la serie que se obtiene como expresión del operador evolución, se dice que ésta es un desarrollo asintótico. Pero no se demuestra rigurosamente sino que se admite de un modo formal y más bien como una simple manifestación de la no convergencia, en general, del desarrollo obtenido.

En el presente capítulo nos proponemos dar a estas demostraciones el rigor matemático de que carecen y de es-

te modo establecer definitivamente el carácter asintótico y no convergente de los invariantes adiabáticos.

Conviene indicar que en este capítulo supondremos constantemente el espectro de valores de la energía discreto y no degenerado, incluyendo la posibilidad de una degeneración instantánea y accidental debida al cruzado de dichos valores.

Puede pensarse, sobre todo desde el punto de vista físico, que esta hipótesis es más bien artificial, ya que no parece convincente que la ecuación de Schrödinger correspondiente a algún valor propio particular de la energía, haya de estar esencialmente influenciada por la naturaleza discreta o continua de aquellas partes del espectro distantes del valor propio considerado.

T. Kato¹³⁾ presentó una nueva demostración que soslaya las dificultades citadas. No obstante, y por razones de sencillez, cuando se trata este problema se suele hacer referencia a la demostración original de Born y Fock. También nosotros seguiremos este procedimiento tal como lo presenta Messiah¹⁴⁾. Lo hacemos así porque, a parte de su mayor complicación, la demostración de Kato, según escribe él mismo, "es más bien formal y no completamente rigurosa desde el punto de

vista matemático".

TEOREMA ADIABÁTICO

Sea $H(t)$ el Hamiltoniano correspondiente a nuestro sistema cuántico y $E_j(t)$ el valor propio correspondiente al vector propio $|j(t)\rangle$.

Suponemos que el Hamiltoniano evoluciona con continuidad, pasando del valor $H(t_0)$ en el instante inicial t_0 a $H(t_1)$ en el instante t_1 . Conviene introducir el parámetro $\tau = t_1 - t_0$, que representa el intervalo de tiempo durante el cual tiene lugar la evolución del sistema. Si medimos el tiempo real tomando el parámetro τ como unidad obtenemos un tiempo ficticio relacionado con el t mediante la fórmula

$$t = t_0 + \tau \quad (2.1)$$

De ahora en adelante todos los estados y observables del sistema los referiremos a τ por sencillez en los cálculos ya que la evolución del sistema tiene lugar entre los

"instantes" $\tau = 0$ y $\tau = 1$.

Admitimos las siguientes hipótesis relativas al espectro de $H(\tau)$:

a) No existe degeneración en ningún punto del intervalo $(0, 1)$.

Es decir

$$E_j(\tau) \neq E_k(\tau) \quad (2.2)$$

para todo $j \neq k$, cualesquiera que sean los valores que tomen estos subíndices.

b) La función

$$\omega_{jk}(\tau) \equiv \frac{E_j(\tau) - E_k(\tau)}{h}$$

y sus sucesivas derivadas con respecto a τ son continuas y acotadas en el intervalo $0 \leq \tau \leq 1$.

c) Las sucesivas derivadas del proyector $P_j(\tau) = |E_j(\tau)\rangle\langle E_j(\tau)|$ con respecto a τ permanecen acotadas en dicho intervalo.

Como lo que nos interesa es la acotación de las funciones y operadores citados, admitimos la posibilidad de existencia de discontinuidades de primera especie, pero finitas.

Exigiendo tan sólo las condiciones a) y c), como se hace frecuentemente¹⁴⁾, veremos más adelante que no se pue-

de asegurar el carácter asintótico de la serie que resulta.

Si representamos el operador evolución por $U(\tau)$, habrá de verificarse la ecuación de Schrödinger. Es decir:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{d\tau} U(\tau) &= T H(\tau) U(\tau) \\ U(0) &= I \end{aligned} \tag{2.3}$$

Si el subespacio determinado por cada valor propio permaneciese fijo, podríamos integrar fácilmente la ecuación anterior. Bastaría tener en cuenta

$$H(\tau) = \sum_i E_i(\tau) P_i(0) \tag{2.4}$$

que llevado a la ecuación anterior e integrado nos conduce a (apéndice A)

$$U(\tau) = \sum_j (\exp -iT \varphi_j(\tau)) P_j(0) \tag{2.5}$$

siendo

$$\varphi_j(\tau) = \frac{1}{\hbar} \int_0^\tau E_j(\tau') d\tau' \tag{2.6}$$

Quiere decir que, si el Hamiltoniano de nuestro sistema cuántico es tal que el subespacio de cada valor propio permanece fijo, un estado propio $|E_k(0)\rangle$ evoluciona de modo que en cualquier instante τ no difiere del inicial más que en el factor de fase $\exp -iT\varphi_k(\tau)$, ya que en virtud de (2.5) se puede escribir

$$\begin{aligned} U(\tau)|E_k(0)\rangle &= \sum_j (\exp -iT\varphi_j(\tau)) P_j(0)|E_k(0)\rangle = \\ &= (\exp -iT\varphi_k(\tau)) |E_k(0)\rangle \end{aligned} \quad (2.7)$$

Pero en general no se cumple la invariencia del subespacio de cada valor propio y la resolución de la ecuación de Schrödinger se complica notoriamente.

Un primer método lógico para resolver este problema consistirá en efectuar un cambio de representación, variable con el tiempo, de modo que el sistema de referencia se mueva como los ejes propios del Hamiltoniano estudiado. En esta nueva representación los ejes propios serán fijos y podremos resolver la ecuación de Schrödinger tal y como hemos indicado. Deshaciendo el cambio efectuado tendremos resuelto el problema original.

Nos vemos así conducidos a introducir la que vamos a llamar "representación de ejes giratorios". Pero veremos que surge una complicación que hace que el problema no sea exactamente resoluble. Y es que la nueva ecuación de Schrödinger tiene un término adicional que estudiaremos como una perturbación pequeña en virtud de las hipótesis sobre las que descansa el teorema adiabático.

Introduzcamos un operador unitario $\mathcal{R}_1(\tau)$, que represente este movimiento de los ejes propios. Es decir, se habrá de verificar

$$|E_j(\tau)\rangle = \mathcal{R}_1(\tau) |E_j(0)\rangle, \quad (j=1,2,\dots) \quad (2.8)$$

El operador $\mathcal{R}_1(\tau)$ define así una transformación en la cual todo vector propio de $H(0)$ se transforma en vector propio de $H(\tau)$. Y lo mismo ocurre con los subespacios determinados por los proyectores correspondientes, pues conjugando la relación (2.8) obtenemos

$$\langle E_j(\tau)| = \langle E_j(0)| \mathcal{R}_1^\dagger(\tau) \quad , \quad (j=1,2,\dots) \quad (2.9)$$

y multiplicando operacionalmente las dos últimas igualdades re-

sulta

$$P_j(\tau) = R_1(\tau) P_j(0) R_1^\dagger(\tau), \quad (j=1, 2, \dots) \quad (2.10)$$

Introduzcamos el operador

$$K(\tau) = i\hbar \frac{d R_1(\tau)}{d\tau} R_1^\dagger(\tau) \quad (2.11)$$

Es un operador hermitico y acotado por representar $R_1(\tau)$ una transformación unitaria. Como el operador $R_1(\tau)$ tiene la propiedad (2.10), $K(\tau)$ ha de satisfacer unas ciertas condiciones. En el apéndice B hemos demostrado que para que se verifique la igualdad (2.10) es condición necesaria y suficiente que

$$[K(\tau), P_j(\tau)] = i\hbar \frac{d}{d\tau} P_j(\tau), \quad (j=1, 2, \dots) \quad (2.12a)$$

Naturalmente que esta relación de conmutación no puede definir unívocamente al operador $K(\tau)$. La igualdad (2.12a) se mantiene sumando al operador $K(\tau)$ otro de la forma

$$\sum_i P_i(\tau) F_i(\tau) P_i(\tau)$$

donde los $F_i(\tau)$ son operadores cualesquiera. Para evitar esta

indeterminación, y por razones de sencillez que más tarde aparecerán, exigimos al operador $K(\tau)$ la condición extra

$$\langle E_j(\tau) | K(\tau) | E_j(\tau) \rangle = 0 \quad , \quad (j = 1, 2, \dots) \quad (2.12b)$$

Como prueba de que ahora el operador $K(\tau)$ está totalmente definido vamos a calcularlo. Para ello basta multiplicar el desarrollo de (2.12a) por la derecha por $P_j(\tau)$, teniendo en cuenta (2.12b), y sumar para todos los valores de j . Se llega a la expresión

$$K(\tau) = i\hbar \sum_j \left(\frac{d}{d\tau} P_j(\tau) \right) P_j(\tau) \quad (2.14)$$

Con ello $R_1(\tau)$ queda definido por la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} R_1(\tau) = K(\tau) R_1(\tau) \quad (2.15)$$

con la condición inicial $R_1(0) = I$.

Si dotamos de superíndice 1 a los operadores resultantes de efectuar sobre los primitivos la transformación unitaria $R_1^+(\tau)$, se verifica

$$H^{(1)}(\tau) = R_1^+(\tau) H(\tau) R_1(\tau) = \sum_j E_j(\tau) P_j(0)$$

$$K^{(1)}(\tau) = R_1^+(\tau) K(\tau) R_1(\tau)$$

(2.16)

$$U^{(1)}(\tau) = R_1^+(\tau) U(\tau)$$

puesto que, como es sabido, el operador evolución no se transforma igual que los demás sino multiplicando tan sólo por la izquierda.

La ecuación transformada de la (2.3) será

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} (R_1(\tau) U^{(1)}(\tau)) = \tau R_1(\tau) H^{(1)}(\tau) R_1^+(\tau) R_1(\tau) U^{(1)}(\tau) \quad (2.17)$$

Teniendo en cuenta que de (2.12) se deduce

$$i\hbar R_1^+(\tau) \frac{d}{d\tau} R_1(\tau) = K^{(1)}(\tau) \quad (2.18)$$

la expresión (2.17) conduce, multiplicando miembro a miembro por $R_1(\tau)$ por la izquierda, a

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} U^{(1)}(\tau) = (\tau H^{(1)}(\tau) - K^{(1)}(\tau)) U^{(1)}(\tau) \quad (2.19)$$

con la condición inicial

$$U^{(0)}(0) = I \quad (2.20)$$

que se deduce de (2.3), (2.12) y (2.16).

Cabía esperar que, puesto que la transformación R_1^+ ha sido introducida de modo que anula exactamente el movimiento de los ejes propios, la ecuación de Schrödinger en la representación de ejes móviles fuera fácilmente soluble por ser los proyectores constantes en el tiempo. Pero analizando la ecuación (2.19) se deduce que lo que ocurre es que el nuevo Hamiltoniano no es $H^{(0)}(\tau)$ sino

$$H_R(\tau) = H^{(0)}(\tau) - \frac{1}{T} K^{(0)}(\tau) \quad (2.21)$$

Aunque $H^{(0)}(\tau)$ tenga por proyectores a los $P_j^{(0)}$, nada se puede decir "a priori" sobre los ejes propios del nuevo Hamiltoniano $H_R(\tau)$.

También podría pensarse que, puesto que el cambio de representación que hemos efectuado no nos conduce a una ecuación de Schrödinger exactamente resoluble, la transformación elegida no es la más conveniente. Este argumento nos llevaría

a buscar una transformación tal que, en la nueva representación, el Hamiltoniano fuese nulo o al menos constante para así poder resolver la ecuación de Schrödinger. Si demostramos que esto no es posible quedará justificado el seguir operando en la "representación de ejes giratorios".

Sea $A^\dagger(\tau)$ una transformación unitaria desconocida. Tratemos de determinarla con la condición de que, en la nueva representación, la ecuación de Schrödinger sea fácilmente resoluble. Según (2.17) la nueva ecuación será de la forma

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} (A(\tau) U^{(A)}(\tau)) = T A(\tau) H^{(A)}(\tau) U^{(A)}(\tau) \quad (2.22)$$

o lo que es lo mismo

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} U^{(A)}(\tau) = \left(T H^{(A)}(\tau) - i\hbar A^\dagger \frac{d}{d\tau} A(\tau) \right) U^{(A)}(\tau) \quad (2.23)$$

Los casos en los que (2.23) es más fácil de resolver son aquellos en los que se verifique

$$T H^{(A)}(\tau) - i\hbar A^\dagger(\tau) \frac{d}{d\tau} A(\tau) = c\tau. \quad (2.24)$$

Esta ecuación se puede escribir en la forma

$$i\hbar \frac{d}{dt} A(t) = T H(t) A(t) + cE \cdot A(t) \quad (2.25)$$

Si comparamos esta ecuación con la (2.3), que es la que tratamos de resolver, nos encontraremos con que, en el mejor de los casos, es de igual dificultad que aquélla. Es decir, se puede conseguir la constancia del nuevo Hamiltoniano. Pero el problema es, cuando menos, de análoga dificultad que el original. No es viable, por tanto, otro procedimiento que el de "parar" los ejes y estudiar el carácter del término aditivo que figura en (2.21) y que aparece como pequeño por figurar T en el denominador.

Nos proponemos aplicar la teoría de series asintóticas, expuesta en el capítulo anterior, siguiendo un método sugerido por nosotros¹⁵⁾ para evaluar rigurosamente la contribución de este término perturbativo. Recurriremos a una imagen de interacción, teniendo en cuenta que el problema del Hamiltoniano no perturbado está resuelto, como ya hemos indicado en el apéndice A.

Consideremos la ecuación transformada de la de Schrödinger. Según (2.19) es

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} U^{(1)}(\tau) = (T H^{(1)}(\tau) - K^{(1)}(\tau)) U^{(1)}(\tau) \quad (2.26)$$

Introduciendo el Hamiltoniano sin perturbar $H^{\circ}(\tau)$ y el perturbador $H^1(\tau)$ escribiremos

$$\begin{aligned} H^{\circ}(\tau) &= H^{(1)}(\tau) \\ H^1(\tau) &= -\frac{1}{T} K^{(1)}(\tau) \end{aligned} \quad (2.27)$$

Si los respectivos operadores evolución son $U^{\circ}(\tau)$ y $U^1(\tau)$ el operador buscado será

$$U^{(1)}(\tau) = U^{\circ}(\tau) U^1(\tau) \quad (2.28)$$

Como los proyectores de $H^{\circ}(\tau) = H^{(1)}(\tau)$ son los

$$R_i^{\dagger}(\tau) P_j(\tau) R_i(\tau) = P_j(0)$$

la constancia de los mismos nos permite escribir (apéndice A)

$$U^{\circ}(\tau) = \sum_j \left(\exp -iT \psi_j(\tau) \right) P_j(0) \quad (2.29)$$

El valor inicial será

$$U^{\circ}(0) = \sum_j P_j(0) = I \quad (2.30)$$

por ser

$$\psi_j(0) = 0 \quad \text{y} \quad \sum_j P_j(\tau) = I$$

El problema se reduce a calcular

$$U^{\prime}(\tau) = U^{\circ\prime}(\tau) U^{\prime\prime}(\tau) = \sum_j \left(\exp i T \psi_j(\tau) \right) P_j(0) U^{\prime\prime}(\tau) \quad (2.31)$$

y para ello vamos a deducir la ecuación integral que satisface este operador, que hemos considerado como una perturbación del $U^{\circ}(\tau)$. Sustituyendo (2.28) en (2.26) y teniendo en cuenta que $U^{\circ}(\tau)$ es solución (apéndice A) de

$$i \hbar \frac{d}{d\tau} U^{\circ}(\tau) = T H^{(0)}(\tau) U^{\circ}(\tau) \quad (2.32)$$

resulta

$$i \hbar U^{\circ}(\tau) \frac{d}{d\tau} U^{\prime}(\tau) = -K^{\prime\prime}(\tau) U^{\circ}(\tau) U^{\prime}(\tau) \quad (2.33)$$

con la condición inicial

$$U'(0) = I \quad (2.34)$$

que se deduce de (2.20), (2.28) y (2.30).

Las condiciones (2.33) y (2.34) pueden resumirse diciendo que el operador $U'(\tau)$ satisface la ecuación integral

$$U'(\tau) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^{\tau} U^{\dagger}(\tau') K'(\tau') U(\tau') U'(\tau') d\tau' \quad (2.35)$$

La ecuación (2.35) es de tipo Volterra. Entonces puede pensarse en encontrar una serie uniformemente convergente como solución de la misma, puesto que el núcleo, en nuestro caso, satisface la condición de continuidad en todo el intervalo $0 \leq \tau \leq t$ ¹⁶⁾. Pero hay que tener en cuenta que la ecuación (2.35) relaciona operadores. Para resolverla aplicando la teoría usual de funciones hay que tomar elementos de matriz, con lo cual llegamos a ecuaciones donde el núcleo ha degenerado en suma de funciones multiplicadas por variables y ya no se conserva el carácter original de la ecuación. Ésta deja de ser de tipo Volterra, de modo que no conviene tomar elementos de matriz.

Estudiemos el operador

$$F(\tau) = \int_0^1 U^{\dagger}(\tau) K''(\tau) U(\tau) d\tau \quad (2.36)$$

Según (2.29) esta igualdad se puede escribir en la forma

$$F(\tau) = \int_0^1 \sum_j (\exp i\tau\varphi_j(\tau)) P_j(0) K''(\tau) \sum_k (\exp -i\tau\varphi_k(\tau)) P_k(0) d\tau \quad (2.37)$$

y tomando elementos de matriz, al no depender $F(\tau)$ de la variable z resulta

$$\langle E_m(0) | F(\tau) | E_n(0) \rangle = \langle E_m(0) | \int_0^1 (\exp i\tau(\varphi_m - \varphi_n)) K''(\tau) d\tau | E_n(0) \rangle \quad (2.38)$$

Los elementos diagonales de $F(\tau)$ son nulos. En efecto, teniendo en cuenta (2.16), (2.8) y (2.13) resulta

$$\begin{aligned} \langle E_m(0) | K''(\tau) | E_n(0) \rangle &= \langle E_m(0) | R_1^{\dagger}(\tau) K(\tau) R_1(\tau) | E_n(0) \rangle = \\ &= \langle E_m(\tau) | K(\tau) | E_n(\tau) \rangle = 0 \end{aligned} \quad (2.39)$$

En cuanto a los no diagonales, como $m \neq n$, el problema se reduce a calcular

$$\bar{F}_{mn}(\tau) = \int_0^1 (\exp i\tau \psi_{mn}(\tau)) K_{mn}^{(1)}(\tau) d\tau \quad (2.40)$$

(m ≠ n)

donde hemos introducido la función

$$\psi_{mn}(\tau) = \psi_m(\tau) - \psi_n(\tau) \quad (2.41)$$

que no se anula en ningún punto del intervalo de integración.

La integral (2.40) fue previamente tratada en el capítulo I. Es análoga a la (1.24). Exigiendo a $K_{mn}^{(1)}(\tau)$ y a $\psi_{mn}(\tau)$ las amplias condiciones (1.32), obtenemos un desarrollo en serie asintótica para $\bar{F}_{mn}(\tau)$. Limitándonos al primer término podemos escribir

$$\bar{F}_{mn}(\tau) = O\left(\frac{1}{\tau}\right) \quad (2.42)$$

Imponiendo además las condiciones extras del caso particular a) obtenemos

$$\bar{F}_{mn}(\tau) = O\left(\frac{1}{\tau^{n+2}}\right) \quad (2.43)$$

y con las del caso b)

$$F_{mn}(\tau) = O\left(\frac{1}{\tau^{m+1}}\right) \quad (2.44)$$

Estas tres últimas igualdades las escribiremos conjuntamente en la forma

$$F(\tau) = O\left(\frac{1}{\tau^n}\right) \quad (2.45)$$

teniendo en cuenta que para $n=1$ obtenemos el desarrollo general de (2.40) y que para $n=m+2$ y $n=m+1$ (2.45) expresa la forma asintótica del mismo en los casos particulares a) y b) respectivamente. En principio, hasta resolver matemáticamente el problema matemático planteado, trataremos los tres casos conjuntamente. Más tarde analizaremos detalladamente el sentido físico de cada uno y estableceremos las conclusiones apropiadas.

Antes de seguir adelante con la demostración, conviene analizar detenidamente el significado de las igualdades del tipo (2.45) donde se indica que un operador es del orden de

$$\frac{1}{\tau^n} \cdot$$

Hemos efectuado el estudio del operador $F(\tau)$ a través de sus elementos de matriz. Aplicando al problema que nos ocupa el desarrollo en serie asintótica de la integral (1.24)

hemos establecido un orden para todos sus elementos de matriz. Y simbólicamente, hemos resumido todo ello en la igualdad (2.45). Entonces todas las expresiones de este tipo no son más que un modo abreviado y formal de escribir que, en la representación de energías (la única interesante para nuestro problema desde el punto de vista físico), los elementos de matriz del operador en cuestión son del orden que se cita.

Una vez establecido el significado de la ecuación (2,45) insistiremos en un hecho. Tratamos de determinar con una cierta aproximación el operador evolución del sistema. Es interesante, por tanto, calcular la norma del operador que encontremos para ver el grado en que la aproximación empleada conserva la unitariedad.

Para ello conviene tener en cuenta que la ecuación (2.45) se puede interpretar, bien en el sentido de que los elementos de matriz del operador en cuestión son del orden de $\frac{1}{\tau^n}$, o también como que la norma del operador $F(\tau)$ es del orden de $\frac{1}{\tau^n}$. La equivalencia entre ambas interpretaciones nos parece fundamental por cuanto de ella se derivan importantes consecuencias que, a nuestro juicio, no se habían tenido en cuenta en las investigaciones en torno al problema adiabático. Con objeto de no perder la unidad, incluimos en el apéndice C la demostración de la misma.

Integrando por partes el segundo miembro de (2.35) y teniendo en cuenta (2.36) resulta

$$U'(\tau) = I + F(\tau) U'(\tau) - \int_0^{\tau} F(\tau') \frac{d}{d\tau'} U'(\tau') d\tau' \quad (2.46)$$

Y como $U'(\tau)$ es un operador unitario, de (2.45) y (2.46) se deduce

$$U'(\tau) = I + O\left(\frac{1}{T^n}\right) \quad (2.47)$$

que llevado a la igualdad (2.28) hace que (2.16) nos proporcione directamente la expresión del operador evolución

$$U(\tau) = R_1(\tau) U^{\circ}(\tau) \left[I + O\left(\frac{1}{T^n}\right) \right] \quad (2.48)$$

CASOS PARTICULARES

El grado de aproximación final obtenido depende del valor de n en las igualdades (2.45) y (2.48). La expresión (2.45) no es sino el desarrollo asintótico de la

integral (2.40), que fue estudiada detenidamente por nosotros en el capítulo anterior. Exigiendo condiciones adicionales o introduciendo procedimientos específicos lográbamos hacer n tan grande como deseáramos.

En primer lugar limitémonos al caso más sencillo. No exigiremos condiciones extraordinarias a las funciones que intervienen en (2.40) y por tanto llegamos a que, de acuerdo con (2.42), el operador evolución es

$$U(1) = R_1(1) U^0(1) \left[I + o\left(\frac{1}{\tau}\right) \right] \quad (2.49)$$

Es decir, sin más que tomar $n=1$ hemos obtenido el teorema adiabático ordinario. Y su demostración es la indicada pero sustituyendo n por 1.

Supongamos ahora que el Hamiltoniano del sistema es tal que se anulan sus m primeras derivadas en los instantes inicial y final. En este caso $K_{m,n}^{(1)}(\tau)$ y sus derivadas son nulas inicial y finalmente¹¹⁾ y el desarrollo asintótico de $F(\tau)$ es el del caso a) del capítulo anterior. De acuerdo con (1.41)

$$F(\tau) = o\left(\frac{1}{\tau^{m+1}}\right) \quad (2.50)$$

y por tanto el operador de evolución es

$$U(t) = R_1(t) U^0(t) \left[I + O\left(\frac{1}{T^{m+1}}\right) \right] \quad (2.51)$$

Hemos obtenido de este modo el teorema de orden m y su demostración, sin más que tener en cuenta que, en virtud de las condiciones impuestas al Hamiltoniano, $n=m+1$.

Finalmente supongamos que antes de integrar (2.40) efectuamos un nuevo cambio de representación mediante la transformación unitaria $R_2(\tau)$ definida por la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} R_2(\tau) = K^{(2)}(\tau) R_2(\tau) \quad (2.52)$$

$$R_2(0) = I$$

donde

$$K^{(2)}(\tau) = i\hbar \sum_j \left(\frac{d}{d\tau} P_j^{(2)}(\tau) \right) P_j^{(2)}(\tau) \quad (2.53)$$

siendo $P_j^{(2)}(\tau)$ los proyectores del Hamiltoniano

$$H^{(1)}(\tau) = \frac{1}{T} R_1^+(\tau) K^{(1)}(\tau) R_1(\tau) \quad (2.54)$$

En este caso se ha demostrado¹²⁾ que

$$K^{(2)}(\tau) = O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (2.55)$$

Y del mismo modo, repitiendo m veces el cambio de representación se llega al resultado

$$K^{(m)}(\tau) = O\left(\frac{1}{T^{m-1}}\right) \quad (2.56)$$

La integral final que hay que resolver es

$$\bar{F}_{jk}(T) = \int_0^1 \left(\exp i T \varphi_{jk}(\tau) \right) K_{jk}^{(m)}(\tau) d\tau \quad (2.57)$$

que por verificarse (2.56) admite un desarrollo asintótico del tipo b). De este modo obtenemos

$$\bar{F}_{jk}(T) = O\left(\frac{1}{T^m}\right) \quad (2.58)$$

y el operador evolución adquiere la forma

$$U(T) = R_1(T) R_2(T) \dots R_m(T) U^{(m)}(T) \left[I + O\left(\frac{1}{T^m}\right) \right] \quad (2.59)$$

Entonces la demostración del teorema adiabático generalizado es la misma que hemos dado para los demás, pero teniendo en cuenta que, en virtud del proceso de iteración introducido se verifica $n = m$.

CONCLUSIONES

El desarrollo asintótico de la integral (1.24) nos ha permitido demostrar con rigor el carácter asintótico de la invariancia adiabática. La demostración de los tres teoremas admite un esquema común, si bien la exigencia de condiciones extras, por un lado, y la iteración de un procedimiento, por otro, representan dos casos particulares que hemos diferenciado según el valor de un exponente.

Pudiera pensarse que puesto que el teorema generalizado proporciona el grado de aproximación deseado, es equivalente al teorema de orden m . Pero conviene insistir en que, aunque ambos proporcionan un mismo grado de aproximación, su contenido, e incluso su aplicabilidad, no es similar. Comparemos las igualdades (2.41) y (2.59). Aun en el caso de que la aproximación sea en ambos de $\frac{1}{T^m}$, la forma del operador evolución es distinta y mucho más complicada en el caso del teorema generalizado. De modo que, en igual-

dad de condiciones, es decir, tratándose de un Hamiltoniano para el cual se anulen sus $m-1$ primeras derivadas en los instantes inicial y final, la utilidad práctica del teorema de orden m es superior a la del generalizado.

Pero, normalmente, un Hamiltoniano no cumple estas condiciones. En este caso el único procedimiento conocido para calcular el operador evolución con aproximación $\frac{1}{T^m}$ es el teorema generalizado, en el cual se consigue dicho objetivo mediante m cambios de representación.

Finalmente queremos señalar que cualquier problema relacionado con el resto es fácilmente resoluble puesto que la aproximación se refiere siempre a la empleada para $F(\tau)$ y el resto de la serie ha sido previamente calculado por nosotros en (1.29) y (1.37). No obstante desde el punto de vista físico este problema no es de importancia, puesto que existen procedimientos usuales para el cálculo del resto en el teorema adiabático de gran sencillez. Un resumen de los mismos se incluye en el apéndice D.

CAPÍTULO III

UNA NUEVA APROXIMACIÓN

INTRODUCCIÓN

En los capítulos anteriores nos hemos propuesto dar rigor matemático a la aproximación adiabática y sintetizar en una sola demostración las existentes hasta hoy para cada uno de los teoremas adiabáticos. Al mismo tiempo hemos aclarado cada una de las hipótesis introducidas para terminar con un análisis del significado físico de los métodos matemáticos empleados. Las conclusiones finales nos han servido para puntualizar el grado de aproximación y las posibilidades que presenta la hipótesis adiabática.

En el presente capítulo pretendemos sugerir una combinación de las aproximaciones instantánea y adiabática para llegar a la conclusión de que, bajo ciertas condiciones de variación lenta y rápida combinadas del Hamiltoniano, el sistema que inicialmente se encuentra en un estado propio de la energía, evoluciona de modo que el estado en un instante cualquiera es el propio que se deduce del primero por continuidad. Para ello conviene recordar brevemente el significado de las dos aproximaciones que pretendemos combinar.

Es importante conocer de qué modo evoluciona

el estado dinámico de un sistema cuando se modifica el campo exterior al que se encuentra sometido. Como el problema es análogo al de resolver la ecuación de Schrödinger, no se puede establecer un resultado general para el cálculo del operador evolución. La resolución del problema depende fundamentalmente del modo concreto según el cual se efectúa la variación del campo; o dicho de otra manera: de la forma concreta del Hamiltoniano del sistema.

Es un caso muy estudiado, y que se encuentra resuelto exactamente en el apéndice A, aquél en que la evolución del sistema es tal que los subespacios asociados a los proyectores de los vectores propios del Hamiltoniano son independientes del tiempo. Pero en el caso general los proyectores propios dependen explícitamente del tiempo y es necesario acudir a procedimientos específicos o a métodos aproximados para calcular el operador evolución. No obstante existen dos casos en los cuales es sencillo su estudio. El primero es la aproximación instantánea ("sudden"), aplicable cuando el tiempo T que dura la evolución es "muy pequeño" y el segundo es la aproximación adiabática correspondiente al caso en que T es "muy grande". En el apéndice D hemos incluido un breve resumen sobre la aproximación instantánea así como el estudio del grado de validez de ambas. De ahora en ade-

lante al parámetro que mide la evolución del sistema lo representaremos por τ_i y τ_a , según se trate de perturbaciones instantáneas o adiabáticas, respectivamente.

Si τ_i es suficientemente pequeño se llega a la conclusión de que el operador evolución, en el intervalo de tiempo τ_i , puede considerarse, en primera aproximación, igual a la identidad. Hemos visto en el apéndice D, cómo se puede calcular el error que lleva consigo esta aproximación y llegamos a la conclusión de que

$$U_i(1) = I + O(\tau_i) \quad (3.1)$$

siendo esta expresión tanto más lícita cuanto más acusada es la desigualdad

$$\tau_i \ll \frac{\hbar}{\Delta H_i} \quad (3.2)$$

donde ΔH_i representa la desviación cuadrática media en el estado inicial del observable

$$\overline{H} = \int_0^1 H(\tau) d\tau = \frac{1}{\tau_i} \int_{t_{inicial}}^{t_{final}} H(t) dt \quad (3.3)$$

y Σ es el tiempo real medido en unidades T_i .

Por el contrario, si T_a es "muy grande", aplicando la teoría de aproximaciones asintóticas a la resolución de la ecuación de Schrödinger se llega a la conclusión de que si el sistema se encuentra inicialmente en un estado propio de la energía, la evolución lo lleva finalmente al estado estacionario instantáneo que se deduce del primero por continuidad.

Una medida del error que lleva consigo esta teoría se puede deducir calculando el resto de la serie asintótica a que conduce la teoría de perturbaciones (capítulo I). También, al igual que en el caso de la aproximación instantánea, se puede medir por la probabilidad de encontrar al sistema en un estado final distinto del proyectado según el estado propio deducido por continuidad (apéndice B). Desde el punto de vista físico, éste es el más útil porque presenta un significado mucho más intuitivo.

El resultado final es que la hipótesis adiabática es tanto más lícita cuanto más válida es la desigualdad

$$\left| \frac{\alpha_j^{\max.}(t)}{\omega_j^{\min.}(t)} \right|^2 \ll 1, \quad t_{\text{inic.}} \leq t \leq t_{\text{final}} \quad (3.4)$$

donde $\alpha_j(t)$ representa la longitud del vector $\frac{d}{dt} |E_j(t)\rangle$ (velocidad angular del eje propio correspondiente) y $\omega_j(t)$ es el valor de la frecuencia de Bohr de la transición del estado $|E_j(t)\rangle$ de valor propio $E_j(t)$ hacia su vecino más próximo, en el instante t .

LA NUEVA INVARIANCIA

Supongamos un Hamiltoniano que varía alternativamente de un modo lento y luego brusco. Utilizaremos la representación gráfica de la figura 1, pero teniendo en cuenta que es meramente simbólica y que su único objeto es materializar, en lo posible, el sentido del artificio que vamos a emplear. Los puntos marcados en grueso representan el comienzo de las variaciones bruscas pero en ellos la variación es todavía adiabática. Son puntos que carecen de papel predominante. Tan sólo los introducimos como medio de aclarar al máximo la demostración de esta nueva invariancia.

Como ya hemos anticipado nos proponemos combinar de modo apropiado las aproximaciones adiabática e instantánea, de modo que las condiciones que habremos de imponer en cada intervalo serán las convenientes para que podamos aplicar alter-

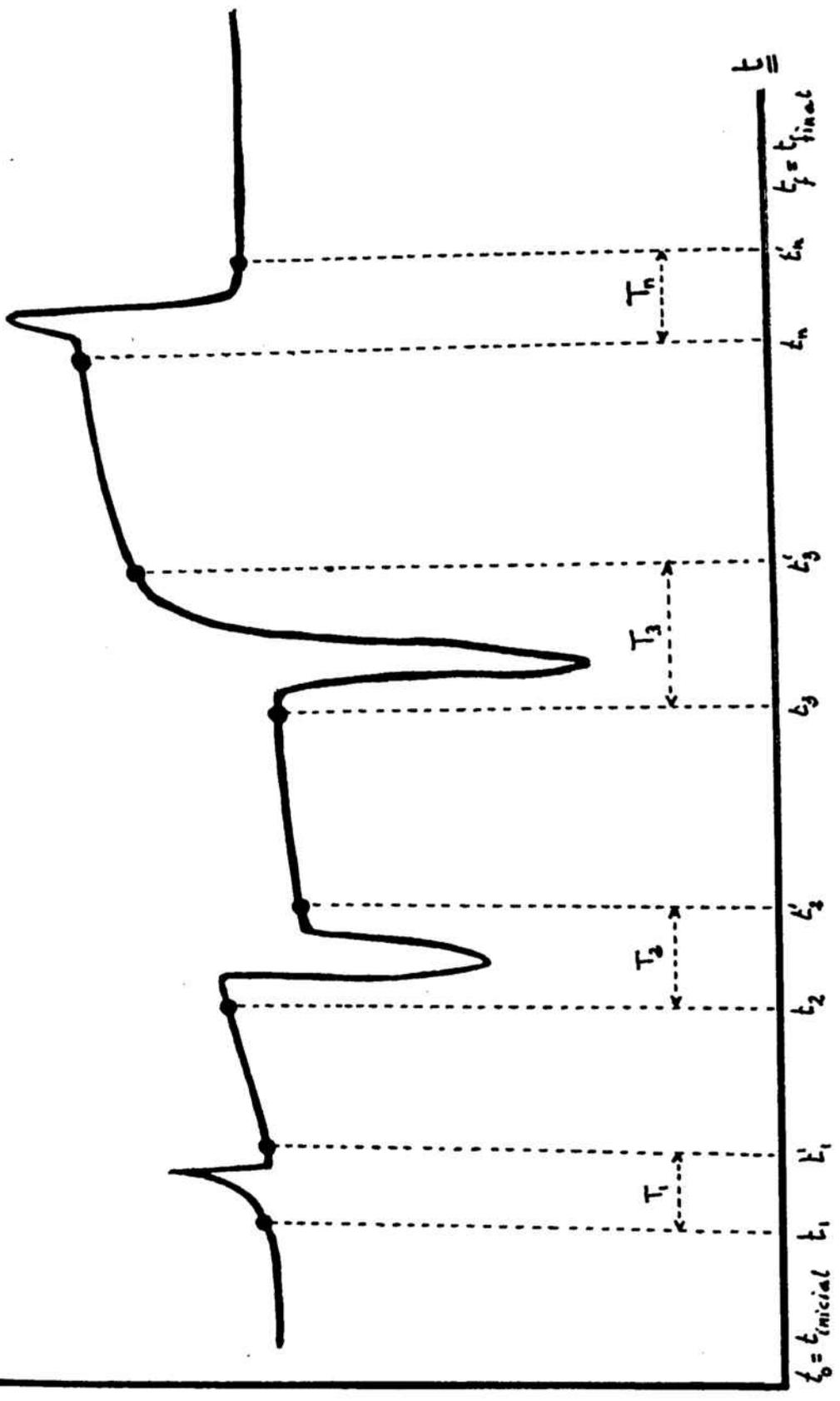


FIG. 1

nativamente cada una de ellas.

Las variaciones bruscas aparecen pues limitadas por la condición

$$T_k \ll \frac{\hbar}{\Delta \bar{H}_k}, \quad (k=1, 2, 3, \dots, n) \quad (3.5)$$

donde $\Delta \bar{H}_k$ tiene el sentido indicado en (3.3). Naturalmente que el estado inicial, que es en el que hay que calcular la desviación cuadrática media, depende del subíndice k . Como se puede comprobar en la figura, el instante inicial para el cálculo de ΔH_k es precisamente t_k .

Del mismo modo exigiremos que en las evoluciones lentas, los ejes propios del Hamiltoniano tengan una velocidad de giro máxima que sea muy pequeña, en cualquier instante, comparada con la frecuencia mínima de Bohr para la transición del estado en cuestión al vecino más próximo, en el instante considerado. Es decir

$$\left| \frac{\overset{\text{max.}}{\dot{\alpha}_j(t)}}{\underset{\text{min.}}{\omega_j(t)}} \right|^2 \ll 1, \quad (j=1, 2, 3, \dots, n) \quad (3.6)$$

para todo t comprendido en los intervalos de variación lenta. Conviene tener en cuenta que, dada la notación de la fi-

gura, todos los instantes de evolución lenta y brusca, se pueden escribir de este modo, respectivamente

$$t_{\text{adiab.}} = t_i + \tau T_i$$

$$t_{\text{instant.}} = t \neq t_i + \tau T_i \quad (3.7)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$. ; $0 < \tau < 1$.

Consideremos el operador evolución de nuestro sistema $U(t_f, t_0)$ entre los instantes t_0 y t_f . Introduzcamos los operadores $U(t, t')$ y los $U(t', t)$. Por medio del primero representamos un operador que coincide con el de evolución del sistema en el intervalo (t', t) y que fuera de él es la identidad. Del mismo modo $U(t', t)$ representa un operador igual al $U(t_f, t_0)$ en el intervalo (t, t') . Fuera de este intervalo, $U(t', t)$ coincide con el operador identidad.

Como el sistema físico, en su evolución de t_0 a t_f pasa por todos los instantes intermedios, el operador evolución del mismo será igual al producto de los operadores que actúan en cada uno de los intervalos en que hemos dividido el total. Es decir

$$\begin{aligned}
 U(t_1, t_0) &= U(t_f, t'_{f-1}) U(t'_{f-1}, t_{f-1}) \dots U(t'_{n+1}, t_n) U(t_n, t'_n) \dots \\
 &\dots U(t'_2, t_2) U(t_2, t'_1) U(t'_1, t_1) U(t_1, t_0)
 \end{aligned}
 \tag{3.8}$$

En este producto operacional hay dos tipos de operadores completamente distintos. En primer lugar aparecen los de la forma $U(t_{n+1}, t'_n)$, admitiendo para conservar la notación $t'_0 = t_0$. Estos operadores, según su definición, rigen la evolución del sistema durante un intervalo de tiempo en el cual se puede aplicar la aproximación adiabática. Es decir, según (2.48) resulta que

$$U(t_{n+1}, t'_n) = R(t_{n+1}) \phi(t_{n+1}) \left[I + o\left(\frac{1}{t_{n+1} - t'_n}\right) \right]
 \tag{3.9}$$

donde $R(t_{n+1})$ es el operador unitario introducido en el capítulo II para pasar a la representación de ejes móviles, y

$$\phi(t_{n+1}) = \sum_j (\exp i(t'_n - t_{n+1}) \hbar^{-1} \varphi_j(t_{n+1})) P_j(t'_n)
 \tag{3.10}$$

siendo

$$\varphi_j(t_{n+1}) = \int_{t'_n}^{t_{n+1}} E_j(t) dt, \quad (j=1,2,\dots) \quad (3.11)$$

Del mismo modo se pueden aplicar a este operador todas las conclusiones del capítulo II, sin más que tener en cuenta que el instante inicial es el t'_n , el final el t_{n+1} y la evolución dura un tiempo $t_{n+1} - t'_n$, puesto que se verifica la condición (3.6) que garantiza la aplicabilidad del teorema adiabático.

Según el enunciado del teorema adiabático, si el sistema se encuentra inicialmente en un estado propio del hamiltoniano, que escribiremos $|t'_n\rangle$, al final de su evolución se encontrará en el estado propio de $H(t)$ que se deduce del primero por continuidad y que será $|t_{n+1}\rangle$ según nuestra notación. Es decir, este tipo de operadores son tales que

$$U(t_{n+1}, t'_n) |t'_n\rangle = |t_{n+1}\rangle, \quad (n=0,1,2,\dots) \quad (3.12)$$

siendo $|t'_n\rangle$ y $|t_{n+1}\rangle$ vectores propios de $H(t)$ en los instantes que indican.

El segundo tipo de operadores que aparecen en el producto finito (3.8) son de la forma $U(t'_n, t_n)$. En vir-

tud de las condiciones (3.5) la variación del Hamiltoniano entre dos instantes de este tipo puede tomarse como una perturbación instantánea. O sea

$$U(t'_n, t_n) |t_n\rangle = |t_n\rangle = |t'_n\rangle \quad (3.13)$$

Si el operador evolución es la identidad, significa que un estado propio inicial del que partimos no sufre alteración ninguna. Es decir

$$U(t'_n, t_n) = I + O(t'_n - t_n), (n=1, 2, \dots, f-1) \quad (3.14)$$

Como el producto (3.8) tan sólo incluye operadores de uno de estos dos tipos, es fácil llegar a la conclusión de que si partimos de un estado propio inicial $|t_0\rangle$ y se cumplen las condiciones (3.5) y (3.6) en las sucesivas variaciones lentas y rápidas, el sistema evoluciona de modo que en el instante final el sistema se encuentra en el estado propio $|t_f\rangle$ que se deduce del primero por continuidad.

En efecto, calculemos el vector $U(t_f, t_0) |t_0\rangle$. Teniendo en cuenta (3.13) y (3.14) resulta :

$$U(t_f, t_0) |t_0\rangle = U(t_f, t'_{f-1}) U(t'_{f-1}, t_{f-1}) \dots U(t'_n, t_n) U(t_n, t'_{n-1}) \dots$$

$$\dots U(t', t_i) U(t, t_0) |t_0\rangle = U(t_f, t'_{f-1}) U(t'_{f-1}, t_{f-1}) \dots$$

$$\dots U(t'_n, t_n) U(t_n, t'_{n-1}) \dots U(t', t_i) |t_i\rangle = U(t_f, t'_{f-1})$$

$$U(t'_{f-1}, t_{f-1}) \dots U(t'_n, t_n) U(t_n, t'_{n-1}) \dots |t'_i\rangle = \dots =$$

$$= U(t_f, t'_{f-1}) |t'_{f-1}\rangle = |t_f\rangle . \quad (3.15)$$

De este modo llegamos al nuevo teorema adiabático, objeto del presente capítulo: Si un sistema físico se encuentra inicialmente en un estado propio $|E_j(t_0)\rangle$ de la energía, correspondiente al valor propio $\bar{E}_j(t_0)$, y se somete a un campo de variaciones bruscas y lentas combinadas sujetas a las restricciones (3.5) y (3.6), su evolución es tal que en el instante final su estado físico viene representado por el vector propio $|\bar{E}_j(t_f)\rangle$ correspondiente al valor propio $E_j(t_f)$, que se deduce del primero por continuidad.

CONCLUSIONES

El grado de aproximación que suministra el nuevo teorema adiabático, se deduce de la expresión (3.8) que hemos encontrado para el operador evolución. Como conocemos la aproximación de cada factor, mediante el cálculo del producto podremos encontrar la de $U(t_f, t_0)$.

Tratemos, por ejemplo, de calcular la norma del operador evolución, muy importante por suministrar la información necesaria sobre su posible unitariedad. Teneiendo en cuenta (3.9) y (3.13), así como $R(t) R^\dagger(t) = I$ y $\phi(t) \phi^\dagger(t) = I$ llegamos a la conclusión de que

$$\| U(t_f, t_0) \| = \left[1 + o\left(\frac{1}{t_f - t_{f-1}}\right) \right] \left[1 + o(\tau_{f-1}) \right] \dots \left[1 + o\left(\frac{1}{t_1 - t_0}\right) \right] \quad (3.16)$$

y como en todas las aplicaciones físicas el número de factores será finito, podemos escribir, con una buena aproximación,

$$\| U(t_f, t_0) \| = I + o(\tau_{\max}) \quad (3.17)$$

representando por τ_{\max} el valor máximo que se obtiene al comparar los intervalos de perturbación instantánea con los in-

tervalos de variación adiabática del Hamiltoniano.

Es decir el operador evolución no es exactamente unitario (lo mismo sucede en la mayoría de los métodos aproximados). Su norma difiere de la unidad en una cantidad del orden del error máximo cometido al aplicar las aproximaciones instantánea y adiabática.

Naturalmente que cualquier aproximación obtenida es susceptible de mejora. Basta aproximar más en el cálculo de los factores de (3.8) según los procedimientos indicados en el capítulo II.

Conviene insistir en que esta aproximación es muy buena porque nos permite, no sólo asegurar ^{que} el estado propio inicial se desplaza con continuidad, sino que la fórmula (3.8) nos da un procedimiento asequible para calcular el operador evolución. De este modo, partiendo de un estado, incluso no propio, podremos predecir el estado final.

$$| \text{Estado final} \rangle \simeq U(t_f, t_0) | \text{Estado inicial} \rangle \quad (3.18)$$

con el grado de aproximación indicado. Ello es de suma aplicación porque suministra inmediatamente las probabilidades de transición, empleando para el cálculo el procedimiento seguido, por ejemplo, por A. Dykhne¹⁸⁾.

Finalmente queremos insistir un tanto en el significado físico del nuevo teorema, con objeto de resolver las posibles dificultades que se pueden presentar cuando se trate de interpretar el sentido del mismo.

El teorema adiabático, proporciona en primer lugar un procedimiento para calcular el operador evolución de un sistema físico. Y nos lleva a la conclusión de que un estado propio evoluciona de modo que se "traslada" según los distintos estados propios instantáneos. Pero, como ya hemos indicado, lo verdaderamente importante es que suministra asimismo la forma del operador evolución.

Cuando el Hamiltoniano es tal que sus estados propios, o mejor dicho, los proyectores asociados, son constantes en el tiempo el sistema evoluciona de un modo trivial. Los estados propios se conservan, salvo factor de fase, y el operador evolución adquiere la forma más sencilla (A.8). Pues bien, el teorema adiabático permite asegurar que, si los ejes propios del Hamiltoniano giran muy lentamente el fenómeno es análogo y tan sólo hay que efectuar un cambio de representación conocido para calcular el operador evolución con la aproximación que se desee.

Se da como hipótesis de trabajo para la aplicación del teorema adiabático que el tiempo que separa los instantes entre los cuales se mide la evolución del sistema "tien-

de a infinito" . A nuestro juicio es desacertada tal afirmación pues lo que realmente se quiere indicar, es que los ejes propios giran muy lentamente si se les compara con el cambio experimentado por los niveles más próximos. O dicho de otro modo, en un proceso físico se podrá aplicar la hipótesis adiabática cuando el tiempo que ha de transcurrir para que exista un cambio apreciable en los estados propios del Hamiltoniano es grande comparado con la potencia de Bohr mínima entre todas las posibles transiciones.

Como es lógico el caso límite se presenta cuando los subespacios que proyectan sobre cada vector propio son constantes. Entonces el teorema adiabático suministra exactamente la solución de la ecuación de Schrödinger ($\tau = \infty$) y se pueden relacionar estados del sistema separados por cualquier intervalo de tiempo ($\tau =$ finito). En una palabra, el parámetro τ mide la evolución del sistema y ha de ser muy grande (velocidad de giro pequeña). Pero los instantes que se relacionan pueden estar separados por tiempos finitos, que es precisamente el caso más interesante.

Veamos ahora el significado físico de las perturbaciones instantáneas. Cuando la introducción del sistema en un campo se lleva a cabo en un intervalo de tiempo que cumple la condición (3.5) el sistema no altera su estado físico :

por grande que sea la perturbación. Tal afirmación puede parecer un contrasentido, pero hay que tener en cuenta que el verdadero significado de la relación de incertidumbre tiempo-energía¹⁹⁾, y ésta es precisamente la condición (3.5), atribuye al sistema físico una cierta inercia para experimentar cambios de energía. No son aceptadas alteraciones tales que se experimenten en un tiempo inferior a $\hbar/\Delta\bar{H}$. El sistema no las acusa. Por eso en tiempos de perturbación de este orden el operador evolución coincide con la unidad y el sistema físico se mantiene inalterado.

De acuerdo con las interpretaciones indicadas la nueva invariancia aparece con un claro sentido lógico, como ocurre con todos los fenómenos físicos una vez que se ha penetrado en su verdadera esencia. Establece, simplemente, que en una sucesión de variaciones adiabáticas e instantáneas combinadas, todo sucede como si éstas últimas no existiesen puesto que transcurren en un tiempo tan pequeño que el sistema no las acepta. Por eso el resultado final es el mismo que si la perturbación fuera enteramente adiabática.

La aplicación de esta nueva invariancia para el cálculo de probabilidades de transición y problemas ligados a aceleración de partículas se retrasará en la práctica hasta

que se puedan construir aceleradores que proporcionen cambios de energía considerables en tiempos suficientemente pequeños de acuerdo con la condición (3.5). Es decir, es un problema técnico del que no nos ocuparemos por no presentar interés desde el punto de vista de nuestra investigación.

Finalmente queremos insistir en que la nueva invariancia se distingue de las adiabáticas en que incorpora a las mismas un fenómeno de naturaleza puramente cuántica, como lo es la relación de incertidumbre tiempo-energía. Por esta razón, en el capítulo siguiente, al trasladar la hipótesis adiabática a la Mecánica Clásica nos será posible obtener resultados similares a los deducidos en el segundo capítulo. Pero no intentaremos encontrar la nueva invariancia por ser esencial en ella el que las acciones sobre sistemas físicos no se puedan producir instantáneamente. Como este hecho está en franca contradicción con la teoría clásica no es posible la extensión de nuestro trabajo a la Mecánica Clásica.

CAPÍTULO IV

LA INVARIANCIA ADIABÁTICA EN MECÁNICA CLÁSICA

INTRODUCCIÓN

En recientes trabajos^{20, 21, 22, 23)} se ha presentado una nueva técnica de cálculo formal que permite tratar los problemas clásicos de perturbaciones por procedimientos análogos a los empleados en Mecánica Cuántica. Se introduce un operador evolución, de modo similar a como se hace en el campo cuántico, y se llega a su ecuación de movimiento. Presenta una gran analogía con la de Schrödinger, con la diferencia de que el operador de evolución aparece ahora multiplicando por la izquierda. Esta modalidad no representa ninguna alteración esencial. Es simplemente un ingenioso recurso de cálculo, útil para poder desarrollar una cómoda teoría de perturbaciones²³⁾.

Aprovechando esta técnica operacional se ha llegado a un teorema adiabático de orden m en Mecánica Clásica, exigiendo las condiciones apropiadas al sistema físico, deduciéndose el teorema adiabático ordinario, como caso particular cuando no se imponen condiciones extras.

En el presente capítulo nos proponemos extender esta analogía formal Cuántico-Clásica, mediante el establecimiento de un teorema adiabático generalizado de validez clásica. Pudiera pensarse que, dado el claro paralelismo existente

entre los métodos clásico y cuántico de perturbaciones mediante operadores en el espacio de Hilbert, podría llegarse del mismo modo al establecimiento de un teorema adiabático válido para la Mecánica Clásica. Pero ya podemos anticipar que las cosas no serán tan sencillas como limitarse a trasladar los métodos cuánticos, que son, fundamentalmente, los presentados en el capítulo II. Y no puede ocurrir así porque allí se utilizaban dos artificios que en Mecánica Clásica carecen de sentido: la descomposición espectral del Hamiltoniano y la anulación del movimiento de los ejes del mismo mediante un cambio de representación apropiado. Ello no significa que no se pueda llegar a un cálculo efectivo del operador evolución adiabático. Pero es forzoso utilizar otro procedimiento. Y así se ha hecho para establecer el teorema adiabático ordinario²³⁾.

Los resultados, en cuanto a la invariancia adiabática ordinaria y de orden m , son similares a los cuánticos. No obstante, nosotros presentamos un nuevo procedimiento que ofrece la ventaja de permitir el cálculo del operador evolución con una aproximación de cualquier orden deseado, sin necesidad de exigir condiciones extras al sistema físico.

Antes de tratar el problema según este nuevo procedimiento no queremos dejar sin señalar el hecho de que el ca-

rácter asintótico del teorema adiabático ordinario, en Mecánica Clásica, se puede probar inmediatamente, teniendo en cuenta los resultados que hemos obtenido en el primer capítulo.

En efecto, como resultado final, tras aplicar la teoría de perturbaciones, se llega a la integral²³⁾

$$R_j(\tau) = \int_0^{\tau} \Omega_j(\tau') \exp(i\omega_j \tau' T) d\tau' \quad (4.1)$$

donde las constantes ω_j tienen el significado de frecuencias fundamentales y sus armónicos y $\Omega_j(\tau)$ es el operador de Liouville asociado al Hamiltoniano $h_j(\tau)$. El Hamiltoniano perturbador se supone que es de la forma

$$H'(\tau) = \sum_j h_j(\tau) \exp(i\omega_j \tau T) \quad (4.2)$$

El punto clave del teorema adiabático se reduce a encontrar un desarrollo asintótico en serie de potencias de $\frac{1}{T}$ para la integral (4.1); esto es, hay que encontrar las hipótesis bajo las cuales se puede escribir rigurosamente

$$R_j(\tau) = O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (4.3)$$

o bien

$$\mathcal{R}_j(\tau) = O\left(\frac{1}{\tau^{m+1}}\right) \quad (4.4)$$

si se exigen las conocidas condiciones extra de anulación de las m primeras derivadas, inicial y finalmente, de $\Omega_j(\tau)$.

Como esta integral, su desarrollo, el resto y los casos particulares que pueden presentarse han sido detenidamente estudiados por nosotros en el capítulo I, nos limitamos a remitirnos al mismo. Únicamente indicaremos el significado de las condiciones (1.32) en el caso que nos ocupa.

1) $\frac{d}{d\tau}(\omega_j \tau) \neq 0$ en el intervalo $0 \leq \tau \leq 1$. Significa que hemos de exigir la condición $\omega_j \neq 0$ para toda $j=1, 2, \dots$. Esta hipótesis es fundamental y ha surgido de manera trivial al particularizar las condiciones generales. Su validez está fuera de toda duda, puesto que, si se estudian los desarrollos intermedios en la demostración del teorema adiabático, se puede comprobar que las ω_j aparecen siempre en los denominadores multiplicando a τ .

2) $\frac{d}{d\tau}(\omega_j \tau) = \omega_j = cte.$. Por tanto la acotación y continuidad de las derivadas de $\omega_j \tau$ en el intervalo $0 \leq \tau \leq 1$, se traduce en que ω_j sea finita para todo $j=1, 2, 3, \dots$.

3) Se ha de verificar, además, que $\Omega_j(\tau)$ y sus sucesivas derivadas sean continuas y finitas en el intervalo $0 \leq \tau \leq 1$.

HIPÓTESIS ADIABÁTICA

Por razones de sencillez nos limitamos a sistemas clásicos que poseen tan sólo un grado de libertad. Admitimos también que su movimiento es periódico. Es conocido²⁴⁾ que en este caso el movimiento puede ocurrir de dos modos diferentes. En la libración p y q son funciones periódicas del tiempo, es decir después de un período τ_0 tanto p como q adquieren el valor original y por tanto las órbitas, en el espacio de las fases, son cerradas. En cambio en la rotación, después de un cierto período τ_0 , p vuelve a su valor inicial, mientras q varía en una cantidad constante q_0 , y el sistema vuelve al estado primitivo. En un péndulo simple, por ejemplo, se da la libración para pequeñas amplitudes; pero si la energía es suficiente puede verse obligado a dar giros completos en cuyos caso el movimiento es de rotación. En general, la libración se da cuando el sistema se mueve entre estados de energía cinética casi nula. Cuando esto no ocurre suele haber rotación y q es un ángulo tal que q_0 es igual a 2π .

Es conocida²⁵⁾ la posibilidad de escoger conjuntos de variables canónicas conjugadas de modo que el Hamiltoniano sea función tan sólo de la mitad de ellas. Para sistemas

periódicos se pueden elegir, además, variables angulares tales que cambien en una unidad por periodo. La razón para introducir las primeras es trivial. En cambio las ventajas de las variables angulares y de acción son menos evidentes, en principio. Tan sólo se acudió a ellas cuando comenzó a desarrollarse la teoría cuántica. Y la razón era que las variables de acción resultaban ser invariantes adiabáticos, es decir, magnitudes que se mantenían "casi constantes" cuando la evolución del sistema físico era "extremadamente lenta". Y Ehrenfest había descubierto que las magnitudes apropiadas para cuantizar habían de ser invariantes adiabáticos²⁶⁾. Puesto que las variables de acción eran invariantes adiabáticos, resultaban cuantizables (regla Sommerfeld-Wilson). De ahí la posterior utilización de las variables acción-ángulo.

Puesto que los problemas de movimiento periódico suelen tratarse adoptando como variables canónicas conjugadas la acción y el ángulo y en la hipótesis adiabática nos limitaremos al estudio de sistemas multiperiódicos (periódicos en cada coordenada y para los cuales la ecuación de Hamilton-Jacobi se puede resolver por separación de variables) parece lógico que adoptemos éstas como nuevas variables. Será el equivalente al paso a la "representación de ejes móviles" en Mecánica Cuántica.

Dado que las propiedades de las variables angulares y de acción son sobradamente conocidas, así como las transformaciones canónicas que conducen a ellas, no insistiremos sobre este punto. En la bibliografía citada^{24,25,27)} se encuentran los resultados que aplicaremos en el presente capítulo.

TEOREMA ADIABÁTICO GENERALIZADO

Insistimos en que por razones de sencillez nos limitamos al estudio del caso unidimensional. La extensión a movimientos multiperiódicos de distintos grados de libertad es inmediata, siempre que no exista degeneración; es decir, cuando no se pueda dar una relación de la forma

$$\sum_i \nu_i k_i = 0 \quad (4.5)$$

entre las frecuencias ν_i de cada movimiento y los números enteros k_i . Cuando un sistema multiperiódico presenta una relación del tipo (4.5) se dice que es degenerado y queda excluido de nuestro tratamiento.

Consideremos un sistema físico de Hamiltoniano

$H(p, q, t)$ que evoluciona desde el instante t_0 al t_1 . Introduciendo

$$T = t_1 - t_0 \quad \tau = \frac{t - t_0}{T} \quad t_0 \ll t \ll t_1 \quad (4.5)$$

escribiremos el nuevo Hamiltoniano como función del tiempo ficticio τ . La acción está definida por

$$J_1(\tau) = \oint p \, dq \quad (4.6)$$

donde la integral (4.6) se realiza sobre un periodo de q . Significa que si q es una variable cíclica, por resultar $p = cte.$, se verifica

$$J_1(\tau) = 2\pi p = cte. \quad (4.7)$$

Con objeto de introducir las variables acción-ángulo, efectuamos la transformación canónica definida por

$$p = \frac{\partial}{\partial q} F_1(q; \omega_1; \tau) \quad (4.8)$$

$$J_1 = - \frac{\partial}{\partial \omega_1} F_1(q; \omega_1; \tau)$$

Es sabido que tal transformación implica un cambio de variables canónicas conjugadas. Se pasa de las antiguas $(p; q)$ a las nuevas $(J; \omega)$. Como la transformación es canónica se mantienen las ecuaciones de Hamilton, siendo el nuevo Hamiltoniano

$$H_1(J; \omega; \tau) = H(J; \tau) + \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial \tau} F_1(q; \omega; \tau) \quad (4.9)$$

puesto que H no depende de ω , después de efectuar el cambio de coordenadas^{24,25}). Hasta aquí no hemos hecho sino aplicar la teoría de transformaciones canónicas en Mecánica Clásica. Ahora bien, como nuestro sistema es periódico en ω , y con periodo unidad (significa que $q(\omega+1) = q(\omega)$ y $\dot{q}(\omega+1) = \dot{q}(\omega) + 2\pi$ para la libración y rotación respectivamente) podemos desarrollar F_1 en una serie de Fourier. Es decir:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} F_1 = \sum_{k \neq 0} \left\{ F_{1k}(q; \tau) \exp_{\tau} (2\pi i k \omega) \right\} \quad (4.10)$$

siendo ω función lineal del tiempo²⁵).

La ecuación (4.9) se puede interpretar del siguiente modo: el término $\frac{1}{T} \frac{\partial F_1}{\partial \tau}$ caracteriza una perturbación muy pequeña (por ser T muy grande) y el Hamiltoniano $H(J; \tau)$ representa el movimiento no perturbado de terminado por las ecuaciones

$$\begin{aligned}
 J_1(\tau) &= J_1(0) \quad \text{por ser } \omega_1 \text{ cíclica} \\
 \omega_1(\tau) &= \omega_1(0) + \tau \int_0^\tau \frac{\partial}{\partial J_1} H(J_1, \tau) d\tau \quad (4.11)
 \end{aligned}$$

Nos vemos así obligados a aplicar teoría de perturbaciones. En virtud de (4.10) la ecuación que satisfará el operador evolución del término perturbativo será análoga a la (2.35). Aprovechando los resultados del capítulo II, llegamos a la conclusión de que el operador evolución perturbador es de la forma

$$S_1' = I + O\left(\frac{1}{\tau}\right) \quad (4.12)$$

El movimiento no perturbado está resuelto por (4.11) y por tanto las constantes de éste representan invariantes adiabáticos de primer orden.

Pero lo realmente interesante es encontrar un procedimiento que permita obtener invariantes adiabáticos de cualquier orden prefijado. Para ello vamos a operar de modo análogo a como se hace en Mecánica Cuántica. Así no trataremos (4.9) por teoría de perturbaciones, sino que vamos a aplicar a $H_1(J_1; \omega_1, \tau)$ los mismos métodos que previamente hemos desarrollado para $H(p, q, t)$.

Definamos

$$J_2(\tau) = \oint J_1 d\omega_1 \quad (4.13)$$

integral que se extiende a un periodo de ω_1 . Introduzcamos las nuevas variables canónicas conjugadas (J_2, ω_2) mediante la transformación canónica $F_2(\omega_1, \omega_2, \tau)$ definida por

$$J_1 = \frac{\partial}{\partial \omega_1} F_2(\omega_1, \omega_2, \tau) \quad (4.14)$$

$$J_2 = - \frac{\partial}{\partial \omega_2} F_2(\omega_1, \omega_2, \tau)$$

El nuevo Hamiltoniano será

$$H_2(J_2, \omega_2, \tau) = H_1(J_2, \tau) + \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial \tau} F_2(\omega_1, \omega_2, \tau) \quad (4.15)$$

donde se ha tenido en cuenta que, después de efectuar el cambio a las nuevas coordenadas, H no depende de ω_2 .

Por tratarse de transformaciones canónicas, las ecuaciones de Hamilton continúan siendo válidas. Por tanto se verifica

$$\dot{J}_2 = T \frac{\partial H_2}{\partial \omega_2} = \frac{\partial}{\partial \omega_2} \left(\frac{\partial F_2}{\partial \tau} \right) \quad (4.16)$$

Hemos designado por \dot{J}_2 a la derivada de J_2 con relación al tiempo ficticio τ . Teniendo en cuenta (4.9) y (4.11) la teoría de perturbaciones conduce a

$$J_2(\tau) = J_2(0) + \frac{1}{T} G_1(\tau) \quad (4.17)$$

y la comparación de (4.16) y (4.17) nos lleva a la conclusión de que

$$\frac{\partial F_2}{\partial \tau} = O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (4.18)$$

Quiere decir que el término perturbativo de (4.15) es del orden de $\frac{1}{T^2}$. Como el movimiento no perturbado tiene por soluciones

$$J_2(\tau) = J_2(0) \text{ por ser } \omega_2 \text{ cíclica}$$

$$\omega_2(\tau) = \omega_2(0) + T \int_0^\tau \frac{\partial}{\partial J_2} H_1(J_2, \tau') d\tau' \quad (4.19)$$

las constantes de éste representan invariantes adiabáticos de segundo orden.

Si efectuamos n transformaciones sucesivas, la última está definida mediante

$$J_{n-1} = \frac{\partial}{\partial \omega_n} F_n(\omega_{n-1}; \omega_n; \tau) \quad (4.20)$$

$$J_n = - \frac{\partial}{\partial \omega_{n-1}} F_n(\omega_{n-1}; \omega_n; \tau)$$

siendo

$$J_{n-1} = \oint J_{n-2} d\omega_{n-2} \quad (4.21)$$

$$J_n = \oint J_{n-1} d\omega_{n-1}$$

El Hamiltoniano final será

$$H_n(J_n; \omega_n; \tau) = H_{n-1}(J_n; \tau) + \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \tau} F_n(\omega_{n-1}; \omega_n; \tau) \quad (4.22)$$

Las soluciones del movimiento no perturbado son

$$J_n(\tau) = J_n(0) \text{ por ser } \omega_n \text{ cíclica}$$

$$\omega_n(\tau) = \omega_n(0) + \tau \int_0^\tau \frac{\partial}{\partial J_n} H_{n-1}(J_n; \tau') d\tau' \quad (4.23)$$

Y, puesto que las n transformaciones han sido canónicas, se conservan las ecuaciones de Hamilton. Es decir:

$$(4.24)$$

Por otro lado hemos visto que el paso de H a H_1 se realiza mediante una perturbación de primer orden; el de H_1 a H_2 mediante una de segundo orden y el de H_{n-2} a H_{n-1} por medio de una de orden $n-1$. Como J_n es la acción de H_{n-1} y J_{n-1} la de H_{n-2} , resultará

$$J_n(\tau) = J_{n-1}(0) + \frac{1}{\Gamma^{n-1}} G_{n-1}(\tau) \quad (4.25)$$

La comparación de (4.24) y (4.25) conduce al resultado esperado

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \bar{F}_n(\omega_{n-1}, \omega_n; \tau) = O\left(\frac{1}{\Gamma^{n-1}}\right) \quad (4.26)$$

con lo cual la perturbación en (4.22) es de orden $\frac{1}{\Gamma^n}$ y las constantes del movimiento no perturbado (4.23) son invariantes adiabáticos de orden n . Desde luego éstos están expresados en función de las coordenadas (J_n, ω_n) . Para obtener dichas magnitudes en términos de p y q bastará realizar los cambios sucesivos determinados por las n funciones \bar{F}_i . Es decir

$$(J_n; \omega_n) \xrightarrow{F_n} (J_{n-1}; \omega_{n-1}) \xrightarrow{F_{n-1}} \dots \xrightarrow{F_2} (J_1; \omega_1) \xrightarrow{F_1} (p; q) \quad (4.27)$$

que es el equivalente a deshacer los sucesivos cambios de representaciones de ejes móviles introducidos en Mecánica Cuántica¹²⁾. Finalmente conviene observar que los invariantes adiabáticos, expresados ya en términos de p y q , dependerán explícitamente del parámetro τ que se introduce como consecuencia de la dependencia temporal de las F_i .

COMPARACIÓN CON LA INVARIANCIA ADIABÁTICA DE ORDEN m

El teorema adiabático de orden m establece que, cuando las $m-1$ primeras derivadas del Hamiltoniano son nulas inicial y finalmente, las constantes del movimiento no perturbado son invariantes adiabáticos de orden m . Conviene, una vez llegado a este punto, tener en cuenta el hecho de que el teorema de orden m actualmente conocido²³⁾ no es comparable con el nuestro puesto que el movimiento no perturbado no coincide en ambos. Al enunciarlo, al principio del epígrafe, hemos trasladado el lenguaje cuántico al campo clásico y de este modo no nos limitaremos a presentar como invariantes adiabáticos los del Hamiltoniano

inicial.

Es conocido²³⁾ que la acción es un invariante adiabático de orden m cuando las $m-1$ derivadas temporales del Hamiltoniano son nulas inicial y finalmente. Puesto que ω_1 es función lineal del tiempo t ²⁵⁾, la igualdad (4.8) nos permite escribir

$$\frac{\partial}{\partial \tau} F_1(q; \omega_1; \tau) = O\left(\frac{1}{T^{m-1}}\right) \quad (4.28)$$

puesto que

$$J_1(\tau) = J_1(0) + O\left(\frac{1}{T^m}\right) \quad (4.29)$$

En este caso la perturbación es de orden m y las constantes del movimiento de $H(J_1; \tau)$ son invariantes adiabáticos de orden m .

Según ello, de (4.9) se obtiene

$$J_2(\tau) = J_1(0) + O\left(\frac{1}{T^m}\right) \quad (4.30)$$

y de (4.14) y la linealidad de ω_2 se deduce

$$\frac{\partial F_2}{\partial \tau} = O\left(\frac{1}{T^{m-1}}\right) \quad (4.31)$$

Como la perturbación en (4.15) resulta ser del orden de $\frac{1}{\Gamma^m}$, podemos iterar el procedimiento, obteniendo que

$$\frac{\delta \bar{F}_{n-2}}{\delta \tau} = o\left(\frac{1}{\Gamma^{m-1}}\right) \quad (4.32)$$

De este modo obtenemos invariantes adiabáticos de orden m en cualquiera de los Hamiltonianos H_1, H_2, \dots, H_{n-1} , lo cual prueba la coincidencia de la invariancia adiabática de orden m y la generalizada cuando, a partir de ésta, se imponen las condiciones extras que exige la primera.

CONCLUSIONES

Queremos precisar un punto que tal vez podría dar lugar a falsas interpretaciones de los resultados obtenidos en el presente capítulo. Se ha pretendido explotar la analogía existente entre la Mecánica Cuántica y la Mecánica Clásica, en el sentido de que ambas dinámicas pueden tratarse con gran similitud sobre la base de utilizar operadores en un espacio de Hilbert apropiado. Pero la analogía no admite extensión posible en cuanto a su interpretación física.

La Dinámica Cuántica y la Clásica aparecen formalmente como idénticas. Pero no ocurre lo mismo con las Cinemáticas; no tienen ninguna relación. Y sucede así porque, en Mecánica Cuántica, el paso de una a otra se apoya en el principio de complementariedad, que da sentido a la doble realidad física de partícula y onda, y en el principio de incertidumbre, que expresa claramente el sentido y la limitación con que se deben considerar ambos conceptos.

Ninguno de los dos principios son asequibles a la Cinemática Clásica, que es completamente determinista. De ahí que ambas Cinemáticas tengan interpretaciones totalmente dispares, y que se deba huir del intento de unificarlas, mientras se basen en los conceptos que hoy se admiten.

Una buena prueba de esta diferencia la puede suministrar el hecho de que, formalmente, el traslado del capítulo tercero a la Mecánica Clásica es inmediato. Basta calcular el operador evolución, que presenta la misma forma (3.8) con el sentido que allí se daba a los distintos operadores que intervenían en dicha fórmula. Pero no es posible añadir interpretación alguna, por no existir el concepto de estado propio. Así como tampoco se puede dar un sentido apropiado a las perturbaciones instantáneas, por no existir la relación

de incertidumbre. De ahí que carezca de interés el establecimiento en Mecánica Clásica de la nueva aproximación.

También resulta obligado señalar que el rigor matemático en este punto deja bastante que desear. A nuestro juicio, la mayoría de los trabajos importantes que se han realizado en este campo, no resistirían una crítica matemática conveniente. Sobre todo en lo que a la construcción del espacio de Hilbert se refiere. De modo que no hay que conceder a estas operaciones más que un significado formal que da buenos resultados, especialmente en la Física del Plasma, en el tratamiento del problema denominado "aproximación del centro guía", que se basa en la búsqueda de invariantes adiabáticos de distintos órdenes^{28,29,30)}, así como en otros varios ejemplos de la Mecánica Clásica que se pueden tratar por estos métodos operacionales.

En virtud del hallazgo de la invariancia adiabática generalizada, el cálculo de invariantes adiabáticos del orden que se desee es un problema teóricamente resuelto. Por esta razón confiamos en que la presente tesis sirva para abrir horizontes nuevos en la Física del Plasma.

APÉNDICES

APÉNDICE A

Si $H(\tau) = \sum_i E_i(\tau) P_i(0)$ la ecuación de Schrödinger para el operador evolución se podrá escribir en la forma

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} U(\tau) = \tau \sum_i E_i(\tau) P_i(0) U(\tau) \quad (\text{A.1})$$

Integrando entre 0 y τ resulta

$$U(\tau)/U(0) = \exp\left(-i\tau\hbar^{-1} \int_0^\tau \sum_i E_i(\tau') P_i(0) d\tau'\right) \quad (\text{A.2})$$

En virtud de la definición de operador evolución, se verifica

$U(0) = I$. La igualdad (A.2) se puede escribir entonces

$$U(\tau) = \exp\left(-i\tau\hbar^{-1} \sum_i P_i(0) \int_0^\tau E_i(\tau') d\tau'\right) \quad (\text{A.3})$$

Introduciendo la función

$$\Psi_i(\tau) = \int_0^\tau E_i(\tau') d\tau' \quad (\text{A.4})$$

obtenemos para el operador $U(\tau)$ la expresión

$$U(\tau) = \exp\left(-i\tau \sum_i \varphi_i(\tau) P_i(0)\right) \quad (\text{A.5})$$

Desarrollando en serie la exponencial resulta

$$U(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-i\tau \sum_i \varphi_i(\tau) P_i(0)\right)^n}{n!} \quad (\text{A.6})$$

Por ser $P_i(0)$ un proyector goza de la propiedad de idempotencia, la cual permite escribir (A.6) en la forma

$$U(\tau) = \sum_i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-i\tau \varphi_i(\tau)\right)^n}{n!} P_i(0) \quad (\text{A.7})$$

equivalente a la expresión

$$U(\tau) = \sum_i \left(\exp -i\tau \varphi_i(\tau)\right) P_i(0) \quad (\text{A.8})$$

que es la que utilizamos en la teoría.

APÉNDICE B

Se trata de demostrar que las reglas de conmutación

$$(j=1,2,\dots), \quad [K(\tau), P_j(\tau)] = i\hbar \frac{d}{d\tau} P_j(\tau) \quad (\text{B.1})$$

son condición necesaria y suficiente para la validez de

$$(j=1,2,\dots), \quad |E_j(\tau)\rangle = R_1(\tau) |E_j(0)\rangle \quad (\text{B.2})$$

donde el operador $R_1(\tau)$ verifica

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} R_1(\tau) = K(\tau) R_1(\tau) \quad (\text{B.3})$$

$$R_1(0) = I$$

Para demostrar que es condición necesaria calculemos la expresión que resulta de multiplicar (B.2), por la derecha, por su igualdad conjugada:

$$(j=1,2,\dots) \quad P_j(\tau) = R_1(\tau) P_j(0) R_1^\dagger(\tau) \quad (\text{B.4})$$

Derivando (B.4) resulta, para cada valor de j ,

$$\frac{d}{d\tau} P_j(\tau) = \frac{d}{d\tau} R_1(\tau) P_j(0) R_1^+(\tau) + R_1(\tau) P_j(0) \frac{d}{d\tau} R_1^+(\tau) \quad (\text{B.5})$$

Mediante la introducción del operador identidad

$$I = R_1(\tau) R_1^+(\tau) = R_1^+(\tau) R_1(\tau)$$

la expresión anterior se puede escribir en la forma

$$\frac{d}{d\tau} P_j(\tau) = \frac{d}{d\tau} R_1(\tau) R_1^+(\tau) P_j(\tau) + P_j(\tau) R_1(\tau) \frac{d}{d\tau} R_1^+(\tau) \quad (\text{B.6})$$

La transformación $R_1(\tau)$ es unitaria. Por tanto las derivadas de $R_1(\tau)$ y de $R_1^+(\tau)$ están ligadas por la relación

$$R_1(\tau) \frac{d}{d\tau} R_1^+(\tau) = - \frac{d}{d\tau} R_1(\tau) R_1^+(\tau) \quad (\text{B.7})$$

que, sustituida en (B.6) conduce a

$$\frac{d}{d\tau} P_j(\tau) = \frac{d}{d\tau} R_1(\tau) R_1^+(\tau) P_j(\tau) - P_j(\tau) \frac{d}{d\tau} R_1(\tau) R_1^+(\tau) \quad (\text{B.8})$$

Esta expresión, según (B.3), contiene las reglas de conmutación (B.1) que buscábamos para el operador $K(\tau)$.

Para demostrar la suficiencia partiremos de la hipótesis (B.1) y las condiciones (F.3) para llegar a (B.2) o mejor a su expresión equivalente

$$P_j(\tau) = R_1(\tau) P_j(0) R_1^+(\tau) \quad (B.9)$$

Derivemos la expresión $R_1(\tau) P_j(\tau) R_1^+(\tau)$. Obtenemos

$$\frac{dR_1^+(\tau)}{d\tau} P_j(\tau) R_1(\tau) + R_1^+(\tau) \frac{dP_j(\tau)}{d\tau} R_1(\tau) + R_1^+(\tau) P_j(\tau) \frac{dR_1(\tau)}{d\tau} \quad (B.10)$$

Sustituyendo en la expresión (B.10) la (B.3) resulta

$$-\frac{1}{i\hbar} R_1^+(\tau) K(\tau) P_j(\tau) R_1(\tau) + R_1^+(\tau) \frac{dP_j(\tau)}{d\tau} R_1(\tau) + R_1^+(\tau) P_j(\tau) \frac{1}{i\hbar} K(\tau) R_1(\tau) \quad (B.11)$$

que es nula según la condición (B.1). Por tanto la expresión original tiene un valor constante, que según la condición inicial $R_1(0) = I$, permite llegar al resultado buscado, esto es a (B.9).

Conviene tener presente que al fijar las proyecciones del operador $K(\tau)$ según (2.12b), ha sido totalmente arbitrario. Dos vectores $|E_j(\tau)\rangle$ no quedan completamente de-

terminados por el hecho exclusivo de ser unitarios y soluciones propias de $H(\tau)$. Pero al fijar los elementos diagonales de $K(\tau)$ hemos evitado esta indeterminación porque nos lleva a establecer la ortogonalidad de los $|E_j(\tau)\rangle$ y los $\frac{d}{d\tau}|E_j(\tau)\rangle$, según vamos a demostrar. En efecto:

$$\frac{d}{d\tau} |E_j(\tau)\rangle = \frac{d}{d\tau} R_1(\tau) |E_j(0)\rangle, \quad (j=1, 2, \dots) \quad (B.12)$$

Según (B.3) y (2.14) la expresión (B.12) puede escribirse así:

$$\frac{d}{d\tau} |E_j(\tau)\rangle = \frac{1}{i\hbar} K(\tau) R_1(\tau) |E_j(0)\rangle = \frac{dP_j(\tau)}{d\tau} |E_j(\tau)\rangle \quad (B.13)$$

para todo valor de τ .

Por otra parte derivemos miembro a miembro la expresión $P_j(\tau) |E_j(\tau)\rangle = |E_j(\tau)\rangle$. Obtenemos:

$$\frac{dP_j(\tau)}{d\tau} |E_j(\tau)\rangle + P_j(\tau) \frac{d}{d\tau} |E_j(\tau)\rangle = \frac{d}{d\tau} |E_j(\tau)\rangle \quad (B.14)$$

Comparando (B.13) y (B.14) resulta

$$P_j(\tau) \frac{d}{d\tau} |E_j(\tau)\rangle = 0, \quad (j=1, 2, \dots) \quad (B.15)$$

que es equivalente a

$$\langle E_j(\tau) | \frac{d}{d\tau} | E_j(\tau) \rangle = 0 \quad , \quad (j = 1, 2, \dots) \quad (B.16)$$

Queremos resaltar el hecho de que no es que nos estemos refiriendo a unos $| E_j(\tau) \rangle$ particulares. Lo que ocurre es que la indeterminación normal en la fase de los vectores propios se traduce en una indeterminación en el operador que anula el movimiento de dichos ejes. Pero esta indeterminación no se refiere a la forma del operador sino al hecho de que existen varios, infinitos, con los cuales podemos contrarrestar el movimiento del sistema de referencia. Al elegir una transformación particular de todas ellas lo hacemos del modo que resulte lo más cómoda. Y hemos visto que esto se consigue exigiendo la condición (2.12b), y ésta se traduce, según acabamos de demostrar, en la (B.16).

APÉNDICE C

Sea un operador F del espacio de Hilbert de la Mecánica Cuántica, cuyos elementos de matriz en representación de energías son del orden de $\frac{1}{T}$. Escribiremos

$$F = O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (C.1)$$

$T \rightarrow \infty$

Su norma es el valor máximo¹⁷⁾ de la expresión

$$\frac{\langle u | F^\dagger | F | u \rangle}{\langle u | u \rangle} \quad (C.2)$$

donde $|u\rangle$ representa un vector cualquiera del campo de aplicación de F .

Tomando vectores normalizados con relación a la unidad (aunque no es necesario porque las constantes no alteran las relaciones de orden), podemos limitarnos a buscar el valor máximo de la expresión del numerador de (C.2).

Sean $|E_i\rangle$ los vectores de la base considerada. Teniendo en cuenta la propiedad II) de los símbolos de orden resulta

$$\begin{aligned} \langle E_i | F^+ | F | E_i \rangle &= \sum_j \left\{ \langle E_i | F^+ | E_j \rangle \langle E_j | F | E_i \rangle \right\} = \\ &= \sum_j O\left(\frac{1}{T^2}\right) = O\left(\sum_j \left(\frac{1}{T^2}\right)\right) = O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (C.3) \end{aligned}$$

donde hemos supuesto que T es un infinito del mismo orden que el infinito numerable que caracteriza el número de dimensiones del espacio de Hilbert y F representa un operador acotado (Téngase en cuenta que los operadores acotados admiten una cota superior para sus elementos de matriz. Por tanto si éstas son de cierto orden de magnitud, implica la uniformidad respecto a las componentes.)

Por representar $|E_i\rangle$ una base se verificará que, para todo $|u\rangle$,

$$|u\rangle = \sum_{\kappa} a_{\kappa} |E_{\kappa}\rangle \quad (C.4)$$

$\sum_{\kappa} |a_{\kappa}|^2$ está acotado, con lo cual la norma del operador será el valor máximo de la expresión

$$\begin{aligned}
 & \sum_i a_i^+ \langle E_i | F^+ | F | E_j \rangle a_j | E_j \rangle = \\
 & = \sum_k \left\{ \sum_i a_i^+ \langle E_i | F^+ | E_k \rangle \sum_j a_j \langle E_k | F | E_j \rangle \right\} = \\
 & = \sum_k \left(O\left(\frac{1}{T}\right) O\left(\frac{1}{T}\right) \right) = \sum_k O\left(\frac{1}{T^2}\right) = O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (C.5)
 \end{aligned}$$

donde hemos utilizado la propiedad III) de los símbolos de orden, así como la acotación de (C.4).

Hemos llegado a la conclusión de que la norma del operador F es

$$\| F \| = O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (C.6)$$

Supongamos ahora que se verifica la igualdad (C.6). Pretendemos demostrar que los elementos de matriz del operador acotado F son del mismo orden de magnitud. En efecto, (C.6) significa que, si $|E_i\rangle$ son los vectores de una base cualquiera,

$$\langle E_i | F^+ | F | E_i \rangle = O\left(\frac{1}{T}\right) \text{ para todo } i \quad (C.7)$$

Introduciendo $I = \sum_j |\epsilon_j\rangle\langle\epsilon_j|$ en (C.7) resulta

$$\sum_j \langle\epsilon_i|F^\dagger|\epsilon_j\rangle\langle\epsilon_j|F|\epsilon_i\rangle = \sum_j |F_{ji}|^2 = O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (C.8)$$

Sea

$$|F_{ji}|^2 = |\langle\epsilon_j|F|\epsilon_i\rangle|^2 = O\left(\frac{1}{T^n}\right) \quad (C.9)$$

Para encontrar el valor de n , sumemos para todo j , resultando

$$\sum_j |\langle\epsilon_j|F|\epsilon_i\rangle|^2 = O\left(\frac{1}{T^{n-1}}\right) \quad (C.10)$$

La comparación de (C.8) y (C.10) conduce inmediatamente a que $n = 2$. Finalmente la propiedad I) de los símbolos de orden nos lleva al resultado que buscábamos

$$|\langle\epsilon_j|F|\epsilon_i\rangle| = O\left(\frac{1}{T}\right) \text{ para todo } i, j. \quad (C.11)$$

APÉNDICE D

Aproximación instantánea.-

Supongamos medido el tiempo real t , en unidades T , donde T representa el intervalo durante el cual estudiamos la evolución del sistema. En este caso, el operador evolución satisface la ecuación integral

$$U(\tau) = I - i\hbar^{-1}T \int_0^{\tau} H(\tau') U(\tau') d\tau' \quad (D.1)$$

Si consideramos el límite en el cual $T \rightarrow 0$, y recordamos que se trata de operadores acotados la igualdad anterior conduce a:

$$\lim_{T \rightarrow 0} U(1) = I \quad (D.2)$$

En realidad T es una cantidad pequeña y la igualdad (D.2) no se da. La aproximación instantánea consiste en suponer

$$U(1) = I \quad (D.3)$$

o lo que es lo mismo

$$U(t) |0\rangle = |0\rangle \quad (D.4)$$

donde hemos representado por $|0\rangle$ el estado del sistema en el instante inicial, separado del final por el tiempo real T .

El error que implica esta aproximación es tanto mayor cuanto más largo sea el tiempo T , que dura la evolución del sistema. Para calcularlo habríamos de resolver (D.1) por iteración, con lo cual llegamos a una serie de la cual tomamos el primer término (D.3). El problema se convierte entonces en el de encontrar el resto de la misma.

No obstante, en el presente apéndice nos proponemos presentar un método usual en Mecánica Cuántica, que permite el cálculo del error cometido en la aproximación con gran sencillez y que proporciona asimismo una valiosa información acerca de la interpretación física del mismo.

Cálculo del error en la aproximación instantánea.-

Puesto que en dicha aproximación el estado final

se supone igual al inicial (D.4), podrá tomarse como medida del error que lleva consigo tal hipótesis, la probabilidad de que el sistema, al final de la evolución, se presente en un estado distinto del inicial:

$$\mathbb{P} = \langle 0 | U^\dagger(t) (I - |0\rangle\langle 0|) U(t) | 0 \rangle \quad (D.5)$$

Si se resuelve por iteración la ecuación (D.1) se llega a la igualdad

$$U(t) = I - i\hbar^{-1}T \int_0^t H(\tau) d\tau - \hbar^{-2}T^2 \int_0^t d\tau \int_0^\tau H(\tau) H(\tau') d\tau' + \dots \quad (D.6)$$

que se puede escribir en la forma

$$U(t) = I - i\hbar^{-1}T \overline{H(t)} + o\left(\frac{1}{T^2}\right) \quad (D.7)$$

donde hemos introducido el operador hermítico

$$\overline{H(t)} = \int_0^t H(\tau) d\tau$$

Sustituyendo (D.7) en (D.5) se llega a

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P} &= \langle 0 | \mathbb{I} + i\hbar^{-1} T \overline{H(i)} + O\left(\frac{1}{T^2}\right) | \mathbb{I} - 10 \rangle \langle 0 | \mathbb{I} - i\hbar^{-1} T \overline{H(i)} + O\left(\frac{1}{T^2}\right) | 0 \rangle = \\
 &= \frac{T^2}{\hbar^2} \langle 0 | \overline{H(i)} | \mathbb{I} - 10 \rangle \langle 0 | \overline{H(i)} | 0 \rangle + O\left(\frac{1}{T^3}\right) = \\
 &= \frac{T^2}{\hbar^2} \left[\langle 0 | \overline{H(i)}^2 | 0 \rangle - \langle 0 | \overline{H(i)} | 0 \rangle^2 \right] + O\left(\frac{1}{T^3}\right) = \\
 &= \frac{T^2}{\hbar^2} (\Delta \overline{H})^2 + O\left(\frac{1}{T^3}\right) \tag{D.8}
 \end{aligned}$$

donde $\Delta \overline{H}$ representa la desviación cuadrática media del operador $\overline{H(i)}$ en el estado inicial.

De este modo hemos obtenido una buena medida del error de la aproximación instantánea. Para que $\mathcal{P} \ll 1$, se ha de verificar

$$\frac{T^2 (\Delta \overline{H})^2}{\hbar^2} \ll 1 \tag{D.9}$$

o lo que es lo mismo

$$T \ll \frac{\hbar}{\Delta \overline{H}} \tag{D.10}$$

expresión que justifica la condición (3.2) impuesta a la evolución rápida del Hamiltoniano en el capítulo III.

Conviene señalar que la desigualdad (D.10) no es sino el enunciado de la relación de incertidumbre tiempo-energía. El sistema presenta una cierta inercia a variar el estado en que se encuentra. Necesita un cierto tiempo $\frac{\hbar}{\Delta H}$ para acusar una modificación de su estado debido a la evolución originada por $\overline{H(t)}$ que no es sino el Hamiltoniano medio del sistema en el intervalo considerado. Tan sólo cuando se verifique la desigualdad (D.10) el estado del sistema no habrá sufrido alteración apreciable.

Cálculo del error en la aproximación adiabática.-

Se puede efectuar una medida del error mediante el cálculo de la probabilidad de encontrar al sistema en un estado final distinto del predicho por la fórmula (2.49). El método es similar al expuesto en el apartado anterior pero conduce a un resultado poco útil¹⁴⁾. Con objeto de obtener conclusiones más aplicables nos vamos a limitar al único caso de interés práctico, en el cual se utiliza la aproximación adiabá-

tica. Es aquél en que el estado inicial es vector propio de $H(t_0)$.

Elijamos un sistema de ejes propios del Hamiltoniano inicial, a los cuales designaremos por

$$|E_1(0)\rangle, |E_2(0)\rangle, \dots, |E_j(0)\rangle, \dots \quad (D.11)$$

$$H(t_0) |E_i(0)\rangle = E_i(0) |E_i(0)\rangle, \quad (i = 1, 2, \dots)$$

Sean $|E_1(t)\rangle, |E_2(t)\rangle, \dots, |E_j(t)\rangle, \dots$ los vectores que se deducen de los anteriores por la transformación $R_i(t)$.

Es decir:

$$\begin{aligned} |E_i(t)\rangle &= R_i(t) |E_i(0)\rangle \\ H(t) |E_i(t)\rangle &= E_i(t) |E_i(t)\rangle \end{aligned} \quad (D.12)$$

$$P_i(t) = |E_i(t)\rangle \langle E_i(t)|$$

$$i = 1, 2, 3, \dots$$

Supongamos que, en el instante inicial t_0 , el sistema se encuentra en el estado $|E_j(0)\rangle$. Según la aproximación adiabática (2.49) el estado final será

$$U(t, t_0) |E_j(t_0)\rangle = \exp\left(-i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t E_j(t') dt'\right) R_i(t_1) |E_j(t_0)\rangle \quad (D.13)$$

que sólo difiere del estado $|E_j(t_1)\rangle$ en un factor de fase. Por tanto la probabilidad de encontrar al sistema en un estado propio final $|E_i(t_1)\rangle$, donde $i \neq j$, distinto del predicho por la teoría será

$$P = \sum_{i \neq j} \left| \langle E_i(t_1) | U(t, t_0) | E_j(t_0) \rangle \right|^2 \quad (D.14)$$

Limitándonos al primer término en la iteración de (2.35) y teniendo en cuenta (2.36) obtenemos

$$U'(t, t_0) = I + \frac{i}{\hbar} F(t_1) \quad (D.15)$$

con lo que, según (2.16) y (2.28) resulta

$$U(t, t_0) = R_i(t_1) U''(t, t_0) = R_i(t_1) U'(t_1) \left[I + \frac{i}{\hbar} F(t_1) \right] \quad (D.16)$$

Sustituyendo (D.16) en (D.14) se llega a

$$P = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i \neq j} \left| \langle E_i(t_1) | R_i(t_1) F(t_1) | E_j(t_0) \rangle \right|^2 \quad (D.17)$$

que teniendo en cuenta (2.9) se puede escribir en la forma

$$P = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i \neq j} \left| \langle E_i(t_0) | \dot{F}(t) | E_j(t_0) \rangle \right|^2 \quad (D.18)$$

En virtud de (2.36), (2.16) y (2.14) la igualdad anterior se transforma en

$$P = \sum_{i \neq j} \left| \int_{t_0}^{t_i} d_{ij}(t) \exp \left(i \int_{t_0}^t \omega_{ij}(\tau) d\tau \right) dt \right|^2 \quad (D.19)$$

donde por razones que se verán justificadas posteriormente hemos introducido las funciones

$$d_{ij}(t) \equiv \langle E_i(t_0) | R_i^\dagger(t) \frac{dR_j}{dt} R_i(t) | E_j(t_0) \rangle \quad (D.20)$$

$$\omega_{ij}(t) \equiv \frac{E_i(t) - E_j(t)}{\hbar}$$

Calculando por partes la integral (D.19) y admitiendo que $d_{ij}(t)$ y $\omega_{ij}(t)$ varían de un modo regular, se considera una buena aproximación el tomar

$$P = \sum_{i \neq j} \max. \left| \frac{d_{ij}(t)}{\omega_{ij}(t)} \right|^2 \quad \text{en el intervalo } (t_0, t_i) \quad (D.21)$$

Y como, según (D.20)

$$d_{ij}(t) = \langle E_i(t) | \frac{d|E_j(t)\rangle}{dt} \rangle \quad (D.22)$$

resulta que

$$d_j^2(t) = \sum_{i \neq j} |d_{ij}(t)|^2 \quad (D.23)$$

no es sino la longitud del vector

$$\frac{d}{dt} |E_j(t)\rangle$$

o lo que es lo mismo, la "velocidad de giro" de los ejes móviles. De modo que podemos escribir

$$P \approx \left| \frac{\alpha_j^{\max}(t)}{\omega_j^{\min}(t)} \right|^2 \quad (D.24)$$

donde ω_j^{\min} es el valor mínimo de la frecuencia de Bohr de la transición j hasta la más próxima.

La expresión (D.24) se toma como expresión del error porque en condiciones normales representa una mayorante para la suma (D.21). En este caso, la aproximación adiabática

será aplicable cuando se verifique

$$\left| \frac{\dot{\alpha}_j^{\max}(t)}{\omega_j^{\min}(t)} \right|^2 = \left| \frac{\text{veloc. de giro max. de } |E_j(t)\rangle}{\text{frecuencia de Bohr min. de } E_j(t)} \right|^2 \ll 1 \quad (\text{D.25})$$

Hemos deducido de este modo una condición física intuitiva para la aplicación de la aproximación adiabática. Por supuesto que suministra una información de orden de magnitud. Y además su deducción es válida para la mayor parte de los casos. No obstante pueden presentarse accidentes que impidan deducir la igualdad (D.24). Pero no insistiremos en este punto. No forma parte de nuestro objetivo y tan sólo hemos visto aquí el método como aclaración y justificación de las hipótesis exigidas en el capítulo III). Para mayor información nos remitimos al libro de A. Messiah, citado en la bibliografía.

EPÍLOGO

RESUMEN DE LOS PRINCIPALES MÉTODOS Y RESULTADOS ORIGINALES
CONTENIDOS EN LA PRESENTE TESIS.-

En el capítulo primero presentamos el modo de obtener un desarrollo asintótico en serie de potencias, de la integral $F(\tau)$. Asimismo calculamos el resto de la serie, con objeto de poder tener, siempre que el problema lo requiera, una medida del error de la aproximación empleada.

Al obtener el desarrollo asintótico, no sólo hemos calculado la expresión del término general, sino que indicamos expresamente las condiciones que han de satisfacer cada una de las funciones para que tal desarrollo sea lícito.

Hemos incluido el estudio de los casos particulares que podían presentarse, los cuales nos han servido, posteriormente, para deducir cada uno de los teoremas adiabáticos existentes. También señalamos la clara diferencia entre cada caso particular, interpretando el significado de las condiciones exigidas y haciendo notar que de ello se deducirá el sentido físico y la aplicabilidad de cada teorema.

El segundo capítulo lo hemos dedicado a una definitiva demostración de los teoremas adiabáticos. Ofrece la ventaja de ser rigurosa y común a todas las aproximaciones

adiabáticas existentes. Indicamos en ella el significado de cada una de las expresiones simbólicas utilizadas y aplicamos los resultados obtenidos en el capítulo anterior. Todo ello nos ha llevado a establecer con rigor el carácter asintótico de la aproximación adiabática.

Hemos demostrado, asimismo, que la introducción de la llamada "representación de ejes giratorios" es la más conveniente. Ésta es la razón por la cual también nosotros hemos acudido a ella en nuestra demostración.

En el capítulo tercero hemos obtenido una nueva aproximación, combinación de la adiabática y la instantánea. Llegamos a la conclusión de que, aun bajo alteraciones bruscas y lentas alternadas del Hamiltoniano, el sistema físico evoluciona de modo que, si parte de un estado propio inicial, el final es el propio que se deduce del primero por continuidad.

También hemos calculado el operador evolución, que es el que tiene interés práctico cuando el estado inicial no es propio. Finalmente hemos indicado el modo de calcular el error en cada caso práctico, así como la posibilidad de mejorar la aproximación.

En el capítulo cuarto hemos extendido totalmente la hipótesis adiabática al campo clásico. Nuestro objetivo ha

sido la obtención de un teorema adiabático generalizado, puesto que el ordinario y el de orden m no son sino casos particulares del primero. Y en efecto, una vez logrado nuestro propósito hemos impuesto al Hamiltoniano del sistema físico las condiciones de anulación de derivadas en los instantes inicial y final y hemos obtenido el teorema de orden m , lo cual nos ha servido de comprobante de la validez de la aproximación generalizada.

A continuación hemos discutido el significado de la invariencia adiabática generalizada para finalizar comparando los resultados clásicos y cuánticos, haciendo constar la analogía en la forma y la diferencia en la interpretación de todos los resultados obtenidos.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA

- 1) H. Poincaré.- Acta Mathem. 8, 295-344, (1886).
- 2) Th. Stieltjes.- Ann. de L'Ec. Norm. Sup. (3) 3, 201-298(1886)
- 3) J. G. van der Corput.- "Asymptotic Expansions" Partes I, II y III, National Bureau of Standards (1951-52).
- 4) J. G. van der Corput.- Nederl. Akad. Wetensch., Amsterdam, Proc. 57, 206-217, (1954).
- 5) J. G. van der Corput.- "Asymptotic Expansions. Fundamental Theorems of Asymptotics". Dep. of Math. Univer. of Calif. Berkeley (1954).
- 6) N. G. de Bruijn.- "Asymptotic Methods in Analysis". North Holland Pub. Amsterdam (1961).
- 7) A. Erdélyi.- "Asymptotic Expansions".- Dover Pub. (1956).
- 8) E. Landau.- "Vorlesungen über Zählen Theorie".- Leipzig vol. 2 (1927).
- 9) H. Jeffreys.- "Asymptotic Approximations". Oxford. Clarendon Press (1962).
- 10) M. Born and V. Fock.- Zs. f. Phys. 51, 166 (1928).
- 11) L. M. Garrido and F. J. Sancho.- Physica. 28, 553 (1962).
- 12) L. M. Garrido.- Journ. Math. Phys. 5, 355, (1964).
- 13) T. Kato.- Journ. Phys. Soc. Jap. 5, 435, (1950).
- 14) A. Messiah.- "Mécanique Quantique". Dunod. Paris. T.2 (1960).

- 15) L. Navarro and L. M. Garrido.- An. R. Soc. Esp. de Fís. y Quím. Pendiente de publicación.
- 16) E. Coursat.- "Cours d'analyse mathématique". Gauthier-Villars Paris T. III (1942).
- 17) M. H. Stone.- "Linear transformations in Hilbert Space". Amer. Math. Soc. New York, (1932).
- 18) A. M. Dykhne.- Soviet Phys. Doklady 147, 57, (1962).
- 19) Y. Aharonov and D. Bohm.- Phys. Rev. 122, 1649 (1961).
- 20) L. M. Garrido.- Proc. Phys. Soc. t76, 33 (1960)
- 21) L. M. Garrido.- Journ. Math. Analys. Applicat. 3, 295 (1961).
- 22) L. M. Garrido.- Collect. Mathem. 13, 3, (1961).
- 23) F. Gascón.- Tesis Doctoral. Zaragoza (1962).
- 24) H. Goldstein.- "Classical Mechanics". Addison Wesley (1956).
- 25) D. Ter Haar.- "Elements of Hamiltonian Mechanics". North Holland (1961).
- 26) P. Ehrenfest.- Collected Scientific Papers. North Holland. (1959) Paper no. 37.
- 27) J. W. Leech.- "Éléments de Mécanique Analytique". Dunod (1961).
- 28) A. Lenhard.- Ann. Phys. 6, 261, (1959).
- 29) S. Chandrasekhar.- "The Plasma in a Magnetic Field". R. K. Landshoff, Ed., (1958).
- 30) R. M. Kulsrud.- Phys. Rev. 106, 205, (1957).

INDICE

	<u>pág.</u>
<u>Prólogo.</u>	1
<u>Capítulo primero.</u>	7
Introducción.	8
Símbolos de orden.	15
Desarrollos asintóticos.	21
Series asintóticas de potencias.	25
Aproximación asintótica de la integral $F(T)$. .	32
Casos particulares.	38
<u>Capítulo segundo.</u>	41
Introducción.	42
Teorema adiabático.	44
Casos particulares.	62
Conclusiones.	66
<u>Capítulo tercero.</u>	68
Introducción.	69
La nueva invariancia.	73
Conclusiones.	81
<u>Capítulo cuarto.</u>	87
Introducción.	88
Hipótesis adiabática.	92
Teorema adiabático generalizado.	94
Comparación con la invariancia adiabática de orden m	102

Conclusiones. 104

Apéndices. 107

 Apéndice A. 108

 Apéndice B. 110

 Apéndice C. 115

 Apéndice D. 119

Epílogo. 129

 Resumen de los principales métodos y resulta-
 dos originales contenidos en la presente tesis 130

Bibliografía. 133

Índice. 136

ooo000ooo