### Universidad de Sonora

División de Ciencias Exactas y Naturales Departamento de Física



Tesis que para obtener el título de Licenciado en Física presenta

Juan Ernesto Robles Acosta

### Universidad de Sonora

#### Repositorio Institucional UNISON





Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

# El Propagador de Feynman del Oscilador Armónico:

Métodos para su estudio y aplicación

Una tesis presentada a la Universidad de Sonora para la obtención del Título de Licenciado en Física

por

Juan Ernesto Robles Acosta



Departamento de Física
Universidad de Sonora
Abril de 2010

# Agradecimientos

A ntes que nada quiero agradecer a mi familia. A mis padres, Bersabé y Salvador, y a mi hermano Víctor, por todo su apoyo y cuidado.

A mi asesora María Elena Tejeda Yeomans, por lo que he aprendido de ella, por su ayuda, su tiempo, su paciencia y sobre todo por su amistad.

A todos mis maestros especialmente a, Carlos Calcaneo, Angelina Uribe, Laura Yeomans y Antonio Jauregui por el interés y entusiasmo que me provocaban sus clases. En verdad pasaba muy buenos momentos aprendiendo de ustedes.

A todos mis amigos, y en particular a Patricia y Enrique, con los que crecí desde el inicio de mi carrera

Por último quiero agradecerte a tí: A., por tu cariño y apoyo incondicional.

### Contenido

|   | Lista de Figuras  | II |
|---|---|----|
|   | Introducción  | 1  |
| 1 | El propagador cuántico  | 5  |
| 2 | Método de Schwinger   | ļ  |
|   | 2.1. Descripción del método   | (  |
|   | 2.2. Método de Schwinger aplicado al oscilador armónico                   | 8  |
| 3 | Método Algebraico   | 14 |
|   | 3.1. Descripción del método   | 1  |
|   | 3.2. Método algebraico aplicado al oscilador armónico                     | 16 |
| 4 | Método de Integral de Camino  | 22 |
|   | 4.1. Método de Integral de Camino Aplicado al Oscilador Armónico          | 28 |
| 5 | Aplicaciones  | 32 |
|   | 5.1. Eigenfunciones y Eigenvalores  | 32 |
|   | 5.2. Función de Partición   | 33 |
|   | 5.3. Propagador de oscilador armónico con términos nuevos en el potencial | 35 |
|   | 5.3.1. Término lineal   | 35 |
|   | 5.3.2. Término cuártico   | 36 |
|   | Conclusiones  | 38 |
| A | Representaciones de la Mecánica Cuántica                                  | 42 |
|   | A.0.1. El Operador de Evolución Temporal                                  | 4  |

| В            | Fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff  | 46        |
|--------------|--|-----------|
| $\mathbf{C}$ | Cálculo de $\langle p'' \mid \exp(-i\gamma \hat{P}\hat{X}/\hbar) \mid p'  angle$ | 48        |
|              | Bibliografía   | <b>51</b> |

### Lista de Figuras

| 4.1. | Diagrama que muestra el camino clásico y otros caminos que contribuyen a la                               |    |
|------|---|----|
|      | descripción de la mecánicua cuántica  | 24 |
| 4.2. | Diagrama que muestra la discretización del camino utilizado para integrar en la                           |    |
|      | ecuación (4.22)   | 26 |
| 6.1. | La gráfica superior muestra $\operatorname{Re}\{K\},$ contra el tiempo y el desplazamiento. En la         |    |
|      | parte inferior la gráfica de la izquierda muestra $\operatorname{Re}\{K\}$ contra $t$ para valores de $x$ |    |
|      | fijos y la de<br>la derecha muestra $\operatorname{Re}\{K\}$ contra $x$ para valores de $t$ fijos         | 39 |
| 6.2. | Esta gráfica muestra $\operatorname{Im}\{K\}$ , contra el tiempo y el desplazamiento                      | 40 |
| 6.3. | En la gráfica de la izquierda se muestra, para distintos valores de $m, \operatorname{Re}\{K\}$ contra    |    |
|      | x, para t constante y en la derecha se muestra la dependencia en t, para x constante.                     | 41 |

## Introducci'on

l oscilador armónico es uno de los modelos más estudiados en la física. A primera aproximación, los sistemas que oscilan alrededor de un punto de equilibrio estable puede ser estudiados con ayuda de este modelo.

El objetivo de este trabajo es el de mostrar tres métodos didácticos para calcular el propagador de Feynman, tomando como ejemplo el caso del oscilador armónico y el de motivar el uso del propagador para caracterizar sistemas en la Mecánica Cuántica con algunas aplicaciones.[1][2][3] [4]

En el Capítulo 1 damos una breve descripción del propagador cuántico para establecer notación. Los Capítulos 2 a 4 contienen el estudio de los tres métodos que contemplamos para la construcción del propagador.

El primer método es el de Schwinger el cual se basa en la solución de las ecuaciones de Heisenberg. El segundo método está basado en técnicas algebráicas basadas en la factorización del operador de evolución temporal usando la formula de Baker-Campbell-Hausdorff. Usando la factorización, la relación de completéz y el valor del elemento de matriz  $\langle x|p\rangle$  podemos determinar el propagador. El tercer método es el de integral de camino el cual está basado en una relación de recurrencia para producir propagadores infinitesimales.

Finalmente, en el Capítulo 5 se muestran algunas aplicaciones del propagador obtenido, tales como el cálculo de la función de partición, los estados estacionarios y sus niveles de energía. Además dentro de las aplicaciones reportamos la construcción del propagador de oscilador armónico con un término extra lineal en el potencial y con uno cuártico. Veremos como en el primero se tiene prácticamente una aplicación directa, pero en el segundo caso, los métodos no permiten un análisis parecido.

### Capítulo 1

## El propagador cuántico

n la mecánica cuántica no relativista, un propagador es la amplitud de probabilidad de que una partícula viaje de un punto a otro en determinado tiempo, o bien que viaje con cierta energía y momento. Si un sistema tiene un Hamiltoniano  $\hat{H}$ , entonces el propagador apropiado es una función K que satisface la ecuación de Schrödinger. Estas funciones son las funciones Green. En la mecánica cuántica relativista, los propagadores cumplen con la invarianza de Lorentz, y nos dan la amplitud de probabilidad de que una partícula viaje entre dos puntos del espaciotiempo.

El propagador, nos permite saber el estado final de cualquier sistema conociendo el estado inicial. Esto se hace a través del operador de evolución temporal (también llamado operador de Dyson), el cual describe la conexión entre los estados en los que se desarrolla la propagación de una partícula.

Antes de mostrar el operador de evolución temporal es necesario hablar de las representaciones de la mecánica cuántica. Las representaciones más utilizadas son las de Schrödinger, Heisenberg y la de Interacción (o de Dirac). Estas representaciones están relacionadas a través de transformaciones unitarias de los estados y operadores  $(U^{\dagger} = U^{-1})$ , logrando que la probabilidad  $\langle \beta \mid \hat{O} \mid \alpha \rangle$  sea independiente de la representación.

En la representación de Heisenberg los operadores  $\hat{O}$  tienen dependencia temporal, mientras que los estados  $|\alpha\rangle$  permanecen constantes. La ecuación de movimiento correspondiente a esta representación es:

$$i\frac{\partial \hat{O}(t)}{\partial t} = [\hat{O}(t), \hat{H}] \tag{1.1}$$

y sus soluciones son de la forma:

$$\hat{O}^{H}(t) = \exp[i\hat{H}t]\hat{O}(0)\exp[-i\hat{H}t]$$
(1.2)

que así mismo es la manera en la que se transforman operadores del esquema de Heisenberg al esquema de Schrödinger.

En la representación de Schrödinger la ecuación de movimiento es:

$$i\frac{\partial}{\partial t} \mid \alpha, t \rangle^S = \hat{H} e^{-i\hat{H}t} \mid \alpha \rangle^H = \hat{H} \mid \alpha, t \rangle^S$$
 (1.3)

La transformación de operadores de la representación de Schrödinger a la de Heisenberg esta dada por:

$$\hat{O}^S = \exp[-i\hat{H}t]\hat{O}(t)\exp[i\hat{H}t] \tag{1.4}$$

y la transformación correspondiente a los eigenvalores es:

$$|\alpha, t\rangle^{S} = \exp[-i\hat{H}t] |\alpha\rangle^{H}$$
(1.5)

La representación de interacción es un esquema intermedio entre la representación de Schrödinger y la representación de Heisenberg, en la cual tanto los operadores como los estados tienen una parte dependiente del tiempo.

Para cambiar a esta representación es necesario considerar al Hamiltoniano como una combinación en la cual una parte es el Hamiltoniano correspondiente al sistema libre mas la parte en la cual se incluye algún tipo de perturbación:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I \tag{1.6}$$

La transformación para operadores entre la representación de Schrödinger y la representación de interacción está dada por:

$$\hat{O}^{I}(t) = \exp[i\hat{H}_{0}^{S}t]\hat{O}^{S}\exp[-i\hat{H}_{0}^{S}t]$$
(1.7)

y la transformación entre estados es:

$$|\alpha, t\rangle^{I} = \exp[i\hat{H}_{0}^{S}t] |\alpha, t\rangle^{S}$$
(1.8)

donde  $\hat{H}_0^S \equiv \hat{H}_0(t=0)$ 

La transformación para operadores entre la representación de Heisenberg y la representación de interacción está dada por:

$$\hat{O}^{I}(t) = \exp[i\hat{H}_{0}^{S}t] \exp[-i\hat{H}t]\hat{O}^{H}(t) \exp[i\hat{H}t] \exp[-i\hat{H}_{0}^{S}t]$$
(1.9)

y la transformación entre los estados es:

$$|\alpha, t\rangle^{I} = \exp[i\hat{H}_{0}^{S}t] \exp[-i\hat{H}t] |\alpha\rangle^{H}$$
(1.10)

La ecuación de movimiento para esta representación es:

$$i\frac{\partial}{\partial t} \mid \alpha, t \rangle^{I} = (\hat{H}^{I} - \hat{H}_{0}^{I}) \mid \alpha, t \rangle^{I}$$
$$= \hat{H}_{I}^{I} \mid \alpha, t \rangle^{I}$$
(1.11)

Tomando en cuenta lo anterior\*, podemos encontrar el operador de evolución temporal:

$$|\alpha, t_1\rangle^I = \exp[i\hat{H}_0 t_1] |\alpha, t_1\rangle^S$$

$$= \exp[i\hat{H}_0 t_1] \exp[-i\hat{H}(t_1 - t_0)] |\alpha, t_0\rangle^S$$

$$= \exp[i\hat{H}_0 t_1] \exp[-i\hat{H}(t_1 - t_0)] \exp[-i\hat{H}_0 t_0] |\alpha, t_0\rangle^I$$
(1.12)

donde  $t_0$  es el tiempo incial y  $t \to t - t_0$  es el tiempo final. Por lo tanto el operador que conecta los estados entre  $t_1$  y  $t_0$  esta dado por:

$$\hat{\mathbb{U}}(t_1, t_0) = e^{i\hat{H}_0 t_1} e^{-i\hat{H}(t_1 - t_0)} e^{-i\hat{H}_0 t_0}$$
(1.13)

Como en general los operadores  $\hat{H}$  y  $\hat{H}_0$  no conmutan se tiene que respetar el orden de los factores.

Considerando el operador de evolución anterior, podemos describir la propagación de partículas entre el punto x' en  $t_0$  y x'' en  $t_1$  con el propagador de Feynman en la representación de Heisenberg. Lo haremos para un sistema no relativista con un Hamiltoniano  $\hat{H}$  sin dependencia temporal explícita, de la siguiente manera:

$$K(x'', x'; \tau) = \Theta(\tau) \langle x'' \mid \hat{U}(\tau) \mid x' \rangle \tag{1.14}$$

donde  $t_1-t_0= au$  y  $\hat{U}$  esta dado por la siguiente expresión:

$$\hat{U}(\tau) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}\tau}{\hbar}\right). \tag{1.15}$$

Recordemos que  $\Theta(\tau)$  es la función paso definida por:

$$\Theta(\tau) = \begin{cases} 1 & \text{si } \tau \ge 0 \\ 0 & \text{si } \tau < 0 \end{cases}$$
 (1.16)

y su presencia garantiza el ordenamiento temporal congruente con la evolución que se describe con el operador  $\hat{U}$ .

<sup>\*</sup>Ver apéndice A

### Capítulo 2

## Método de Schwinger

l principio de acción de Schwinger es una de las ideas mas importantes para el cálculo de propagadores. El propagador se obtiene usando técnicas de operadores e involucra integración explícita de las ecuaciones de movimiento de Heisenberg y la evolución de conmutadores a tiempos diferentes [2].

El método que detallaremos en esta sección, fue introducido por Schwinger en 1951 [5] en un artículo titulado *Invariancia de Norma y Polarización del Vacío* en el cual Schwinger se enfrentó con un tipo de propagador cuántico no-relativista, en una dimensión extra.

La manera en la que analizó esta situación, dio origen a este método que desde entonces ha sido empleado mayormente en problemas relativistas. Sin embargo el método de Schwinger también es adecuado para el cálculo de propagadores no-relativistas, aunque rara vez es usado en este contexto.

Hasta donde sabemos, este método fue usado por primera vez en la mecánica cuántica norelativista por Urrutia y Hernández [3] para construir el propagador de Feynman para un oscilador armónico amortiguado. A partir de entonces se han estudiado en este contexto, diversos sistemas asociados al oscilador armónico (ver por ejemplo [1] y referencias ahí).

Antes de mostrar este método, recordemos algunos conceptos que ya se estudiaron en el Capítulo 1. Consideremos primero la ecuación 1.14 y observemos que para  $\tau > 0$ , podemos llegar a una ecuación diferencial para el propagador de Feynman derivando como sigue:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} K(x'', x'; \tau) = \langle x'' \mid \hat{H} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau\right) \mid x' \rangle.$$
 (2.1)

Además, recordemos la relación general entre operadores en el esquema de Heisenberg y Schrödinger\*:

$$\hat{X}_H(t) = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{X}_S e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$
(2.2)

<sup>\*</sup>Ver apéndice A

y, en notación de brakets tenemos

$$|x,t\rangle^{S} = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |x\rangle^{H},$$

$${}^{S}\langle x,t| = {}^{H}\langle x|e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}. \qquad (2.3)$$

Haciendo uso de las ecuaciones (2.2)-(2.3), podemos escribir la ecuación (2.1) de las siguiente manera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} K(x'', x'; \tau) = \langle x'' \mid e^{-\frac{i\hat{H}\tau}{\hbar}} \hat{H}_{H} e^{\frac{i\hat{H}\tau}{\hbar}} e^{-\frac{i\hat{H}\tau}{\hbar}} \mid x' \rangle$$

$$= \langle x'' \mid e^{-\frac{i\hat{H}\tau}{\hbar}} \hat{H}_{H} e^{\frac{i\hat{H}(0)}{\hbar}} \mid x' \rangle$$

$$= \langle x'', \tau \mid \hat{H}_{H}(\hat{X}(0), \hat{P}(0)) \mid x', 0 \rangle. \tag{2.4}$$

La ecuación (2.4) es la ecuación del Propagador de Feynman  $K(x'', x'; \tau) = \langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle$ , en el esquema de Heisenberg. Podemos ver que para obtener el propagador con este método, será necesario integrar el lado derecho de esta ecuación con respecto al tiempo. Para poder realizar dicha integral, necesitaremos obtener la expresión del Hamiltioniano del sistema en términos de X(0) y P(0) e integrar. Además será necesario obtener la constante de integración asociada con este proceso.

#### 2.1. Descripción del método

Nuestra intención es obtener el propagador de Feynman para el oscilador armónico usando este método. Para ello, procedemos ahora a explicar cuales serían los pasos a seguir de manera general y, en la siguiente sección se llevarán a cabo para el caso concreto del oscilador armónico.

Paso I. Primero, necesitamos resolver las ecuaciones de Heisenberg

$$i\hbar \frac{d}{d\tau}\hat{X}(\tau) = [\hat{X}(\tau), \hat{H}]$$
 (2.5)

$$i\hbar \frac{d}{d\tau}\hat{P}(\tau) = [\hat{P}(\tau), \hat{H}]$$
 (2.6)

para los operadores  $\hat{X}(\tau)$  y  $\hat{P}(\tau)$ , y escribir las soluciones sólo en términos de  $\hat{X}(\tau)$  y  $\hat{X}(0)$ .

Paso II. A continuación usaremos las soluciones obtenidas en el Paso I, para reescribir el operador Hamiltoniano  $\hat{H}$  como una función de los operadores  $\hat{X}(0)$  y  $\hat{X}(\tau)$ , ordenados de tal manera que en cada término de  $\hat{H}$  el operador  $\hat{X}(\tau)$  debe aparecer en el lado izquierdo,

mientras que el operador  $\hat{X}(0)$  debe aparecer en el lado derecho. La finalidad de este ordenamiento, es que al momento de calcular el lado derecho de la ecuación (2.4), se extraerán los eigenvalores de los brakets formados con los operadores y sus estados temporalmente correspondientes. Este ordenamiento se hace con la ayuda del conmutador  $[\hat{X}(0), \hat{X}(\tau)]$  que se puede calcular fácilmente con ayuda de las soluciones obtenidas en el **Paso I**. Al Hamiltoniano ordenado se le llamará  $\hat{H}_{ord}(\hat{X}(\tau), \hat{X}(0))$ . Después del ordenamiento, el elemento de matríz en el lado derecho de la ecuación (2.4) se puede expresar como:

$$\langle x'', \tau \mid \hat{H}_H \mid x', 0 \rangle = \langle x'', \tau \mid \hat{H}_{ord}(\hat{X}(\tau), \hat{X}(0)) \mid x', 0 \rangle$$

$$\equiv H(x'', x'; \tau) \langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle$$
(2.7)

Sustituyendo el resultado anterior en la ecuación (2.4) e integrando sobre  $\tau$ , obtenemos el propagador,

$$\langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle = C(x'', x') \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int^{\tau} H(x'', x', \tau) d\tau'\right)$$
 (2.8)

donde C(x'', x') es una constante de integración arbitraria.

Paso III. Finalmente, procederemos al cálculo de C(x'', x') y para ello imponemos las siguientes condiciones

$$\langle x'', \tau \mid \hat{P}(\tau) \mid x', 0 \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''} \langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle$$
 (2.9)

$$\langle x'', \tau \mid \hat{P}(0) \mid x', 0 \rangle = +i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle$$
 (2.10)

Estas condiciones provienen de utilizar las ecuaciones de eigenvalores análogas a (2.3) para el operador de momento  $\hat{P} = -i\hbar\nabla$  y del hecho de que para todo tiempo la relación de conmutación entre el operador de posición y momento es

$$[\hat{X}(\tau), \hat{P}(\tau)] = [\hat{X}(0), \hat{P}(0)] = i\hbar.$$
 (2.11)

La implicación de imponer las condiciones (2.9) y (2.10) sobre el propagador de Feynman es, en la práctica, sustituir en sus lados izquierdos la expresión para  $\langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle$  dada por (2.8), mientras que en sus lados derechos usamos los operadores  $\hat{P}(\tau)$  y  $\hat{P}(0)$ , escritos en términos de  $\hat{X}(\tau)$  y  $\hat{X}(0)$  con el ordenamiento temporal apropiado.

Después de usar las ecuaciones (2.9) y (2.10), aún hay un factor a determinar en C(x'', x'). Este factor se puede encontrar imponiéndole ahora una condición inicial al propagador de Feynman

$$\lim_{\tau \to 0^+} \langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle = \delta(x'' - x'). \tag{2.12}$$

Al aplicar esta condición obligamos a que el tratamiento del problema sea no relativista, ya que demandamos que para tiempos muy cortos no hay propagación entre los puntos x' y x'' (a través de la función Delta de Dirac). Si no demandáramos tal comportamiento, estaríamos permitiendo la propagación de partículas con velocidades relativistas, lo cual esta fuera del presente estudio.

#### 2.2. Método de Schwinger aplicado al oscilador armónico

El operador Hamiltoniano para el oscilador armónico es independiente del tiempo, a pesar de que los operadores de posición y de momento dependen explícitamente de él. Esto quiere decir que podemos usar

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2(\tau)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2(\tau), \tag{2.13}$$

ó

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2(0)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2(0), \tag{2.14}$$

como Hamiltoniano del oscilador armónico. Como ya lo indicamos en la notación usada en la sección anterior, nosotros usamos (2.14).

De acuerdo al **Paso I** del método, tenemos que resolver las ecuaciones de Heisenberg, dadas por las expresiones (2.5) y (2.6). Desarrollando el lado derecho de la ecuación (2.5),

$$\begin{split} [\hat{X}(\tau), \hat{H}] &= \frac{1}{2m} \hat{X}(\tau) \hat{P}^2(\tau) + \frac{1}{2m} \omega^2 \hat{X}^3(\tau) - \frac{1}{2m} \hat{P}^2(\tau) \hat{X}(\tau) - \frac{1}{2m} \omega^2 \hat{X}^3(\tau) \\ &= \frac{1}{2m} (\hat{X}(\tau) \hat{P}^2(\tau) - \hat{P}^2(\tau) \hat{X}(\tau)) \\ &= \frac{1}{2m} [\hat{X}(\tau), \hat{P}^2(\tau)] \end{split} \tag{2.15}$$

Además, usando la propiedad de los conmutadores

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}],$$

У

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}], \qquad [\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$$
 (2.16)

tenemos

$$[\hat{X}(\tau), \hat{H}] = \frac{1}{2m} \{ [\hat{X}(\tau), \hat{P}(\tau)] \hat{P}(\tau) + \hat{P}(\tau) [\hat{X}(\tau), \hat{P}(\tau)] \}$$

$$= \frac{i\hbar}{m} \hat{P}(\tau)$$
(2.17)

Así la ecuación (2.5) queda de la siguiente manera

$$\frac{d}{d\tau}\hat{X}(\tau) = \frac{\hat{P}(\tau)}{m}.$$
(2.18)

Ahora hacemos el mismo desarrollo, solo que esta vez usaremos la ecuación (2.6). Para ello necesitamos el conmutador

$$[\hat{P}(\tau), \hat{H}] = \frac{1}{2m} \hat{P}^{3}(\tau) + \frac{1}{2} m \omega^{2} \hat{P}(\tau) \hat{X}^{2}(\tau) - \frac{1}{2m} \hat{P}^{3}(\tau) - \frac{1}{2} m \omega^{2} \hat{X}^{2}(\tau) \hat{P}(\tau)$$

$$= \frac{1}{2} m \omega^{2} [\hat{P}(\tau), \hat{X}^{2}(\tau)]$$

$$= \frac{1}{2} m \omega^{2} [\hat{P}(\tau), \hat{X}(\tau)] \hat{X}(\tau) + \hat{X}(\tau) [\hat{P}(\tau), \hat{X}(\tau)]$$
(2.19)

donde usamos

$$[\hat{P}(\tau), \hat{H}] = -i\hbar m\omega^2 \hat{X}(\tau). \tag{2.20}$$

De esta manera, la ecuación (2.6) queda

$$\frac{d}{d\tau}\hat{P}(\tau) = -m\omega^2 \hat{X}(\tau). \tag{2.21}$$

Para encontrar la forma de  $\hat{X}(\tau)$  y  $\hat{P}(\tau)$ , primero derivamos con respecto a  $\tau$  la ecuación (2.18) para tener

$$\frac{d}{d\tau}\hat{P} = m\frac{d^2}{d\tau^2}\hat{X}(\tau)$$

y sustituyendo en la ecuación (2.21) tenemos

$$\frac{d^2}{d\tau^2}\hat{X}(\tau) = -\omega^2 \hat{X}(\tau),\tag{2.22}$$

cuya solución es de la forma

$$\hat{X}(\tau) = C_1 \cos \omega \tau + C_2 \sin \omega \tau. \tag{2.23}$$

Para encontrar  $C_1$  usamos las condición inicial  $\hat{X}(0) = \hat{X}(\tau) \mid_{\tau=0}$ ,

$$\hat{X}\mid_{\tau=0} = \hat{X}(0) = C_1, \tag{2.24}$$

Ahora bien, para encontrar  $C_2$  evaluamos la ecuación (2.18) en  $\tau=0$ :

$$\frac{d}{d\tau}\hat{X}\mid_{\tau=0} = \frac{\hat{P}(0)}{m}$$

$$(-\omega C_1 \sin \omega \tau + \omega C_2 \cos \omega \tau)\mid_{\tau=0} = \frac{\hat{P}(0)}{m},$$
(2.25)

lo cual implica que

$$C_2 = \frac{\hat{P}(0)}{m\omega}.\tag{2.26}$$

Dados los valores obtenidos para  $C_1$  y  $C_2$ , sustituyendo en la ecuación 2.23 tenemos

$$\hat{X}(\tau) = \hat{X}(0)\cos\omega\tau + \frac{\hat{P}(0)}{m\omega}\sin\omega\tau. \tag{2.27}$$

Por otro lado, podemos usar la solución anterior en la ecuación (2.6)

$$\frac{d}{d\tau}\hat{P}(\tau) = -m\omega^2 \hat{X}(0)\cos\omega\tau - \omega\hat{P}(0)\sin\omega\tau, \qquad (2.28)$$

e integrar

$$\hat{P}(\tau) = -m\omega \hat{X}(0)\sin \omega \tau + \hat{P}(0)\cos \omega \tau. \tag{2.29}$$

Con las ecuaciones (2.27) y (2.29) tenemos las soluciones a las ecuaciones de Heisenberg que necesitamos para proceder al **Paso II**. Como se mencionó en la sección anterior, ahora necesitamos reescribir el Hamiltoniano en términos de  $\hat{X}(\tau)$  y  $\hat{X}(0)$  y con un ordenamiento en particular. Por ello, primero usamos las ecuaciones (2.27) y (2.29) para reescribir  $\hat{P}(0)$  y  $\hat{P}(\tau)$  como

$$\hat{P}(0) = \frac{m\omega}{\sin\omega\tau}(\hat{X}(\tau) - \hat{X}(0)\cos\omega\tau) \tag{2.30}$$

$$\hat{P}(\tau) = m\omega \cot(\omega\tau)(\hat{X}(\tau) - \hat{X}(0)\cos\omega\tau) - m\omega\hat{X}(0)\sin(\omega\tau)$$
(2.31)

Ahora podemos proceder, como se indica en el  ${f Paso}$  II, a reescribir el Hamiltoniano usando la ecuación (2.30) en (2.14) para tener

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \frac{m\omega}{\sin \omega \tau} \right)^2 \left[ \hat{X}^2(\tau) + \hat{X}^2(0) \cos^2 \omega \tau - \hat{X}(\tau) \hat{X}(0) \cos \omega \tau - \hat{X}(0) \hat{X}(\tau) \cos \omega \tau \right] + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{X}^2(0).$$
(2.32)

En el método de Schwinger, el Hamiltoniano en términos de los operadores  $\hat{X}(\tau)$  y  $\hat{X}(0)$  debe estar escrito de tal forma que en cada uno de los términos del Hamiltoniano, el operador  $\hat{X}(\tau)$  debe estar en el lado izquierdo del término, y el operador  $\hat{X}(0)$  en el lado derecho. Para ordenar el Hamiltoniano de esta forma, usaremos el conmutador  $[\hat{X}(0), \hat{X}(\tau)]$ . Para obtener dicho conmutador, usaremos el resultado (2.27) y la expresión (2.30) de la siguiente manera

$$\begin{split} [\hat{X}(0), \hat{X}(\tau)] &= [\hat{X}(0), \hat{X}(0)\cos\omega\tau + \frac{\hat{P}(0)}{m\omega}\sin\omega\tau] \\ &= \hat{X}^2(0)\cos\omega\tau + \frac{\hat{X}(0)\hat{P}(0)}{m\omega}\sin\omega\tau - \hat{X}^2(0)\cos\omega\tau - \frac{\hat{P}(0)\hat{X}(0)}{m\omega}\sin\omega\tau \\ &= \frac{\sin\omega\tau}{m\omega}(\hat{X}(0)\hat{P}(0) - \hat{P}(0)\hat{X}(0)) \\ &= \frac{\sin\omega\tau}{m\omega}[\hat{X}(0), \hat{P}(0)], \end{split}$$

por lo que

$$[\hat{X}(0), \hat{X}(\tau)] = \frac{i\hbar}{m\omega} \sin \omega \tau. \tag{2.33}$$

Este conmutador nos ayuda a reescribir el Hamiltoniano en (2.32) como el Hamiltoniano ordenado

$$\hat{H}_{ord} = \frac{m\omega^2}{2\sin^2\omega\tau} (\hat{X}^2(\tau) + \hat{X}^2(0)\cos^2\omega\tau - 2\hat{X}(\tau)\cos\omega\tau + \frac{i\hbar}{m\omega}\cos\omega\tau\sin\omega\tau) + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2(0)$$

$$= \frac{m\omega^2}{2\sin^2\omega\tau} (\hat{X}^2(\tau) + \hat{X}^2(0) - 2\hat{X}(\tau)\hat{X}(0)\cos\omega\tau) - \frac{i\hbar\omega}{2}\cot\omega\tau \qquad (2.34)$$

Ahora que tenemos el Hamiltoniano ordenado  $H_{ord}$  podemos encontrar la función  $H(x'', x'; \tau)$  que nos ayudará a obtener el propagador de Feynman y que, según la ecuación (2.7) satisface

$$H(x'', x'; \tau) = \frac{\langle x'', \tau \mid \hat{H}_{ord} \mid x', 0 \rangle}{\langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle}$$

y, al usar el Hamiltoniano ordenado tenemos

$$H(x'', x'; \tau) = \frac{m\omega^2}{2\sin^2\omega\tau} \left( \frac{\langle x'', \tau \mid \hat{X}^2(\tau) \mid x', 0 \rangle}{\langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle} + \frac{\langle x'', \tau \mid \hat{X}^2(0) \mid x', 0 \rangle}{\langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle} - 2\cos\omega\tau \frac{\langle x'', \tau \mid \hat{X}(\tau)\hat{X}(0) \mid x', 0 \rangle}{\langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle} \right) - \frac{i\hbar\omega}{2}\cot\omega\tau$$
(2.35)

Como sabemos que los eigenvalores del operador posición satisfacen  $\hat{X}(t) \mid x, t \rangle = x \mid x, t \rangle$ , entonces

$$H(x'', x'; \tau) = \frac{m\omega^2}{2} [(x''^2 + x'^2)\csc^2\omega\tau - 2x''x'\cot\omega\tau\csc\omega\tau] - \frac{i\hbar\omega}{2}\cot\omega\tau.$$
 (2.36)

Usando la ecuación (2.8) y el resultado anterior, podemos escribir el propagador de Feynman del oscilador armónico de la siguiente manera

$$\langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle = C(x'', x') \exp \left\{ \frac{-i}{\hbar} \int^{\tau} d\tau' \left[ \frac{m\omega^2}{2} (x''^2 + x'^2) \csc^2 \omega \tau' - m\omega^2 x'' x' \cot \omega \tau' \csc \omega \tau' - \frac{i\hbar\omega}{2} \cot \omega \tau' \right] \right\}, \tag{2.37}$$

que, haciendo uso de

$$\int \csc^2 u du = -\cot u, \qquad \int \csc u \cot u du = -\csc u \quad \text{y} \quad \int \cot u du = \ln|\sin u|,$$

nos queda

$$\langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle = C(x'', x') \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar} (x''^2 + x'^2) \left[\cot \omega \tau - 2x'' x' \csc \omega \tau\right] - \frac{1}{2} \ln |\sin \omega \tau| \right\}$$
(2.38)

o bién

$$\langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle = \frac{C(x'', x')}{\sqrt{\sin \omega \tau}} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega \tau} [(x''^2 + x'^2) \cos \omega \tau - 2x'' x'] \right\}. \tag{2.39}$$

Ya tenemos aquí una expresión para el propagador de Feynman del oscilador armónico que sólo requiere que especifiquemos la constante de integración C(x'',x'). Para ello, pasamos a la implementación del **Paso III** del método de Schwinger. Ahora, haremos uso de las expresiones (2.30) y (2.31) en donde obtuvimos  $\hat{P}(\tau)$  y  $\hat{P}(0)$  (respectivamente) en términos de los operadores  $\hat{X}(\tau)$  y  $\hat{X}(0)$ .

Siguiendo con el **Paso III** hacemos uso de (2.39) en el lado derecho de la ecuación de eigenvalores para el operador de momento  $\hat{P}(\tau)$  dada por

$$\langle x'', \tau' \mid \hat{P}(\tau) \mid x', 0 \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''} \langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle$$
 (2.40)

para tener

$$\langle x'', \tau' \mid \hat{P}(\tau) \mid x', 0 \rangle = \left[ \frac{m\omega}{2\sin\omega\tau} (2x''\cos\omega\tau - 2x') \right] \langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle$$

$$-\frac{i\hbar}{\sqrt{\sin\omega\tau}} \exp\left\{ \frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega\tau} ((x''^2 + x'^2)\cos\omega\tau - 2x''x') \right\} \frac{\partial}{\partial x''} C(x'', x')$$
(2.41)

Por otro lado, en el lado izquierdo podemos usar la ecuación (2.31) y así obtener una expresión para la derivada de C(x'', x')

$$\left[m\omega\cot\omega\tau(x''-x'\cos\omega\tau)-m\omega x'\sin\omega\tau\right]\langle x'',\tau\mid x',0\rangle = 
= \left[\frac{m\omega}{2\sin\omega\tau}(2x''\cos\omega\tau-2x')\right]\langle x'',\tau\mid x',0\rangle 
-\frac{i\hbar}{\sqrt{\sin\omega\tau}}\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega\tau}((x''^2+x'^2)\cos\omega\tau-2x''x')\right\}\frac{\partial}{\partial x''}C(x'',x')$$
(2.42)

lo que nos lleva a

$$\frac{-i\hbar}{\sqrt{\sin \omega \tau}} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega \tau} ((x''^2 + x'^2)\cos \omega \tau - 2x''x') \frac{\partial}{\partial x''} C(x'', x') = 0\right] \tag{2.43}$$

Para que la ecuación (2.43), cumpla con la igualdad al menos un término de esta, debe ser igual a cero. Sin embargo para una solución no trivial, tendremos que escoger C(x'', x') tal que:

$$\frac{\partial}{\partial x''}C(x'',x') = 0. {(2.44)}$$

ya que de lo contrario, es decir, en caso de que tomaramos la parte que involucra al exponencial igual a cero, se perdería la información que se necesita para obtener el propagador.

Haciendo un ejercicio análogo a lo que se llevó a cabo anteriormente de la ecuación (2.40) a la (2.44), pero aprovechando la ecuación de eigenvalores para el operador de momento  $\hat{P}(0)$  dada por

$$\langle x'', \tau' \mid \hat{P}(0) \mid x', 0 \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle$$
 (2.45)

y notando que la expresión para el propagador (2.39) es simétrica en x'' y x', tendremos también

$$\frac{\partial}{\partial x'}C(x'',x') = 0. {(2.46)}$$

De (2.44) y (2.46) podemos concluir que C es un parámetro que no depede ni de x'' ni de x'. Ahora para completar el análisis del comportamiento de C solo resta tomar el límite  $\tau^+ \to 0$  de la expresión para el propagador (2.39). Utilizando las aproximaciones en dicha expresión, para desplazamientos pequeños  $\sin \omega \tau \approx \omega \tau$  y  $\cos \omega \tau \approx 1$ , tenemos:

$$\lim_{\tau^{+} \to 0} \langle x'', \tau \mid x', 0 \rangle = \lim_{\tau^{+} \to 0} \frac{C}{\sqrt{\omega \tau}} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar \tau} (x'' - x')^{2} \right]$$

$$= C \sqrt{\frac{2\pi i\hbar}{m\omega}} \delta(x'' - x') \tag{2.47}$$

Si comparamos este resultado con la condición inicial de la ecuación (2.12) obtenemos la expresión para la constante:

$$C = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar}} \tag{2.48}$$

Finalmente sustituimos este resultado en la ecuación (2.39), y así obtenemos el propagador de Feynman para el oscilador armónico:

$$K(x'', x': \tau) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega \tau}} \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega \tau} [(x''^2 + x'^2)\cos \omega \tau - 2x''x']\right\}. \quad (2.49)$$

### Capítulo 3

### | | Método Algebraico

l origen del método algebraico data del comienzo de la Mecánica Cuántica, con la formulación matricial de Jordan, Heisenberg y Pauli, entre otros. En este capítulo utilizaremos dicho método algebraico para calcular el propagador de Feynman, lo cual implicará la manipulación de operadores de posición y momento, como se verá a continuación.

Recordemos de (1.14) y (1.15) que si queremos simplemente tomar un operador Hamiltoniano dentro del operador de evolución temporal y proyectar en los estados  $|x\rangle$  y  $|p\rangle$ , tendremos que considerar varios detalles. Por ejemplo, el operador Hamiltoniano  $\hat{H}$  para un sistema no relativista, usualmente se puede escribir como una suma de términos que involucran los operadores de posición  $\hat{X}$  y de momento  $\hat{P}$ , los cuales no conmutan. Además necesitaremos la factorización del operador de evolución temporal en un producto de simples operadores exponenciales, lo cual involucra trabajo algebraico.

Esta álgebra trata básicamente con las relaciones de conmutación entre los operadores de posición y momento, y el uso de las expresiones conocidas como de Baker-Campbell-Hausdorff  $(BCH)^*$ . El uso de estas expresiones es la escencia del método algebraico, ya que es mas sencillo calcular la acción de estos operadores exponenciales simples en los estados  $|x\rangle$  y  $|p\rangle$ , que calcular la acción sobre los mismos estados pero del operador de evolución temporal original.

#### 3.1. Descripción del método

Como mencionamos anteriormente, queremos obtener el propagador de Feynman para el oscilador armónico usando el método algebraico. Entonces, a continuación explicaremos de manera general cuales serían los pasos a seguir y, en la siguiente sección, se llevarán a cabo para el caso concreto del oscilador armónico.

Podemos resumir el método algebraico en los siguientes pasos:

**Paso I.** Lo primero que necesitamos es poder reescribir el operador de evolución temporal  $\hat{U}$  de

<sup>\*</sup>Ver apéndice B

la ecuación (1.15) como un producto de exponenciales de los operadores  $\hat{X}$ ,  $\hat{P}$  y  $\hat{P}\hat{X}$ . Esta factorización se logra con ayuda de la fórmula BCH, en donde se tiene una relación entre cualesquiera dos operadores A y B dada por

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{C} \tag{3.1}$$

donde

$$\hat{C} = \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$
(3.2)

Podemos ver que usando las expresiones anteriores obtenemos

$$\hat{C}^2 = (e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}})(e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}}) = e^{\hat{A}}\hat{B}^2e^{-\hat{A}}, \qquad (3.3)$$

o en general

$$\hat{C}^n = e^{\hat{A}} \hat{B}^n e^{-\hat{A}}. \tag{3.4}$$

Si desarrollamos e $^{\hat{C}}$  en serie de potencias y reescribimos cada término de esta serie utilizando las ecuaciones (3.2) y (3.4), encontramos

$$e^{\hat{C}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\hat{A}},$$
 (3.5)

que puede invertirse para tener

$$e^{\hat{B}} = e^{-\hat{A}}e^{\hat{C}}e^{\hat{A}}.$$
 (3.6)

Podemos ver que si  $\hat{B} = -i\tau \hat{H}/\hbar$  en la ecuación (3.6), tenemos una expresión que nos ayudará a factorizar el operador de evolución temporal en (1.15) eligiendo un operador  $\hat{A}$  de manera conveniente. La elección específica de  $\hat{A}$  depende de la forma explícita del Hamiltoniano.

Es importante enfatizar que esta factorización puede ser repetida tantas veces como sea necesaria.

Paso II. Ahora sustituimos el operador de evolución temporal factorizado (con las herramientas desarrolladas en el Paso I) en la definición (1.14) del propagador de Feynman  $K(x'', x' : \tau)$  y calculamos la acción de las exponenciales de los operadores  $\hat{X}$ ,  $\hat{P}$  y  $\hat{P}\hat{X}$  en el estado  $|x\rangle$ . Para el operador  $\hat{X}$  este cálculo es trivial y para  $\hat{P}$  solo necesitamos usar la relación  $1 = \int dp |p\rangle\langle p|$  y el elemento de matriz  $\langle x|p\rangle = (1/2\pi\hbar)^{1/2} \exp(ixp)$ .

Sin embargo, pueden existir términos con productos de ambos operadores  $\hat{P}\hat{X}$  y para dichos términos usaremos\*\*:

$$\langle p'' \mid \exp\{-i\gamma \hat{P}\hat{X}/\hbar\} \mid p'\rangle = e^{-\gamma} \delta(p'' - e^{-\gamma}p')$$
 (3.7)

donde  $\gamma$  es un parámetro arbitrario que es seleccionado dependiendo del caso en cuestión.

#### 3.2. Método algebraico aplicado al oscilador armónico

Considerando (2.13) y (1.15) podemos ver que el operador de evolución temporal para el caso del oscilador armónico es

$$\hat{U}(\tau) = \exp\left\{\frac{-i\tau}{\hbar} \left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2\right)\right\}. \tag{3.8}$$

De acuerdo al **Paso I** del método, tenemos que factorizar el operador de evolución temporal, eligiendo un operador  $\hat{A}$  de manera conveniente. Como veremos a continuación, es conveniente usar  $\hat{A} = \alpha \hat{X}^2$  donde  $\alpha$  es un parametro arbitrario y  $\hat{B} = -i\tau \hat{H}/\hbar$ . Si consideramos esta elección en las ecuaciones (3.1) a (3.7) tenemos

$$e^{\hat{C}} = \exp(\alpha \hat{X}^2) \exp(\frac{-i\tau \hat{H}}{\hbar}) \exp(-\alpha \hat{X}^2)$$

$$= \exp\left\{\frac{-i\tau \hat{H}}{\hbar} - \frac{-i\tau \hat{H}}{\hbar} [\alpha \hat{X}^2, \hat{H}] + \frac{1}{2!} (\frac{-i\tau \hat{H}}{\hbar})^2 [\alpha \hat{X}^2, [\alpha \hat{X}^2, \hat{H}]] \cdots\right\}$$
(3.9)

Podemos observar que tenemos varios conmutadores que calcular. Los primeros términos de la serie involucran los siguientes:

$$[\hat{X}^{2}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m} (\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}), \qquad (3.10)$$

$$[\hat{X}^{2}, [\hat{X}^{2}, \hat{H}]] = [\hat{X}^{2}, \frac{i\hbar}{m} (\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X})]$$

$$= \frac{i\hbar}{m} (\hat{X}^{3}\hat{P} + \hat{X}^{2}\hat{P}\hat{X} - \hat{X}\hat{P}\hat{X}^{2} - \hat{P}\hat{X}^{3})$$

$$= \frac{i\hbar}{m} (3i\hbar\hat{X}^{2} + \hat{X}(\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X})\hat{X})$$

$$= \frac{i\hbar}{m} (4i\hbar\hat{X}^{2}) \qquad (3.11)$$

Los siguientes conmutadores son igual a cero, ya que todos estan en función del operador  $\hat{X}$ ,

<sup>\*\*</sup>Ver apéndice C

por lo tanto:

$$\exp(\alpha \hat{X}^{2}) \exp(\frac{-i\tau \hat{H}}{\hbar}) \exp(-\alpha \hat{X}^{2}) = \exp\left\{\frac{-i\tau}{\hbar} \left(\frac{\hat{P}^{2}}{2m} + \frac{i\hbar\alpha}{m}(\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X})\right) + \frac{m}{2} \left[\omega^{2} - \left(\frac{2\alpha\hbar}{m}\right)^{2}\right] \hat{X}^{2}\right\}$$
(3.12)

Como necesitamos factorizar el operador de evolución escogemos una  $\alpha$  tal que

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar} \tag{3.13}$$

de tal manera que los términos con  $\hat{X}^2$  se cancelen, para tener

$$\exp(\alpha \hat{X}^2) \exp(\frac{-i\tau \hat{H}}{\hbar}) \exp(-\alpha \hat{X}^2) = \exp\left\{\frac{-i\tau}{\hbar} \left[\frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{i\omega}{2} \left(\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}\right)\right]\right\}. \tag{3.14}$$

Usando la relación de conmutación  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$  (i.e.  $\hat{X}\hat{P} = \hat{P}\hat{X} + i\hbar$ ) tenemos:

$$\exp(\alpha \hat{X}^2) \exp(\frac{-i\tau \hat{H}}{\hbar}) \exp(-\alpha \hat{X}^2) = \exp\left\{\frac{-i\tau}{\hbar} \left[\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega \hat{P}\hat{X}\right] + \frac{i\omega\tau}{2}\right\}$$
(3.15)

De la expresión anterior podemos obtener la exponencial del lado izquierdo que tiene el operador Hamiltoniano y con ello lograremos la factorización del operador de evolución temporal de acuerdo al **Paso I** del método algebraico:

$$\exp(\frac{-i\tau\hat{H}}{\hbar}) = \exp\left(\frac{i\omega\tau}{2}\right) \exp\left(-\alpha\hat{X}^2\right) \exp\left\{-\frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega\hat{P}\hat{X}\right]\right\} \exp(\alpha\hat{X}^2). \tag{3.16}$$

Vemos que podemos factorizar todavia más este operador si ahora repetimos el **Paso I** del método algebráico pero para los operadores  $\hat{A} = \beta \hat{P}^2$  y  $\hat{B} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega \hat{P}\hat{X}$ . De acuerdo a las ecuaciones (3.1) a (3.7), tenemos que:

$$\exp\left(\beta\hat{P}^2\right)\left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega\hat{P}\hat{X}\right)\exp\left(-\beta\hat{P}^2\right) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega\hat{P}\hat{X} + \left[\beta\hat{P}^2, \frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega\hat{P}\hat{X}\right] + \cdots \quad (3.17)$$

calculando el conmutador  $[\beta \hat{P}^2, \frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega \hat{P}\hat{X}]$ :

$$[\beta \hat{P}^2, \frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega \hat{P}\hat{X}] = \beta i\omega \hat{P}(\hat{P}^2\hat{X} - \hat{X}\hat{P}^2)$$
$$= -\beta i\omega \hat{P}[\hat{X}, \hat{P}^2] = -\beta i\omega \hat{P}([\hat{X}, \hat{P}]\hat{P} + \hat{P}[\hat{X}, \hat{P}]) = 2\beta \omega \hbar \hat{P}^2$$
(3.18)

Como el resultado de calcular el conmutador anterior, solo tiene que ver con  $\hat{P}$ , los términos que involucran conmutadores anidados en la formula de Baker-Campbell-Hausdorff, para estos operadores, son iguales a cero. Entonces:

$$e^{\beta \hat{P}^2} (\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega \hat{P}\hat{X}) e^{-\beta \hat{P}^2} = (\frac{1}{2m} + 2\omega\hbar\beta)\hat{P}^2 + i\omega\hat{P}\hat{X}$$
 (3.19)

para eliminar el término proporcional a  $\hat{P}^2$  en el lado derecho de la ecuación, tomamos:

$$\beta = -\frac{1}{4m\omega\hbar} \tag{3.20}$$

así

$$e^{\beta \hat{P}^2} \left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega \hat{P}\hat{X}\right) e^{-\beta \hat{P}^2} = i\omega \hat{P}\hat{X}$$
(3.21)

de acuerdo a la ecuación (3.5), tenemos:

$$e^{\beta \hat{P}^2} e^{(\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega \hat{P}\hat{X})} e^{-\beta \hat{P}^2} = e^{i\omega \hat{P}\hat{X}}$$
(3.22)

esto implica que:

$$e^{\left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega\hat{P}\hat{X}\right)} = e^{-\beta\hat{P}^2}e^{i\omega\hat{P}\hat{X}}e^{\beta\hat{P}^2}$$
(3.23)

Sustituyendo este resultado en la ecuación (3.15)

$$\exp(\frac{-i\tau\hat{H}}{\hbar}) = e^{\frac{i\omega\tau}{2}}\exp(-\alpha\hat{X}^2)\exp(-\beta\hat{P}^2)\exp(i\omega\hat{P}\hat{X})\exp(\beta\hat{P}^2)\exp(\alpha\hat{X}^2)$$
(3.24)

De esta manera el operador de evolución temporal es expresado como un producto de operadores. Ahora en el **Paso II** usamos la expresión (3.24) sustituyendola en el propagador de Feynman:

$$K(x'', x'; \tau) = e^{\frac{i\omega\tau}{2}} e^{-\alpha x''^2} e^{\alpha x'^2} \langle x'' \mid e^{-\beta \hat{P}^2} e^{\frac{-i}{\hbar} (i\omega\tau) \hat{P} \hat{X}} e^{\beta \hat{P}^2} \mid x' \rangle$$
(3.25)

Introduciendo el desarrollo de la unidad tenemos:

$$K(x'', x'; \tau) = e^{\frac{i\omega\tau}{2}} e^{-\alpha x''^2} e^{\alpha x'^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp' dp'' \langle x'' \mid p'' \rangle \langle p'' \mid e^{-\beta \hat{P}^2} e^{\frac{-i}{\hbar}(i\omega\tau)\hat{P}\hat{X}} e^{\beta \hat{P}^2} \mid p' \rangle \langle p' \mid x' \rangle$$

$$(3.26)$$

usando  $\langle x \mid p \rangle = (1/2\pi\hbar)^{1/2} \exp(ixp)$  tenemos:

$$K(x'', x'; \tau) = \exp\left[-\alpha(x''^2 - x'^2) + \frac{i\omega\tau}{2}\right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'dp''}{2\pi\hbar}$$

$$\times \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p''x'' - p'x') - \beta(p''^2 - p'^2)\right]$$

$$\times \langle p'' \mid e^{\frac{-i}{\hbar}(i\omega\tau)\hat{P}\hat{X}} \mid p'\rangle$$
(3.27)

tomando  $\gamma = i\omega \tau$ , las formas explícitas de  $\alpha$  y  $\beta$  y usando la ecuación (3.7), tenemos:

$$K(x'', x'; \tau) = \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x''^2 - x'^2) + \frac{i\omega\tau}{2}\right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'dp''}{2\pi\hbar}$$

$$\times \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p''x'' - p'x') + \frac{1}{4m\omega\hbar}(p''^2 - p'^2)\right]$$

$$\times \exp(-i\omega\tau)\delta(p'' - e^{-i\omega\tau})$$
(3.28)

Integrando sobre p'' y utilizando:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) f(x) = f(a)$$
(3.29)

tenemos:

$$K(x'', x'; \tau) = \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x''^2 - x'^2) - \frac{i\omega\tau}{2}\right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'}{2\pi\hbar}$$

$$\times \exp\left[\frac{i}{\hbar}p'(e^{-i\omega\tau}x'' - x') - \frac{1}{4m\omega\hbar}p'^2(1 - e^{-2i\omega\tau})\right]$$

$$= \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x''^2 - x'^2) - \frac{i\omega\tau}{2}\right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'}{2\pi\hbar}$$

$$\times \exp\left\{-\left[\frac{1 - e^{-2i\omega\tau}}{4m\omega\hbar}\right]\right]$$

$$\times \left[p'^2 - 4im\omega\left(\frac{e^{-i\omega\tau}x'' - x'}{1 - e^{-2i\omega\tau}}\right)p'\right]\right\}$$
(3.30)

completando el cuadrado  $[(a+b)^2=a^2+2ab+b^2$ , tenemos que para nuestro caso:

$$a = p'$$

$$2ab = -4im\omega \left(\frac{e^{-i\omega\tau}x'' - x'}{1 - e^{-2i\omega\tau}}\right)p'$$

por lo tanto:

$$b = -2im\omega \left( \frac{e^{-i\omega\tau}x'' - x'}{1 - e^{-2i\omega\tau}} \right)$$

entonces:

$$p'^{2} - 4im\omega \left(\frac{e^{-i\omega\tau}x'' - x'}{1 - e^{-2i\omega\tau}}\right) = \left[p' - 2im\omega \left(\frac{e^{-i\omega\tau}x'' - x'}{1 - e^{-2i\omega\tau}}\right)\right]^{2} + 4m^{2}\omega^{2}\left(\frac{e^{-i\omega\tau}x'' - x'}{1 - e^{-2i\omega\tau}}\right)^{2}$$
(3.31)

Sustituyendo este resultado en la ecuación (3.30)

$$K(x'', x'; \tau) = \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x''^2 - x'^2) - \frac{i\omega\tau}{2} - \frac{m\omega}{\hbar}\frac{(e^{-i\omega\tau}x'' - x')^2}{1 - e^{-2i\omega\tau}}\right]$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\left[\frac{1 - e^{-2i\omega\tau}}{4m\omega\hbar}\right] \left[p' - 2im\omega\left(\frac{e^{-i\omega\tau}x'' - x'}{1 - e^{-2i\omega\tau}}\right)\right]^2\right\} (3.32)$$

La integral que tenemos es una integral de Gauss, que cumple con:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$
 (3.33)

así:

$$K(x'', x'; \tau) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{4\pi m\omega\hbar}{1 - e^{-2i\omega\tau}}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} \left(x''^2 - x'^2 + 2\frac{(e^{-i\omega\tau}x'' - x')^2}{1 - e^{-2i\omega\tau}}\right) - \frac{i\omega\tau}{2}\right]$$
(3.34)

Usando  $1 - e^{-2i\omega\tau} = 2ie^{-i\omega\tau}\sin\omega\tau$ , tenemos:

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{4\pi m\omega\hbar}{1 - e^{-2i\omega\tau}}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega\tau}}\exp\left(\frac{i\omega\tau}{2}\right)$$
(3.35)

Sustituyendo (3.35) en (3.34):

$$K(x'', x'; \tau) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega \tau}}$$

$$\times \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} \left(x''^2 - x'^2 + 2\frac{(e^{-i\omega\tau}x'' - x')^2}{1 - e^{-2i\omega\tau}}\right)\right]$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega \tau}}$$

$$\times \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega \tau} \left(i\sin \omega \tau (x''^2 - x'^2)\right) + \frac{(e^{-i\omega\tau}x'' - x')^2}{e^{-i\omega\tau}}\right)\right]$$
(3.36)

Usando:

$$i\sin\omega\tau = \frac{e^{i\omega\tau} - e^{-i\omega\tau}}{2}$$

tenemos:

$$K(x'', x'; \tau) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega \tau}}$$

$$\times \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega \tau} \left(\left(\frac{e^{i\omega\tau} - e^{-i\omega\tau}}{2}\right)(x''^2 - x'^2)\right) + \frac{e^{-2i\omega\tau}x''^2 - 2x''x'e^{-i\omega\tau} + x'^2}{e^{-i\omega\tau}}\right)\right]$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega \tau}}$$

$$\times \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega \tau} \left[\left(\frac{e^{i\omega\tau} - e^{-i\omega\tau}}{2} + e^{-i\omega\tau}\right)x''^2 + \left(\frac{e^{-i\omega\tau} - e^{-i\omega\tau}}{2} + e^{i\omega\tau}\right)x''^2 + \left(\frac{e^{-i\omega\tau} - e^{-i\omega\tau}}{2} + e^{i\omega\tau}\right)x'^2 - 2x'x''\right]\right\}$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega \tau}}$$

$$\times \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega \tau} \left[\left(\frac{e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau}}{2}\right)\left(x''^2 + x'^2\right) - 2x'x''\right]\right\}$$
(3.37)

Finalmente haciendo uso de  $\cos \omega \tau = \frac{e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau}}{2}$ , encontramos el propagador de Feynman para el oscilador armónico unidimensional:

$$K(x'', x'; \tau) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega \tau}} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega \tau} \left( (x''^2 + x'^2) \cos \omega \tau - 2x'x'' \right) \right]. \quad (3.38)$$

Vemos que este método también nos permite obtener la expresión del propagador que ya se obtuvo en el Capítulo 2. La diferencia es que con el método algebraico, no fue necesario resolver ecuaciones diferenciales acopladas, pero es necesario hacer una propuesta de factorización que permita que la serie infinita que surge de la fórmula de BCH, se corte.

# Capítulo 4

# Método de Integral de Camino

l formalismo de la integral de camino fue introducido por Feynamn en 1948, siguiendo las ideas desarrolladas por Dirac. Este método consiste en evaluar la integral de camino explícitamente, sin hacer uso de aproximaciones semiclásicas y constituye esencialmente el entendimiento de la mecánica cuántica, permitiendo una derivación de ecuaciones exactas en la teoría cuántica de campo. Para introducirnos al concepto de integral de camino, es necesario involucrar a la acción clásica, ya que juega un papel central en el formalismo de éste. [6] Una descripción elegante para el caso de la partícula clásica, es ofrecida por el principio de acción de Hamilton. El punto de partida es la funcional de la acción. Siendo L la Lagrangiana del sistema y  $t_0$  y  $t_N$  los dos tiempos fijos, se define la acción funcional:

$$S[x_N, x_0] \equiv S[x(t_N), x(t_0)] = \int_{t_0}^{t_N} dt' L\left(x(t'), \dot{x}(t'), t'\right)$$
(4.1)

la cual asigna el valor definido para cualquier camino x(t) que conecte los puntos fijos  $x_0 = x(t_0)$  y  $x_N = x(t_N)$ . De un número infinito de tales caminos, la teoría clásica de una partícula está representada por el camino especial  $\overline{x}(t)$ , para el cual la ecuación (4.1) toma el valor extremo. La condición necesaria para ésto es:

$$\delta S = S[\overline{x} + \delta] - S[\overline{x}] = 0 \tag{4.2}$$

Las implicaciones de la expresión (4.2) en la Lagrangiana nos permiten obtener las ecuaciones de Euler-Lagrange para la trayectoría clásica. Partiendo de (4.1), podemos escribir:

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_N} dt' \left[ \frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \right]$$
 (4.3)

redefiniendo la derivada con respecto al tiempo, tenemos:

$$\frac{dx}{dt} \Rightarrow \frac{d(x+\delta x)}{dt} = \frac{dx}{dt} + \delta \dot{x} \tag{4.4}$$

por lo tanto:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \frac{d}{dt} (\delta x) \tag{4.5}$$

pero:

$$\frac{d}{dt} \left[ \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \right] = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} + \delta x \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$$
(4.6)

de aquí:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \right) - \delta x \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$$

$$(4.7)$$

Entonces sustituyendo (4.7) en (4.3) y usando el teorema fundamental del cálculo tenemos:

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_N} dt' \left[ \frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \right) - \delta x \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right]$$

$$= \delta \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{t_0}^{t_N} + \int_{t_0}^{t_N} dt' \left[ \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right] \delta x$$
(4.8)

Para puntos extremos fijos  $\delta x(t_0) = \delta x(t_N) = 0$  se debe cumplir para la trayectoria clásica de (4.2) y (4.8) que:

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0 \tag{4.9}$$

que son las ecuaciones de Euler-Lagrange y solo se cumplen para la trayectoria clásica  $\overline{x}(t)$ . En la mecánica clásica, lo que es interesante entonces es la funcional de la acción (la forma que tiene) y no necesariamente su valor. Así, podemos considerar de (4.1) y (4.2) a la acción a lo largo de una trayectoria clásica como función de una cota superior.

$$S_{clas}[\overline{x}(t)] = \int_{t_0}^{t} dt' L(\overline{x}(t'), \dot{\overline{x}}(t'), t')$$
(4.10)

entonces de (4.10) y (4.8), tenemos que:

$$\delta S_{clas} = \delta x \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \bigg|_{t_0}^{t_N} + 0 \tag{4.11}$$

además  $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = p$  entonces:

$$\delta S_{clas} = \delta x \cdot p \bigg|_{t_0}^{t_N} \tag{4.12}$$

si  $\delta x(t_0) = 0$  entonces  $\delta S_{clas} = p \delta x$  y por lo tanto:

$$p = \frac{\partial S_{clas}}{\partial \overline{x}} \tag{4.13}$$

Por otro lado de (4.1) y (4.2) podemos decir que:

$$\frac{dS_{clas}}{dt} = L\left[\overline{x}(t), \dot{\overline{x}}, t\right] \tag{4.14}$$

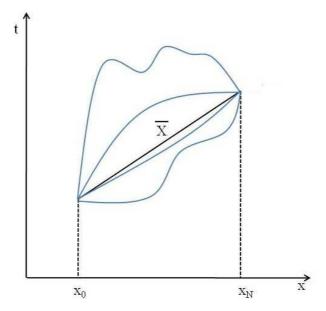


Figura 4.1: Diagrama que muestra el camino clásico y otros caminos que contribuyen a la descripción de la mecánicua cuántica.

y la derivada total es: tomando  $S_{clas} = S_{clas}(\overline{x}, t)$ 

$$\frac{dS_{clas}}{dt} = \frac{\partial S_{clas}}{\partial t} + \frac{\partial S_{clas}}{\partial \overline{x}} \dot{\overline{x}}$$
 (4.15)

entonces:

$$\frac{\partial S_{clas}}{\partial t} = L - p\dot{\bar{x}} = -E \tag{4.16}$$

es decir:

$$E = -\frac{\partial S_{clas}}{\partial t} \tag{4.17}$$

En mecánica cuántica no solo la trayectoria con la mínima acción contribuye a la amplitud de probabilidad  $K(x_N, x_0)$  (Fig.4.1), con la que una partícula se propaga del punto  $x_0$  al punto  $x_N$ , sino que también contribuyen todas las otras trayectorias que unen a dichos puntos. Esto nos lleva a los siguientes postulados:

- 1. Todos los caminos posibles contribuyen de igual manera; pero caminos diferentes contribuyen con fases diferentes.
- 2. La fase de la contribución de un camino dado esta determinado por la acción S a lo largo del camino (medido en  $\hbar$ ).

La probabilidad de aproximarnos a un punto  $x_N$  al tiempo  $t_N$  desde un punto  $x_0$  al tiempo  $t_0$  esta definido como  $P(x_N, x_0) = |K(x_N, x_0)|^2$ . Además la amplitud esta dada por la suma de las contribuciones  $\phi_\ell$  de todos los caminos que unen a los puntos  $x_N$  y  $x_0$ , es decir

$$K(x_N, x_0) = \sum_{\ell} \phi_{\ell}[x_N, x_0]$$
 (4.18)

donde

$$\phi_{\ell}[x_N, x_0] = C \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_{\ell}[x_N, x_0]\right\}$$
(4.19)

donde C es una constante de normalización que se tiene que determinar sabiendo, gracias al postulado (1), que C es la misma para todos los caminos, ya que todos tienen el mismo peso. Por otro lado para aclarar la importancia del *camino especial* en el límite clásico notemos que:

- El límite clásico significa  $S \gg \hbar$ , por lo tanto para el camino clásico  $\overline{x}(t) = \phi_{clas}$  tenemos que la relación  $S/\hbar \gg 1$
- $\phi_{clas}$  es aquel en el cual (4.19) se vuelve estacionaria, lo cual implica que caminos que sean vecinos en una  $\epsilon$ -vecindad, tendrán la misma fase, a primer orden.

Comparado con el camino clásico, todos los otros caminos llevan a fases que oscilan fuertemente, así las contribuciones correspondientes en (4.18) interfieren destructivamente y se cancelan unas con otras. Por lo tanto la amplitud (4.18) esencialmente se reduce a:

$$K(x_N, x_0) \approx f(x_N, x_0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{clas}\right),$$
 (4.20)

donde  $f(x_N, x_0)$  surge de la aproximación de tomar caminos en la vecindad del camino clásico, de manera que la fase se factoriza y nos queda una cantidad parametrizada en términos de los extremos fijos  $x_0$  y  $x_N$ . Ahora discutiremos con mayor detalle la suma contenida en la ecuación (4.18) apoyandonos con la analogía de la definición Riemanniana de integral. Para esto discretizamos el intervalo de tiempo  $\tau = t_N - t_0$  en N intervalos iguales de longitud  $\epsilon$ :

$$N\epsilon = t_N - t_0 \quad , \quad t_N > t_0,$$
  
 $\epsilon = t_{i+1} - t_i \quad , \quad i = 0, ..., N - 1,$  (4.21)

Ahora construiremos cierto camino escogiendo los puntos especiales  $x_i$  para todos los tiempos intermedios  $t_i$  y conectando estos puntos con líneas rectas, como se muestra en la Fig. 4.2. Eventualmente podemos hacer  $\epsilon \to 0$ , es decir reducir el intervalo de tiempo entre los puntos intermedios, para recuperar el camino original.

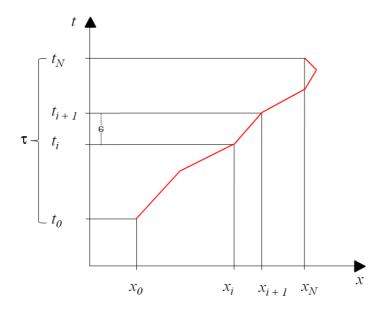


Figura 4.2: Diagrama que muestra la discretización del camino utilizado para integrar en la ecuación (4.22)

Es así como podemos definir la suma sobre todos los caminos como una integral múltiple sobre todos los valores de  $x_i$  ( $i = 1, ..., N - 1; x_0, x_N$  fijos):

$$K(x_N, x_0) \approx \int dx_1 ... dx_{N-1} \phi[x(t)]$$
 (4.22)

Ahora definiremos las suma implicada en (4.18) mas detalladamente. En la integral de Riemann el intervalo  $\epsilon$  puede ser cada vez más pequeño. Para garantizar la convergencia ante esta situación, se tiene que introducir un factor de normalización  $A(\epsilon)$  por cada integral sobre  $x_i$  (porque hay una infinidad de opciones donde localizar cada uno de dichos puntos internos) y un factor de normalización extra, porque cuando  $N \to \infty$  habrá una infinidad de integrales anidadas. Así la suma nos lleva a la integral de camino\*:

$$K(x_N, x_0) = \lim_{\epsilon \to 0, N \to \infty} \frac{1}{A} \int \frac{dx_1}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_N, x_0]\right\}$$
(4.23)

$$K(x_N, x_0; \tau) = \int_{x(0)=x_0}^{x(\tau)=x_N} [Dx] e^{iS(x)/\hbar},$$

donde

$$[Dx] \equiv \frac{1}{A} \prod_{i} \frac{dx_i}{A}$$

es la medida fucional.

<sup>\*</sup>En algunas referencias la expresión de la integral de camino para un propagador cuántico se muestra de la siguiente manera

donde

$$S[x_N, x_0] = \int_{t_0}^{t_N} \left[ \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) - V(x(t)) \right] dt.$$
 (4.24)

Considerando la discretización en el tiempo antes mencionada, tendremos el propagador de Feynman en la ecuación (4.23) como:

$$K(x_{N}, x_{0}; \tau) = \lim_{N \to \infty, \epsilon \to 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \int \prod_{j=1}^{N-1} \left( \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} dx_{j} \right)$$

$$\times \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{k=1}^{N} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{k} - x_{k-1}}{\epsilon} \right)^{2} -V \left( \frac{x_{k} + x_{k-1}}{2} \right) \right] \right\}$$

$$(4.25)$$

donde  $N\epsilon = \tau$  y  $A(\epsilon) = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}$ 

Con esta prescripción, el panorama es el siguiente: sumar sobre todas las funciones x significa sumar sobre todos los polinomios en el plano (t, x(t)), empezando en  $(x_0, t_0)$  y terminando en  $(x_N, t_N)$ , los cuales dan paso a las integraciones sobre las variables  $x_j \equiv x(t_j)$  desde  $-\infty$  hasta  $\infty$ , donde  $t_j = t_0 + j\varepsilon$ , con j = 1, 2, ..., N - 1. Entonces, evaluar la integral de camino significa calcular un número infinito de integrales ordinarias, las cuales requieren un tipo de relación de recurrencia. Cuando los potenciales electromagnéticos estan ausentes, es inecesario adoptar la regla del punto medio para el potencia V(x) como esta expresado en la ecuación (4.25), asi otras opciones pueden ser elegidas. En lugar de usar la regla del punto medio, escribiremos la versión discretizada de la acción como:

$$S \cong \sum_{j=1}^{N} \frac{m(x_j - x_{j-1})^2}{2\tau_j} - \tau_j \frac{1}{2} \left( V(x_j) + V(x_{j-1}) \right)$$
(4.26)

donde se toma  $\tau_j$  como el j-ésimo intervalo de tiempo tal que  $\tau = \sum_{j=1}^N \tau_j$ . Después escribimos el propagador de Feynamn en la forma:

$$K(x_N, x_0; \tau) = \lim_{N \to \infty} \int \prod_{j=1}^{N} K(x_j, x_{j-1}; \tau_j) \prod_{k=1}^{N-1} dx_K$$
 (4.27)

donde el propagador para un intervalo de tiempo infinitesimal está dado por:

$$K(x_j, x_{j-1}; \tau_j) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau_j}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(x_j - x_{j-1})^2}{2\tau_j} - \tau_j \frac{1}{2} \left(V(x_j) + V(x_{j-1})\right)\right]\right\}$$

$$(4.28)$$

### 4.1. Método de Integral de Camino Aplicado al Oscilador Armónico

Tenemos que la Lagrangiana para el oscilador armónico es:

$$L(x,\dot{x}) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{4.29}$$

De acuerdo con la ecuación anterior el propagador infinitesimal toma la forma:

$$K(x_{j}, x_{j-1}; \tau_{j}) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \tau_{j}}} \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(x_{j} - x_{j-1})^{2}}{2\tau_{j}}\right] - \tau_{j} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}m\omega^{2}x_{j}^{2} + \frac{1}{2}m\omega^{2}x_{j-1}^{2}\right)\right]\right\}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \tau_{j}}} \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(x_{j}^{2} + x_{j-1}^{2} - 2x_{j}x_{j-1})}{2\tau_{j}}\right] - \tau_{j} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}m\omega^{2}x_{j}^{2} + \frac{1}{2}m\omega^{2}x_{j-1}^{2}\right)\right]\right\}$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar}} \sqrt{\frac{1}{\omega \tau_{j}}} \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\omega \tau_{j}} \left[x_{j}^{2} + x_{j-1}^{2} - 2x_{j}x_{j-1}\right] - \frac{\tau_{j}^{2}\omega^{2}}{2} \left(x_{j}^{2} + x_{j-1}^{2}\right)\right]\right\}$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar}} \sqrt{\frac{1}{\omega \tau_{j}}} \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\omega \tau_{j}} \left[\left(1 - \frac{\omega^{2}\tau^{2}}{2}\right) \left(x_{j}^{2} - x_{j-1}^{2}\right) - 2x_{j}x_{j-1}\right]$$

$$-2x_{j}x_{j-1}\right]$$

$$(4.30)$$

Para calcular el propagador infinitesimal definimos las nuevas variables  $\phi_j$  tal que:

$$\sin \phi_i = \omega \tau_i \tag{4.31}$$

lo cual implica que  $\phi_j\cong\omega\tau_j$  y  $\cos\phi\cong 1-\omega^2\tau_j^2/2$  introduciendo la función F:

$$F(\eta, \eta'; \phi) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar}} \sqrt{\frac{1}{\sin \phi}} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\sin \phi} \times \left(\cos \phi (\eta^2 + \eta'^2) - 2\eta \eta'\right)\right]$$

$$(4.32)$$

Usando esta función podemos escribir el propagador como:

$$K(x_N, x_0; \tau) = \lim_{N \to \infty} \int \prod_{j=1}^{N} F(x_j, x_{j-1}; \phi_j) \prod_{k=1}^{N-1} dx_k$$
 (4.33)

La función F tiene la siguiente propiedad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(\eta'', \eta; \phi'') F(\eta, \eta'; \phi') d\eta = F(\eta'', \eta'; \phi'' + \phi')$$

$$\tag{4.34}$$

Usando la propiedad (4.34) y la ecuación (4.32) tenemos:

$$F(\eta'', \eta'; \phi'' + \phi') = \frac{m\omega}{2\pi i\hbar} \sqrt{\frac{1}{\sin \phi'' \sin \phi'}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\sin \phi''} \times \left(\cos \phi'' (\eta''^2 + \eta'^2) - 2\eta \eta'\right)\right] \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\sin \phi'} \times \left(\cos \phi'' (\eta^2 + \eta'^2) - 2\eta \eta'\right)\right] d\eta$$

$$= \frac{m\omega}{2\pi i\hbar} \sqrt{\frac{1}{\sin \phi'' \sin \phi'}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\sin \phi''} \eta''^2 + \frac{\cos \phi'}{\sin \phi''} \eta'^2\right) + \left(\frac{\cos \phi''}{\sin \phi''} + \frac{\cos \phi'}{\sin \phi'}\right) \eta^2$$

$$-2\eta \left(\frac{\eta''}{\sin \phi''} + \frac{\eta'}{\sin \phi'}\right)\right] d\eta$$

$$= \frac{m\omega}{2\pi i\hbar} \sqrt{\frac{1}{\sin \phi'' \sin \phi'}} \times \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\sin \phi''} \eta''^2 + \frac{\cos \phi'}{\sin \phi'} \eta'^2\right)\right]$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\sin \phi''} + \frac{\cos \phi'}{\sin \phi'}\right) \eta^2$$

$$-2\eta \left(\frac{\eta''}{\sin \phi''} + \frac{\eta'}{\sin \phi'}\right)\right] d\eta$$

$$= \frac{m\omega}{2\pi i\hbar} \sqrt{\frac{1}{\sin \phi'' \sin \phi'}}$$

$$\times \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\sin \phi''} + \frac{\cos \phi'}{\sin \phi'} \eta'^2\right)\right]$$

$$\times \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\sin \phi''} + \frac{\cos \phi'}{\sin \phi'} \eta'^2\right)\right]$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\sin \phi''} + \frac{\cos \phi'}{\sin \phi'} \eta'^2\right)\right]$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im\omega\alpha}{2\hbar} \left(\eta^2 - \frac{2\eta\beta}{\alpha}\right)\right] d\eta \qquad (4.35)$$

Donde se definió:

$$\alpha = \frac{\sin(\phi'' + \phi')}{\sin \phi'' \sin \phi'} \quad , \quad \beta = \frac{\eta'' \sin \phi' + \eta' \sin \phi''}{\sin \phi'' \sin \phi'}$$
 (4.36)

Completando el cuadrado del exponencial que esta dentro de la integral en la ecuación (4.35)

$$\left(\eta - \frac{\beta}{\alpha}\right)^2 = \eta^2 - 2\eta \frac{\beta}{\alpha} + \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^2 \tag{4.37}$$

para poder escribir de esta manera el exponencial basta agregar el término de  $-(\beta/\alpha)^2$ , así:

$$F(\eta'', \eta'; \phi'' + \phi') = \frac{m\omega}{2\pi i\hbar} \sqrt{\frac{1}{\sin \phi'' \sin \phi'}}$$

$$\times \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\sin \phi''} \eta''^2 + \frac{\cos \phi'}{\sin \phi'} \eta'^2 - \frac{\beta^2}{\alpha}\right)\right] \times \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left[-\frac{m\omega\alpha}{2i\hbar} \left(\eta - \frac{\beta}{\alpha}\right)^2\right]$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\alpha}} \sqrt{\frac{1}{\sin \phi'' \sin \phi'}}$$

$$\times \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\sin \phi''} \eta''^2 + \frac{\cos \phi'}{\sin \phi'} \eta'^2 - \frac{\beta^2}{\alpha}\right)\right]$$

$$(4.38)$$

Usando las definiciones de  $\alpha$  y  $\beta$  tenemos:

$$F(\eta'', \eta'; \phi'' + \phi') = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar}} \sqrt{\frac{1}{\sin(\phi'' + \phi')}}$$

$$\times \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\sin(\phi'' + \phi')} \left(\sin(\phi'' + \phi') \frac{\cos\phi''}{\sin\phi''} \eta''^2\right) + \sin(\phi'' + \phi') \frac{\cos\phi'}{\sin\phi'} \eta'^2$$

$$-\frac{(\eta'' \sin\phi' + \eta' \sin\phi'')^2}{\sin\phi'' \sin\phi'}\right)$$

$$(4.39)$$

Usando las identidades:

$$\sin(u+v) = \sin u \cos v + \cos u \sin v$$

$$\cos(u+v) = \cos u \cos v - \sin u \sin v$$

$$\sin^2 u = 1 - \cos^2 u$$

y definiendo:

$$A = \sin(\phi'' + \phi') \frac{\cos \phi''}{\sin \phi''} \eta''^2 + \sin(\phi'' + \phi') \frac{\cos \phi'}{\sin \phi'} \eta'^2$$
$$-\frac{(\eta'' \sin \phi' + \eta' \sin \phi'')^2}{\sin \phi'' \sin \phi'}$$
(4.40)

tenemos que:

$$A = \cos \phi'' \cos \phi' \left( \eta''^2 + \eta'^2 \right) + \frac{\sin \phi' \cos^2 \phi''}{\sin \phi''} \eta''^2 + \frac{\sin \phi'' \cos^2 \phi'}{\sin \phi'} \eta'^2 - \frac{\sin \phi'}{\sin \phi'} \eta''^2 - \frac{\sin \phi''}{\sin \phi'} \eta'^2 - 2\eta'' \eta' = \frac{\sin \phi' (\cos^2 \phi'' - 1)}{\sin \phi''} \eta''^2 + \frac{\sin \phi'' (\cos^2 \phi' - 1)}{\sin \phi'} \eta'^2 \cos \phi'' \cos \phi' \left( \eta''^2 + \eta'^2 \right) - 2\eta' \eta'' = \cos \phi'' \cos \phi' \left( \eta''^2 + \eta'^2 \right) - \sin \phi'' \sin \phi' \left( \eta''^2 + \eta'^2 \right) - 2\eta' \eta'' = \cos(\phi'' + \phi') (\eta''^2 + \eta'^2) - 2\eta' \eta''$$

$$(4.41)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (4.39) tenemos:

$$F(\eta'', \eta'; \phi'' + \phi') = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar}} \sqrt{\frac{1}{\sin(\phi'' + \phi')}} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\sin(\phi'' + \phi')}\right] \times \left(\cos(\phi'' + \phi')(\eta''^2 + \eta'^2) - 2\eta'\eta''\right)$$

$$(4.42)$$

Definiendo ahora  $x^{\prime\prime}=x_N, x^\prime=x_0$ , y usando el hecho de que

$$\lim_{N \to \infty} \sum_{j=1}^{N} \phi_j = \omega \tau$$

y el resultado obtenido en la ecuación (4.33) obtenemos finalmente el propagador deseado:

$$K(x'', x'; \tau) = F(x'', x'; \omega \tau)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega \tau}} \exp \left[ \frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega \tau} \left( \cos \omega \tau (x''^2 + x'^2) - 2x'' x' \right) \right]$$
(4.43)

Este resultado es el mismo que se obtuvo en las secciones anteriores para el oscilador armónico.

## Capítulo 5

# |Aplicaciones|

n esta sección se mostrarán algunos ejemplos en donde el propagador de Feynman del oscilador armónico es aplicado para obtener otras cantidades relevantes, tales como los estados estacionarios y sus niveles de energía correspondientes, la función de partición para el oscilador armónico cuántico, y el propagador de Feynman para un potencial lineal. Además se expondrá un análisis para el potencial del oscilador armónico con un término cuártico, usando dos de los métodos con los que obtuvimos el propagador para el oscilador armónico, esto con el objetivo de observar casos en donde los métodos utilizados en este trabajo no son los adecuados.

## 5.1. Eigenfunciones y Eigenvalores

Para obtener la energía de los eigenestados y los eigenvalores, necesitamos reescribir el propagador en una forma que permita una directa comparación con la representación espectral para el propagador de Feynman dada por:

$$K(x'', x'; \tau) = \Theta(\tau) \sum_{n} \phi_n(x) \phi_n^*(x') e^{-iE_n \tau/\hbar}$$
(5.1)

Definiendo la variable  $z=\mathrm{e}^{-i\omega\tau}$  podemos escribir:

$$\sin(\omega\tau) = \frac{e^{i\omega\tau} - e^{-i\omega\tau}}{2i} = \frac{1}{2i} \frac{1 - z^2}{z}$$
 (5.2)

$$\cos(\omega\tau) = \frac{e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau}}{2} = \frac{1}{2} \frac{1+z^2}{z}$$
 (5.3)

Además definimos las variables  $\xi' = \sqrt{m\omega/\hbar}x'$  y  $\xi'' = \sqrt{m\omega/\hbar}x''$ , así la expresión para el propagador de Feynman del oscilador armónico queda:

$$K(x'', x'; \tau) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega \tau}} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega \tau} (\cos \omega \tau (x''^2 + x'^2) - 2x''x')\right]$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega z}{\pi\hbar}} (1 - z^2)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar} \frac{1}{1 - z^2} (\frac{1 + z^2}{2} (x''^2 + x'^2) - 2x''x'z)\right]$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega z}{\pi\hbar}} (1 - z^2)^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{1}{1 - z^2} [2\xi'\xi''z - (\xi'^2 + \xi''^2)(\frac{1 + z^2}{2})]\right\}$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega z}{\pi\hbar}} (1 - z^2)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{2\xi'\xi''z}{1 - z^2} - (\xi'^2 + \xi''^2)(\frac{1 + z^2}{2(1 - z^2)})\right]$$
 (5.4)

usando indentidad:

$$\frac{1+z^2}{2(1-z^2)} = \frac{1}{2} + \frac{z^2}{1-z^2} \tag{5.5}$$

tenemos que:

$$K(x'', x'; \tau) = \sqrt{\frac{m\omega z}{\pi\hbar}} (1 - z^2)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{2\xi'\xi''z}{1 - z^2} - (\xi'^2 + \xi''^2)(\frac{1}{2} + \frac{z^2}{1 - z^2})\right]$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega z}{\pi\hbar}} (1 - z^2)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{2\xi'\xi''z - (\xi'^2 + \xi''^2)z^2}{1 - z^2} - \frac{1}{2}(\xi'^2 + \xi''^2)\right]$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega z}{\pi\hbar}} (1 - z^2)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\xi'^2 + \xi''^2)\right] \exp\left[\frac{2\xi'\xi''z - (\xi'^2 + \xi''^2)z^2}{1 - z^2}\right]$$
(5.6)

Considerando la fórmula de Mehler [1]

$$(1-z)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{2xyz - (x^2 + y^2)z^2}{1-z^2}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)H_n(y)\frac{z^n}{2^n n!}$$
(5.7)

donde  $H_n(x)$  son los polinomios de Hermite, estan definidos como:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2}$$
(5.8)

Comparando cada término con la ecuación anterior tenemos:

$$K(x'', x'; \tau) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} (x''^2 + x'^2)\right]$$

$$\times \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x'') H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x') \frac{e^{-i\omega\tau(n+\frac{1}{2})}}{2^n n!}$$
(5.9)

donde tenemos  $x=\xi''=\sqrt{m\omega/\hbar}x''$  y  $y=\xi'=\sqrt{m\omega/\hbar}x'$ . Comparando la ecuación anterior con la representación espectral tenemos la eigenfunción de la energía y los niveles de la energía:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{m\omega}{\pi \hbar} \right) \exp\left( -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) H_n\left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)$$
 (5.10)

У

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega. \tag{5.11}$$

## 5.2. Función de Partición

Para calcular la función de partición asociada al modelo de oscilador armónico, partimos de la expresión general dada por

$$Z(\beta) = Tre^{-\beta \hat{H}}, \tag{5.12}$$

donde la operación de la traza puede ser tomada sobre una base discreta, sobre las eigenfunciones del mismo Hamiltoniano, o sobre el conjunto continuo de eigenestados del operador de posición (denotado por  $|x\rangle$ ):

$$Z(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x \mid e^{\beta \hat{H}} \mid x \rangle.$$
 (5.13)

Si x'' = x' = x y  $\beta = i\tau/\hbar$ , podemos identificar este integrando como el propagador de Feynman en la representación de configuración que ya hemos obtenido con tres diferentes métodos, de manera que

$$Z(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} dx K(x, x; -i\hbar\beta). \tag{5.14}$$

Entonces, de la expresión para el propagador del oscilador armónico que ya encontramos con tres métodos, tenemos:

$$K(x, x; -i\hbar\beta) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(-\omega i\hbar\beta)}}$$

$$\times \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin(-\omega i\hbar\beta)} \left(\cos(-\omega i\hbar\beta)(2x^2) - 2x^2\right)\right]$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sinh(\omega\hbar\beta)}}$$

$$\times \exp\left[-\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sinh\omega\beta\hbar} (\cosh\omega\beta\hbar - 1)x^2\right]$$
(5.15)

Donde se hizo uso de  $\sin(-i\alpha) = -i\sinh\alpha$  y  $\cosh(i\alpha) = \cosh(\alpha)$ . Sustituyendo la ecuación (5.15) en la ecuación (5.14) y usando  $\cosh(\alpha) - 1 = 2\sinh^2(\alpha/2)$  y  $\sinh(\alpha) = 2\sinh(\alpha/2)\cosh(\alpha/2)$ , tenemos:

$$Z(\beta) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\omega\beta\hbar)}}$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{m\omega x^{2}}{\hbar}\tanh\left(\frac{\omega\beta\hbar}{2}\right)\right] dx$$

$$= \frac{1}{2\sinh(\frac{1}{2}\omega\beta\hbar)}$$
(5.16)

Esta ecuación es la función de partición para el oscilador armónico unidimensional, que es punto de partida de cualquier análisis que requiera de un modelo de oscilador armónico, en un contexto estadístico.

# 5.3. Propagador de oscilador armónico con términos nuevos en el potencial

### 5.3.1. Término lineal

Debido a que en la naturaleza hay fenómenos en los que se involucran movimientos en campos eléctricos y gravitacionales uniformes, el estudio de potenciales lineales y por lo tanto el propagador de Feynman para estos, toman gran importancia en la Física. Existen diferentes maneras de obtener este propagador, y en este caso usaremos el resultado obtenido en las secciones anteriores, partiendo análogamente de la idea de correspondencia entre un oscilador armónico perturbado por un potencial lineal y un oscilador con la misma frecuencia pero con energía y coordenadas originales modificadas. En física clásica esto se puede demostrar partiendo de la Lagrangiana de un oscilador armónico:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{z}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 \tag{5.17}$$

donde  $\omega$  es la frecuencia del oscilador. Introduciendo una perturbación lineal en la ecuación (5.17) tenemos:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{z}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 - mgz \tag{5.18}$$

Ahora haciendo el cambio de variable  $z'=z+g/\omega^2$  entonces:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{z'}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 z'^2 + \frac{1}{2}\frac{mg^2}{\omega^2}$$
 (5.19)

que es la Lagrangiana para el oscilador armónico cuyas coordenadas y energía iniciales estan desplazadas por  $\Delta z = g/\omega^2$  y  $\Delta E = \frac{1}{2}mg^2/\omega^2$ . Siguiendo esta misma idea podemos escribir el propagador de Feynman para un oscilador armónico agregandole un potencial lineal. La ecuación (4.43), se puede escribir de la siguiente manera:

$$K(x'', x'; \tau) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega \tau}} \times \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\cot \omega \tau (x''^2 + x'^2) - 2x''x' \csc \omega \tau\right)\right]$$
(5.20)

Agregando el potencial lineal tenemos:

$$K^{OA+LIN}(x'', x'; \tau) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega \tau}} \exp \frac{im}{2\hbar} \left[ \frac{g^2}{\omega^2} \tau + \omega \left( \cot \omega \tau (x''^2 + x'^2) - 2x'' x' \csc \omega \tau \right) \right]$$
(5.21)

Tomando el límite  $\omega \to 0$  en la ecuación (5.21), obtenemos el propagador para el potencial lineal, el cual puede ser derivado haciendo uso de los desarrollos:

$$x \cot x = 1 - \frac{1}{3}x^2 - \frac{1}{45}x^4 + \dots$$

$$x \csc x = 1 + \frac{1}{6}x^2 + \frac{7}{360}x^4 + \dots$$

$$K^{OA+LIN} \approx \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \tau}} \exp\left(i\frac{mg^2}{2\omega^2}\tau\right)$$

$$\times \exp i\left[\frac{m}{2\tau}\left((x'' - x')^2 + \frac{2g}{\omega^2}(x'' + x')\right)\right]$$

$$\times \left(1 - \frac{1}{3}\omega^2\tau^2 - 1 - \frac{1}{6}\omega^2\tau^2\right)$$

$$+ \frac{2g^2}{\omega^4}\left(1 - \frac{1}{3}\omega^2\tau^2 - \frac{1}{45}\omega^4\tau^4 - 1\right)$$

$$- \frac{1}{6}\omega^2\tau^2 - \frac{7}{360}\omega^4\tau^4\right)$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \tau}} \exp i \left[ \frac{m}{2} \frac{(x'' - x')^2}{\tau^2} - \frac{mg}{2} (x'' + x')\tau - \frac{mg^2}{24} \tau^3 \right] + O(\omega^2)$$
(5.22)

Esta última ecuación es la expresión para el propagador de Feynman de un potencial lineal.

## 5.3.2. Término cuártico

Con el objetivo de obtener el propagador para el potencial del oscilador armónico con un término cuártico se utilizaron el método de Schwinger y el método algebraico. El Hamiltoniano correspondiente a este potencial es:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \alpha' \hat{X}^2 + \beta' \hat{X}^4 \tag{5.23}$$

En el método de Schwinger, cuando resolvimos las ecuaciones de Heisenberg, concluimos que para el operador  $\hat{X}$ , la ecuación es la misma que se obtuvo para el caso del oscilador armónico (2.27), pero para el operador  $\hat{P}$ , la ecuación que se tiene que resolver es de la siguiente forma:

$$\frac{d^2\hat{X}}{d\tau^2} + 2\beta'\hat{X} + \alpha'\hat{X}^3 = 0 ag{5.24}$$

identificamos a esta expresión como la ecuación de Painlevé. A diferencia de lo que ocurrió en el Capítulo 2 para el oscilador armónico, en este caso habría que utilizar otros métodos de resolución de las ecuaciones diferenciales de Painlevé resultantes. Para el método algebraico usamos el resultado obtenido en el caso del oscilador armónico, cuando aplicamos la formula de Baker-Campbell- Haussdorf. Esto nos lleva a la primera versión del operador de evolución temporal para el potencial con el término cuártico:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau} = e^{-\hbar\sqrt{\frac{\alpha'}{2m}}}e^{-(\eta\hat{X}^2 + \mu\hat{X}^4)} \exp\left\{-\frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\sqrt{\frac{2\alpha'}{m}}\hat{P}\hat{X}\right] - \left(\frac{i\beta'}{\hbar}\tau - i\mu\tau\sqrt{\frac{32\alpha'}{m}}\right)\hat{X}^4 + \frac{8i\hbar\mu^2}{m}\tau\hat{X}^6\right\}$$

$$\times e^{(\eta\hat{X}^2 + \mu\hat{X}^4)}$$
(5.25)

donde  $\eta$  y  $\mu$  son constantes del operador que se escogió como A'. Definiendo:

$$\eta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m\alpha'}{2}} \tag{5.26}$$

Observemos que los primeros dos términos del exponencial grande en la ecuación 5.25 y 3.16 tienen el mismo orden, que es lo que esperabamos debido a la forma del Hamiltoniano. Los términos extra son consecuencia de los proporcionales a  $\hat{X}^4$ . Al usar de nuevo la fórmula de Baker-Campell-Haussdorf, esta vez para eliminar  $\hat{P}^2$  se escogieron lo operadores siguientes:

$$B'' = \frac{\hat{P}^2}{2m} + i\sqrt{\frac{\alpha'}{2m}}(i\hbar + 2\hat{P}\hat{X}) + \frac{2\mu}{m}\tau(3i\hbar\hat{X}^2 + 2\hat{P}\hat{X}^3) + (i\mu\tau\sqrt{\frac{32\alpha'}{m}} - \beta')\hat{X}^4 + \frac{8i\hbar\mu^2}{m}\tau\hat{X}^6$$

$$A'' = \xi\hat{P}^2$$
(5.27)

donde  $\xi$  es una constante arbitraria. Con esto encontramos que la serie del operador C', se corta hasta el sexto conmutador:

$$[A'', [A'', [A'', [A'', [A'', [A'', B'']]]]] = 184320 \frac{\hbar^7 \xi^4 \mu}{m} \tau (i\hat{P}^6 + \hbar \hat{P}^3)$$
 (5.29)

Sin embargo al llegar a este punto se puede notar que las potencias para operadores  $\hat{X}$  y  $\hat{P}$  dentro de los conmutadores, aumentan cada vez mas, dificultando la simplificación que se requiere, para continuar aplicando el método.

ebido a que el propagador de Feynman (K) es una cantidad compleja, es necesario analizar por separado su parte real  $(\text{Re}\{K\})$  y su parte imaginaria  $(\text{Im}\{K\})$ . Para que esto sea posible, debemos conocer la forma explícita de ambas partes, es decir, reescribir la expresión del propagador en la forma f(z) = Re[f(z)] + iIm[f(z)].[7]

Haciendo  $m=1,\ \omega=1,\ \hbar=1$  y x'=x"=x en la expresión que hemos obtenido por diferentes métodos para el propagador de Feynman (4.43) podemos simplificar dicha expresión, como:

$$K(x,t) = \sqrt{-\frac{i}{2\pi\sin(t)}} \exp\left[\frac{ix^2(\cos(t) - 1)}{\sin(t)}\right]$$
(6.1)

Tomando en cuenta que los valores que puede tomar la función sin(t) incluyen cantidades negativas, introducimos la definición:

$$\operatorname{sgn}(\sin(t)) \equiv \frac{\sin(t)}{|\sin(t)|} \tag{6.2}$$

con la finalidad de expresar la parte real y la parte imaginaria del propagador, de tal manera que el rango de las variables sea infinito. Con esto podemos escribir la parte real del propagador como:

$$\operatorname{Re}\{K\} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{\sin^2(t)}\right)^{1/4} \left[\cos\left(\frac{x^2(\cos(t)-1)}{\sin(t)}\right) + \operatorname{sgn}(\sin(t))\sin\left(\frac{x^2(\cos(t)-1)}{\sin(t)}\right)\right]$$
(6.3)

y la parte imaginaria:

$$\operatorname{Im}\{K\} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{\sin^2(t)}\right)^{1/4} \left[ \operatorname{sgn}(\sin(t)) \cos\left(\frac{x^2(\cos(t)-1)}{\sin(t)}\right) - \sin\left(\frac{x^2(\cos(t)-1)}{\sin(t)}\right) \right]. \tag{6.4}$$

En la Fig. 6.1, se muestran tres gráficas\*. La gráfica superior muestra  $Re\{K\}$ , contra el tiempo y el desplazamiento. En la parte inferior la gráfica de la izquierda muestra  $Re\{K\}$  contra t para valores de x fijos y la de la derecha muestra  $Re\{K\}$  contra x para valores de t fijos.

<sup>\*</sup>Las gráficas elaboradas en este capítulo se generaron utilizando Maple 9.5 [7]

Podemos observar que en t=0, para toda x, el valor de  $Re\{K\}$  tiende al infinito, mostrando el comportamiento de la Delta que se impone en el límite  $t\to 0$ . Además para x (t) cada vez mayores las amplitudes de las oscilaciones aumentan (disminuyen) y las frecuencias aumentan (aumentan).

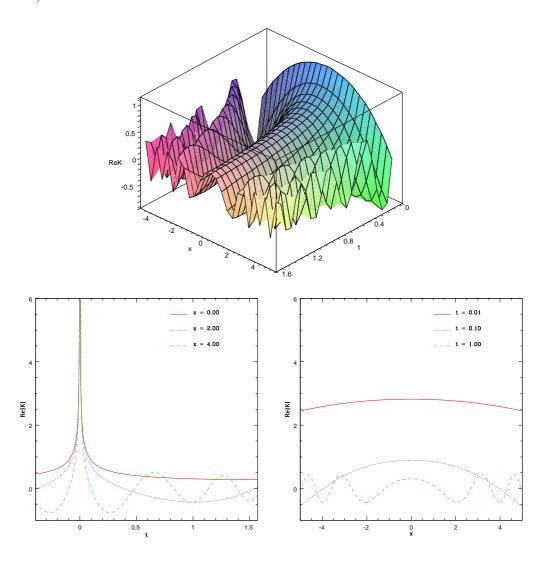


Figura 6.1: La gráfica superior muestra  $Re\{K\}$ , contra el tiempo y el desplazamiento. En la parte inferior la gráfica de la izquierda muestra  $Re\{K\}$  contra t para valores de x fijos y la de la derecha muestra  $Re\{K\}$  contra x para valores de t fijos.

El comportamiento de la parte imaginaria para ambos casos (x o t constantes) es similar al de la parte real, como se puede apreciar en la Fig. 6.2.

Hasta aquí hemos analizado el propagador considerando  $m=1,\,\omega=1,\,\hbar=1$  y x'=x"=x en la expresión (4.43). Ahora tomamos casos donde  $m\neq 1$ , para estudiar la parte real del

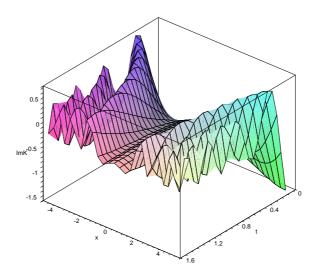
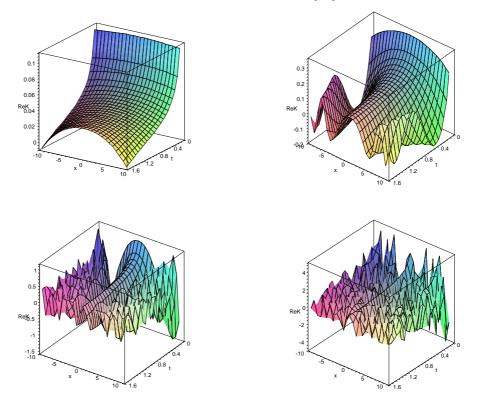


Figura 6.2: Esta gráfica muestra  $Im\{K\}$ , contra el tiempo y el desplazamiento.

propagador

$$K(x,t) = \sqrt{-\frac{im}{2\pi\sin(t)}} \exp\left[\frac{imx^2(\cos(t) - 1)}{\sin(t)}\right]. \tag{6.5}$$

Como se puede observar en las siguientes gráficas de  $\text{Re}\{K\}$  para m=0.01,0.1,1,10,



para masas cada vez mayores, las oscilaciones en el propagador son cada vez mas fuertes. También

en ellas vemos que se conserva el comportamiento para  $t \to 0$ . El comportamiento de la parte imaginaria del propagador es similar a lo que se muestra en las figuras anteriores. Para apreciar el efecto de disminuir o aumentar la masa m en el propagador de Feynman, vemos en la Fig. 6.3 que para valores de m cada vez mayores las amplitudes y las frecuencias de las oscilaciones aumentan.

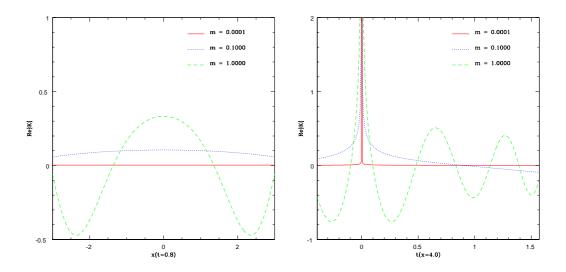


Figura 6.3: En la gráfica de la izquierda se muestra, para distintos valores de m, Re $\{K\}$  contra x, para t constante y en la derecha se muestra la dependencia en t, para x constante.

En síntesis, vemos que el comportamiento del propagador es como lo esperábamos en función de las condiciones iniciales o de frontera que implementamos durante su construcción, para realizar la descripción consistente del oscilador armónico cuántico no relativista.

Finalmente es importante mencionar lo siguiente: En el transcurso de este trabajo, implementamos tres métodos diferentes y logramos obtener el propagador de Feynman para el oscilador armónico. El haber escogido el oscilador armónico nos permite mostrar todos los detalles detrás de los diferentes métodos y hacerlo de manera que los lectores puedan familiarizarse con ellos usando un modelo básico, tal como lo es el oscilador armónico. Si bien en cierto que los métodos se aplicaron a este ejemplo básico, también es cierto que el método de Schwinger y el de Integral de Camino, son imprescindibles, ya que permiten construir los propagadores de partículas en presencia de campos externos y otras condiciones que hacen imposible su obtención con otros métodos, en investigaciones actuales y de frontera. Lo anterior, hace de este trabajo, un estudio didáctico que busca acercar a los lectores hacia métodos de investigación de frontera con un ejemplo que bien puede implementarse en el nivel licenciatura.

# Apéndice A | Representaciones de la | Mecánica Cuántica

La mecánica cuántica puede ser representada de distintas maneras. Las representaciones más utilizadas son las representaciones de Schrödinger, Heisenberg y la de Interacción (o de Dirac). Estas representaciones están relacionadas a través de transformaciones unitarias de los estados y operadores  $(U^{\dagger} = U^{-1})$ , logrando que la probabilidad  $\langle \beta \mid \hat{O} \mid \alpha \rangle$  sea independiente de la representación.

En la representación de Heisenberg los operadores  $\hat{O}$  tienen dependencia temporal, mientras que los estados  $|\alpha\rangle$  permanecen constantes. La ecuación de movimiento correspondiente a esta representación es:

$$i\frac{\partial \hat{O}(t)}{\partial t} = [\hat{O}(t), \hat{H}]$$
 (A.1)

y sus soluciones son de la forma:

$$\hat{O}^{H}(t) = \exp[i\hat{H}t]\hat{O}(0)\exp[-i\hat{H}t] \tag{A.2}$$

que así mismo es la manera en la que se transforman operadores del esquema de Heisenberg al esquema de Schrödinger.

En la representación de Schrödinger la ecuación de movimiento es:

$$i\frac{\partial}{\partial t} \mid \alpha, t \rangle^S = \hat{H} e^{-i\hat{H}t} \mid \alpha \rangle^H = \hat{H} \mid \alpha, t \rangle^S$$
 (A.3)

La transformación de operadores de la representación de Schrödinger a la de Heisenberg esta dada por:

$$\hat{O}^S = \exp[-i\hat{H}t]\hat{O}(t)\exp[i\hat{H}t] \tag{A.4}$$

y la transformación correspondiente a los eigenvalores es:

$$|\alpha, t\rangle^S = \exp[-i\hat{H}t] |\alpha\rangle^H$$
 (A.5)

Haciendo uso de las transformaciones de operadores y estados podemos darnos cuenta que las representaciones son equivalentes ya que  $\langle \beta \mid \hat{O} \mid \alpha \rangle$  es invariante:

$$\langle \beta, t \mid \hat{O}^{S} \mid t, \alpha \rangle^{S} = \langle \beta \mid e^{i\hat{H}t} e^{-i\hat{H}t} \hat{O}(t) e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t} \mid \alpha \rangle^{H}$$

$$= \langle \beta \mid \hat{O}^{H} \mid \alpha \rangle^{H}$$
(A.6)

Además se preserva la transformación canónica:

$$[\hat{A}^S, \hat{B}^S]_{\pm} = \hat{C}^S$$
  
 $[\hat{A}^H, \hat{B}^H]_{+} = \hat{C}^H$  (A.7)

La representación de interacción es un esquema intermedio entre la representación de Schrödinger y la representación de Heisenberg. En comparación con las otras dos representaciones en las cuales los operadores o los estados tenian dependencia temporal, en la de intreacción ambos tienen una parte dependiente del tiempo.

Para cambiar a esta representación es necesario considerar al Hamiltoniano como una combinació en la cual una parte es el Hamiltoniano correspondiente al sistema libre mas la parte en la cual se incluye algún tipo de perturbación:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I \tag{A.8}$$

La transformación para operadores entre la representación de Schrödinger y la representación de interacción está dada por:

$$\hat{O}^{I}(t) = \exp[i\hat{H}_{0}^{S}t]\hat{O}^{S}\exp[-i\hat{H}_{0}^{S}t] \tag{A.9}$$

y la transformación entre estados es:

$$|\alpha, t\rangle^{I} = \exp[i\hat{H}_{0}^{S}t] |\alpha, t\rangle^{S}$$
 (A.10)

donde  $\hat{H}_0^S \equiv \hat{H}_0(t=0)$ 

La transformación para operadores entre la representación de Heisenberg y la representación de interacción está dada por:

$$\hat{O}^{I}(t) = \exp[i\hat{H}_{0}^{S}t] \exp[-i\hat{H}t]\hat{O}^{H}(t) \exp[i\hat{H}t] \exp[-i\hat{H}_{0}^{S}t]$$
(A.11)

y la transformación entre los estados es:

$$|\alpha, t\rangle^{I} = \exp[i\hat{H}_{0}^{S}t] \exp[-i\hat{H}t] |\alpha^{H}$$
(A.12)

De las ecuaciones A.11 y A.12 podemos observar que para el caso donde no hay interacciones, es decir  $\hat{H}_I = 0$ , los operadores en la representación de interacció equivalen a los operadores en la representación de Heisenberg:

$$\hat{O}^{I} = \hat{O}^{H}(t)$$

$$|\alpha, t\rangle^{I} = |\alpha\rangle^{H}$$
(A.13)

Por otro lado para la condición incial t=0, los operadores de las tres representaciones son equivalentes:

$$\hat{O}^I = \hat{O}^H = \hat{O}^S \tag{A.14}$$

La ecuación de movimiento para esta representación se puede encontrar partiendo de la ecuación A.10:

$$i\frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle^{I} = i\frac{\partial}{\partial t} \left[ e^{\left[i\hat{H}_{0}^{S}t \mid \alpha, t\rangle^{S}\right]} \right]$$

$$= -\hat{H}_{0}^{S} e^{i\hat{H}_{0}^{S}t} |\alpha, t\rangle^{S} + e^{i\hat{H}_{0}^{S}t} \left[i\frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle^{S}$$
(A.15)

haciendo uso de la ecuación de Schrödinger en el segundo termino de la ecuación A.15, podemos escribir:

$$i\frac{\partial}{\partial t} \mid \alpha, t \rangle^{I} = -\hat{H}_{0}^{S} \mid \alpha, t \rangle^{I} + e^{i\hat{H}_{0}^{S}t} \hat{H} \mid \alpha, t \rangle^{S}$$

$$= -\hat{H}_{0}^{S} \mid \alpha, t \rangle^{I} + e^{i\hat{H}_{0}^{S}t} \hat{H} e^{-i\hat{H}_{0}^{S}t} e^{i\hat{H}_{0}^{S}t} \mid \alpha, t \rangle^{S}$$

$$= -\hat{H}_{0}^{S} \mid \alpha, t \rangle^{I} + \hat{H}^{I} \mid \alpha, t \rangle^{I}$$

$$= (\hat{H}^{I} - \hat{H}_{0}^{S}) \mid \alpha, t \rangle^{I}$$
(A.16)

tomando en cuenta que  $\hat{H}_0^S=\mathrm{e}^{\,i\hat{H}_0^St}\hat{H}_0^S\mathrm{e}^{\,-i\hat{H}_0^St}=\hat{H}_0^I$  entonces:

$$i\frac{\partial}{\partial t} \mid \alpha, t \rangle^{I} = (\hat{H}^{I} - \hat{H}_{0}^{I}) \mid \alpha, t \rangle^{I}$$
$$= \hat{H}_{I}^{I} \mid \alpha, t \rangle^{I}$$
(A.17)

## A.0.1. El Operador de Evolución Temporal

El operador de evolución temporal (también llamado operador de Dyson) describe la conexión entre eigenestados entre tiempo inicial y tiempo final en los que se desarrolla una propagación de alguna partícula. La manera en que encontramos este operador es la siguiente:

$$|\alpha, t_1\rangle = \exp[i\hat{H}_0 t_1] |\alpha, t_1\rangle^S$$

$$= \exp[i\hat{H}_0 t_1] \exp[-i\hat{H}(t_1 - t_0)] |\alpha, t_0\rangle^S$$

$$= \exp[i\hat{H}_0 t_1] \exp[-i\hat{H}(t_1 - t_0)] \exp[-i\hat{H}_0 t_0] |\alpha, t_0\rangle^I$$
(A.18)

donde  $t_0$  es el tiempo incial y  $t \to t - t_0$  es el timpo final. Por lo tanto el operador que conecta los estados entre  $t_1$  y  $t_0$  esta dado por:

$$\hat{U}(t_1, t_0) = e^{i\hat{H}_0 t_1} e^{-i\hat{H}(t_1 - t_0)} e^{-i\hat{H}_0 t_0}$$
(A.19)

Como en general los operadores  $\hat{H}$  y  $\hat{H}_0$  no conmutan se tiene que respetar el orden de los factores. Este operador tiene algunas propiedades importantes:

■ Condición de frontera

Si 
$$t_1 = t_0$$
 entonces

$$\hat{U}(t_0,t_0)=1$$

■ Si

$$\hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t_2, t_0)$$

entonces cuando  $t_2 = t_0$ 

$$\hat{U}(t_0, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t_0, t_0) = 1$$

Por lo tanto:

$$[\hat{U}(t_1, t_0)]^{-1} = \hat{U}(t_0, t_1)$$

 $\blacksquare$  Para que la normalización de los eigenestados no dependa de t obligamos que  $\hat{U}$  sea unitario:

$$\hat{U}^{\dagger}(t_1, t_0) = \hat{U}^{-1}(t_1, t_0)$$

# Apéndice B

# Fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff

La fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff:

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots$$
 (B.1)

es la solución a la ecuación:

$$\hat{C} = \log(e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}) \tag{B.2}$$

donde  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$ , en general, son elementos que no conmutan. Fue nombrada por Henry Frederick Baker, John Edward Campbell, y Felix Hausdorff. Se observó por primera vez en impresión por Campbell, elaborada por Henri Poincaré y Baker; y sistematizada geométricamente, y vinculada a la identidad de Jacobi por Hausdorff. [8]

Para obtener esta expresión (B.1), escogemos el operador:

$$\hat{U}(x) = e^{x\hat{A}}\hat{B}e^{-x\hat{A}} \tag{B.3}$$

donde x es un parámetro auxiliar continuo. El operador  $\hat{U}(x)$  satisface una ecuación integral cuyas soluciones iteradas en el punto x=1 nos llevarán a la fórmula de BCH (B.1). Para esto, diferenciamos (B.3) con respecto al parámetro x:

$$\frac{d\hat{U}(x)}{dx} = \hat{A}e^{x\hat{A}}\hat{B}e^{-x\hat{A}} - e^{x\hat{A}}\hat{B}e^{-x\hat{A}}\hat{A}$$

$$= \hat{A}\hat{U}(x) - \hat{U}(x)\hat{A}$$

$$= [\hat{A}, \hat{U}(x)] \tag{B.4}$$

La solución a esta ecuación se fija únicamente a través de la condición incial que se obtiene evaluando la ecuación (B.3) en x = 0:

$$\hat{U}(0) = \hat{B} \tag{B.5}$$

Así la ecuación integral correspondiente a la ecuación (B.4) es:

$$\hat{U}(x) = \hat{B} + \int_0^x dy [\hat{A}, \hat{U}(y)]$$
 (B.6)

Esta ecuación integral puede ser resuelta de forma iterativa, que es equivalente a construir la serie de Neumann. En el primer paso pordemos identificar:

$$\hat{U}^{(0)}(x) = \hat{B} \tag{B.7}$$

posteriormente:

$$\hat{U}^{(1)}(x) = \hat{B} + \int_0^x dy [\hat{A}, \hat{U}^{(0)}(y)] 
= \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}]x$$
(B.8)

el siguiente paso es:

$$\hat{U}^{(2)}(x) = \hat{B} + \int_0^x dy [\hat{A}, \hat{U}^{(1)}(y)] 
= \hat{B} + \int_0^x dy [\hat{A}, \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}]y] 
= \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}]x + [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] \frac{1}{2}x^2$$
(B.9)

repitiendo este procedimiento n veces, tenemos:

$$\hat{U}(x) = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}]x + [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] \frac{1}{2}x^2 + \dots + [\hat{A}, [\dots, [\hat{A}, \hat{B}]]] \frac{1}{n!}x^n$$
(B.10)

Finalmente tomando x=1 y aplicando el límite  $n\to\infty$ , obtenemos la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff

$$\hat{U}(1) = e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} 
= \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots$$
(B.11)

En la sección del método algebráico se hizo uso de la relación:

$$\langle p'' \mid \exp(-i\gamma \hat{P}\hat{X}/\hbar) \mid p' \rangle = e^{\gamma} \delta(p'' - e^{-\gamma}p')$$
 (C.1)

Esta ecuación viene de la relación:

$$\exp(-i\gamma \hat{P}\hat{X}/\hbar) \mid p\rangle = e^{\gamma} \mid e^{-\gamma}p\rangle \tag{C.2}$$

Para demostrar que la expresión anterior es válida partimos de la expresión:

$$\exp(-i\gamma \hat{P}\hat{X}/\hbar)\hat{P} \mid p\rangle = p\exp(-i\gamma \hat{P}\hat{X}/\hbar) \mid p\rangle \tag{C.3}$$

que se trata, aplicando  $\hat{P}$  al estado |  $p \rangle$ , de una ecuación de eigenvalores. Introcuciendo 1 = e  $\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}$ e  $-\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}$  entre el operador  $\hat{P}$  y el estado  $|p\rangle$ , en el lado izquierdo de la ecuación tenemos:

$$\left[ e^{-\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}}\hat{P}e^{\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}} \right] e^{-\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}} \mid p\rangle = pe^{-\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}} \mid p\rangle \tag{C.4}$$

Este paso es necesario, para reescribir el término entre corchetes cuadrados usando la formula de Baker-Campbell-Hausdorff:

$$C = e^{A}Be^{-A}$$

$$= B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \dots$$
(C.5)

Tomando:

$$B = \hat{P}$$
 ,  $A = -\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}$  (C.6)

Podemos escribir:

$$e^{-\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}}\hat{P}e^{\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}} = \hat{P} + \left[\frac{-i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X},\hat{P}\right] + \frac{1}{2!}\left[-\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X},\left[\frac{-i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X},\hat{P}\right]\right] + \dots$$
(C.7)

Calculando el primer conmutado tenemos:

$$-\frac{i\gamma}{\hbar}[\hat{P}\hat{X},\hat{P}] = -\frac{i\gamma}{\hbar}[\hat{P}\hat{X}\hat{P} - \hat{P}^{2}\hat{X}]$$

$$= -\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}[\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}]$$

$$= -\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}[\hat{X},\hat{P}]$$

$$= -\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}(i\hbar)$$

$$= \gamma\hat{P}$$
(C.8)

Para calcular el segundo conmutador hacemos uso del resultado anterior:

$$[-\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}, [\frac{-i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}, \hat{P}]] = -\frac{i\gamma}{\hbar}[\hat{P}\hat{X}, \gamma\hat{P}]$$

$$= -\frac{i\gamma^2}{\hbar}[\hat{P}\hat{X}, \hat{P}]$$

$$= \gamma^2\hat{P}$$
(C.9)

Con esto llegamos a la conclusión de que:

$$e^{-\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}}\hat{P}e^{\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}} = \left(1 + \gamma + \frac{1}{2!}\gamma^2 + \dots\right)$$
 (C.10)

Pero el término entre paréntesis es el desarrollo en serie de la función exponencial:

$$e^{\gamma} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\gamma^n}{n!}$$

$$= \left(1 + \gamma + \frac{1}{2!}\gamma^2 + \dots\right)$$
(C.11)

con esto la ecuación (C.7) se puede escribir de la siguiente manera:

$$e^{-\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}}\hat{P}e^{\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}} = e^{\gamma}\hat{P}$$
 (C.12)

Sustituyendo este resultado en la ecuación (C.1) tenemos:

$$e^{\gamma} \hat{P} e^{-\frac{i\gamma}{\hbar} \hat{P} \hat{X}} | p \rangle = p e^{-\frac{i\gamma}{\hbar} \hat{P} \hat{X}} \hat{P} | p \rangle$$

$$\hat{P} [e^{-\frac{i\gamma}{\hbar} \hat{P} \hat{X}} \hat{P} | p \rangle] = e^{-\gamma} p [e^{-\frac{i\gamma}{\hbar} \hat{P} \hat{X}} \hat{P} | p \rangle] \qquad (C.13)$$

esto nos muestra que  $[e^{-\frac{i\gamma}{\hbar}\hat{P}\hat{X}}\hat{P}\mid p\rangle]$  es un eigenestado del operador  $\hat{P}$  con eigenvalor  $pe^{-\gamma}$ . Tomando esto en cuenta podemos escribir:

$$\exp(-i\gamma \hat{P}\hat{X}/\hbar) \mid p\rangle = C_{\gamma} \mid e^{-\gamma}p\rangle \tag{C.14}$$

que es una regla de transformación, donde  $C_{\gamma}$  es una constante a de terminar. Ahora tomamos el Braket completo usando el conjugado de la expresión anterior:

$$\langle p'' \mid e^{i\gamma \hat{X}\hat{P}/\hbar} e^{-i\gamma \hat{P}\hat{X}/\hbar} \mid p' \rangle = \langle p'' \mid e^{\frac{i\gamma}{\hbar}[\hat{X}\hat{P}]} \mid p' \rangle$$
$$= e^{-\gamma} \delta(p'' - p')$$
(C.15)

por otro lado:

$$\langle p'' \mid e^{i\gamma \hat{X}\hat{P}/\hbar} e^{-i\gamma \hat{P}\hat{X}/\hbar} \mid p' \rangle = |C_{\gamma}|^{2} \langle e^{-\gamma}p'' \mid e^{-\gamma}p' \rangle$$

$$= |C_{\gamma}|^{2} \delta[e^{-\gamma}(p'' - p')]$$

$$= e^{\gamma} |C_{\gamma}|^{2} \delta(p'' - p')$$
(C.16)

igualando ambas expesiones tenemos que:

$$e^{-\gamma}\delta(p''-p') = e^{\gamma} |C_{\gamma}|^{2} \delta(p''-p')$$

$$e^{-2\gamma} = |C_{\gamma}|^{2}$$

$$C_{\gamma} = e^{-\gamma}$$
(C.17)

Así la ecuación (C.11) toma la forma:

$$\exp(-i\gamma \hat{P}\hat{X}/\hbar) \mid p'\rangle = e^{-\gamma} \mid e^{-\gamma}p'\rangle$$
 (C.18)

Agregando por el lado izquierdo  $\langle p'' |$  tenemos:

$$\langle p'' \mid \exp(-i\gamma \hat{P}\hat{X}/\hbar) \mid p' \rangle = \langle p'' \mid e^{-\gamma} \mid e^{-\gamma}p' \rangle$$

$$= e^{-\gamma} \langle p'' \mid e^{-\gamma}p' \rangle$$

$$= e^{-\gamma} \delta(p'' - e^{-\gamma}p')$$
(C.19)

que es la expresión que buscabamos.

# Bibliografía

- [1] Barone, F.A., Boschi-Filho, H. y Farina, C.; Am. J. Phys. 71, 483-491 (2003)
- [2] Boudjedaa, T.; Chetouani, L. y Guechi, L. Physica Scripta 52, 9-16 (1995)
- [3] Urrutia, L.F. y Hernández, E., Int. J. Theor. Phys. 23, 1105-1127 (1984)
- [4] Argao, A, Boschi-Filho, H., Farina, C. y Barone, F.A.; Braz. J. Phys. 37, 1260-1268 (2007)
- [5] Schwinger, J., Phys. Rev. **82**, 664 (1951)
- [6] Greiner, W., Quantum Mechanics Special Chapters; Springer; (1997) 378 p.
- [7] Maple versión 9.5, Waterloo Maple Inc., Canada. (2004)
- [8] Reinhardt, J. y Greiner, W., Field Quantization, Springer (2008) 456 p.