

La Integral de Camino de Feynman en la Mecánica Cuántica

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

por

José Alfredo Galaviz Sañudo



Departamento de Física
Universidad de Sonora
Agosto 2011

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"**



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

A Carol.

Agradecimientos

En términos del camino que he recorrido, quiero decir...

A pesar de que ha sido largo, sé que es sólo un segmento del gran camino que comenzó el día que nací. Teniendo claro que lo ha hecho, y lo sigue haciendo grande, la gente maravillosa que ha permitido que nuestros caminos coincidan. Los que me han ayudado a quitar del camino las enormes piedras que pensé invencibles e indestructibles. Todos los que han caminado a mi lado con tanta paciencia como me es necesaria. Los que me ayudaron a construir puentes por los que pudiera cruzar para seguir adelante. Los que me compartieron de su agua en los días de mayor escasez y de jornadas más largas. Por todos ellos he llegado hasta aquí y hoy sólo me resta decir que les estaré agradecido toda mi vida y que este espacio es para ustedes.

Es un hecho que todos los caminos son probables, pero completamente seguro digo que el azar se puso de mi lado al permitir que mi camino se cruzara con el de la maestra María Elena, quien es uno de los grandes faros que alumbran mi camino. Aunque me llegue la noche, permanece conmigo brindándome su luz. Siempre con infinita paciencia, amabilidad y entrega para que todo salga lo mejor posible. Muchas

gracias por su apoyo, confianza, tiempo, consejos, amistad, ... ∞ , pero sobre todo, muchas gracias por ponerle mucha ACCIÓN a mi camino al presentarme este tema que no deja de fascinarme :P.

Cuando era niño, mi mamá me enseñó que el trabajo diario, con honestidad, esfuerzo y responsabilidad, es lo que hace que cada persona viva feliz y tranquila con el camino que recorre. Hoy quiero decir que con su gran ejemplo, el maestro Calcáneo me ha recordado y reforzado las palabras de mi madre. Siempre estaré agradecido con Ud por confiar en mí, por dedicar horas de su vida a platicar conmigo, por dormir menos para escucharme y brindarme su invaluable amistad, por compartir conmigo al Dr. :D. Porque desde la primera vez que fui a su cubículo me atendió muy bien e hizo que me diera cuenta de que era mucho más que la persona que ya admiraba sin conocer.

Al Lucca por compartirme tanto su amistad sincera como a sus padres. Gracias por recordarme que la sencillez es lo mejor que podemos ofrecerle al mundo. Nuevamente gracias María Elena, Calcáneo y Lucca por su bonita amistad.

A mi gran lista de mujeres, que desde que soy niño han sido mi razón para salir adelante. Comienzo por la pequeña vanesusquis (vanessa), la helentrudis (Nicole), la yeyi (Anelly), la keya (Kenia), la yovis (Jhoana) y mi mamá (Ana). Siempre serán el motivo de mi sonrisas y de mis ganas de seguir preparándome. El ejemplo que Uds me dan día con día, de lucha y fortaleza ante los grandes problemas, son lo que me hace admirarlas y desear tener la fuerza que las caracteriza, SON TODO PARA MÍ, gracias por existir y ser mi familia.

Al Carlos, Isidoro, Alan, Gerardo, Neto, Amy, Gibraham, Susy y todos los demás compañeros de generación, gracias por su amistad.

A mi papá de la preparatoria, el maestro Jesús Siraitare. Si no hubiera permitido que me atravezara en su camino, y no me hubiera dado excelentes consejos, seguiría sin saber que se puede estudiar esta hermosa carrera y sé que

mi vida sería muy aburrida en cualquier otra cosa que estuviera haciendo, nunca terminaré de agradecerle por todo.

A todos los excelentes maestros que han contribuido a mi formación, sé que faltarán muchos en mi lista pero estén seguros de que siempre los recuerdo. María Elena, Calcáneo, Chopan, Angelina, Jáuregui, Laura, Tellechea, Martín, Lizárraga, etc. A todos muchas gracias por su coraje y entrega a la hora de enseñar.

Siempre estaré agradecido contigo princesa Carol, a quien dedico este trabajo. He aprendido tantas cosas de ti. Admiro tu entrega, compromiso, genialidad, coraje, amor y toda tu persona. Todos los segundos que caminamos juntos hicieron que por mi camino cruzaran cosas tan bonitas que siempre llevaré conmigo.

Finalmente, a todos les digo que cualquier palabra es pequeña comparada con lo mucho que estoy agradecido con ustedes.

Contenido

Lista de Figuras	II
Introducción	1
1 Acción en Mecánica Clásica: <i>Todo se reduce a seguir sólo un camino.</i>	3
1.1. Principio de Mínima Acción	7
1.2. Oscilador Armónico en Presencia de un Campo Magnético	11
2 Acción en Mecánica Cuántica: <i>Todos los caminos conducen al estado final.</i>	16
2.1. El Propagador y la Integral de Camino	21
2.2. La Integral de Camino en Procesos de Dispersión	30
3 La Integral de Camino en Acción.	38
3.1. Oscilador Armónico en Presencia de un Campo Magnético	39
3.2. Dispersión de Rutherford	45
Conclusiones	48
A Principio de Mínima Acción y Energía Mecánica total.	49
B Otras representaciones para el propagador libre.	52
C Soluciones de la Ec.(3.7).	55
Bibliografía	57

Lista de Figuras

1.1.	Comparación entre desplazamiento virtual $\delta\mathbf{r}$ y desplazamiento real $\Delta\mathbf{r}$	5
1.2.	Posibles trayectorias para ir del punto inicial \mathbf{r}_i en t_i al final \mathbf{r}_f en t_f	8
1.3.	Un oscilador armónico simple (sin presencia de un campo magnético), sigue una trayectoria dada por la combinación lineal de los dos movimientos circulares ilustrados en el lado izquierdo, para los cuales existe sólo una frecuencia de oscilación $\Omega = \omega_0$. De las Ecs.(1.35) y (1.36) se concluye que el movimiento en el plano (x_1, x_2) del OAPCM, es una combinación lineal de dos movimientos circulares de radios C_- y C_+ con oscilaciones de frecuencias Ω_- y Ω_+ respectivamente, como se ilustra en el lado derecho.	14
2.1.	Se ilustra al fenómeno de reflexión parcial, el cual consiste en que parte de los fotones que salen de la fuente son reflejados por la superficie y otra parte la atraviezan. Un caso común es cuando nos reflejamos en un estanque de agua y además podemos ver las piedras dentro del estanque.	18
2.2.	Experimento de la doble rendija, los electrones salen de (1), pasan a través de (2) y se detectan en (3).	18
2.3.	En (a) se muestra la curva de $P(x)$ vs x , en (b) se muestra la curva de probabilidad P_A de que el e^- llegue a x debido a que pasó por A , la curva en (c) representa a la probabilidad P_B de que e^- llegue a x dado que pasó por B y finalmente en (d) se muestra la curva de probabilidad obtenida al sumar P_A y P_B	19
2.4.	Transición de (q_i, t_i) a (q_f, t_f) via un punto intermedio en t	23
2.5.	Transición de (q_i, t_i) a (q_f, t_f) via $n+1$ puntos intermedios separados una longitud τ	24
2.6.	Desarrollo perturbativo del Propagador.	33
A.1.	Trayectoria LMN alternativa a LN.	49

Introducción

Física: es donde está la acción.

Anónimo

Hasta el año 1942 existían tres representaciones de la mecánica cuántica, la de Schrödinger, Heisenberg y Dirac, las cuales basan la interpretación de los fenómenos cuánticos de las partículas en la dualidad onda-partícula de de Broglie. Fue en ese año cuando Richard Feynman introdujo una nueva forma de concebir y describir a estos fenómenos, a la cual se le conoce como Formulación de Integral de Camino de la Mecánica Cuántica (FICMC) [1].

Con la Formulación Ondulatoria de la Mecánica Cuántica, analizamos a los sistemas construyendo y resolviendo su correspondiente ecuación de Schrödinger, dada en general por

$$\hat{H}\psi(q, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t},$$

donde \hat{H} es el operador Hamiltoniano y $\psi(q, t)$ es la función de onda. Esta ecuación, surgió de la necesidad de obtener a la función de onda que describe el comportamiento de una partícula, tal y como lo propone la dualidad Onda-Partícula, que resumimos en la *Hipótesis de de Broglie*: las partículas microscópicas se comportan a veces como *onda* y a veces como *partícula*.

En la FICMC, para analizar a un sistema se construye su correspondiente propagador, dado en general por

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = N \int \mathcal{D}q \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\},$$

donde S es la acción de la mecánica clásica. Este propagador surge de los postulados de Feynman, en los cuales se propone que las partículas microscópicas siguen *todas las trayectorias posibles* cuando cambian de estado, y cada trayectoria aporta a la transición con su correspondiente acción.

El objetivo principal de este trabajo es describir la FICMC, tanto su interpretación del comportamiento cuántico de las partículas, como sus aplicaciones; entre las cuales está el encontrar las eigenfunciones y eigenvalores de un sistema, así como estudiar la teoría de dispersión.

En la expresión del *propagador* $K(q_f, t_f; q_i, t_i)$ vemos que éste se relaciona con la acción clásica, es por esto que hemos preparado la presentación del trabajo de la siguiente forma: En el capítulo 1, se introduce el concepto de acción y el principio de mínima acción de la mecánica clásica, el cual garantiza que de todas las trayectorias posibles para la evolución de un sistema, desde un punto inicial (q_i, t_i) a uno final (q_f, t_f) , éste seguirá la que deje estacionaria a la acción.

En el capítulo 2, se presenta la FICMC cuya base fundamental son los postulados de Feynman, los cuales afirman que la evolución de los sistemas (cuánticos) no satisface el principio de mínima acción, i.e no sólo la trayectoria que cumple con éste aporta a la amplitud de probabilidad de dicha evolución; “sino que todas las trayectorias aportan con cierta probabilidad”.

Finalmente, en el capítulo 3, utilizamos las herramientas desarrolladas de la integral de camino para resolver dos problemas: El primero consiste en encontrar las eigenfunciones y eigenvalores de un sistema formado por una partícula cargada de masa m , que se encuentra en presencia de un campo magnético uniforme y de un potencial de oscilador armónico. El segundo corresponde a la dispersión de una partícula cargada y sin spin por un potencial Coulombiano, *dispersión de Rutherford*.

Tanto en este último capítulo, como en el desarrollo de todo el trabajo, se hace énfasis en la interpretación de los fenómenos cuánticos desarrollada por Feynman, y se hace incapié en las relaciones que consideramos de mayor importancia de esta formulación, tanto por la descripción física que se introduce en ellas, como por las aplicaciones que se pueden desarrollar con las mismas.

Capítulo 1

Acción en Mecánica Clásica: Todo se reduce a seguir sólo un camino.

Las leyes de Newton nos permiten describir de forma precisa a fenómenos físicos estudiados por la mecánica clásica, por ejemplo, con ellas podemos conocer la trayectoria que seguirá una partícula bajo las condiciones que deseemos investigar¹.

El objetivo principal de este capítulo es introducir el concepto de *acción* y mostrar que las trayectorias obtenidas de la segunda ley de Newton dejan estacionaria a esta cantidad. Esto nos llevará a presentar el *principio de mínima acción*, el cual es un formalismo de la mecánica clásica alternativo a las leyes de Newton. Revisaremos este principio y el concepto de acción ya que nos servirán en el capítulo 2 para plantear las bases del formalismo de la mecánica cuántica de integral de camino.

Comenzaremos por introducir algunos conceptos importantes del cálculo variacional así como sus propiedades, ya que además de introducir notación que se utilizará a lo largo del capítulo, nos ayudará a lograr los objetivos descritos anteriormente.

Conceptos de Cálculo Variacional

El cálculo variacional fue desarrollado en gran parte por Leonard Euler a principios del siglo XVIII. Surgió de la necesidad de resolver una larga lista de problemas interesantes tales como el de encontrar la curva con un perímetro dado que encierra mayor área (*problema de los isoperímetros*), la curva de descenso más rápido para una partícula que se encuentra afectada por un campo gravitacional (*problema de la braquistócrona*), la curva de menor longitud que une a dos puntos en el espacio Euclidiano, etc. Como podemos ver, estos problemas tienen en común que consisten en encontrar una curva o función que extremaliza a una cantidad como el área, el tiempo, la longitud, etc.

La razón por la cual usamos cálculo variacional, es porque nos sirve para comparar curvas y así obtener cuál de ellas nos da un valor extremo para una cantidad de interés. Teniendo presente

¹En este trabajo los términos *trayectoria* y *camino* serán indistinguibles. Se utilizarán para referirnos a la curva descrita por el cambio de estado de una partícula en cualquier espacio (de configuración, fase, coordenado, etc).

el objetivo de este capítulo, que se reduce a comparar la trayectoria que obtenemos con las leyes de Newton, con otras trayectorias posibles para el cambio de estado de un sistema, podemos decir que en la utilidad del cálculo variacional es donde radica nuestro interés por introducirlo en esta sección.

Esta rama del cálculo basa sus principios en algunos conceptos similares a los utilizados en el cálculo diferencial ordinario, como resumiremos a continuación[2]:

Funcional

En el cálculo diferencial una función $f(x)$ es una regla de correspondencia que a cada elemento x de un conjunto A le asigna un elemento $f(x)$ de un conjunto B. De forma análoga, en el cálculo variacional definimos a un *funcional* $J[f(x)]$ como una regla de correspondencia que a cada función $f(x)$ de un conjunto Ω le asigna un número del conjunto \mathbb{R} . Para ilustrar el concepto de funcional presentamos los siguientes tres ejemplos:

- Evaluación de una función.

$$J[f(x)] = f(27) \quad (1.1)$$

En este caso el funcional $J[f(x)]$ evalúa a las funciones de un cierto conjunto en el número 27. El resultado es el número que el funcional $J[f(x)]$ le asigna a dicha función.

- Funcional de tiempo.

$$J[y(x)] = \int_{y_1}^{y_2} \left(1 + \left(\frac{dx}{dy} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} dy \quad (1.2)$$

Aquí el funcional $J[y(x)]$ le asigna un número a la función $y(x)$ que representa el tiempo que le toma a una partícula para ir de y_1 a y_2 sobre $y(x)$, cuando cae desde el reposo debido a la fuerza de gravedad, siguiendo la curva $y(x)$. Este es el funcional del problema de la braquistócrona, el cual consiste en encontrar la curva $y(x)$ para la cual el funcional (el tiempo) es mínimo.

- Funcional de longitud.

$$J[f(x)] = \int_a^b \sqrt{1 + \dot{f}(x)^2} dx \quad (1.3)$$

El número que le asigna el funcional $J[f(x)]$ a la función $f(x)$ en este caso representa la longitud de la curva $f(x)$ que une a los puntos a y b . El problema de encontrar la curva más corta que une a dos puntos en el espacio Euclidiano consiste en encontrar $f(x)$ para el cual $J[f(x)]$ es mínimo.

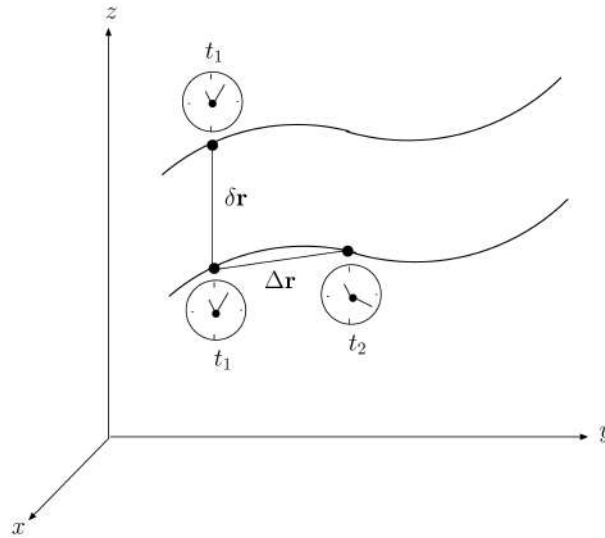


Figura 1.1: Comparación entre desplazamiento virtual $\delta \mathbf{r}$ y desplazamiento real $\Delta \mathbf{r}$.

Para introducir el concepto de derivada de una función en el cálculo diferencial se estudian los incrementos de las funciones $\Delta f(x)$ y de la variable independiente Δx . Ahora introducimos el concepto de variación de una función para definir a la derivada funcional con la cual podremos encontrar características importantes de los funcionales, como sus condiciones de extremalización.

Variación

La variación de una función ², denotada por $\delta f(x)$, es la diferencia de dos funciones en un mismo valor de la variable independiente x .

$$\delta f(x) = f_2(x) - f_1(x). \quad (1.4)$$

Como ejemplo de $\delta f(x)$ podemos mencionar al desplazamiento virtual de una partícula, que es la comparación de dos trayectorias en un mismo instante t_1 , y está dado por:

$$\delta \mathbf{r} = \mathbf{r}'(t_1) - \mathbf{r}(t_1). \quad (1.5)$$

En la Fig.(1.1) se muestra el desplazamiento virtual $\delta \mathbf{r}$ y el desplazamiento real $\Delta \mathbf{r}$ (comparación de una función en dos instantes) de una partícula, para ilustrar la diferencia que existe entre estas dos definiciones.

²Nótese que en el cálculo variacional las palabras incremento de una función y variación de una función son diferentes, lo cual no sucede en el cálculo diferencial.

De igual forma definimos el incremento de un funcional como la comparación de un funcional en dos funciones diferentes (para las cuales está definido):

$$\Delta J[f(x)] = J[f_2(x)] - J[f_1(x)], \quad (1.6)$$

lo que podemos escribir de la siguiente manera (considerando Ec.(1.4) en Ec.(1.6))

$$\Delta J[f(x)] = J[f_1(x) + \delta f(x)] - J[f_1(x)].$$

De forma análoga a la definición de derivada de una función, definimos la derivada de un funcional (a la cual nos referiremos como variación del funcional) como:

$$\frac{\delta J[f(x)]}{\delta f(x)} = \lim_{\delta f(x) \rightarrow 0} \frac{J[f_1(x) + \delta f(x)] - J[f_1(x)]}{\delta f(x)}. \quad (1.7)$$

De Ec.(1.7) concluimos que la forma de calcular variaciones de funcionales es similar a la de derivadas de funciones. Un resultado importante del cálculo diferencial, es que si el valor de la derivada de una función en un punto es cero, éste es un punto crítico de la función y existe la posibilidad de que ésta sea extremalizada en dicho punto. De igual forma, ahora que conocemos la definición de variación de un funcional podemos enunciar el siguiente teorema, que trata el caso de extremalización de funcionales.

Teorema fundamental del cálculo de variaciones

Si existe una función $f^E(x)$ para la cual se cumple:

$$\left. \frac{\delta J[f(x)]}{\delta f(x)} \right|_{f^E(x)} \equiv \delta J[f^E(x)] = 0, \quad (1.8)$$

entonces $f^E(x)$, a la cual le llamaremos función extremal, es una función que deja estacionario³ al funcional $J[f(x)]$.

Aplicando este teorema a los funcionales de las Ecs.(1.2) y (1.3) encontramos que la solución al problema de la braquistócrona es la curva dada por un arco de cicloide y la solución al problema de la curva más corta, en el espacio Euclidiano, es la línea recta [3].

Como se planteó en la introducción de este capítulo, utilizaremos los conceptos establecidos anteriormente con el propósito de evidenciar que las trayectorias obtenidas con las leyes de Newton dejan estacionario a un funcional que llamaremos *acción*.

³Minimiza, maximiza o es punto de inflexión del funcional [5]. También se utiliza el término estacionario para referirse a que un cambio a primer orden del funcional en la función extremal es cero.

1.1. Principio de Mínima Acción

PRINCIPIO GENERAL. *Cuando se produce algún cambio en la naturaleza, la cantidad de acción necesaria para este cambio es la más pequeña posible, donde la cantidad de acción es mvd.*

P. de Maupertuis [4]

Para encontrar la trayectoria que seguirá una partícula de masa m cuyo movimiento tiene características clásicas hay que conocer su posición inicial \mathbf{r}_i , velocidad inicial $\dot{\mathbf{r}}_i$, las fuerzas que actúan sobre ésta y resolver la siguiente ecuación diferencial correspondiente a la segunda ley de Newton:

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}, \quad (1.9)$$

donde \mathbf{F} resulta de sumar a todas las fuerzas que actúan sobre la partícula y $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}}$ es el momento lineal. Es muy importante mencionar que en ciertas situaciones la trayectoria que sigue una partícula es impuesta por fuerzas de constricción, que asociamos a situaciones en las que la partícula está en contacto con una superficie, atada a un cable, etc. Por ejemplo, una partícula que se mueve en la superficie de un cascarón esférico de radio R , sigue la trayectoria cuya descripción respeta la relación $x^2 + y^2 + z^2 = R^2$ que surge de su interacción con la superficie.

Motivados por la descripción anterior, escribimos a la segunda ley de Newton como sigue

$$\mathbf{F}^{(c)} + \mathbf{F}^{(a)} = m \frac{d\dot{\mathbf{r}}}{dt}, \quad (1.10)$$

donde hemos considerado que la masa de la partícula es constante y separamos a la fuerza total que actúa sobre ella en:

- fuerzas de constricción $\mathbf{F}^{(c)}$
- más las fuerzas aplicadas $\mathbf{F}^{(a)}$ sobre la partícula que modifican la dinámica de la misma por su naturaleza. Por ejemplo la fuerza gravitacional afecta el movimiento de una partícula si ésta tiene masa.

Entonces, al resolver la Ec.(1.10) y considerar las condiciones iniciales podemos obtener a \mathbf{r} para todo t i.e. la trayectoria que sigue la partícula. Estamos interesados en conocer la característica que distingue a esta trayectoria de todas las posibles trayectorias por las que la partícula

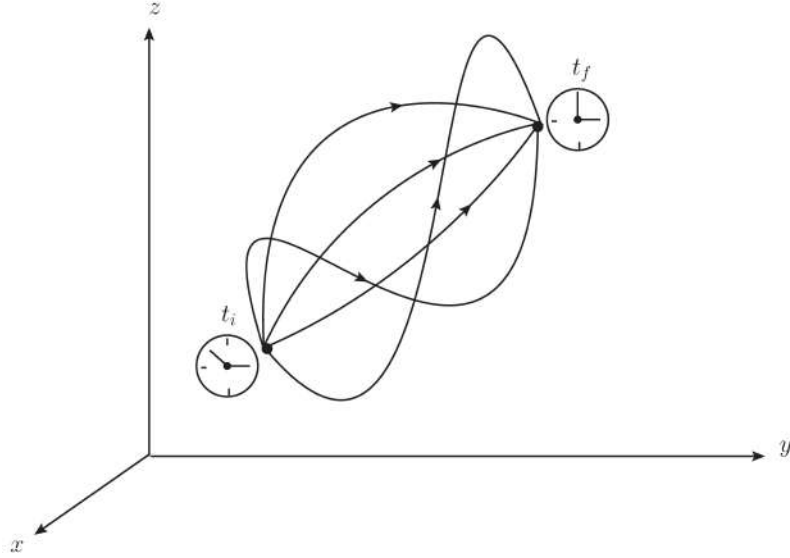


Figura 1.2: Posibles trayectorias para ir del punto inicial \mathbf{r}_i en t_i al final \mathbf{r}_f en t_f .

puede viajar desde un punto inicial en un tiempo t_i hasta uno final en t_f , como se muestra en la Fig.(1.2).

Para encontrar lo que diferencia a la trayectoria que se obtiene con la segunda ley de Newton de todas las demás trayectorias posibles, necesitamos compararlas entre sí. Para hacerlo, aprovecharemos la definición de desplazamiento virtual en Ec.(1.5), comenzando por multiplicar la expresión (1.10) por $\delta \mathbf{r}$

$$\left(\mathbf{F}^{(a)} - m \frac{d\dot{\mathbf{r}}}{dt} \right) \cdot \delta \mathbf{r} = -\mathbf{F}^{(c)} \cdot \delta \mathbf{r}. \quad (1.11)$$

Al producto de las fuerzas por el desplazamiento virtual se le conoce como *trabajo virtual*. Es importante notar que debido a la definición de desplazamiento virtual, para cada t entre t_i y t_f tendremos un valor de trabajo virtual. Para calcular el trabajo virtual total realizado entre estos dos puntos, integramos con respecto a t desde t_i hasta t_f . Además, consideramos el caso en el que las fuerzas $\mathbf{F}^{(a)} = \mathbf{F}^{(cv)}$ son conservativas y que por lo tanto se cumple $\delta V(\mathbf{r}) = -\mathbf{F}^{(cv)} \cdot \delta \mathbf{r}$. Con esto la Ec.(1.11) nos queda como sigue

$$-\int_{t_i}^{t_f} \delta V(\mathbf{r}) dt - \int_{t_i}^{t_f} m \frac{d\dot{\mathbf{r}}}{dt} \delta \mathbf{r} dt = -\int_{t_i}^{t_f} \mathbf{F}^{(c)} \cdot \delta \mathbf{r} dt. \quad (1.12)$$

Ahora asumimos el principio del trabajo virtual o principio de D'Alembert, el cual establece que el trabajo virtual total, hecho por las fuerzas de constricción es igual a cero, por lo que

$$-\int_{t_i}^{t_f} \delta V(\mathbf{r}) dt - \int_{t_i}^{t_f} m \frac{d\dot{\mathbf{r}}}{dt} \delta \mathbf{r} dt = 0. \quad (1.13)$$

La motivación del principio de D'Alembert es que en general las fuerzas de constricción son perpendiculares a los desplazamientos virtuales con lo que el producto punto $\mathbf{F}^{(c)} \cdot \delta \mathbf{r}$ es cero. Como vemos en Ec.(1.13) al considerar este principio desaparecen las fuerzas de constricción de nuestro análisis.

Integramos por partes el segundo término de Ec.(1.13) y ésta es ahora

$$- \int_{t_i}^{t_f} \delta V(\mathbf{r}) dt + \int_{t_i}^{t_f} m \dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{d\delta \mathbf{r}}{dt} dt - [m \dot{\mathbf{r}} \cdot \delta \mathbf{r}]_{t_i}^{t_f} = 0. \quad (1.14)$$

Como todas las curvas van del punto inicial t_i al final t_f (ver Fig.(1.2)), la variación del vector de posición en estos puntos será nula, con ello tendremos que el operador de variación conmuta con el de integral y de derivada, además de que el tercer término es cero. Esto se debe a que, en general, $\delta \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{d\delta \mathbf{r}}{dt} - \delta t$ y $\delta \int \mathbf{r} dt = \int (\delta \mathbf{r} + \delta t) dt$. Con esto la Ec.(1.14) se reduce a

$$\delta \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - V(\mathbf{r}) \right) dt = 0.$$

Identificamos a la función Lagrangiana dada por $\mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - V(\mathbf{r})$ y en estos términos el resultado anterior se puede escribir como sigue

$$\delta \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) dt = 0. \quad (1.15)$$

Al comparar la Ec.(1.15) con el teorema fundamental del cálculo de variaciones dado por Ec.(1.8), podemos concluir que:

La función Lagrangiana $\mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})$ es función extremal de un funcional. Es decir la trayectoria que sigue una partícula, según la segunda ley de Newton, es aquella para la cual el funcional

$$S[\mathbf{r}] \equiv \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) dt \quad (1.16)$$

es estacionario.

El funcional $S[\mathbf{r}]$ se llama función principal de Hamilton, pero es más conocido con el nombre de **acción**. Utilizaremos el resultado anterior para motivar un principio conocido como principio de Hamilton o más comunmente como **Principio de Mínima Acción (PMA)**⁴.

Principio de Mínima Acción: La evolución de los sistemas clásicos, es aquella en la que permanece estacionario al funcional de acción, es decir satisfacen la siguiente expresión

$$\delta S[\mathbf{r}] = \delta \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) dt = 0. \quad (1.17)$$

⁴Aunque el nombre lo diga la acción no siempre es mínima, lo es sólo bajo algunas condiciones [5]. Pero por costumbre le seguiremos llamando Principio de Mínima Acción.

Otra forma de enunciar este principio es contestando la siguiente pregunta: dados dos puntos fijos⁵ en el espacio coordinado (en general se cumple en cualquier espacio), uno inicial \mathbf{r}_i en un tiempo t_i y otro final \mathbf{r}_f en t_f ¿cuál es la trayectoria que seguirá una partícula entre estos dos puntos si está sujeta a un potencial $V(\mathbf{r})$? La respuesta es: *seguirá la trayectoria para la cual la acción dada por Ec.(1.16) es estacionaria.*

Considerando que en general la función Lagrangiana depende de las coordenadas generalizadas q_i , las velocidades generalizadas \dot{q}_i y del tiempo, analizaremos a la acción con el fin de encontrar las condiciones que debe satisfacer la función Lagrangiana para cumplir con el PMA. Utilizando la Ec.(1.7) tendremos que la variación de la acción está dada por

$$\delta S[q_i(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \delta q_i \right) dt,$$

donde se ha considerado que no hay variaciones temporales. Al integrar por partes el primer término y de nuevo tomar en cuenta que la variación temporal es nula, podemos reescribir lo anterior como

$$\delta S[q_i(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \right) \delta q_i dt. \quad (1.18)$$

Si además aplicamos el PMA, la Ec.(1.18) es ahora

$$\delta S[q_i(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \right) \delta q_i dt = 0. \quad (1.19)$$

Consideramos el lema fundamental del cálculo de variaciones que establece

$$\int f(x) \delta x dx = 0, \quad (1.20)$$

si y sólo si la función $f(x) = 0$ para δx arbitrarias, entonces de Ec.(1.19) se sigue

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0. \quad (1.21)$$

Lo que corresponde a las *ecuaciones de Euler-Lagrange*. Con esto concluimos que el PMA implica que la función Lagrangiana debe satisfacer este sistema de ecuaciones diferenciales para dejar estacionaria a la acción. En resumen, de todas las trayectorias posibles, para una partícula que irá de una posición inicial en t_i a una final en t_f , ésta seguirá la trayectoria que se obtenga al someter a la función Lagrangiana del sistema a satisfacer las ecuaciones de Euler-Lagrange, ya que de esta forma garantizamos que la acción del sistema es estacionaria.

⁵Por fijos nos referimos a que todas las trayectorias comienzan en \mathbf{r}_i en un tiempo t_i y terminan en \mathbf{r}_f en un tiempo t_f .

Es aquí (y al haber asumido el principio de D'Alembert para obtener la Ec.(1.13)) donde podemos ver que el PMA es complementario a otros formalismos de la mecánica clásica. Además, la importancia del concepto de acción y del PMA, radica en que estos nos permiten crear puentes con teorías más generales que la mecánica clásica, por ejemplo con la mecánica cuántica (como veremos en el capítulo 2), la electrodinámica clásica y cuántica, la relatividad (especial y general), la teoría cuántica de campos, etc. Es decir podemos estudiar varias áreas de la Física utilizando un concepto y un principio.

En el apéndice A se estudia la relación entre la acción de un sistema y su energía mecánica total. Se ilustra cómo el PMA es equivalente a decir que *la energía cinética promedio menos la energía potencial promedio es mínima para la trayectoria que sigue un objeto que va desde un punto inicial a uno final*, esto con el fin de analizar un poco más el concepto de acción y el PMA.

Con el objetivo de presentar un ejemplo que ayudará en el capítulo 3, en la siguiente sección analizaremos el oscilador armónico en presencia de un campo magnético uniforme (OAPCM) utilizando el PMA.

1.2. Oscilador Armónico en Presencia de un Campo Magnético

Queremos utilizar las herramientas desarrolladas anteriormente para analizar al sistema que consta de una partícula con masa m y carga q , bajo la influencia de un potencial de oscilador armónico y de un campo magnético uniforme. El objetivo de esta sección es familiarizarnos con el sistema ya que lo analizaremos desde el punto de vista cuántico en el capítulo 3.

Partimos de la función lagrangiana correspondiente a una partícula cargada de masa m , que se encuentra en presencia de una campo electromagnético,

$$\mathcal{L}' = T - V - q\phi + \frac{q}{c}\dot{x}_i A_i, \quad (1.22)$$

de donde al considerar $\phi = 0$ obtenemos la lagrangiana que utilizaremos a continuación, V en este caso, corresponde al potencial del oscilador armónico.

Para analizar al OAPCM, partimos de la acción de este sistema que se obtiene al sustituir el caso $\phi = 0$ de Ec.(1.22) en Ec.(1.16)

$$S[x_1(t), x_2(t)] = \sum_{i,j=1}^2 \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{1}{2}m\dot{x}_i^2 - \frac{1}{2}kx_i^2 + \frac{q}{c}\dot{x}_i A_i \right) dt, \quad (1.23)$$

donde x_i son las coordenadas naturales del sistema $x_1 = x$, $x_2 = y$ y $x_3 = z$ y \mathbf{A} es el potencial vectorial el cual se relaciona con el campo magnético de la siguiente forma (norma de Landau):

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}.$$

El campo magnético es constante en la dirección de x_3 , por lo que

$$A_i = \frac{1}{2}B\epsilon_{ij}x_j, \quad (1.24)$$

donde $i, j = 1, 2$ (i.e. el movimiento se restringe al plano (x_1, x_2) al escoger al campo en la dirección x_3), además $\epsilon_{12} = 1$, $\epsilon_{21} = -1$ y $\epsilon_{ij} = 0$ si $i = j$. Así Ec.(1.23) se reduce a

$$S[x_1(t), x_2(t)] = \sum_{i,j=1}^2 \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{1}{2}m\dot{x}_i^2 - \frac{1}{2}kx_i^2 + \frac{qB}{2c}\epsilon_{ij}x_i\dot{x}_j \right) dt. \quad (1.25)$$

Ahora calcularemos la variación de Ec.(1.25) para posteriormente considerar el PMA y encontrar las ecuaciones de movimiento que debe satisfacer x_i para cumplir con este principio⁶. La variación es

$$\delta S[x_1(t), x_2(t)] = \sum_{i,j=1}^2 \int_{t_i}^{t_f} \left(m\dot{x}_i\delta\dot{x}_i - kx_i\delta x_i + \frac{qB}{2c}\epsilon_{ij}(x_i\delta\dot{x}_j + \dot{x}_j\delta x_i) \right) dt, \quad (1.26)$$

reagrupando los términos de Ec.(1.26) nos queda

$$\delta S[x_1(t), x_2(t)] = \sum_{i,j=1}^2 \int_{t_i}^{t_f} \left(-kx_i + \frac{qB}{2c}\epsilon_{ij}\dot{x}_j \right) \delta x_i dt + \sum_{i,j=2}^2 \int_{t_i}^{t_f} \left(m\dot{x}_i + \frac{qB}{2c}\epsilon_{ij}x_i \right) \delta\dot{x}_i dt,$$

que al integrar por partes el segundo término obtenemos

$$\begin{aligned} \delta S[x_1(t), x_2(t)] &= \sum_{i,j=1}^2 \int_{t_i}^{t_f} \left(-kx_i + \frac{qB}{2c}\epsilon_{ij}\dot{x}_j - m\ddot{x}_i - \frac{qB}{2c}\epsilon_{ij}\dot{x}_i \right) \delta x_i dt \\ &\quad + \sum_{i,j=1}^2 \left(m\dot{x}_i + \frac{qB}{2c}\epsilon_{ij}x_i \right) \delta x_i \Big|_{t_i}^{t_f}. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Considerando que los puntos x_i y x_f están fijos a t_i y t_f respectivamente, y el PMA, la Ec.(1.27) nos queda como sigue

$$\delta S[x_1(t), x_2(t)] = \sum_{i,j=1}^2 \int_{t_i}^{t_f} \left(-kx_i + \frac{qB}{2c}\epsilon_{ij}\dot{x}_j - m\ddot{x}_i - \frac{qB}{2c}\epsilon_{ij}\dot{x}_i \right) \delta x_i dt = 0,$$

y reescribiendo

$$\delta S[x_1(t), x_2(t)] = \sum_{i,j=1}^2 \int_{t_i}^{t_f} \left(-kx_i + \frac{qB}{c}\epsilon_{ij}\dot{x}_j - m\ddot{x}_i \right) \delta x_i dt = 0. \quad (1.28)$$

⁶Estas ecuaciones se pueden obtener sustituyendo directamente la Lagrangiana del sistema en las ecuaciones de Euler-Lagrange. Pero queremos hacer énfasis en el PMA.

Ahora consideramos al lema fundamental del cálculo de variaciones Ec.(1.20) y Ec.(1.28) para concluir que las coordenadas x_i deben satisfacer las siguientes ecuaciones para dejar estacionaria a la acción

$$m\ddot{x}_1 - \frac{qB}{c}\dot{x}_2 + kx_1 = 0, \quad (1.29)$$

$$m\ddot{x}_2 + \frac{qB}{c}\dot{x}_1 + kx_2 = 0. \quad (1.30)$$

En términos de la frecuencia de Larmor $\omega_L = \frac{qB}{2mc}$ y de la frecuencia del oscilador armónico simple, $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$ tenemos

$$\ddot{x}_1 - 2\omega_L\dot{x}_2 + \omega_0^2x_1 = 0, \quad (1.31)$$

$$\ddot{x}_2 + 2\omega_L\dot{x}_1 + \omega_0^2x_2 = 0. \quad (1.32)$$

Para resolver este sistema de ecuaciones y con ello encontrar la trayectoria que deja estacionaria a la acción definimos la siguiente variable $z(t) = x_1 + ix_2$. Con esto podemos combinar las Ecs.(1.31) y (1.32) de la siguiente forma

$$\ddot{z} + 2i\omega_L\dot{z} + \omega_0^2z = 0,$$

cuyas soluciones están dadas por

$$z(t) = A \exp\{\lambda_+t\} + B \exp\{\lambda_-t\}.$$

A y B son constantes complejas y λ_{\pm} son las soluciones de la ecuación característica

$$\lambda^2 + 2i\omega_L\lambda + \omega_0^2 = 0,$$

es decir

$$\lambda_{\pm} = \left(-\omega_L \pm \sqrt{\omega_L^2 + \omega_0^2}\right) i.$$

Ya que $A = C_- \exp\{i\phi_-\}$ y $B = C_+ \exp\{i\phi_+\}$ con C_-, C_+, ϕ_-, ϕ_+ constantes reales, las cuales dependen de las condiciones iniciales, podemos escribir la solución de la siguiente forma

$$z(t) = C_- \exp\{i(\Omega_-t + \phi_1)\} + C_+ \exp\{-i(\Omega_+t + \phi_2)\}, \quad (1.33)$$

donde

$$\Omega_{\pm} = \pm\omega_L + \sqrt{\omega_L^2 + \omega_0^2}. \quad (1.34)$$

De la Ec.(1.33) podemos extraer

$$x_1(t) = C_- \cos(\Omega_-t + \phi_-) + C_+ \cos(\Omega_+t + \phi_+), \quad (1.35)$$

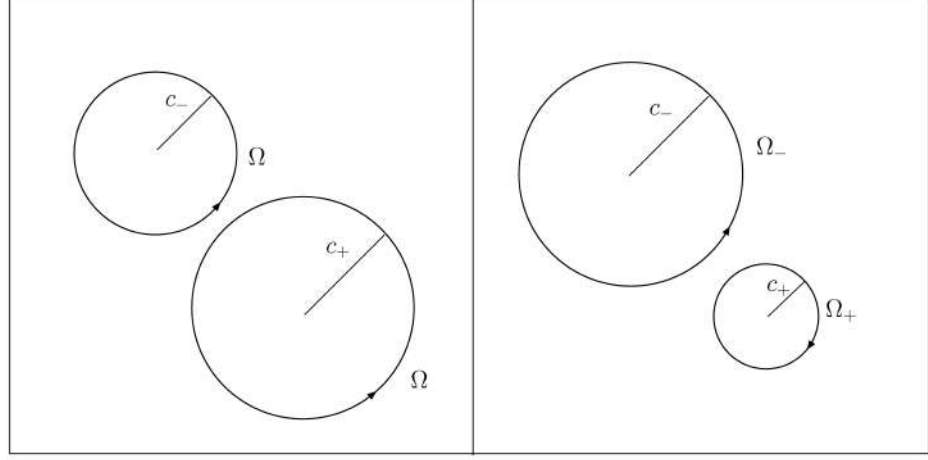


Figura 1.3: Un oscilador armónico simple (sin presencia de un campo magnético), sigue una trayectoria dada por la combinación lineal de los dos movimientos circulares ilustrados en el lado izquierdo, para los cuales existe sólo una frecuencia de oscilacion $\Omega = \omega_0$. De las Ecs.(1.35) y (1.36) se concluye que el movimiento en el plano (x_1, x_2) del OAPCM, es una combinación lineal de dos movimientos circulares de radios C_- y C_+ con oscilaciones de frecuencias Ω_- y Ω_+ respectivamente, como se ilustra en el lado derecho.

$$x_2(t) = C_- \text{sen}(\Omega_- t + \phi_-) - C_+ \text{sen}(\Omega_+ t + \phi_+). \quad (1.36)$$

Un oscilador armónico simple (sin presencia de un campo magnético), sigue una trayectoria dada por la combinación lineal de los dos movimientos circulares ilustrados en el lado izquierdo de la Fig.(1.3), para los cuales existe sólo una frecuencia de oscilacion $\Omega = \omega_0$. De las Ecs.(1.35) y (1.36) se concluye que el movimiento en el plano (x_1, x_2) del OAPCM, es una combinación lineal de dos movimientos circulares de radios C_- y C_+ con oscilaciones de frecuencias Ω_- y Ω_+ respectivamente, como se ilustra en el lado derecho de la Fig.(1.3).

Las velocidades de nuestro sistema están dadas por las siguientes expresiones

$$\dot{x}_1(t) = -C_- \Omega_- \text{sen}(\Omega_- t + \phi_-) - C_+ \Omega_+ \text{sen}(\Omega_+ t + \phi_+),$$

$$\dot{x}_2(t) = C_- \Omega_- \cos(\Omega_- t + \phi_-) - C_+ \Omega_+ \cos(\Omega_+ t + \phi_+),$$

con esto podemos calcular la energía del sistema

$$E = \frac{1}{2} m [C_-^2 (\Omega_-^2 + \omega_0^2) + C_+^2 (\Omega_+^2 + \omega_0^2)].$$

Utilizando las expresiones de Ω_{\pm} dadas por Ec.(1.34) tendremos que la energía se puede escribir de la siguiente forma

$$E = E_+ + E_- \quad (1.37)$$

con

$$E_{\pm} = mC_{\pm}^2\omega_0^2 \left(1 + \frac{\omega_L^2}{\omega_0^2} \pm \frac{\omega_L}{\omega_0} \sqrt{1 + \frac{\omega_L^2}{\omega_0^2}} \right). \quad (1.38)$$

Finalmente podemos concluir que el objetivo principal de este capítulo se ha logrado. Ya hemos presentado la característica importante de las trayectorias (que siguen sistemas clásicos) de dejar estacionaria a la cantidad introducida con el nombre de acción.

En el capítulo siguiente veremos cuál es el rol de la acción en la mecánica cuántica, nos daremos cuenta de que a este nivel no podemos describir el cambio de estado de un sistema recurriendo al PMA, ya que aquí las partículas siguen todas las trayectorias (cada una con cierta probabilidad). Nos interesa entonces describir el comportamiento cuántico de sistemas físicos con la FICMC, lo cual implica considerar que todas las trayectorias, por las que puede evolucionar un sistema de un estado inicial $\psi(q_i, t_i)$ a uno final $\psi(q_f, t_f)$, son posibles y que cada una aporta con una amplitud de probabilidad que depende directamente de la acción clásica correspondiente a dicha trayectoria. De ahí la importancia de haber analizado el concepto de acción.

Capítulo 2

Acción en Mecánica Cuántica: Todos los caminos conducen al estado final.

La formulación más elegante de la mecánica clásica es sin duda la basada en el PMA. Tal y como vimos en el capítulo anterior, este principio implica que una partícula, cuyo movimiento tiene características clásicas, sólo seguirá la trayectoria $\mathbf{r}(t)$ para la cual la acción $S[\mathbf{r}] = \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) dt$ es estacionaria. Desde sus estudios de preparatoria, este principio atrapó la atención de Richard Feynman quien motivado por éste y por un artículo de Paul Dirac titulado “*The Lagrangian in Quantum Mechanics*” logró establecer una conexión entre el concepto clásico de acción y las ideas de la mecánica cuántica ya establecidas por Schrödinger, Heisenberg y Born[8][12]. Por la discusión que queremos plantear en este capítulo, mencionaremos los siguientes dos aspectos de estas ideas:

- A nivel atómico sólo podemos hablar de la probabilidad de tener un resultado en un experimento. La forma de obtener esta probabilidad es calculando la norma al cuadrado de una función compleja ψ , llamada *amplitud de probabilidad*.
- Se introduce el concepto de *función de onda*, denotada por $\psi(q, t)$, la cual nos da la amplitud de probabilidad de localizar a una partícula en la posición q en un tiempo t .

Dirac en [9] sugiere que la función $\exp(i\epsilon\mathcal{L})$, donde \mathcal{L} es la función Lagrangiana de la mecánica clásica, es algo análogo a una transformación para la función de onda de la mecánica cuántica, que funciona como sigue: dada una función de onda inicial $\psi(q_i, t_i)$ se puede obtener una función de onda en un tiempo posterior a t_i con sólo aplicarle la transformación descrita. Feynman postuló que para obtener a $\psi(q_f, t_f)$ a partir de $\psi(q_i, t_i)$ la transformación de la que habló Dirac debe ser $\exp(i\frac{S}{\hbar})$ donde S es la acción clásica. Además postuló que todos los caminos para ir a q_f partiendo de q_i son posibles, lo cual tiene que considerarse a la hora de aplicar la transformación a la función de onda. En la sección 2.1 introduciremos a la transformación mencionada con el nombre de *propagador*.

Con estas nuevas ideas nació una forma de hacer mecánica cuántica conocida como *Formulación de Integral de Camino de la Mecánica Cuántica* [11] y fue presentada en 1942 en la tesis doctoral de Feynman titulada “The Principle of Least Action in Quantum Mechanics”[1].

En esta formulación se introduce la idea de que todos los caminos son posibles para ir de q_i a q_f , con ella se construye al *propagador* con el cual podemos describir la evolución de un sistema.

El objetivo principal de este capítulo es introducir el concepto de *propagador* y su forma conocida como *integral de camino*, en donde se muestra la relación entre el concepto de acción y el *propagador*. Además, utilizando la integral de camino se presentará la forma de obtener los eigenvalores de la energía de un sistema así como las eigenfunciones del mismo. Como estamos interesados en describir procesos de dispersión con ésta herramienta, haremos un desarrollo perturbativo del *propagador* el cual nos permitirá obtener una expresión para calcular la amplitud de probabilidad de la dispersión de una partícula por un potencial dado.

Comenzaremos por describir la forma de obtener la probabilidad de un evento en la mecánica cuántica. Con esto se motivará la idea de que todos los caminos para la evolución de un sistema son posibles, lo cual es fundamental para introducir al *propagador*.

Probabilidad en la mecánica cuántica

... Does this mean that physics, a science of great exactitude, has been reduced to calculating only the probability of an event, and not predicting exactly what will happen? yes!...

Richard Feynman [10]

Cuando estudiamos fenómenos atómicos encontramos que sólo podemos calcular la probabilidad de que ocurra un evento y no predecir exactamente lo que pasará. Esto no debe preocuparnos ya que, en palabras de Feynman, “la ciencia no ha colapsado aún” [10]. Por ejemplo, en el fenómeno de reflexión parcial Fig.(2.1), no podemos predecir si un fotón particular que parte de una fuente será reflejado por una superficie de vidrio. Lo único que podemos decir es que de cada 100 fotones que salgan de la fuente, x serán registrados en un detector A colocado frente a la superficie y y serán registrados en un detector B colocado detrás de la superficie (los valores x y y dependen del material).

El concepto tradicional de probabilidad no es alterado en la mecánica cuántica. Cuando decimos que la probabilidad de cierto resultado A en un experimento es p , nos referimos al

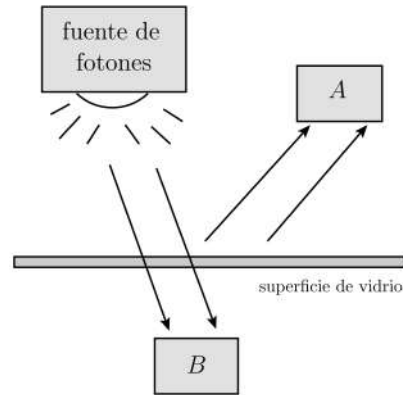


Figura 2.1: Se ilustra al fenómeno de reflexión parcial, el cual consiste en que parte de los fotones que salen de la fuente son reflejados por la superficie y otra parte la atraviezan. Un caso común es cuando nos reflejamos en un estanque de agua y además podemos ver las piedras dentro del estanque.

sentido convencional de hacer cálculos en probabilidad. Si el experimento es repetido n veces, uno espera que se obtenga A en la fracción correspondiente a p . En el ejemplo de reflexión parcial el resultado A es que el fotón sea reflejado y la probabilidad de que suceda es $p = \frac{x}{100}$. Lo que sí cambia, y de forma radical, es la forma de calcular probabilidades. Para motivar esta nueva forma, vamos a analizar el *experimento de la doble rendija* el cual se describe en la Fig.(2.2). En dicha figura vemos que en (1) tenemos una fuente de electrones (e^-). Éstos saldrán hacia (2) que consta de una placa con dos rendijas denotadas por A y B . Los e^- pasarán a través de A y B para finalmente llegar a (3) que consta de una pantalla con un detector (por ejemplo un contador Geiger-Müller).

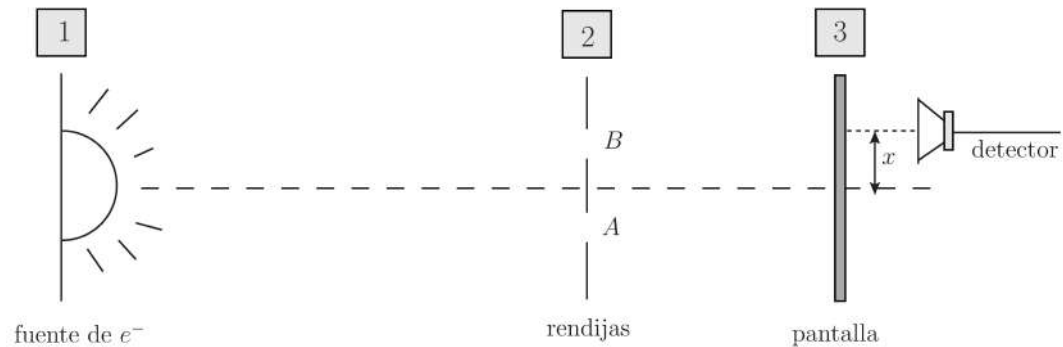


Figura 2.2: Experimento de la doble rendija, los electrones salen de (1), pasan a través de (2) y se detectan en (3).

Consideraremos el caso en el que la fuente emite a todos los e^- con la misma energía y que

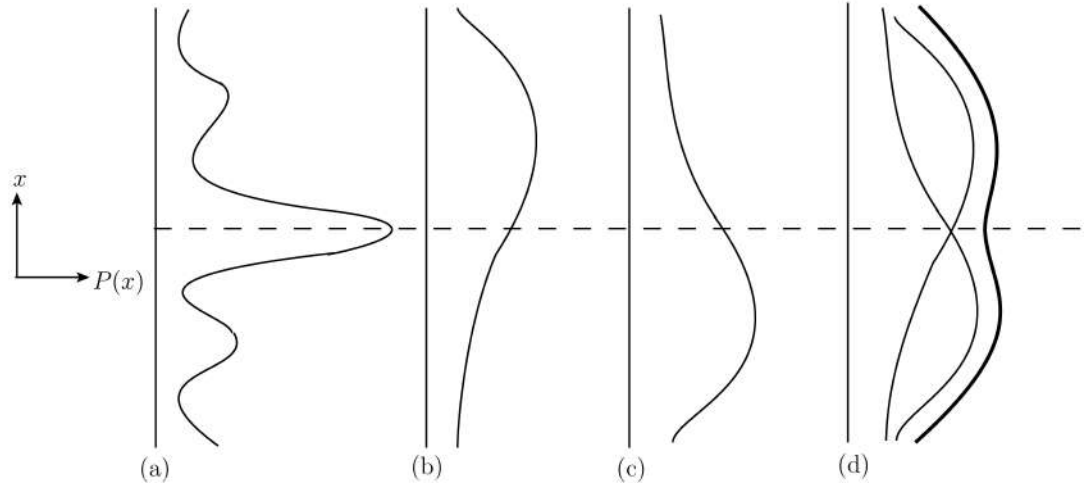


Figura 2.3: En (a) se muestra la curva de $P(x)$ vs x , en (b) se muestra la curva de probabilidad P_A de que el e^- llegue a x debido a que pasó por A , la curva en (c) representa a la probabilidad P_B de que e^- llegue a x dado que pasó por B y finalmente en (d) se muestra la curva de probabilidad obtenida al sumar P_A y P_B .

el detector registra un pulso por cada e^- que llegue a éste. Mediremos el número de pulsos por segundo registrados en el detector para varias posiciones x del mismo. Con esto determinaremos experimentalmente la probabilidad $P(x)$ de que un e^- vaya de la fuente al detector en x .

Cada e^- que va de la fuente al detector debe ir a través de la rendija A o de la B . Como consecuencia de esto esperamos que la probabilidad de llegar al detector en x , sea la suma de la probabilidad de que el e^- llegue a x debido a que cruzó por A , denotada por P_A más la probabilidad P_B de que llegue a x debido que cruzó por B . La única forma de comprobar que esto es cierto es realizando el experimento. En la Fig.(2.3) se muestra un esquema del resultado de este experimento [12]. La descripción de dicha figura es: en (a) presentamos la curva de $P(x)$ vs x obtenida en el experimento, en (b) a la curva de probabilidad P_A de que el e^- llegue a x debido a que pasó por A , la curva en (c) representa a la probabilidad P_B de que e^- llegue a x dado que pasó por B y finalmente en (d) se muestra la curva de probabilidad obtenida al sumar P_A y P_B . Al comparar (a) con (d) concluimos que la probabilidad de que el e^- llegue a x es diferente a la suma de las dos probabilidades $((b) + (c))$ como se había propuesto, i.e. $P \neq P_A + P_B$.

Algo muy importante es que al analizar la curva $P(x)$, podemos notar que corresponde a la distribución de intensidad de un patrón de interferencia, obtenido cuando el experimento de la doble rendija se realiza con una onda. Este hecho hizo que físicos de inicios de siglo XX, como

Louis De Broglie, propusieron que existía una dualidad onda-partícula para el e^- (conocida como *hipótesis de De Broglie*)[13]. En lugar de considerar esta idea introduciremos el postulado I de Feynman el cual es una de las ideas fundamentales en las que se basa la FICMC.

Postulado I: *La probabilidad de que una partícula sea encontrada en $q(t)$ dentro de una región del espacio-tiempo, es el cuadrado de la suma de las contribuciones dadas por cada camino en dicha región [11].*

Este postulado introduce la idea de considerar que todos los caminos, que van de la fuente a x , son posibles. Y que la función $P(x)$ es el resultado de calcular la norma de cierta función compleja denotada por ψ a la cual llamaremos *amplitud de probabilidad*. Donde ψ será la suma de las amplitudes de probabilidad independientes, por ejemplo para el experimento de la doble rendija tenemos:

- $\psi(A : 1)$: será la amplitud de probabilidad de que el e^- pase de la fuente, etiquetada con (1), a la rendija, etiquetada con A.
- $\psi(3 : A)$: será la amplitud de probabilidad de que el e^- pase de la rendija A al detector, etiquetado con (3).
- así sucesivamente.

Con esto, la amplitud de probabilidad de que los e^- vayan de la fuente (1) al detector (3) está dada por:

$$\psi(3 : 1) = \psi(3 : A)\psi(A : 1) + \psi(3 : B)\psi(B : 1) \tag{2.1}$$

y el patrón de intensidad en la pantalla estará dado por la probabilidad

$$P(3 : 1) = |\psi(3 : 1)|^2. \tag{2.2}$$

Vemos que esta probabilidad tiene “términos de interferencia”. Para evidenciar estos términos usamos Ec.(2.1) en Ec.(2.2)

$$P(3 : 1) = |\psi(3 : 1)|^2 = |\psi(3 : A)\psi(A : 1) + \psi(3 : B)\psi(B : 1)|^2$$

$$+ \underbrace{\psi(3 : A)\psi(A : 1)\psi^*(3 : B)\psi^*(B : 1) + \psi^*(3 : A)\psi^*(A : 1)\psi(3 : B)\psi(B : 1)}_{\text{términos de interferencia}},$$

lo que es equivalente a

$$P(x) = P_A + P_B + \text{términos de interferencia.}$$

En el ejemplo anterior vimos que la probabilidad de detectar al e^- que va de la fuente al detector en x , se construye al considerar que todos los caminos son posibles y que cada uno contribuye con una amplitud de probabilidad de que ocurra dicho fenómeno. Además para calcular la probabilidad, fue necesario construir la función de amplitud de probabilidad total, la cual es la suma de todas las amplitudes independientes, y calcular la norma al cuadrado de ésta. En resumen podemos decir que se ha ilustrado la noción de todos los caminos posibles. Ésta será clave para construir las integrales de camino, como veremos a continuación.

2.1. El Propagador y la Integral de Camino

A la amplitud de probabilidad de encontrar a una partícula en la posición q en un tiempo t , le llamaremos *función de onda* y la denotaremos por $\psi(q, t)$. Más concretamente:

Función de onda: *Amplitud de probabilidad que se obtiene al considerar la contribución de todos los caminos que llegan al estado (q, t) desde un estado (q_i, t_i) en el pasado.*

Una pregunta fundamental de la mecánica cuántica es: dada una función de onda a un tiempo t ¿cómo podemos encontrar la correspondiente función de onda en un instante posterior? La respuesta es: para encontrar a $\psi(q_f, t_f)$ a partir de $\psi(q_i, t_i)$ basta considerar que todos los caminos para dicha transición son posibles, por lo tanto cada uno aporta una amplitud de probabilidad denotada por $\phi_k(q, t)$. Con esto tendremos

$$\psi(q_f, t_f) = \sum_k \phi_k(q, t) \psi(q_i, t_i), \quad (2.3)$$

lo que podemos leer como: $\psi(q_f, t_f)$ es la amplitud de probabilidad total de llegar a (q_f, t_f) dado que venimos de (q_i, t_i) y tomamos los caminos $\phi_k(q, t)$.

Dado que el número posible de trayectorias es infinito y forman un continuo, reemplazamos la suma sobre todas las trayectorias por una integral sobre las mismas. Como ϕ es, en general, una función compleja la podemos expresar de la siguiente forma $\phi = A \exp \{i\theta(q, t)\}$, con esto tenemos

$$\psi(q_f, t_f) = \int \mathcal{D}q A \exp \{i\theta(q, t)\} \psi(q_i, t_i),$$

donde, como veremos más adelante, $\mathcal{D}q$ es el resultado de multiplicar los infinitos diferenciales correspondientes a los infinitos caminos. A la cantidad que permite la transición de la función de onda inicial a la final se le conoce como *propagador* y se denota con $K(q_f, t_f; q_i, t_i)$. Concluimos

que el propagador $K(q_f, t_f; q_i, t_i)$, nos ayuda a responder la pregunta fundamental con la siguiente expresión:

$$\psi(q_f, t_f) = \int K(q_f, t_f; q_i, t_i) \psi(q_i, t_i) dq_i. \quad (2.4)$$

Interpretamos a $K(q_f, t_f; q_i, t_i)$ como la amplitud de probabilidad de la transición de q_i en t_i a q_f en t_f y de la Ec.(2.2) la probabilidad de esta transición es $P(q_f, t_f) = |K(q_f, t_f; q_i, t_i)|^2$. De lo anterior vemos que es en el propagador donde está la información sobre todos los caminos.

A continuación introduciremos el postulado II de Feynman el cual nos dice cómo cuantificar la aportación de cada camino mediante esta fase y magnitud, que es lo que los diferencia entre sí:

Postulado II: *todos los caminos contribuyen con igual magnitud, pero la fase de su contribución es la acción clásica (en unidades de \hbar); i.e. la integral temporal de la Lagrangiana tomada a lo largo del camino*[11].

Al tomarlo en cuenta nos queda la siguiente expresión para el propagador

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = N \int \mathcal{D}q \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\}, \quad (2.5)$$

donde N es una constante que resulta de multiplicar las amplitudes de una infinidad de trayectorias y es divergente¹. Es importante mencionar que la Ec.(2.5) es la representación de *integral de camino* del propagador. La acción se ha postulado a ser la fase con la que cada camino aporta a la amplitud de probabilidad total en evolución de un sistema, por lo que concluimos que la forma de determinar cómo y cuánto aporta cada camino a la amplitud de probabilidad total de la transición es con la acción correspondiente a cada uno de ellos. Es decir, en la expresión de integral de camino dada por Ec.(2.31) se muestra el papel de la acción en la mecánica cuántica; aquí no sólo el camino que la deja estacionaria interviene en la evolución de un sistema “todos son posibles”.

Hemos construido la integral de camino partiendo de los postulados de Feynman. Ésta nos ayudará a analizar los sistemas de interés para la mecánica cuántica no relativista. A continuación mostraremos cómo podemos implementar las ideas centrales de los postulados de Feynman, para obtener la integral de camino utilizando los resultados de la mecánica cuántica ya establecidos por Heisenberg, Schrödinger, etc.

¹Al calcular observables físicos se obtienen resultados libres de divergencias utilizando técnicas de renormalización, las cuales consisten en esencia en construir observables con respecto a una referencia estándar dada por las condiciones en las que se realice la medición de dicho observable

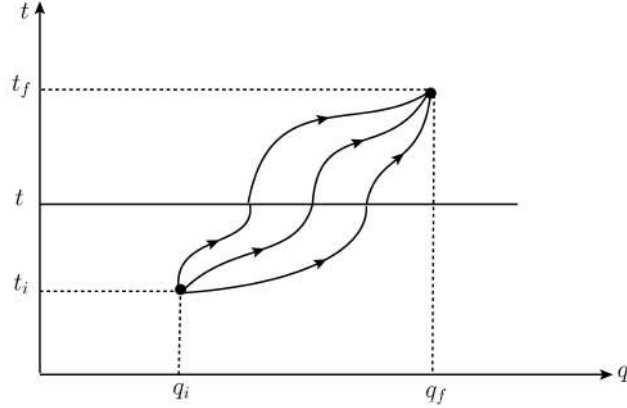


Figura 2.4: Transición de (q_i, t_i) a (q_f, t_f) via un punto intermedio en t .

Partiremos de responder a la pregunta fundamental hecha párrafos arriba utilizando la expresión para la función de onda en la notación de Dirac

$$\psi(q, t) = \langle qt | \psi \rangle^H. \quad (2.6)$$

Lo cual representa una proyección de $|\psi\rangle^H$ en la base $\langle qt |$, donde $|\psi\rangle^H$ es la función de onda en el esquema de Heisenberg [13]. Comenzaremos por insertar un conjunto completo de estados de posición en el lado derecho de Ec.(2.6) (nótese que consideramos el estado $\psi(q_f, t_f)$)

$$\langle q_f t_f | \psi \rangle^H = \int \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle \langle q_i t_i | \psi \rangle^H dq_i. \quad (2.7)$$

Al comparar Ec.(2.7) con Ec.(2.6) tendremos la siguiente expresión para la función de onda

$$\psi(q_f, t_f) = \int \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle \psi(q_i, t_i) dq_i,$$

que al compararla con Ec.(2.4) concluimos que la cantidad $\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle$ juega el papel del propagador al llevar a la función de onda de un estado inicial a uno final. Por lo tanto el propagador en la notación de Dirac es

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) \equiv \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle. \quad (2.8)$$

Como nuestro interés es evidenciar que en el propagador está la información de todos los caminos por los que puede evolucionar el sistema, analizaremos sus propiedades considerando a un tiempo t entre t_i y t_f , como se muestra en la Fig.(2.4). La amplitud de probabilidad de ir de t_i a t_f via t será: primero para ir de t_i a t

$$\psi(q, t) = \int K(q, t; q_i, t_i) \psi(q_i, t_i) dq_i, \quad (2.9)$$

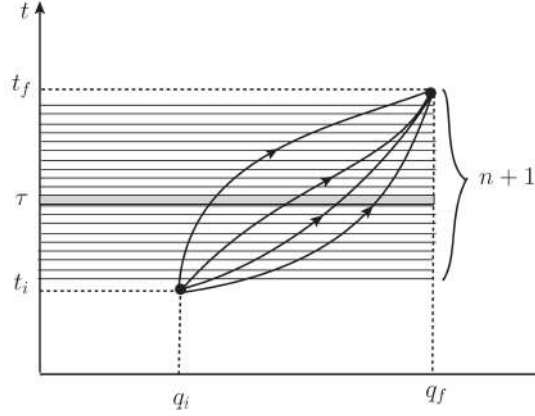


Figura 2.5: Transición de (q_i, t_i) a (q_f, t_f) via $n + 1$ puntos intermedios separados una longitud τ .

y para ir de t a t_f

$$\psi(q_f, t_f) = \int K(q_f, t_f; q, t) \psi(q, t) dq. \quad (2.10)$$

Introduciendo la expresión para $\psi(q, t)$ de Ec.(2.9) en Ec.(2.10)

$$\psi(q_f, t_f) = \int K(q_f, t_f; q, t) \int K(q, t; q_i, t_i) \psi(q_i, t_i) dq_i dq,$$

lo que podemos escribir como

$$\psi(q_f, t_f) = \int \int K(q_f, t_f; q, t) K(q, t; q_i, t_i) \psi(q_i, t_i) dq_i dq. \quad (2.11)$$

Al comparar Eq.(2.11) con Ec.(2.4), identificamos a

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \int K(q_f, t_f; q, t) K(q, t; q_i, t_i) dq. \quad (2.12)$$

Entonces la transición de (q_i, t_i) a (q_f, t_f) puede considerarse como el resultado de la transición de (q_i, t_i) a todos los puntos intermedios (q, t) seguidos de la transición de este punto a (q_f, t_f) . Es decir, el propagador tiene la propiedad de que se puede subdividir en propagadores para subintervalos de tiempo entre dos puntos.

Ahora veremos cómo podemos obtener la representación de integral de camino del propagador partiendo de la Ec.(2.8) y utilizando la propiedad del propagador dada por Ec.(2.12). Para esto, dividiremos el intervalo de tiempo $[t_i, t_f]$ que le toma a un sistema para ir de un estado inicial $\psi(q_i, t_i)$ a uno final $\psi(q_f, t_f)$, en $n + 1$ segmentos iguales de longitud τ como se ilustra en la Fig.(2.5). Por analogía con lo realizado para obtener Ec.(2.12) y usando Ec.(2.8), tendremos

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \int \cdots \int dq_1 dq_2 \cdots dq_n \langle q_f t_f | q_n t_n \rangle \langle q_n t_n | q_{n-1} t_{n-1} \rangle \cdots \langle q_1 t_1 | q_i t_i \rangle, \quad (2.13)$$

donde la integral es tomada sobre todos los posibles estados intermedios.

A continuación calcularemos el propagador sobre un pequeño segmento de un posible camino. Partimos de la siguiente expresión para el propagador en un intervalo de tiempo $[t_j, t_{j+1}]$

$$\langle q_{j+1}t_{j+1} | q_jt_j \rangle = \langle q_{j+1} | \exp \left\{ \frac{-i\hat{H}\tau}{\hbar} \right\} | q_j \rangle, \quad (2.14)$$

donde $\tau \equiv t_{j+1} - t_j$.

Expresamos la función exponencial de Ec.(2.14), en desarrollo en serie de McLaurin, para tener:

$$\langle q_{j+1}t_{j+1} | q_jt_j \rangle = \langle q_{j+1} | 1 - \frac{i\hat{H}\tau}{\hbar} + \mathcal{O}(\tau^2) | q_j \rangle. \quad (2.15)$$

Considerando que los subintervalos de tiempo τ , en los que se divide el intervalo $[t_i, t_f]$, son pequeños, $\tau \ll 1$, podemos escribir a Ec.(2.15) como

$$\langle q_{j+1}t_{j+1} | q_jt_j \rangle = \langle q_{j+1} | q_j \rangle - \frac{i\tau}{\hbar} \langle q_{j+1} | \hat{H} | q_j \rangle + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (2.16)$$

Analizaremos el primer término del lado derecho de Ec.(2.16), comenzando por insertarle un conjunto completo de estados de momento

$$\langle q_{j+1} | q_j \rangle = \int dp_i \langle q_{j+1} | p_i \rangle \langle p_i | q_j \rangle. \quad (2.17)$$

Utilizamos la siguiente relación [13]²

$$\langle q | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} pq \right\}, \quad (2.18)$$

con esto la expresión Ec.(2.17) se reduce a

$$\langle q_{j+1} | q_j \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_i \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p_i (q_{j+1} - q_j) \right\}. \quad (2.19)$$

Para analizar el segundo término (lado derecho) de Ec.(2.16) consideraremos que el operador hamiltoniano está dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(q),$$

²Se obtiene de considerar el siguiente elemento de matriz $\langle q | \hat{p} | p \rangle = p \langle q | p \rangle$, el cual satisface $\langle q | \hat{p} | p \rangle = -i\hbar \frac{d\langle q|p \rangle}{dq}$, con lo que nos queda la siguiente ecuación diferencial $p \langle q | p \rangle = -i\hbar \frac{d\langle q|p \rangle}{dq}$. Cuya solución es

$$\langle q | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} pq \right\}.$$

entonces tendremos que calcular

$$\langle q_{j+1} | \hat{H} | q_j \rangle = \langle q_{j+1} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | q_j \rangle + \langle q_{j+1} | \hat{V}(q) | q_j \rangle. \quad (2.20)$$

Introducimos conjuntos completos de estados de momento correspondientes a las variables p y p' en el primer término de Ec.(2.20) (lado derecho) con lo que nos queda

$$\langle q_{j+1} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | q_j \rangle = \int dp' dp \langle q_{j+1} | p' \rangle \langle p' | \frac{\hat{p}^2}{2m} | p \rangle \langle p | q_j \rangle. \quad (2.21)$$

Usamos nuevamente la Ec.(2.18) además del hecho

$$\langle p' | \frac{\hat{p}^2}{2m} | p \rangle = \frac{p^2}{2m} \delta(p - p'),$$

en Ec.(2.21) y obtenemos

$$\langle q_{j+1} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | q_j \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' dp \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p' q_{j+1} - p q_j) \right\} \frac{p^2}{2m} \delta(p - p').$$

Finalmente integramos con respecto a p' para tener

$$\langle q_{j+1} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | q_j \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p (q_{j+1} - q_j) \right\} \frac{p^2}{2m}. \quad (2.22)$$

Es importante señalar que \hat{p}^2 del lado izquierdo es un operador mientras que en el lado derecho nos quedó la función p^2 .

Para el segundo término (lado derecho) de Ec.(2.20) con consideraremos la prescripción del potencial en el punto medio, como se indica a continuación

$$\langle q_{j+1} | \hat{V}(q) | q_j \rangle = V\left(\frac{q_{j+1} + q_j}{2}\right) \langle q_{j+1} | q_j \rangle. \quad (2.23)$$

Por analogía con el procedimiento realizado para obtener Ec.(2.22) analizaremos la Ec.(2.23) introduciendo conjuntos completos de estados de momento, agrupando términos, considerando la Ec.(2.18) e integrando, lo que nos lleva a obtener

$$\langle q_{j+1} | \hat{V}(q) | q_j \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p (q_{j+1} - q_j) \right\} V(\bar{q}_j) \quad (2.24)$$

donde $\bar{q}_j = \frac{1}{2}(q_{j+1} + q_j)$. Una vez más de lado derecho no hay operadores.

Sumamos las Ecs.(2.22) y (2.24) para formar la Ec.(2.20), quedándonos

$$\langle q_{j+1} | \hat{H} | q_j \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p (q_{j+1} - q_j) \right\} \frac{p^2}{2m} + \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p (q_{j+1} - q_j) \right\} V(\bar{q}_j).$$

Lo que podemos escribir como

$$\langle q_{j+1} | \hat{H} | q_j \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p (q_{j+1} - q_j) \right\} H(p, \bar{q}_j) \quad (2.25)$$

donde $H(p, \bar{q}_j) = \frac{p^2}{2m} + V(\bar{q}_j)$. Ahora sustituimos a las Ecs.(2.25) y (2.19) en Ec.(2.16)

$$\langle q_{j+1}t_{j+1} | q_j t_j \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p(q_{j+1} - q_j) \right\} \left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} H(p, \bar{q}_j) + \mathcal{O}(\tau^2) \right). \quad (2.26)$$

Además consideramos

$$\left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} H(p, \bar{q}_j) + \mathcal{O}(\tau^2) \right) \approx \exp \left\{ -\frac{i\tau}{\hbar} H(p, \bar{q}_j) \right\} \quad \tau \ll 1,$$

con esto la Ec.(2.26) se puede escribir como sigue

$$\langle q_{j+1}t_{j+1} | q_j t_j \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p(q_{j+1} - q_j) - \frac{i\tau}{\hbar} H(p, \bar{q}_j) \right\}.$$

Si usamos $p = p_j$ representando al momento entre t_j y t_{j+1} o equivalentemente entre q_j y q_{j+1} finalmente tendremos

$$\langle q_{j+1}t_{j+1} | q_j t_j \rangle = \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [p_j(q_{j+1} - q_j) - \tau H(p_j, \bar{q}_j)] \right\}, \quad (2.27)$$

lo cual nos dará el propagador sobre un segmento de un posible camino.

Para obtener el propagador completo en el intervalo $[t_i, t_f]$ sustituimos el resultado anterior Ec.(2.27) en Ec.(2.13)

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \prod_{j=1}^n dq_j \prod_{j=0}^n dp_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n [p_j(q_{j+1} - q_j) - \tau H(p_j, \bar{q}_j)] \right\}, \quad (2.28)$$

donde hemos utilizado la notación:

$$\prod_{j=p}^n d\phi_j = d\phi_p d\phi_{p+1} \cdots d\phi_{p+n}$$

tanto para p como para q . Si consideramos el $\lim_{n \rightarrow \infty}$ equivalente a que $\tau \rightarrow 0$, es decir, que los intervalos de tiempo $[t_{j+1}, t_j]$ sean infinitesimales, la Ec.(2.28) nos queda como

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} [p\dot{q} - H(p, q)] dt \right\} \quad (2.29)$$

donde $q_i = q(t_i)$, $q_f = q(t_f)$ y $\mathcal{D}\phi \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{j=p}^n d\phi_j$. La Ec.(2.29) es la *integral de camino para la amplitud de transición de (q_i, t_i) a (q_f, t_f)* . De este resultado podemos observar que

- Cada par $q(t)$ y $p(t)$ definen un camino en el espacio fase. En conclusión el propagador es el resultado de considerar que todos los caminos para ir de un estado inicial a uno final son posibles. Esto se ve de forma explícita en la integral de camino ya que para obtener el propagador con ésta es necesario integrar sobre todos los caminos.

- La forma de obtener la aportación de cada camino en la construcción del propagador está medida por la integral que aparece en la exponencial $\frac{1}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} [p\dot{q} - H(p, \bar{q})] dt$.

Ya contamos con una de las expresiones para la amplitud de transición, lo cual será de gran ayuda para realizar cálculos como espectros de energía de un sistema, dispersión de partículas, etc.

Con el propósito de simplificar la notación y de lograr obtener la expresión de la integral de camino construida con los postulados de Feynman, la cual hace evidente el papel de la acción en el propagador, retomamos la Ec.(2.28)

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \prod_{j=1}^n dq_j \prod_{j=0}^n dp_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n [p_j(q_{j+1} - q_j) - \tau H(p_j, \bar{q}_j)] \right\},$$

y como $H(p_j, \bar{q}_j) = \frac{p_j^2}{2m} + V(\bar{q}_j)$ podemos escribirla de la siguiente forma

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \prod_{j=1}^n dq_j \prod_{j=0}^n dp_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \left[p_j(q_{j+1} - q_j) - \tau \frac{p_j^2}{2m} - \tau V(\bar{q}_j) \right] \right\}$$

integramos respecto a p_j ³ y nos queda

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau} \right)^{\frac{n+1}{2}} \int \prod_{j=1}^n dq_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\tau} \right)^2 - V(\bar{q}_j) \right] \tau \right\}. \quad (2.30)$$

Al tomar el $\lim_{n \rightarrow \infty}$ vemos que

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = N \int \mathcal{D}q \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(q, \dot{q}) dt \right\},$$

donde $\mathcal{L}(q, \dot{q})$ es la función Lagrangiana, como $\int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(q, \dot{q}) dt$ es la acción de la mecánica clásica, finalmente tenemos

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = N \int \mathcal{D}q \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\}. \quad (2.31)$$

Con lo que concluimos que los postulados de Feynman nos llevan a los mismos resultados que los esquemas tradicionales de la mecánica cuántica mencionados por ejemplo en [13].

Cuando analizamos a un sistema en la mecánica cuántica nos interesa encontrar las funciones de onda correspondientes a dicho sistema, así como los eigenvalores de la energía del mismo ya que

³La integral se resuelve utilizando el siguiente resultado

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2 + bx + c) dx = \left(\frac{\pi}{a} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(\frac{b^2}{4a} + c \right).$$

con esto podemos dar una descripción amplia del comportamiento del sistema. A continuación se obtendrá la forma de relacionar a la integral de camino con los eigenvalores de un sistema. Partiremos de la siguiente expresión para el propagador ⁴

$$K(x_{1f}, p_{2f}, t_f; x_{1i}, p_{2i}, t_i) = \langle x_{1f}, p_{2f}, t_f | x_{1i}, p_{2i}, t_i \rangle,$$

lo que podemos escribir de la siguiente forma

$$K(x_{1f}, p_{2f}, t_f; x_{1i}, p_{2i}, t_i) = \langle x_{1f}, p_{2f} | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i) \right\} | x_{1i}, p_{2i} \rangle, \quad (2.32)$$

lo cual es equivalente a Ec.(2.29).

Denotamos a los eigenestados que corresponde a los eigenvalores E_n con $|n\rangle$ los cuales satisfacen la condición

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1,$$

además introducimos este conjunto completo de estados en Ec.(2.32)

$$K(x_{1f}, p_{2f}, t_f; x_{1i}, p_{2i}, t_i) = \sum_{n,m} \langle x_{1f}, p_{2f} | m \rangle \langle m | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i) \right\} | n \rangle \langle n | x_{1i}, p_{2i} \rangle.$$

Tenemos que $\phi_n(x_1, p_2) = \langle x_1, p_2 | n \rangle$ son las eigenfunciones expresadas en términos de las variables x_1 y p_2 . Al comparar esta expresión con Ec.(2.29) concluimos

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} [p\dot{q} - H(p, q)] dt \right\} = \sum_n \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_n(t_f - t_i) \right\} \phi_n^*(x_{1f}, p_{2f}) \phi_n(x_{1i}, p_{2i}). \quad (2.33)$$

Como el propagador también está dado por la Ec.(2.31) tenemos

$$K(x_{1f}, p_{2f}, t_f; x_{1i}, p_{2i}, t_i) = N \int \mathcal{D}q \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\} = \sum_n \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_n(t_f - t_i) \right\} \phi_n^*(x_{1f}, p_{2f}) \phi_n(x_{1i}, p_{2i}). \quad (2.34)$$

De Ec.(2.34) vemos que la integral de camino nos muestra una conexión directa entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica, ya que podemos conocer a las eigenfunciones de un sistema cuántico y obtener sus eigenvalores de energía (lado derecho de la ecuación) si construimos la acción clásica del sistema y utilizamos el método de integral de camino para encontrar al propagador (lado izquierdo de la ecuación).

Otro interés de estudio de la mecánica cuántica son los procesos de dispersión. A continuación presentaremos un análisis de éstos procesos utilizando la forma de integral de camino del propagador. Esto nos llevará a presentar un conjunto de reglas, llamadas reglas de Feynman, que nos ayudan a construir la amplitud de probabilidad de una dispersión.

⁴Donde hemos escogido la dependencia de las coordenadas x_1, p_2 ya que de esta forma nos será de gran utilidad en el capítulo 3.

2.2. La Integral de Camino en Procesos de Dispersión

En esta sección ilustraremos cómo se utiliza el método de integral de camino para estudiar procesos de dispersión, utilizando el hecho de que la dispersión de una partícula por otra se describe por la interacción a través de un potencial. Para esto expresamos a Ec.(2.31) como sigue

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = N \int \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} T dt \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} V dt \right\}, \quad (2.35)$$

donde se ha usado el hecho $S = \int_{t_i}^{t_f} (T-V)dt$ y se ha cambiado de notación $q \rightarrow x$. Comenzaremos por hacer la siguiente consideración

$$\left| \int_{t_i}^{t_f} V dt \right| < \hbar,$$

lo cual implica que la interacción entre las partículas es mediada por un potencial débil o que ocurre durante tiempos muy cortos. Esta consideración es clave para calcular la amplitud de transición, ya que nos permite utilizar el método perturbativo como método de aproximación haciendo el siguiente desarrollo conocido como *desarrollo perturbativo* (serie de McLaurin de $\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} V dt \right\}$)

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} V dt \right\} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} V dt - \frac{1}{2! \hbar^2} \left[\int_{t_i}^{t_f} V dt \right]^2 + \dots, \quad (2.36)$$

sustituimos la Ec.(2.36) en Ec.(2.31) y con esto podemos escribir al propagador como

$$K(x_f t_f; x_i t_i) = \mathcal{K}_0 + \mathcal{K}_1 + \mathcal{K}_2 + \dots, \quad (2.37)$$

donde \mathcal{K}_0 es el propagador de partícula libre, \mathcal{K}_1 es la corrección a primer orden del propagador y así sucesivamente.

A continuación se obtendrán las expresiones de cada uno de los propagadores enlistados arriba, ya que con ellos obtendremos la forma explícita de $K(x_f t_f; x_i t_i)$ hasta primer orden. Comenzaremos con \mathcal{K}_0 que es el resultado de multiplicar el primer término del desarrollo perturbativo Ec.(2.36) con la exponencial de energía cinética, esto es:

$$\mathcal{K}_0 = N \int \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} T dt \right\} = N \int \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} m \int_{t_i}^{t_f} \dot{x}^2 dt \right\} \quad (2.38)$$

donde se ha usado la forma explícita de la energía cinética ($T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$). Para resolver la integral

de Ec.(2.38) retomamos la forma discreta⁵

$$\mathcal{K}_0 = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{n+1}{2}} \int \prod_{j=1}^n dx_j \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} m \sum_{j=0}^n \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\tau} \right\}. \quad (2.39)$$

Procedemos a resolver la integral anterior⁶. Como $(n+1)\tau = t_f - t_i$, el propagador de partícula libre está dado por

$$\mathcal{K}_0 = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_f - t_i)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} m \frac{(x_f - x_i)^2}{t_f - t_i} \right\}.$$

Para conservar la evolución temporal de eventos, es decir considerar que se debe cumplir $t_f > t_i$, escribimos al propagador de partícula libre de la siguiente forma

$$\mathcal{K}_0 = \Theta(t_f - t_i) \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_f - t_i)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} m \frac{(x_f - x_i)^2}{t_f - t_i} \right\}, \quad (2.40)$$

donde $\Theta(t_f - t_i)$ es la función paso y está definida como sigue

$$\Theta(t_f - t_i) = \begin{cases} 1 & t_f > t_i \\ 0 & \text{otro caso.} \end{cases}$$

Ahora se calculará \mathcal{K}_1 , el cual está dado por la multiplicación del segundo término del desarrollo perturbativo Ec.(2.36) con la exponencial de energía cinética de la siguiente manera

$$\mathcal{K}_1 = -\frac{i}{\hbar} N \int \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} m \int_{t_1}^{t_f} \dot{x}^2 dt \right\} \int_{t_1}^{t_f} V dt.$$

En forma discreta, lo anterior se escribe como

$$\mathcal{K}_1 = -\frac{i}{\hbar} \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{n+1}{2}} \sum_{i=1}^n \tau \int dx_1 \cdots dx_n \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} m \sum_{j=0}^n \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\tau} \right\} V(x_\alpha, t_\alpha),$$

donde no hay que perder de vista que se reemplazó la integral temporal del potencial por una sumatoria, y que el potencial está seleccionado en un punto. Separaremos la sumatoria del exponente en dos partes: una que vaya de $j = 0$ a $j = \alpha - 1$ y otra que vaya de $j = \alpha$ a $j = n$.

⁵Véase la Ec.(2.30).

⁶Resolvemos la integral utilizando el siguiente resultado

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \cdots dx_n \exp \{ i\lambda [(x_1 - a)^2 + (x_2 - x_1)^2 + \dots + (b - x_n)^2] \} = \left[\frac{i^n \pi^n}{(n+1)\lambda^n} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i\lambda}{n+a} (b-a)^2 \right].$$

Con lo que nos queda

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_1 &= -\frac{i}{\hbar} \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{n+1}{2}} \sum_{i=1}^n \tau \int dx_1 \cdots dx_n \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} m \sum_{j=0}^{\alpha-1} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\tau} \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} m \sum_{j=\alpha}^n \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\tau} \right\} V(x_\alpha, t_\alpha). \end{aligned}$$

Como $V(x_\alpha, t_\alpha)$ depende de x_α nos será de gran ayuda escribir la expresión anterior de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_1 &= -\frac{i}{\hbar} \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \tau \int dx_i \left\{ P^{\frac{n-\alpha+1}{2}} \exp \left(\frac{i}{2\hbar} m \sum_{j=\alpha}^n \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\tau} \right) dx_{\alpha+1} \cdots dx_n \right\} \\ &\quad \times V(x_\alpha, t_\alpha) \left\{ P^{\frac{\alpha}{2}} \exp \left(\frac{i}{2\hbar} m \sum_{j=0}^{\alpha-1} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\tau} \right) dx_1 \cdots dx_{\alpha-1} \right\} \end{aligned} \quad (2.41)$$

donde se ha hecho $\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{n+1}{2}} = P^{\frac{n+1}{2}}$. Comparamos la expresión anterior Ec.(2.41) con Ec.(2.40) e identificamos a los siguientes propagadores:

- $\mathcal{K}_0(x_f, t_f; x_\alpha, t_\alpha) = \Theta(t_f - t_\alpha) \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{n-\alpha+1}{2}} \int \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} m \sum_{j=i}^n \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\tau} \right\} dx_{\alpha+1} \cdots dx_n$
- $\mathcal{K}_0(x_\alpha, t_\alpha; x_i, t_i) = \Theta(t_\alpha - t_i) \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{\alpha}{2}} \int \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} m \sum_{j=0}^{i-1} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\tau} \right\} dx_1 \cdots dx_{\alpha-1}$.

Con esto \mathcal{K}_1 es

$$\mathcal{K}_1 = -\frac{i}{\hbar} \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \tau \int dx_i \mathcal{K}_0(x_f t_f; x_\alpha, t_\alpha) V(x_\alpha, t_\alpha) \mathcal{K}_0(x_\alpha t_\alpha; x_i t_i).$$

Al tomar el límite nos queda

$$\mathcal{K}_1 = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_f} dt \int dx \mathcal{K}_0(x_f t_f; xt) V(x, t) \mathcal{K}_0(xt; x_i t_i),$$

como nos interesa conservar la evolución temporal de eventos, concluimos que la integral sobre t puede ser tomada sobre todos los valores de t , así tendremos

$$\mathcal{K}_1 = -\frac{i}{\hbar} \int dt \int dx \mathcal{K}_0(x_f t_f; xt) V(x, t) \mathcal{K}_0(xt; x_i t_i) \quad (2.42)$$

lo cual corresponde a la corrección a primer orden del propagador libre.

Juntando las Ecs.(2.42) y (2.40) la expresión para el desarrollo perturbativo del propagador Ec.(2.37), queda de la siguiente forma

$$\begin{aligned} K(x_f t_f; x_i t_i) &= \mathcal{K}_0(x_f t_f; x_i t_i) \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int dt \int dx \mathcal{K}_0(x_f t_f; xt) V(x, t) \mathcal{K}_0(xt; x_i t_i) + \dots, \end{aligned} \quad (2.43)$$

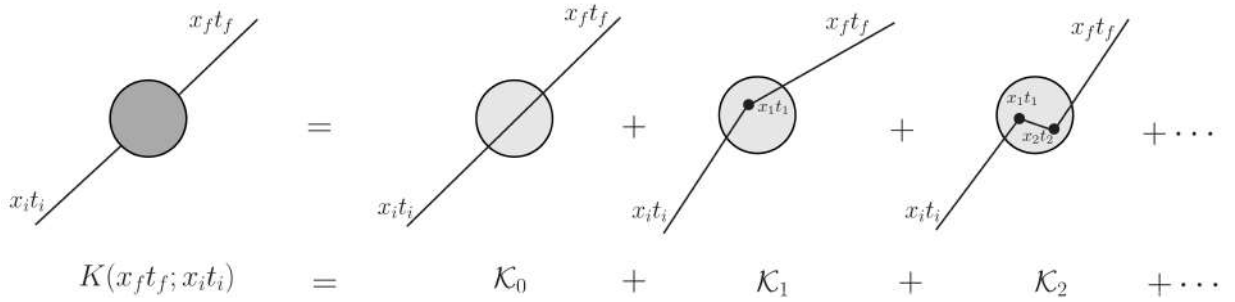


Figura 2.6: Desarrollo perturbativo del Propagador.

la cual es la solución en serie de perturbaciones de K , y es conocida como *serie de Born*. En resumen \mathcal{K}_0 describe la propagación libre de una función de onda de (x_i, t_i) a (x_f, t_f) , \mathcal{K}_1 describe la propagación de una función de onda con una perturbación en (x_1, t_1) , así sucesivamente.

Esquemáticamente el desarrollo perturbativo del propagador se puede visualizar como en la Fig.(2.6).

En la medición de un proceso de dispersión, las condiciones experimentales son: en $t \rightarrow -\infty$ la partícula es libre, luego es dispersada y es libre nuevamente en $t \rightarrow +\infty$. Estas serán las condiciones para nuestra función de onda ψ . Tendremos que ψ es una onda plana en t_i denotada por $\psi_i(x_i, t_i)$. Además consideraremos que $V \rightarrow 0$ para tiempos $t \gg t_i$ y $t_f \gg t$ donde t es el instante en el que se realiza la interacción.

Tomando hasta la primera aproximación la serie de Born Ec.(2.43) tenemos para $\psi_i(x_i, t_i)$ (donde se utiliza la Ec.(2.4))

$$\begin{aligned} \psi^{(+)}(x_f, t_f) &= \int \mathcal{K}_0(x_f, t_f; x_i, t_i) \psi_i(x_i, t_i) dx_i \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int \mathcal{K}_0(x_f, t_f; x, t) V(x, t) \mathcal{K}_0(x, t; x_i, t_i) \psi_i(x_i, t_i) dx dx_i dt, \end{aligned} \quad (2.44)$$

donde $\psi^{(+)}(x_f, t_f)$ corresponde a una onda que fue libre en $t = -\infty$. Esto involucra a un propagador que llamaremos *de retardo* $\mathcal{K}_0(x, t; x', t')$, el cual es cero para $t' > t$.

Así mismo la solución se puede escribir para $\psi^{(-)}(x_i, t_i)$, la cual consiste en una onda que será libre en $t \rightarrow \infty$, en términos de la función denotada por ψ_f i.e dado que fue dispersada. Aquí se involucrará un propagador que llamaremos *de avance* $\mathcal{K}_0(x, t; x', t')$ el cual será cero cuando $t > t'$.

Estamos interesados en la amplitud de probabilidad de detectar una partícula (al final) con un momento definido, esto es, una onda plana ψ_f , la cual será plana ya que $V \rightarrow 0$ para valores "grandes" positivos de t . Como $\psi^{(+)}(x_f, t_f)$ y $\psi^{(-)}(x_i, t_i)$ son las amplitudes de probabilidad

de que: la partícula sea dispersada dado que fue libre y sea libre dado que fue dispersada, respectivamente. Entonces, la superposición de éstas dos amplitudes de probabilidad nos dará la amplitud de dispersión con la siguiente expresión:

$$\mathcal{S} = \int \psi_f^*(x_f, t_f) \psi^{(+)}(x_f, t_f) dx_f. \quad (2.45)$$

Al sustituir la Ec.(2.44) en Ec.(2.45) obtenemos la amplitud de probabilidad de la transición de ψ_i a ψ_f a través del potencial $V(x, t)$ a primer orden

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{fi} &= \int \psi_f^*(x_f, t_f) \mathcal{K}_0(x_f, t_f; x_i, t_i) \psi_i(x_i, t_i) dx_i dx_f \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int \psi_f^*(x_f, t_f) \mathcal{K}_0(x_f, t_f; x, t) V(x, t) \mathcal{K}_0(x, t; x_i, t_i) \\ &\quad \times \psi_i(x_i, t_i) dx_f dx dx_i dt. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Considerando que los momentos final e inicial en tres dimensiones son: $\mathbf{P}_f = \hbar \mathbf{K}_f$ y $\mathbf{P}_i = \hbar \mathbf{K}_i$, tendremos que las correspondientes funciones de onda $\psi_i(\mathbf{x}, t)$ y $\psi_f(\mathbf{x}, t)$ estarán dadas por:

$$\psi_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\hbar\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{x} - E_i t)\right\} \quad \text{y} \quad \psi_f(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\hbar\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{P}_f \cdot \mathbf{x} - E_f t)\right\}, \quad (2.47)$$

donde $E = \frac{p^2}{2m}$ y $(2\hbar\pi)^{-\frac{3}{2}}$ es el factor de normalización. Sustituyendo Ec.(2.47) en Ec.(2.46) y usando la siguiente identidad

$$\int \exp\{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}\} d\mathbf{x} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}), \quad (2.48)$$

nos queda a primer orden

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{fi} &= \delta(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i) - \frac{i}{\hbar} \int \psi_f^*(x_f, t_f) \mathcal{K}_0(x_f, t_f; xt) V(x, t) \mathcal{K}_0(x, t; x_i, t_i) \\ &\quad \times \psi_i(x_i, t_i) dx_f dx dx_i dt. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Donde hemos considerado conservación de la energía $E_i = E_f$. La amplitud de dispersión es entonces un elemento de una matriz, denotado con \mathcal{S}_{fi} , cuyos (fi) elementos están dados por Ec.(2.49); a ésta matriz se le conoce como *matriz de dispersión* o *matriz* \mathcal{S} . El primer término corresponde a la “no” interacción dando conservación de momento y una matriz \mathcal{S} unidad. Las interacciones son representadas por el segundo término. La amplitud de que un particular estado de “salida ψ_f ” resulte de un particular estado de “entrada ψ_i ” es a primer orden

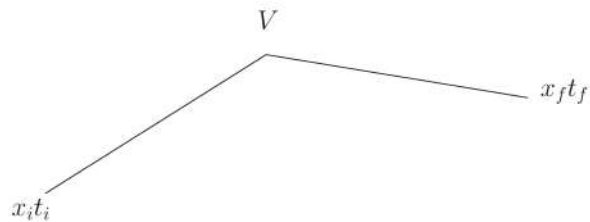
$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \int \psi_f^*(x_f, t_f) \mathcal{K}_0(x_f, t_f; xt) V(x, t) \mathcal{K}_0(x, t; x_i, t_i) \\ &\quad \times \psi_i(x_i, t_i) dx_f dx dx_i dt. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Ahora tenemos una expresión para la amplitud de dispersión en términos del propagador libre \mathcal{K}_0 y del potencial de interacción.

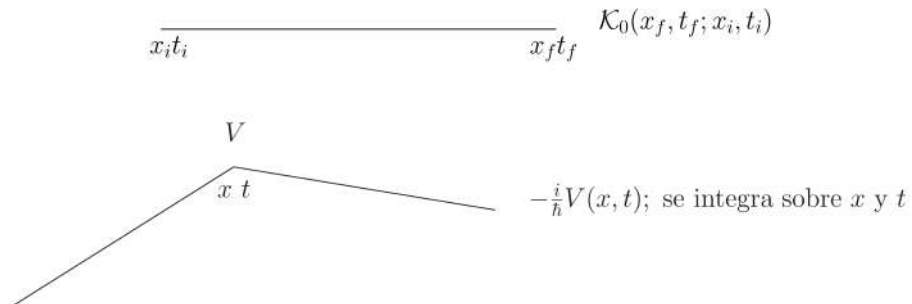
Reglas de Feynman para la amplitud de dispersión

La ecuación Ec.(2.50) puede ser trasladada hacia un conjunto de reglas para calcular la amplitud de dispersión, conocidas como *reglas de Feynman* las cuales se presentan a continuación.

La idea consiste en representar con diagramas cada término de la serie de Born, por ejemplo podemos representar la amplitud dada por Ec.(2.50) (la cual es una aproximación a primer orden) con el siguiente diagrama:

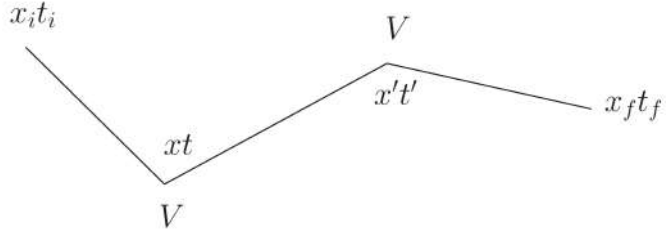


Entre cada extremo del diagrama y el potencial hay propagación libre. La amplitud de dispersión se puede formar al sumar los correspondientes diagramas al orden deseado; por ejemplo la amplitud de dispersión con corrección a primer orden resulta de sumar los siguientes dos diagramas.



Multiplicamos por $\psi_i(\mathbf{x}, t)$ y $\psi_f(\mathbf{x}, t)$ a los extremos de cada diagrama, integramos sobre las dos variables espaciales relevantes y con ello obtendremos la expresión para la amplitud de dispersión.

En la derecha se ilustra el diagrama correspondiente a la corrección a segundo orden de la amplitud de probabilidad de una dispersión.



Entonces, por las reglas antes presentadas tendremos que la corrección a segundo orden, denotada por $\mathcal{A}^{(2)}$, es:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(2)} &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int \psi_f^*(\mathbf{x}_f, t_f) \mathcal{K}_0(\mathbf{x}_f, t_f; \mathbf{x}', t') V(\mathbf{x}', t') \mathcal{K}_0(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}, t) V(\mathbf{x}, t) \\ &\quad \times \mathcal{K}_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_i, t_i) \psi_i(\mathbf{x}_i, t_i) d\mathbf{x}_i d\mathbf{x} dt d\mathbf{x}' dt' d\mathbf{x}_f. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Como mencionamos anteriormente las amplitudes de probabilidad dependen del propagador libre. Para el cual tenemos una expresión en el espacio coordenado, en el apéndice B se presentan las correspondientes representaciones del propagador libre en el espacio fase, y en el de momento y energía. En estos espacios se evidencia que la propagación libre se da sólo si hay conservación de momento y de energía.

Por último obtendremos una expresión para la amplitud de dispersión que nos servirá en el capítulo 3 para estudiar la dispersión de Rutherford. Comenzamos por sustituir la expresión para \mathcal{K}_0 dada por la Ec.(B.6)

$$\mathcal{K}_0(\mathbf{x}_f t_f; \mathbf{x}_i t_i) = \Theta(t_f - t_i) \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_f) - \frac{\mathbf{q}^2}{2m} (t_f - t_i) \right) \right\} d\mathbf{q},$$

en la amplitud de dispersión dada por la primera aproximación de Born Ec.(2.50), junto con las expresiones de $\psi_f^*(x_f t_f)$ y $\psi_i(x_i t_i)$ y obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar(2\pi)^3} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{P}_f \cdot \mathbf{x}_f - \frac{\mathbf{P}_f^2}{2m} t_f \right) \right\} \Theta(t_f - t) \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) - \frac{\mathbf{q}^2}{2m} (t_f - t) \right) \right\} V(\mathbf{x}, t) \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{q}' \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}) - \frac{\mathbf{q}'^2}{2m} (t - t_i) \right) \Theta(t - t_i) \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{x}_i - \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} t_i \right) \right\} d\mathbf{x}_f d\mathbf{x} d\mathbf{x}_i dt d\mathbf{q} d\mathbf{q}'. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Integramos con respecto a \mathbf{x}_f

$$\int \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{P}_f - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{x}_f \right) d\mathbf{x}_f = (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{q}).$$

Este es el mismo resultado para la integral con respecto a \mathbf{x}_i , donde ahora $\mathbf{P}_f \rightarrow \mathbf{P}_i$ y $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}'$. Utilizando los resultados anteriores integramos con respecto a \mathbf{q} para tener

$$\int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{x}\right) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{q}) d\mathbf{q} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{P}_f \cdot \mathbf{x}\right),$$

y la contribución de la integral sobre \mathbf{q}' que se obtiene cuando $\mathbf{P}_f \rightarrow \mathbf{P}_i$, $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}'$ y $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0$. Resolvemos las integrales que involucran a t_f

$$\int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\mathbf{q}^2}{2m} t_f\right) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{q}) d\mathbf{q} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\mathbf{P}_f^2}{2m} t_f\right)$$

y a t_0 , al cambiar $\mathbf{P}_f \rightarrow \mathbf{P}_i$, $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}'$ y $t_f \rightarrow t_0$ en el resultado anterior.

Finalmente utilizando los resultados anteriores la Ec.(2.52) se reduce a

$$\mathcal{A}^{(1)} = -\frac{i}{(2\pi)^3 \hbar} \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} [(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f) \cdot \mathbf{x} - (E_i - E_f)t]\right\} V(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt, \quad (2.53)$$

con $E_{i,f} = \frac{\mathbf{P}_{i,f}^2}{2m}$. A partir de la expresión anterior, podemos calcular la amplitud de dispersión de una partícula que cumpla con las condiciones que describimos al inicio del capítulo a través de cualquier potencial $V(\mathbf{x}, t)$.

Para concluir con este capítulo, podemos decir que hemos presentado una interpretación de los fenómenos cuánticos alterna a la desarrollada por De Broglie, Schrödinger, Heisenberg entre otros. En esta interpretación se relaciona a la mecánica cuántica con la mecánica clásica por medio del concepto de acción. Esto es evidente en la Ec.(2.5) que se construye con los dos postulados de la formulación de integral de camino de la mecánica cuántica, los cuales tienen como idea central considerar que todos los caminos, para la evolución de un sistema, aportan a dicha evolución con una amplitud de probabilidad. La forma de obtener información de un sistema con la integral de camino es utilizando Ec.(2.34) la cual relaciona a las eigenfunciones y eigenvalores de la energía con el propagador del sistema. Finalmente para estudiar procesos de dispersión, hicimos un desarrollo perturbativo del propagador lo cual nos llevó a establecer las reglas de Feynman. Éstas nos ayudan a construir la amplitud de probabilidad de una dispersión.

En el siguiente capítulo, pondremos en acción los resultados anteriormente descritos analizando al sistema de una partícula de masa m y carga q en presencia de un campo magnético uniforme y de un potencial de oscilador armónico simple. También se estudiará la dispersión de Rutherford con el objetivo de ilustrar la forma de utilizar la teoría de dispersión antes presentada.

Capítulo 3

| *La Integral de Camino en Acción.*

En este capítulo presentaremos las aplicaciones, descritas al final del capítulo dos, de la integral de camino. Comenzamos por analizar el espectro de energía del sistema formado por una partícula cargada en presencia de un campo magnético uniforme y de un potencial de oscilador armónico. Terminaremos por analizar la dispersión de una partícula cargada por un potencial coulombiano, lo que corresponde a la dispersión de Rutherford.

En el capítulo 1 utilizamos el principio de mínima acción para analizar al sistema de una partícula cargada en presencia de un campo magnético uniforme y de un potencial de oscilador armónico. En este capítulo analizaremos el mismo sistema, desde un punto de vista cuántico, utilizando el método de integral de camino que se desarrolló en el capítulo 2 [16] .

Reescribiremos a la Lagrangiana del sistema en términos de las coordenadas $(x_1, p_2, \dot{x}_1, \dot{p}_2)$ lo que nos lleva a tener un término de acoplamiento entre estas coordenadas.

Veremos que para poder resolver la integral de camino correspondiente a este sistema es práctico realizar una rotación ortogonal al sistema de coordenadas con el objetivo de desacoplar el término mencionado, ya que después de esto la Lagrangiana resultante en el nuevo sistema de coordenadas corresponde al sistema de dos osciladores armónicos independientes, lo que permite evaluar la integral de forma directa.

Analizamos los casos límites $B \ll m$, $k \ll B$ y $m \ll B^2$ del espectro obtenido para el sistema y notamos que existe una correspondencia directa entre los primeros dos límites y los sistemas reducidos correspondientes a dichos límites, además encontramos que para hacer coincidir el espectro obtenido con el de la teoría reducida en el tercer caso, es necesario hacer una redefinición de una de las frecuencias obtenidas.

El resultado del último análisis descrito coincide con el obtenido por Dunne y Jackiw quienes analizaron este sistema utilizando el método de operadores [17].

3.1. Oscilador Armónico en Presencia de un Campo Magnético

Comenzamos por reescribir a la Lagrangiana de este sistema, como la transformada de Legendre de la función Hamiltoniana correspondiente, es decir

$$\mathcal{L} = \sum_{i,j=1}^2 p_i \dot{x}_i - H, \quad (3.1)$$

donde

$$H = \sum_{i,j,\beta=1}^2 \left(\frac{1}{2m} (p_i - \frac{1}{2} B \epsilon_{ij} x_j) (p_i - \frac{1}{2} B \epsilon_{i\beta} x_\beta) + \frac{1}{2} k x_i^2 \right) \quad (3.2)$$

Ahora bien, utilizaremos la Ec.(2.34) para encontrar el espectro de energía así como las correspondientes funciones de onda, las cuales dependen sólo de x_1 y p_2 por la forma en la que construimos a Ec.(2.34).

De las Ecs.(3.1) y (3.2), vemos que la función Lagrangiana que integraremos en el propagador es una función cuadrática en las coordenadas x_2 y p_1 . Tomando en cuenta este hecho y las relaciones entre el resto de las coordenadas involucradas a través de los paréntesis de Poisson, podemos considerar la integral con respecto a las variables x_2 y p_1 como parte de una constante N [16][17]. Por lo tanto, usando la Ec.(2.29), escribimos al propagador como sigue :

$$K(x_{1f}, p_{2f}, t_f | x_{1i}, p_{2i}, t_i) = N \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}_{ef} dt \right\}, \quad (3.3)$$

donde $\mathcal{L}_{ef} = \mathcal{L}_{ef}(x_i, p_2, \dot{x}_i, \dot{p}_2)$ es

$$\mathcal{L}_{ef} = \frac{B^2 + mk}{2k} \dot{x}_1^2 + \frac{B}{k} \dot{x}_1 \dot{p}_2 + \frac{1}{2k} \dot{p}_2^2 - \left(\frac{1}{2m} p_2^2 + \frac{k}{2} x_1^2 \right) \quad (3.4)$$

y hemos hecho $q = c = 1$.

Para poder resolver la integral, tenemos que desacoplar el término $\frac{B}{k} \dot{x}_1 \dot{p}_2$, para esto definimos a las siguientes matrices de 2×2

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \frac{B^2 + mk}{k} & \frac{B}{k} \\ \frac{B}{k} & \frac{1}{k} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & \frac{1}{m} \end{pmatrix},$$

y al vector $\mathbf{X} = (x_1, p_2)^T$, con esto podemos escribir a la Lagrangiana de Ec.(3.4) de la siguiente forma

$$\mathcal{L}_{ef} = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{X}}^T \mathbf{M} \dot{\mathbf{X}} - \frac{1}{2} \mathbf{X}^T \mathbf{K} \mathbf{X}. \quad (3.5)$$

Aplicaremos una transformación al vector $\mathbf{X} = (x_1, p_2)^T$ para cambiar de coordenadas y ya no tener el término en el que se acopla a \dot{x}_1 con \dot{p}_2 . El nuevo vector será $\mathbf{Y} = (y_1, y_2)^T$ y lo

obtendremos al realizar una transformación escalar \mathbf{S} sobre el vector \mathbf{X} , seguida de una rotación ortogonal \mathbf{O} . Con esto tendremos:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{OSX}.$$

El objetivo de aplicar la transformación escalar es lograr que las dos nuevas coordenadas y_1 y y_2 tengan las mismas unidades, y el de la ortogonal es el de rotar los ejes del espacio fase para con ello desacoplar a las coordenadas \dot{x}_1 y \dot{p}_2 . Estas matrices estarán dadas por

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \sqrt{k} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{m}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{O} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Para mantener invariante a la Lagrangiana de Ec.(??) transformamos a las matrices \mathbf{M} y \mathbf{K} de la siguiente manera:

$$\mathbf{M}' = \mathbf{OS}^{-1}\mathbf{M}(\mathbf{OS})^{-1}$$

y

$$\mathbf{K}' = \mathbf{OS}^{-1}\mathbf{K}(\mathbf{OS})^{-1},$$

con lo que nos queda la siguiente función Lagrangiana en las nuevas coordenadas

$$\mathcal{L}'_{ef} = \frac{1}{2}\dot{\mathbf{Y}}^T\mathbf{M}'\dot{\mathbf{Y}} - \frac{1}{2}\mathbf{Y}^T\mathbf{K}'\mathbf{Y}. \quad (3.6)$$

Las matrices \mathbf{M}' y \mathbf{K}' son

$$\mathbf{M}' = \begin{pmatrix} \frac{B^2}{k^2} \cos^2 \theta + \frac{m}{k} - 2\frac{\sqrt{m}}{k^{\frac{3}{2}}}B \sin \theta \cos \theta & \frac{B^2}{k^2} \cos \theta \sin \theta + \frac{\sqrt{m}}{k^{\frac{3}{2}}}B(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \\ \frac{B^2}{k^2} \cos \theta \sin \theta + \frac{\sqrt{m}}{k^{\frac{3}{2}}}B(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) & \frac{B^2}{k^2} \cos^2 \theta + \frac{m}{k} + 2\frac{\sqrt{m}}{k^{\frac{3}{2}}}B \sin \theta \cos \theta \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{K}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Escogeremos una matriz de rotación que diagonalice a la matriz \mathbf{M}' , con el objetivo de no tener acopladas a las coordenadas \dot{y}_1 y \dot{y}_2 , para lograr esto tenemos que resolver la siguiente ecuación:

$$\frac{B^2}{k^2} \cos \theta \sin \theta + \frac{\sqrt{m}}{k^{\frac{3}{2}}}B(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) = 0, \quad (3.7)$$

al sustituir la solución (ver apéndice D) de esta ecuación en las entradas \mathbf{M}'_{11} y \mathbf{M}'_{22} nos quedan las siguientes expresiones para las matrices \mathbf{M}' y \mathbf{K}'

$$\mathbf{M}' = \begin{pmatrix} M_1 & 0 \\ 0 & M_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}' = \begin{pmatrix} M_1\Omega_1^2 & 0 \\ 0 & M_2\Omega_2^2 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Donde

$$M_1 = \frac{1}{2k^2}[2mk + B^2 + B\sqrt{4mk + B^2}], \quad (3.9)$$

$$M_2 = \frac{1}{2k^2}[2mk + B^2 - B\sqrt{4mk + B^2}] \quad (3.10)$$

y

$$\Omega_i^2 = \frac{1}{M_i}. \quad (3.11)$$

Sustituyendo las matrices \mathbf{M}' y \mathbf{K}' de Ec.(3.8) en Ec.(3.6) obtenemos

$$\mathcal{L}'_{ef} = \sum_{i=1}^2 \left(\frac{1}{2} M_i \dot{y}_i^2 - \frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 y_i^2 \right), \quad i = 1, 2. \quad (3.12)$$

Como podemos ver esta Lagrangiana no tiene términos acoplados. Esta función es la Lagrangiana de dos osciladores armónicos ortogonales e independientes con masas M_i y frecuencias Ω_i . Ahora procederemos a calcular el propagador correspondiente a ésta

$$K(\mathbf{Y}_f, t_f |, \mathbf{Y}_i, t_i) = N \int \mathcal{D}y_i \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}'_{ef}(y_i, \dot{y}_i) dt \right\}.$$

Existen varios métodos de encontrar este propagador, por ejemplo podríamos hacerlo utilizando la forma discreta [18] de la integral de camino tal y como lo hicimos cuando encontramos el propagador de partícula libre Ec.(2.40). Lo que haremos es representar a los caminos como una variación del camino clásico [12] como se muestra a continuación

$$K(\mathbf{Y}_f, t_f |, \mathbf{Y}_i, t_i) = N \int \mathcal{D}y_i \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{1}{2} M_i (\dot{y}_i^{cl} + \delta \dot{y}_i)^2 - \frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 (y_i^{cl} + \delta y_i)^2 \right] dt \right\},$$

con esto podemos expresar al propagador de la siguiente forma

$$K(\mathbf{Y}_f, t_f |, \mathbf{Y}_i, t_i) = N F(t_f - t_i) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S_{ef}^{cl} \right\},$$

donde $F(t_f - t_i)$ son fluctuaciones al camino clásico relacionadas con todos los caminos (excepto el clásico) que unen a los puntos i y f . Con la forma explícita de $F(t_f - t_i)$ y con la expresión para la acción del oscilador armónico [12][18] tenemos que el propagador viene dado por

$$\begin{aligned} K(\mathbf{Y}_f, t_f |, \mathbf{Y}_i, t_i) &= N \left(\prod_{k=1}^2 \frac{M_k \Omega_k}{2\pi i \hbar \sin \{\Omega_k(t_f - t_i)\}} \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\times \exp\left\{ \sum_{k=1}^2 \frac{i M_k \Omega_k}{2\hbar \sin \{\Omega_k(t_f - t_i)\}} [(y_{kf}^2 + y_{ki}^2) \cos \Omega_k(t_f - t_i) - 2y_{ki}y_{kf}] \right\}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Ahora que contamos con la expresión del propagador de nuestro sistema Ec.(3.13), haremos el siguiente cambio de variable en ésta para obtener la expresión de las eigenfunciones y eigenvalores del sistema

$$\sin \{\Omega_k(t_f - t_i)\} = \frac{1}{2i} \frac{1-p^2}{p} \quad \text{y} \quad \cos \{\Omega_k(t_f - t_i)\} = \frac{1}{2} \frac{1+p^2}{p},$$

donde $p = \exp \{-i\Omega_k(t_f - t_i)\}$. Además definiremos a las siguientes variables

$$\xi_{ki} = \sqrt{\frac{M_k \Omega_k}{\hbar}} y_{ki} \quad \text{y} \quad \xi_{kf} = \sqrt{\frac{M_k \Omega_k}{\hbar}} y_{kf}.$$

Con esto la Ec.(3.13) se escribe de la siguiente forma

$$\begin{aligned} K(\xi_{kf}, t_f |, \xi_{ki}, t_i) &= N \left(\prod_{k=1}^2 \frac{M_k \Omega_k p}{2\pi i \hbar} \right)^{\frac{1}{2}} (1-p^2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\xi_{kf}^2 + \xi_{ki}^2) \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{2\xi_{kf}^2 \xi_{ki}^2 p - (\xi_{kf}^2 + \xi_{ki}^2) p^2}{1-p^2} \right\}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Utilizamos la siguiente relación conocida como fórmula de Mehler [19]

$$(1-p^2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{2\xi_{kf}^2 \xi_{ki}^2 p - (\xi_{kf}^2 + \xi_{ki}^2) p^2}{1-p^2} \right\} = \sum_{n_k=0}^{\infty} \frac{1}{2^{n_k} n_k!} H_{n_k}(\xi_{ki}) H_{n_k}(\xi_{kf}) p^{n_k},$$

donde H_{n_k} son los polinomios de Hermite. Con esto el propagador Ec.(3.14) nos queda como sigue

$$K(\xi_{kf}, t_f |, \xi_{ki}, t_i) = N \left(\prod_{k=1}^2 \frac{M_k \Omega_k p}{2\pi i \hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\xi_{kf}^2 + \xi_{ki}^2) \right\} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^{n_k} n_k!} H_{n_k}(\xi_{ki}) H_{n_k}(\xi_{kf}) p^{n_k}.$$

Al regresar el cambio de variable (a las variables $\mathbf{Y}_{i,f}$) obtenemos

$$\begin{aligned} K(\mathbf{Y}_f, t_f |, \mathbf{Y}_i, t_i) &= N \left(\prod_{k=1}^2 \frac{M_k \Omega_k}{2\pi i \hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{M_k \Omega_k}{\hbar} y_{kf}^2 + \frac{M_k \Omega_k}{\hbar} y_{ki}^2 \right) \right\} \\ &\times \sum_{n_k=0}^{\infty} \frac{1}{2^{n_k} n_k!} H_{n_k} \left(\sqrt{\frac{M_k \Omega_k}{\hbar}} y_{ki} \right) H_{n_k} \left(\sqrt{\frac{M_k \Omega_k}{\hbar}} y_{kf} \right) \\ &\times \exp \left\{ -i\Omega_k(t_f - t_i) \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Comparamos a Ec.(3.15) con Ec.(2.34) y concluimos que las eigenfunciones de este sistema son

$$\phi(\mathbf{Y}_f) = N^{\frac{1}{2}} \left(\prod_{k=1}^2 \frac{M_k \Omega_k}{2\pi i \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{M_k \Omega_k}{\hbar} y_{kf}^2 \right) \right\} H_{n_k} \left(\sqrt{\frac{M_k \Omega_k}{\hbar}} y_{kf} \right).$$

Así mismo, los eigenvalores de la energía

$$E_{n_k} = \left(n_k + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega_k,$$

por lo que la energía total es

$$E_{n_1, n_2} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega_1 + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega_2 \quad (3.16)$$

Esta expresión es el análogo cuántico de $E = E_+ + E_-$ del caso clásico (Ec.(1.37)). A continuación analizaremos el espectro de energía dado por Ec.(3.16). Comenzaremos por escribir a las frecuencias Ω_i como sigue (usamos las Ecs.(3.9), (3.10) y (3.11))

$$\Omega_1 = \frac{\sqrt{2}k}{\sqrt{2mk + B^2 + B\sqrt{4mk + B^2}}}$$

y

$$\Omega_2 = \frac{\sqrt{2}k}{\sqrt{2mk + B^2 - B\sqrt{4mk + B^2}}}.$$

Si consideramos $B \ll m$ y k fija, nos queda

$$\Omega_1 = \sqrt{\frac{k}{m} - \frac{B}{2m}} + 2 \left(\frac{B^2}{8\sqrt{m^3k}} \right)^2 + \mathcal{O}(B^4)$$

y

$$\Omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m} + \frac{B}{2m}} + 2 \left(\frac{B^2}{8\sqrt{m^3k}} \right)^2 + \mathcal{O}(B^4),$$

por lo que, en el límite $\frac{B}{m} \rightarrow 0$, la energía total Ec.(3.16) toma la siguiente forma

$$E_{n_1, n_2, n_3}^{\frac{B}{m} \rightarrow 0} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 + \left(n_3 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 \quad n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots \quad (3.17)$$

Aquí es necesario tomar en cuenta a la coordenada x_3 ya que sin campo el movimiento no será restringido al plano. La expresión anterior es la de la energía del oscilador armónico tridimensional tal como era de esperarse al disminuir la intensidad del campo. De la misma forma, las frecuencias se pueden escribir, para $k \ll B$ y m fija, como sigue:

$$\Omega_1 = \frac{k}{B} \left[1 - \frac{km}{B^2} + 2 \left(\frac{km}{B^2} \right)^2 \right] + \mathcal{O} \left(\left(\frac{k}{B^2} \right)^4 \right)$$

y

$$\Omega_2 = \frac{B}{m} + \frac{k}{B} \left[1 - \frac{km}{B^2} + 2 \left(\frac{km}{B^2} \right)^2 \right] + \mathcal{O} \left(\left(\frac{k}{B^2} \right)^4 \right),$$

con esto nos queda que, en el límite $\frac{k}{B} \rightarrow 0$, la energía está dada por

$$E_n^{\frac{k}{B} \rightarrow 0} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.18)$$

donde $\omega_c = \frac{B}{m}$ se conoce como frecuencia de ciclotrón (es la frecuencia de una partícula de masa m cargada en presencia de un campo magnético). Ec.(3.18) coincide completamente con la energía de teoría reducida correspondiente a $k = 0$.

Para $m \ll B^2$ tenemos

$$\Omega_1 = \frac{k}{B} \left[1 - \frac{km}{B^2} + 2 \left(\frac{km}{B^2} \right)^2 \right] + \mathcal{O} \left(\left(\frac{m}{B^2} \right)^4 \right)$$

y

$$\Omega_2 = \frac{B}{m} + \frac{k}{B} \left[1 - \frac{km}{B^2} + 2 \left(\frac{km}{B^2} \right)^2 \right] + \mathcal{O} \left(\left(\frac{m}{B^2} \right)^4 \right),$$

por lo que

$$\lim_{\frac{m}{B^2} \rightarrow 0} \Omega_1 = \frac{k}{B}$$

y

$$\lim_{\frac{m}{B^2} \rightarrow 0} \Omega_2 = \lim_{\frac{m}{B^2} \rightarrow 0} \left(\frac{B}{m} + \frac{k}{B} \right) \rightarrow \infty.$$

Entonces, para el límite considerado, es necesario hacer la siguiente redefinición $\Omega_2 \rightarrow \Omega_2 - \left(\frac{B}{m} + \frac{k}{B} \right)$ ya que éste nos dará un valor finito para la energía que coincide con el de la teoría reducida correspondiente a $m \ll B^2$ [17].

$$E_n^{\frac{m}{B^2} \rightarrow 0} = \frac{k}{B} \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.19)$$

Por otro lado vimos que los límites $B \ll m$ y $k \ll B$ nos dan el resultado exacto de la teoría reducida en la energía, mientras que para hacer coincidir el límite $m \ll B^2$ de la teoría general con la correspondiente teoría reducida hubo que considerar la redefinición $\Omega_2 \rightarrow \Omega_2 - \left(\frac{B}{m} + \frac{k}{B} \right)$.

Para analizar el hecho de que no coincidan directamente la energía E_n y $E_n^{m \ll B^2}$, utilizaremos a

$$\mathcal{L}'_{eff} = \frac{1}{2} M_i \dot{y}_i^2 - \frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 y_i^2, \quad i = 1, 2$$

y a

$$M_1 = \frac{1}{2k^2} [2mk + B^2 + B\sqrt{4mk + B^2}] = \frac{B^2}{k^2} \left[\frac{2mk}{B^2} + 1 + \sqrt{\frac{4mk}{B^2} + 1} \right]$$

$$M_2 = \frac{1}{2k^2} [2mk + B^2 - B\sqrt{4mk + B^2}] = \frac{B^2}{k^2} \left[\frac{2mk}{B^2} + 1 - \sqrt{\frac{4mk}{B^2} + 1} \right]$$

vemos que al considerar el límite nos queda

$$M_1^{m \ll B^2} = \frac{B^2}{k^2}$$

$$M_2^{m \ll B^2} = 0$$

es decir en el límite sólo tendremos la lagrangiana de un oscilador con masa $M_1^{m \ll B} = \frac{B^2}{k^2}$ y por lo tanto frecuencia $\Omega_1^{m \ll B^2} = \frac{B}{K}$ y el hecho de que $M_2^{m \ll B^2} = 0$ implica que es necesario considerar $\Omega_2 = 0$.

Para concluir, podemos decir que el escribir a la función Lagrangiana del sistema en forma matricial y considerar una transformación ortogonal y otra escalar de las matrices que la forman, nos permitió reescribir la Lagrangiana como la correspondiente a dos osciladores independientes, lo cual nos facilitó obtener el propagador del sistema. De ahí, al realizar los cambios de variable correspondientes, obtuvimos directamente las eigenfunciones y eigenvalores del sistema.

A continuación utilizaremos la teoría desarrollada con la integral de camino para dispersión, analizando la dispersión de Rutherford.

3.2. Dispersión de Rutherford

Ahora aplicaremos la teoría desarrollada en el capítulo 2 a la dispersión de Rutherford, la cual tiene las siguientes características: es la dispersión de una partícula cargada y sin spin en un potencial Coulombiano. Satisface las siguientes condiciones iniciales: en $t \rightarrow -\infty$ la partícula es libre, luego es dispersada y es libre nuevamente en $t \rightarrow +\infty$.

Partimos de sustituir el potencial de Coulomb ($V(\mathbf{x}) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}|}$) en la Ec.(2.53) (la cual nos da la amplitud de dispersión de una partícula que cumpla con las condiciones iniciales que describimos al inicio del capítulo a través de cualquier potencial $V(\mathbf{x}, t)$), y obtenemos

$$\mathcal{A} = -\frac{i}{(2\pi)^3 \hbar} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f) \cdot \mathbf{x} - (E_i - E_f)t] \right\} \frac{1}{|\mathbf{r}|} d\mathbf{x} dt.$$

Procedemos a resolver la integral anterior, comenzamos por integrar con respecto a t , lo que nos da (usamos la Ec.(2.48))

$$\mathcal{A} = -\frac{i}{(2\pi)^3 \hbar} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} 2\pi \hbar \delta(E_f - E_i) \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f) \cdot \mathbf{x} \right\} \frac{1}{|\mathbf{r}|} d\mathbf{x} dt,$$

esta última integral no converge en el infinito, introduciremos un factor de amortiguamiento dado por $\exp\{-a\mathbf{r}\}$ para hacer que la integral sea convergente y luego tomaremos el límite $a \rightarrow 0$ para deshacernos de este factor, con esto nos queda resolver la siguiente integral

$$\mathcal{A} = -\frac{i}{(2\pi)^3 \hbar} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} 2\pi \hbar \delta(E_f - E_i) \lim_{a \rightarrow 0} \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f - a\mathbf{r}) \cdot \mathbf{x}] \right\} \frac{1}{|\mathbf{r}|} d\mathbf{x} dt,$$

la que nos da como resultado $\frac{4\pi\hbar^2}{\mathbf{q}^2}$, con $\mathbf{q} = \mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f$ y así nos queda

$$\mathcal{A} = -\frac{i}{(2\pi)^2} \frac{Ze^2\hbar^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\mathbf{q}^2} \delta(E_f - E_i),$$

lo que corresponde a la amplitud de dispersión, a partir de ella podemos calcular la sección de dispersión σ .

Además $|A|^2$ nos da la probabilidad de que una partícula emerja con momento \mathbf{P}_f . De igual forma tendremos que $|A|^2 \frac{(2\pi)^3}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{P}_f$ nos da la probabilidad de que una partícula emerja con momento entre \mathbf{P}_f y $\mathbf{P}_f + d\mathbf{P}_f$, donde $(2\pi)^3$ es el factor de normalización.

Así mismo, si consideramos el tiempo de la interacción T , tendremos que $\frac{|A|^2}{T} \frac{(2\pi)^3}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{P}_f$ es el número de partículas por segundo que emergen en este rango de momento. Para obtener las secciones de dispersión dividimos por el flujo incidente $\frac{\mathbf{P}_i}{m}$ e integramos con respecto a \mathbf{P}_f . Considerando que hay $\frac{1}{(2\pi)^3}$ partículas por unidad de volumen, tendremos entonces que el flujo incidente es $\frac{\mathbf{P}_i}{(2\pi)^3 m}$ partículas por segundo por unidad de área.

Así la sección de dispersión será:

$$\sigma = \int \frac{|A|^2}{T} \frac{(2\pi)^3 m}{\hbar^3 \mathbf{P}_i} d\mathbf{P}_f,$$

al calcular $|\delta(\frac{E_i - E_f}{\hbar})|^2$ nos queda ¹

$$|\delta(E_i - E_f)|^2 = \frac{T}{2\pi\hbar} \delta(E_i - E_f),$$

con este resultado tendremos que σ es

$$\sigma = \frac{mZ^2e^4}{4\pi^2\epsilon_0^2} \int \frac{1}{P_i \mathbf{q}^4} \delta(E_f - E_i) d\mathbf{P}_f.$$

Como $P_i = (2mE_i)^{\frac{1}{2}}$ y $d^3\mathbf{P}_f \rightarrow \mathbf{P}_f^2 dP_f d\Omega$, además $dP_f = (2mE_f)^{-\frac{1}{2}} m dE_f$, después de integrar con respecto a E_f nos queda

$$\sigma = \frac{m^2 Z^2 e^4}{4\pi^2 \epsilon_0^2} \int \frac{1}{\mathbf{q}^4} d\Omega,$$

¹Es necesario calcular esta cantidad ya que la involucra $|A|^2$. El procedimiento para calcularla es haciendo la siguiente consideración:

$$\delta\left(\frac{E_i - E_f}{\hbar}\right) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \exp\left\{\frac{i(E_i - E_f)}{\hbar} t\right\} dt.$$

Integrar con respecto a t . Luego calcular el área debajo de la función obtenida en la integral anterior y usar el hecho

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\sin^2(\alpha x)}{\alpha x^2} = \pi \delta(x).$$

ahora como $\mathbf{q} = \mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f$ tenemos

$$\mathbf{q}^2 = P_i^2 + P_f^2 - 2P_i P_f \cos \theta.$$

Ya que $P_i = P_f \equiv P$ obtenemos, en forma diferencial con $P = mv$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

Lo que corresponde a la fórmula de Rutherford. Como vimos, surgió de analizar la aproximación a primer orden de la amplitud de dispersión dada en la serie de Born. De igual forma podemos obtener la sección de dispersión correspondiente a otros órdenes de esta serie, comenzando por obtener la amplitud de dispersión hasta el orden deseado utilizando las reglas de Feynman descritas en el capítulo 2, así como las condiciones que se deseen estudiar. Por ejemplo podemos analizar la dispersión de Rutherford considerando que la partícula se encuentra en presencia de un campo magnético uniforme. Donde podemos aprovechar la expresión del propagador obtenida en la sección (3.1).

Conclusiones

Hemos descrito la forma de analizar fenómenos cuánticos no relativistas, utilizando la representación de integral de camino del propagador de la mecánica cuántica. Para lograr esto, fue necesario revisar el concepto de acción de la mecánica clásica, ya que éste se relaciona con el hecho de que a nivel clásico, las partículas describen una trayectoria (la que deje estacionaria a la acción) en el espacio en el que se represente su cambio de estado. El propagador surgió de introducir la idea de que a nivel cuántico todas las trayectorias son posibles para la evolución de un sistema, y nos ayuda a describir dicha evolución.

Entre las propiedades importantes que se analizaron del propagador, está la relación del mismo con las eigenfunciones ϕ_n y los eigenvalores de la energía E_n de un sistema. Vimos que al construir el propagador (en su forma de integral de camino) de un sistema, de éste se leen directamente ϕ_n y E_n , esto se ve claro en Ec.(2.34). También se presentó la forma de analizar procesos de dispersión utilizando la integral de camino, esto nos llevó a establecer un compendio de reglas (reglas de Feynman) para calcular la amplitud de probabilidad de una dispersión.

Otra característica importante que revisamos del concepto de acción fue su relación con la energía mecánica total, vimos que el principio de mínima acción se puede presentar diciendo *la energía cinética promedio menos la energía potencial promedio es mínima para la trayectoria que sigue un objeto que va desde un punto inicial a uno final*.

Podemos decir que hemos cumplido con el objetivo principal de este trabajo de tesis, de obtener las herramientas necesarias para analizar sistemas cuánticos utilizando la integral de camino. Así como el de presentar la interpretación de *todos los caminos posibles* para la evolución de un sistema cuántico, lo cual es alternativo a la dualidad onda-partícula de Louis de Broglie.

Apéndice A

Principio de Mínima Acción y Energía Mecánica total.

El principio de mínima acción es equivalente a decir que *la trayectoria que sigue una partícula en el espacio de configuración es aquella para la cual la diferencia $T - V$ es mínima*, nótese que es la diferencia entre la energía cinética y la potencial lo que se minimiza y no la energía total de un sistema, analizaremos ésto de la siguiente manera [7]:

Partimos del hecho de que por la primera ley de Newton, sabemos que una partícula libre moviéndose a velocidad constante con respecto a un sistema de referencia inercial, sigue una línea recta en el plano (t, x) ; trataremos de “justificar” el hecho de que la partícula siga esa trayectoria. Lo haremos respondiendo lo siguiente ¿tiene la naturaleza alguna razón energética para este fenómeno?, por ejemplo ¿por qué la partícula no toma la trayectoria alternativa denotada por LMN y formada por los segmentos A y B como se muestra en Fig.(A.1)?.

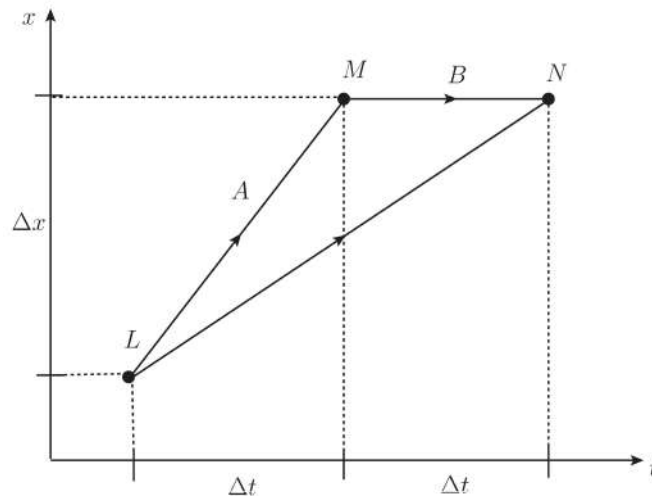


Figura A.1: Trayectoria LMN alternativa a LN.

El primer intento de responder la pregunta es diciendo “la naturaleza quiere que la partícula gaste la menor energía cinética para ir del punto L al N”, si esta respuesta es correcta entonces la energía cinética a lo largo de la trayectoria LN será menor que la de la trayectoria alternativa LMN.

Al hacer el análisis, obtenemos los siguientes resultados para la energía cinética correspon-

diente a la trayectoria LN es

$$T = \frac{1}{2}m \left(\frac{\Delta x}{2\Delta t} \right)^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2}m \left(\frac{\Delta x}{\Delta t} \right)^2 \right). \quad (\text{A.1})$$

Que es igual a la energía cinética promedio de esta trayectoria denotada por $\langle T_{LN} \rangle$. Mientras que para la energía cinética promedio correspondiente a la trayectoria LMN tenemos

$$\langle T_{LMN} \rangle = \frac{1}{2} \times T_A + \frac{1}{2} \times T_B = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}m \left(\frac{\Delta x}{\Delta t} \right)^2 \right), \quad (\text{A.2})$$

comparando el resultado de Ec.(A.1) con Ec.(A.2) concluimos que la respuesta que dimos a la pregunta anterior parece ser correcta, para verificar que lo es analizaremos qué implica, sobre el movimiento de la partícula, el hecho de que gaste el mínimo de energía cinética. Comenzamos por calcular la variación de la energía cinética promedio correspondiente a la trayectoria LN y obtenemos

$$\delta \langle T \rangle \approx -\frac{1}{2} \frac{dp}{dt} \delta x.$$

Ahora, tomando en cuenta que la condición para que la energía cinética sea mínima es que no tenga cambios para variaciones pequeñas δx , concluimos que se debe cumplir

$$\delta \langle T \rangle \approx -\frac{1}{2} \frac{dp}{dt} \delta x = 0.$$

Lo que para variaciones arbitrarias implica

$$\frac{dp}{dt} = 0,$$

de donde tenemos $p = \text{constante}$, que es equivalente a decir que la velocidad de la partícula es constante y por tanto la trayectoria de la partícula es una línea recta en (t, x) . En conclusión *la partícula libre sigue una línea recta en (t, x) ya que es así como “gasta” la menor cantidad de energía cinética.*

Cuando consideramos que la partícula está sometida a un potencial $V(x)$ y tratamos de justificar su trayectoria extendiendo la idea anterior, i.e. proponiendo que la partícula seguirá la trayectoria para la cual la energía total es mínima, encontramos la siguiente relación

$$-\frac{dp}{dt} + \frac{dV}{dx} = 0.$$

Lo cual contradice a la segunda ley de Newton. La siguiente respuesta que podemos proponer es “la razón energética de la naturaleza de que la partícula siga cierta trayectoria, debido a que está

sujeta a un potencial $V(x)$, es que ésta gaste el mínimo de diferencia entre la energía cinética y la potencial”, al aplicar esta idea obtenemos

$$\delta\langle T - V \rangle = \frac{1}{2} \left(-\frac{dp}{dt} - \frac{dV}{dx} \right) \delta x = 0.$$

Donde nuevamente para variaciones arbitrarias

$$-\frac{dp}{dt} - \frac{dV}{dx} = 0,$$

lo que corresponde a la segunda ley de Newton. En conclusión podemos enunciar esta segunda ley, de otra forma, diciendo *la energía cinética promedio menos la energía potencial promedio es mínima para la trayectoria que sigue un objeto que va desde un punto inicial a uno final* [8].

Apéndice B | Otras representaciones para el propagador libre.

Sea $\mathcal{H}_0(\mathbf{P}_f t_f; \mathbf{P}_i t_i)$ la amplitud de probabilidad de que una partícula con momento \mathbf{P}_i en el tiempo t_i sea observada después con un momento \mathbf{P}_f en un tiempo t_f , la cual estará dada por la transformada de Fourier de $\mathcal{K}_0(\mathbf{x}_f t_f; \mathbf{x}_i t_i)$ de la siguiente forma:

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{P}_f t_f; \mathbf{P}_i t_i) = \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{P}_f \cdot \mathbf{x}_f\right) \mathcal{K}_0(\mathbf{x}_f t_f; \mathbf{x}_i t_i) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{x}_i\right) d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}_f.$$

El propagador libre $\mathcal{K}_0(\mathbf{x}_f t_f; \mathbf{x}_i t_i)$ está dado en 3-D, generalización del obtenido en 1-D, por

$$\mathcal{K}_0(\mathbf{x}_f t_f; \mathbf{x}_i t_i) = \Theta(t_f - t_i) \left(\frac{m}{2\pi i(t_f - t_i)}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left\{\frac{im}{2\hbar} \frac{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_f)^2}{t_f - t_i}\right\},$$

lo cual sustituimos en la expresión de \mathcal{H}_0 y nos queda

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0(\mathbf{P}_f t_f; \mathbf{P}_i t_i) &= \Theta(t_f - t_i) \left(\frac{m}{2\pi i(t_f - t_i)}\right)^{\frac{3}{2}} \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{x}_i - \mathbf{P}_f \cdot \mathbf{x}_f)\right\} \\ &\times \exp\left\{\frac{im}{2\hbar} \frac{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_f)^2}{t_f - t_i}\right\} d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}_f. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Para evaluar la integral de Ec.(B.1) haremos los siguientes cambios de variable

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_f & \mathbf{X} &= \mathbf{x}_i + \mathbf{x}_f \\ \mathbf{p} &= \mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f & \mathbf{P} &= \mathbf{P}_i + \mathbf{P}_f. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

De donde

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{X} = 2(\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{x}_i - \mathbf{P}_f \cdot \mathbf{x}_f).$$

El jacobiano de la transformación es $(\frac{1}{2})^3$ con esto y con Ec.(B.2), la Ec.(B.1) se escribe de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0(\mathbf{P}_f t_f; \mathbf{P}_i t_i) &= \Theta(t_f - t_i) \left(\frac{m}{2\pi i(t_f - t_i)}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{2}\right)^3 \int \exp\left\{\frac{i}{2\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{X})\right\} d\mathbf{X} \\ &\times \int \exp\left(\frac{i}{2\hbar} \mathbf{P} \cdot \mathbf{x}\right) \exp\left(\frac{im}{2\hbar} \frac{\mathbf{x}^2}{t_f - t_i}\right) d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Usamos el hecho

$$\exp\left\{\frac{i}{2\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{X})\right\} d\mathbf{X} = (2\hbar)^3 (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}),$$

en Ec.(B.1) y como $\mathbf{p} = \mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f$ nos queda

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_0(\mathbf{P}_f t_f; \mathbf{P}_i t_i) &= \Theta(t_f - t_i) \left(\frac{m}{2\pi i(t_f - t_i)} \right)^{\frac{3}{2}} (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f) \\ &\times \exp\left(-\frac{i}{8m\hbar} \mathbf{P}^2(t_f - t_i)\right). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

La función delta que aparece en Ec.(B.4) implica la conservación del momento lineal, por lo tanto el propagador libre será diferente de cero sólo cuando exista conservación de momento lineal. Esto además implica (de $\mathbf{P} = \mathbf{P}_i + \mathbf{P}_f$) que $\mathbf{P}^2 = 4\mathbf{P}_i^2$ por lo tanto la Ec.(B.4) también se escribe como sigue

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_0(\mathbf{P}_f t_f; \mathbf{P}_i t_i) &= \Theta(t_f - t_i) \left(\frac{m}{2\pi i(t_f - t_i)} \right)^{\frac{3}{2}} (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f) \\ &\times \exp\left(-\frac{i}{2m\hbar} \mathbf{P}_i^2(t_f - t_i)\right). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

La Ec.(B.5) es la amplitud de probabilidad de la transición de una partícula con \mathbf{P}_i en t_i a \mathbf{P}_f en t_f . Es importante mencionar que si queremos recuperar el propagador en el espacio coordenado tenemos que calcular la transformada de Fourier de Ec.(B.5) lo que nos da la siguiente expresión que será de gran ayuda en cálculos de dispersión.

$$\mathcal{K}_0(\mathbf{x}_f t_f; \mathbf{x}_i t_i) = \Theta(t_f - t_i) \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_f) - \frac{\mathbf{q}^2}{2m}(t_f - t_i) \right]\right\} d\mathbf{q}. \quad (\text{B.6})$$

Ahora cambiaremos al espacio de momento y energía realizando la transformada de Fourier de la dependencia temporal en la Ec.(B.5). Comenzamos por sustituir a $\mathcal{K}_0(\mathbf{P}_f t_f; \mathbf{P}_i t_i)$ en la siguiente expresión

$$\mathcal{K}_0(\mathbf{P}_f E_f; \mathbf{P}_i E_i) = \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} E_f t_f\right\} \mathcal{K}_0(\mathbf{P}_f t_f; \mathbf{P}_i t_i) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_i t_i\right\} dt_i dt_f$$

con lo que nos queda

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_0(\mathbf{P}_f E_f; \mathbf{P}_i E_i) &= (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f) \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} (E_f t_f - E_i t_i)\right\} \Theta(t_f - t_i) \\ &\times \exp\left\{-\frac{i}{2m\hbar} \mathbf{P}_i^2(t_f - t_i)\right\} dt_i dt_f. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Haremos el siguiente cambio de variable $\tau = t_f - t_i$ para resolver la integral de Ec.(B.8) de donde $t_f = \tau + t_0$. Con esto tendremos

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_0(\mathbf{P}_f E_f; \mathbf{P}_i E_i) &= (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f) \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t_i\right\} dt_i \\ &\times \int \Theta(t_f - t_i) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left(E_f - \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m}\right) \tau\right\} d\tau. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

La presencia de la función paso en la integral respecto a τ , reduce la integral a

$$\int_0^\infty \exp(i\omega\tau) d\tau, \quad (\text{B.9})$$

donde

$$\omega = \frac{1}{\hbar} \left(E_f - \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} \right). \quad (\text{B.10})$$

Para que la ingral Ec.(B.9) converja necesitamos $\omega \in \mathbb{C}$, por lo tanto nos conviene hacer el siguiente cambio $\omega \rightarrow \omega + i\alpha$ con $\alpha \in \mathbb{R}^+$ y $\alpha \ll 1$. Así la solución de la integral dada por Ec.(B.9) es

$$\int_0^\infty \exp\{i(\omega + i\alpha)\tau\} d\tau = \frac{1}{i(\omega + i\alpha)}. \quad (\text{B.11})$$

El resultado de la integral respecto a t_i de Ec.(B.8), se presenta a continuación

$$\int \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t_i \right\} dt_i = 2\pi\delta(E_f - E). \quad (\text{B.12})$$

Sustituimos a las Ecs.(B.11) y (B.12) en Ec.(B.8) y nos queda que el propagador en el espacio de momento y energía está dado por

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{P}_f E_f; \mathbf{P}_i E_i) = (2\pi\hbar)^4 \delta(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f) \delta(E_f - E) \frac{i\hbar}{E_f - \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + i\alpha}, \quad (\text{B.13})$$

de donde concluimos que se da la propagación sólo si hay conservación de la energía y del momento. Esto nos permite escribir las reglas de Feynman en el espacio de momento y energía las cuales son más fácil de recordar que las escritas en el espacio coordenado ya que se basan en argumentos físicos (conservación de E y de \mathbf{P}).

Apéndice C

| Soluciones de la Ec.(3.7).

Debido a que la Ec.(3.7)¹ es una ecuación de cuarto grado, tiene como soluciones los siguientes cuatro valores para $\cos \theta$:

$$\begin{aligned} \cos \theta_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{4mk + B^2 + \sqrt{B^4 + 4B^2mk}}{B^2 + 4mk}}, & \cos \theta_2 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{4mk + B^2 + \sqrt{B^4 + 4B^2mk}}{B^2 + 4mk}}, \\ \cos \theta_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{4mk + B^2 - \sqrt{B^4 + 4B^2mk}}{B^2 + 4mk}}, & \cos \theta_4 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{4mk + B^2 - \sqrt{B^4 + 4B^2mk}}{B^2 + 4mk}}. \end{aligned}$$

Al sustituir cada una de estas soluciones en las entradas $\mathbf{M}'_{11} = M_1$ y $\mathbf{M}'_{22} = M_2$ obtenemos el siguiente comportamiento

$$\begin{aligned} M_1(\cos \theta_1) &= M_2(\cos \theta_4), & M_1(\cos \theta_2) &= M_2(\cos \theta_3), \\ M_2(\cos \theta_1) &= M_1(\cos \theta_4) & \text{y} & \quad M_2(\cos \theta_2) = M_1(\cos \theta_3) \end{aligned}$$

de donde podemos concluir que sólo dos soluciones son distinguibles. Para decidir cuál solución utilizaremos para la rotación, consideramos el hecho $\Omega_i^2 = \frac{1}{M_i}$ y analizamos las diferentes series de frecuencias obtenidas con las soluciones $\cos \theta_1$ y $\cos \theta_2$. Vimos que para las series $m \ll B^2$ con k fija, y $B \ll m$ con k fija, obtenemos resultados factibles para ambas soluciones. Lo que nos ayuda a discriminar a una de las soluciones, son las series para $k \ll B$ y m fija, con las cuales obtenemos:

Con $\cos \theta_1$

$$\begin{aligned} \Omega_1 &= \left(\frac{1}{M_1(\cos \theta_1)} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{k}{B} \left[1 - \frac{km}{B^2} + 2 \left(\frac{km}{B^2} \right)^2 \right] + \mathcal{O} \left(\left(\frac{m}{B^2} \right)^4 \right), \\ \Omega_2 &= \left(\frac{1}{M_2(\cos \theta_1)} \right)^{\frac{1}{2}} = 0. \end{aligned}$$

Y con $\cos \theta_2$

$$\Omega_1 = \left(\frac{1}{M_1(\cos \theta_2)} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{k}{B} \left[1 - \frac{km}{B^2} + 2 \left(\frac{km}{B^2} \right)^2 \right] + \mathcal{O} \left(\left(\frac{k}{B^2} \right)^4 \right),$$

¹La cual al resolverla nos da los valores de $\cos \theta$, y con ello los de $\sin \theta$, que nos sirven para que la matriz \mathbf{M}' sea diagonal y desacoplar las coordenadas \dot{y}_1 y \dot{y}_2 .

$$\Omega_2 = \left(\frac{1}{M_2(\cos \theta_2)} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{B}{m} + \frac{k}{B} \left[1 - \frac{km}{B^2} + 2 \left(\frac{km}{B^2} \right)^2 \right] + \mathcal{O} \left(\left(\frac{k}{B^2} \right)^4 \right).$$

Al comparar las series, observamos que sólo las obtenidas con la solución $\cos \theta_2$ nos permiten tener una correspondencia con las teorías reducidas como se ve al final del capítulo 3.

Bibliografía

- [1] Brown, Laurie M., *Feynman's Thesis: A New Approach to Quantum Theory*, World Scientific, (2005).
- [2] Gelfand, I.; Fomin, S., *Calculus of Variations*, New Jersey, Prentice-Hall, (1963).
- [3] Goldstein, Herbert.; et al. *Classical Mechanics*, Addison Wesley, tercera edición (1965).
- [4] Maupertuis, P., *Les Loix du mouvement et du repos deduites d'un principe de métaphysique*, 1746.
- [5] Whittaker, E., *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies*, Cambridge U. P., cuarta edición, p. 253.
- [6] Ogborn Jon, Hanc Jozef and Taylor Edwin, *Action on Stage: Historical Introduction*; The Girep conference 2006, Modeling in Physics and Physics Education, Universiteit van Amsterdam.
- [7] Neuenschwander Dwight, Taylor Edwin and Tuleja Slavomir: *The Physics Teacher* 44 (2006).
- [8] Feynman, Richard.; Leighton, Robert B.; Sands, Matthew., *The Feynman Lectures on Physics Vol. II*; San Francisco: Addison Wesley, (1964), p. 19-8.
- [9] Dirac P. *The Lagrangian in Quantum Mechanics*[*Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, Band 3, Heft 1 (1933)]
- [10] Feynman, Richard. *QED: the strange theory of light and matter*, Princeton science library,(1985).
- [11] Feynman, Richard, *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics*; *Rev.Mod.Phys.* **20**,367-387 (1948)

-
- [12] Feynman, Richard.; Hibbs, Albert., *Quantum Mechanics and Path Integral*, McGraw-Hill,(1965).
- [13] Greiner, W., *Quantum Mechanics an introduction*, Springer, tercera edición, (1989)
- [14] Edwin F. Taylor, Stamatis Vokos and John M. O'Meara, y Nora S. Thornber Teaching, Computers in Physics, Vol. 12, No 2, (1998).
- [15] Ryder Lewis, *Quantum Field Theory*; Cambridge University Press; segunda edición (1996)487 p.
- [16] Feng-Hua Liu, et al., Int. J. Theor. Phys.48, (2009)
- [17] Dunne, G. V., Jackiw, R., Trugenberger, C.A.:Phys. Rev. D **41**, 661 (1990)
- [18] Acosta Robles, Juan Ernesto., *El propagador de Feynman del Oscilador Armónico: Métodos para su estudio y aplicación*; Universidad de Sonora; (2010).
- [19] Weisstein, Eric W. "Mehler's Hermite Polynomial Formula."From MathWorld–A Wolfram Web Resource. <http://mathworld.wolfram.com/MehlersHermitePolynomialFormula.html>