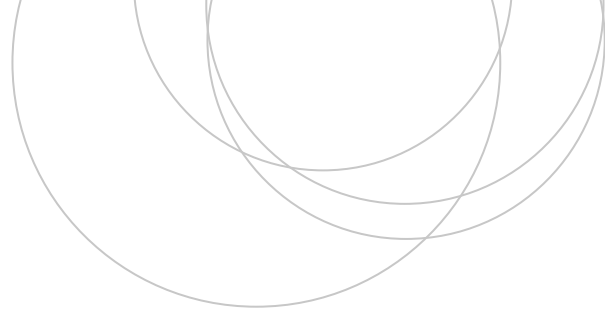




Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

ZIENTZIA
ETA TEKNOLOGIA
FAKULTATEA
FACULTAD
DE CIENCIA
Y TECNOLOGÍA



Gradu Amaierako Lana / Trabajo Fin de Grado
Fisikako Gradua / Grado en Física

Integrales de camino en mecánica cuántica

Egilea/Autor:
Aitor Vicente Cano
Zuzendaria/Director:
Gotzon Madariaga Menéndez

© 2021, "Aitor Vicente Cano"

Leioa, 2021ko ekainaren 18a /Leioa, 18 de junio de 2021

Índice

1. Introducción	1
1.1. Introducción histórica	1
1.2. Objetivos	1
2. Cuantización	3
2.1. Experimento de la doble rendija	3
2.2. Suma a todos los caminos	5
2.3. Postulados	6
2.4. Construcción de la integral de camino	7
2.5. Regla de composición de amplitudes de probabilidad	10
3. Mecánica cuántica	12
3.1. La función de onda	12
3.2. Ecuación de Schrödinger	13
3.3. Elementos de transición	15
3.4. Núcleo en la mecánica cuántica ondulatoria	17
3.5. Integral de camino a partir de la cuántica tradicional	19
4. Resolución de sistemas físicos	23
4.1. La partícula libre	23
4.2. Aproximación semiclásica	25
4.3. Oscilador armónico	28
4.4. Teoría de perturbaciones	31
5. Conclusiones	36
Bibliografía	38

1 Introducción

1.1. Introducción histórica

A principios del siglo XX comienza el desarrollo de la mecánica cuántica, ya que emana la necesidad de explicar experiencias que la física clásica no abarca. Esta nueva rama de la física da solución a problemas capitales como la catástrofe del ultravioleta o el efecto fotoeléctrico. La mecánica cuántica antigua, anterior a 1925, carece de una coherencia global, ya que es el conjunto de estudios sobre diversos sistemas cuánticos sin una base matemática importante que subyace a todos ellos y los liga de alguna forma. En 1925 surgen dos descripciones matemáticas diferentes para explicar los fenómenos cuánticos: la formulación ondulatoria de Schrödinger y la matricial de Heisenberg, equivalentes entre sí. Con estos dos formalismos, se construye lo que se conoce hoy en día como la mecánica cuántica moderna, basada en vectores pertenecientes a espacios de Hilbert y operadores lineales que actúan sobre estos [1].

Las integrales de camino es un formalismo alternativo de la mecánica cuántica moderna no relativista desarrollado por Richard Feynman en *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics* (1948) [2]. Esta formulación constituye una continuación de su tesis doctoral *The Principle of Least Action in Quantum Mechanics* (1942) [3] inspirada en el trabajo realizado por Dirac. En este enfoque de la mecánica, se rehúsa la noción clásica de trayectoria que sigue una partícula desde un punto inicial a otro final; en su lugar, diremos que todo camino que conecta ambos puntos tiene cierta amplitud de probabilidad de ser transitado por la partícula. Es decir, como la partícula puede haber viajado a su destino a través de cualquier camino, interpretaremos que el movimiento se da por todas las trayectorias al mismo tiempo. Así pues, Feynman introduce el concepto de integral de camino como la manera que disponemos para considerar todos los caminos [4].

Pese a que su formulación no se ha encontrado tan atractiva como la imagen de Schrödinger, que está en todos los libros de texto de mecánica cuántica, tiene diversas aplicaciones útiles en disciplinas como la mecánica estadística, la materia condensada o la teoría cuántica de campos. En esta última, se generaliza el concepto original de integral sobre todas las trayectorias a los campos que describen el sistema. Por lo tanto, resulta interesante conocer las herramientas que vamos a desarrollar debido a su transversalidad.

1.2. Objetivos

El objetivo de este trabajo es construir la mecánica cuántica moderna a través de la idea de las integrales de camino, prescindiendo de la cuantización canónica de los observables

físicos descritos por operadores, y demostrar que a partir de esta premisa se puede obtener la mecánica cuántica tradicional ¹[5]. Desarrollaremos la descripción matemática de la integral de camino a través de argumentos plausibles con los resultados del experimento de la doble rendija con electrones. Posteriormente veremos cómo se entiende en este contexto la función de onda, estableciendo el nexo con el formalismo de Schrödinger.

Aplicaremos la teoría desarrollada a sistemas cuánticos sencillos consiguiendo la evolución exacta de la partícula libre y el oscilador armónico. Asimismo, mostraremos dos maneras de aproximar el núcleo de un sistema cuántico cuando el problema no tiene solución analítica: la aproximación semiclásica (válida cuando los efectos cuánticos se presentan en forma de fluctuaciones respecto de la descripción clásica) y la teoría de perturbaciones (aplicable cuando el potencial es débil).

¹Utilizaremos los calificativos *tradicional* y *usual* para referirnos a las dos primeras formulaciones de la mecánica cuántica moderna: la mecánica ondulatoria y la mecánica matricial.

2 Cuantización

En este primer capítulo vamos a cuantizar un sistema formado por una partícula, esto es, dotar a un sistema clásico de más grados de libertad de tal manera que podamos explicar los experimentos de naturaleza cuántica. Para ello, utilizaremos el experimento de la doble rendija con materia para argumentar los postulados que sustentarán la teoría. Todo esto nos llevará a la definición de la integral de camino de Feynman, la cual nos dará la amplitud de probabilidad de transición de la partícula de un punto inicial a otro final.

2.1. Experimento de la doble rendija

Consideremos el experimento de la doble rendija con partículas masivas (electrones, por ejemplo). Disponemos de una fuente A que emite electrones con una velocidad perpendicular a dos pantallas, de tal manera que todos tienen las mismas condiciones iniciales [4].

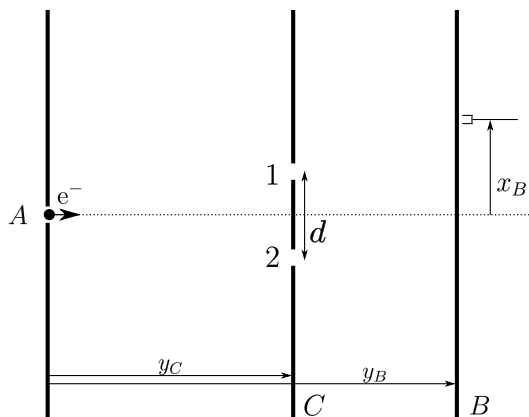


Figura 2.1: experimento de la doble rendija.

En la figura 2.1 distinguimos las dos pantallas, C y B , que se sitúan a una distancia y_C y y_B de la fuente A . La pantalla C tiene dos rendijas paralelas muy estrechas, separadas una distancia d , que permiten el paso de los electrones hasta la pantalla B . Los electrones salen de A , atraviesan C y son detectados en B a una altura x_B .

Si los electrones se comportaran como partículas clásicas, ninguno de ellos atravesaría la pantalla C ya que todos los electrones se acabarían chocando en la mitad de C .

Conocemos los histogramas de detección en cuatro situaciones diferentes, véase la figura 2.2. Analicemos la información que nos aportan las cuatro gráficas con el fin de obtener unos postulados:

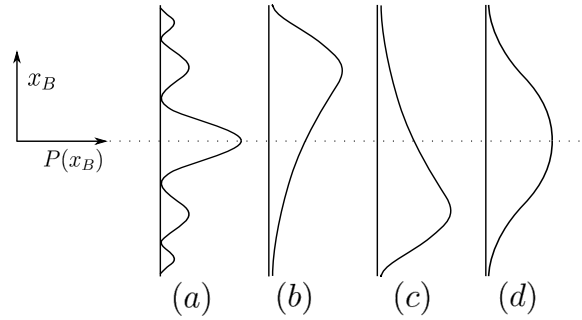


Figura 2.2: patrones de interferencia en cuatro situaciones: (a) dos agujeros abiertos, (b) agujero 2 tapado, (c) agujero 1 tapado, (d) cuando medimos por qué rendija ha pasado el electrón, es la suma de (b) y (c).

- I En todas las situaciones, la posición de llegada del electrón x_B , no es la misma. Este hecho rompe con las leyes de la mecánica clásica, ya que si emitimos varias partículas con la mismas condiciones iniciales (CI), todas seguirían el mismo camino $x_{\text{clás}}(t)$ llegando al mismo punto final. ¿Entonces, los electrones no siguen el camino clásico?
- II Dado que los electrones no llegan al mismo punto, habiendo partido con las mismas CI, nos vemos obligados a interpretar los resultados como *distribuciones de probabilidad de llegada* de un electrón a la pantalla B . ¿Qué naturaleza tiene esta distribución de probabilidad?
- III Es contraintuitivo que la distribución (d), suma de las distribuciones (b) y (c), no sea igual a la distribución (a). ¿Cómo influye el número de caminos posibles por los que el electrón puede atravesar la pantalla C en los resultados?
- IV El acto de medir por cuál de los agujeros pasa el electrón cambia la distribución que observamos. Entonces, si interactuamos con el electrón en la mitad del viaje, modificamos su estado del movimiento bruscamente.
- V La distribución de llegada del electrón en la situación (a) tiene la misma forma que la intensidad de un patrón de interferencia cuando se realiza este experimento con una fuente de luz. Por la similitud de ambas experiencias, podemos decir que el análogo a la amplitud electromagnética en el experimento con electrones es una amplitud de probabilidad de llegada $\phi(x_B)$ al punto x_B . Como disponemos de dos rendijas tendríamos dos amplitudes. Al igual que el campo eléctrico, la amplitud de probabilidad cumple el principio de superposición. Siguiendo con la similitud, la intensidad luminosa es proporcional al módulo al cuadrado de la amplitud eléctrica, por lo que la distribución de probabilidad vendrá dada por el módulo al cuadrado de la amplitud de probabilidad total.

Las probabilidades clásicas se basan en la suma de distribuciones, sin embargo, estamos sumando amplitudes de probabilidad. Entonces, tendremos fenómenos de interferencia que clásicamente no aparecerían.

2.2. Suma a todos los caminos

En el experimento de la doble rendija podemos llegar al punto x_B tras haber atravesado la pantalla C por la rendija 1 o 2, por lo tanto, tenemos dos amplitudes de probabilidad que contribuirán a la amplitud de probabilidad total en x_B : $\phi(x_B) = \phi_1(x_B) + \phi_2(x_B)$ [4].

Ahora, añadimos una pantalla D con 5 rendijas muy estrechas entre A y C tal y como se esboza en la figura 2.3.

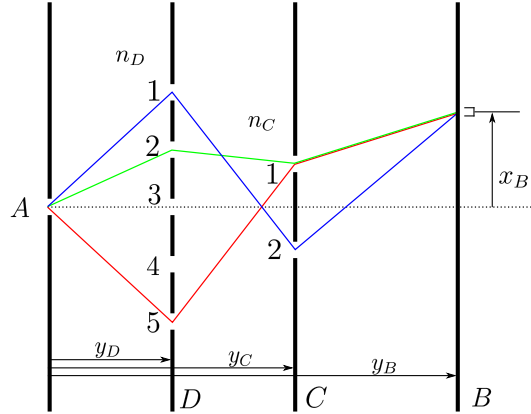


Figura 2.3: experimento de dos pantallas con 5 y 2 rendijas cada una. En esta situación, se han trazado cuatro caminos posibles por los que el electrón viaja desde la fuente a la pantalla final B .

El electrón pasará por un solo agujero de cada una de las dos pantallas. La amplitud de probabilidad total de detectar una partícula en x_B es la suma de todas las amplitudes de cada forma posible de llegar a B . Podemos escribir la amplitud total como:

$$\phi(x_B) = \sum_{n_D=1}^5 \sum_{n_C=1}^2 \phi_{n_D, n_C}(x_B) \quad (2.1)$$

donde n_D y n_C hacen referencia a los agujeros por los cuales ha pasado la partícula.

Si realizamos más agujeros a la pantalla D , el electrón dispondrá de más caminos por los cuales pasar. Supongamos que hemos realizado tantos agujeros que los tenemos que etiquetar con un número real, la distancia x_D , en vez de con natural n_D , de tal forma que el electrón puede pasar por un conjunto continuo de agujeros. Dicho de otra manera, hemos realizado tantos agujeros que la pantalla D está totalmente agujereada, ha desaparecido completamente, véase la figura 2.4. El sumatorio en n_D que aparece en (2.1) se convierte en una integral en x_D :

$$\sum_{n_D} \rightarrow \int dx_D. \quad (2.2)$$

Si colocamos más pantallas agujereadas completamente entre A y B , de tal forma que hay una pantalla para cada valor de y , es fácil concluir que los posibles caminos por los que puede ir el electrón es una función dependiente de la distancia a la fuente $x(y)$. Ya que el electrón se sitúa en cada instante de tiempo en un punto concreto, podemos parametrizar el camino con el tiempo t , obteniendo $(x(t), y(t))$, donde t corre desde un tiempo inicial a uno final de detección.

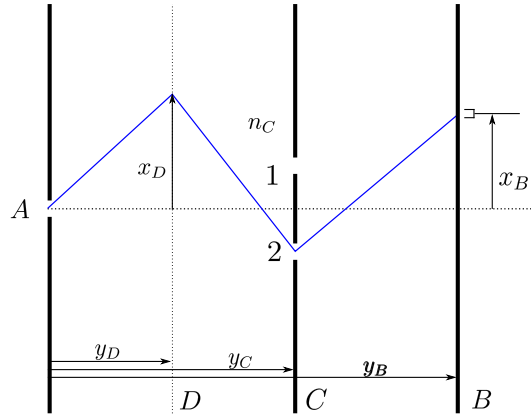


Figura 2.4: un camino posible cuando se ha agujereado completamente la pantalla D .

Por lo tanto, la amplitud de probabilidad total de detectar un electrón en el punto (x_B, y_B) es la siguiente suma:

$$\phi(x_B, y_B) = \sum_{\text{todos los caminos } (x(t), y(t))} \phi(\text{camino } (x(t), y(t))) \quad (2.3)$$

donde hemos utilizado \sum para indicar la suma integral a todos los caminos de manera informal.

Hasta ahora, hemos considerado caminos bidimensionales con el objetivo de obtener (2.3). A partir de este momento, nos restringiremos por simplicidad al estudio de las amplitudes de probabilidad de caminos unidimensionales $x(t)$.

2.3. Postulados

Podemos sintetizar la esencia del razonamiento expuesto sobre la naturaleza de la doble rendija en una serie de postulados:

- I Existe una amplitud de probabilidad compleja $\phi(x)$ asociada con todos los procesos por los que un evento puede tener lugar en un punto x .

Los eventos que vamos a tratar son las detecciones ideales de partículas y los procesos por los cuales pueden tener lugar, corresponden a los caminos que ha podido trazar la partícula para llegar al punto donde se detecta.

- II La amplitud de probabilidad total de que ocurra ese evento es la suma de todas las amplitudes $\phi_n(x)$, donde n recorre todas los procesos:

$$\phi(x) = \sum_n \phi_n(x). \quad (2.4)$$

- III La distribución de probabilidad de detectar ese evento a lo largo de la coordenada x es el módulo al cuadrado de la amplitud de probabilidad total, esto es:

$$P(x) = |\phi(x)|^2. \quad (2.5)$$

Esta cantidad suele denominarse *distribución de probabilidad de presencia*.

iv *Postulado de la medida*: si interrumpimos el viaje de una partícula antes de llegar a su destino, modificamos la amplitud de probabilidad total.

Con los tres primeros postulados, somos capaces de explicar las probabilidades cuánticas; el postulado número iv es necesario dada la naturaleza de la interacción observador-sistema en mecánica cuántica. Asimismo, necesitamos un quinto postulado que relacione la amplitud de probabilidad de detectar la partícula en x , $\phi(x)$, con el proceso que ha provocado que la partícula llegue ahí; es decir, con la trayectoria que sigue la partícula desde un punto inicial hasta el punto final, en el cual se detecta. Así pues, el último postulado que Feynman tomó en su formulación es el siguiente:

v Todos los caminos contribuyen con la misma magnitud, pero diferente fase. La *fórmula de Dirac-Feynman* nos da, salvo una constante de normalización, la amplitud de probabilidad de que la partícula viaje por un camino $x(t)$ entre un punto inicial y otro final [6]:

$$\phi(x(t)) \propto e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \quad (2.6)$$

donde $S[x(t)]$ es la acción de ese camino y \hbar es la constante reducida de Planck, la cual representa la unidad de acción cuántica, cuyo valor experimental es: $\hbar = 1,054\,571\,817 \times 10^{-34}$ Js [7].

2.4. Construcción de la integral de camino

La amplitud de probabilidad total de una partícula que parte de x_a en un instante de tiempo t_a y se detecta en x_b en un tiempo posterior t_b , la denominaremos *núcleo* o *propagador* $K(x_b, t_b; x_a, t_a) \equiv K(b, a)$, donde los puntos espaciotemporales (sin connotaciones relativistas) son $a = (x_a, t_a)$ y $b = (x_b, t_b)$. Utilizando los postulados, el núcleo tiene la siguiente forma:

$$K(b, a) = \sum_{\text{todos los caminos}} \text{const. } e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \quad (2.7)$$

donde se elegirá la constante de proporcionalidad tal que la probabilidad quede normalizada [4].

Para realizar la *suma a todos los caminos*, veamos que cualquier camino continuo $x(t)$ se puede dibujar en un plano de abscisa x y ordenada t . Como queremos que la física sea causal, los caminos deben ser funciones inyectivas del tiempo. Al igual que ocurre en la definición de integral de Riemann¹, para realizar la suma integral a todos los caminos deberemos discretizar la variable independiente, es decir, la variable temporal t en $N + 1$ puntos equiespaciados por un intervalo pequeño $\varepsilon = \frac{t_b - t_a}{N}$

$$t_a \leq t \leq t_b \quad \rightarrow \quad t_n = t_a + n\varepsilon; \quad n = 0, \dots, N \quad (2.8)$$

¹La similitud con la integral de Riemann debe tomarse con perspectiva, ya que para sumar a todos los caminos las posiciones también son variables independientes que tendremos que integrar. El objetivo con el cuál realizamos esta analogía es proporcionar al lector una razón conocida de la discretización de una variable continua como es el tiempo.

con $t_0 = t_a, t_N = t_b$. Realizaremos los cálculos necesarios con el tiempo discretizado y posteriormente tomaremos el límite al continuo $\varepsilon \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$, recuperando el tiempo tal y como lo percibimos, como un continuo.

Debido a la inyectividad de cada camino, para cualquier tiempo t_n la partícula se encontrará en un punto x_n . Por lo tanto, cualquier conjunto de puntos $\{x(t_n) = x_n\}_{n=0}^N$, que verifica $x_0 = x_a, x_N = x_b$ nos determina cualquier camino de tiempo discreto. Podemos decir que la trayectoria continua que traza la partícula viene dada por la unión con líneas rectas, de puntos temporalmente consecutivos, tal y como se muestra con cuatro ejemplos en la figura 2.5. Esta clase de caminos de tiempo discreto los denominaremos *caminos discretos*.

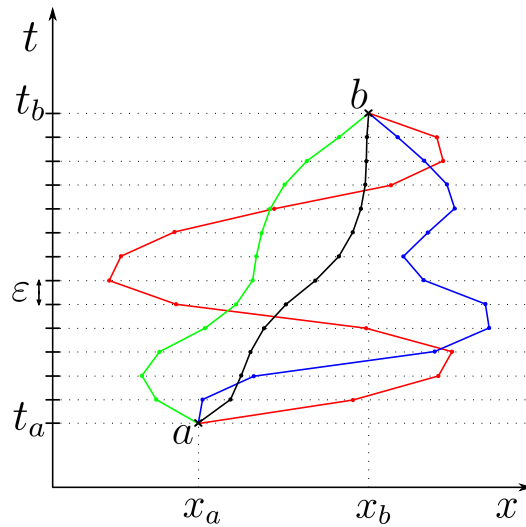


Figura 2.5: cuatro caminos discretos que conectan los puntos inicial a y final b .

Ya que la unión entre dos puntos consecutivos $(x_n, t_n), (x_{n+1}, t_{n+1})$ es totalmente irrelevante cuando tomemos el límite al continuo, podemos argumentar de forma más elegante que la trayectoria que une a cualquier par de puntos $(x_n, t_n), (x_{n+1}, t_{n+1})$ es la trayectoria física dada por el principio de la acción estacionaria [4].

Al discretizar el tiempo, la acción de cada camino discreto es una suma en n :

$$S[\{x_n\}] = \sum_{n=1}^N \varepsilon L(x_n, \dot{x}_n, \varepsilon); \quad \dot{x}_n \equiv \frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} \quad (2.9)$$

donde $L(x, \dot{x}, t)$ es la lagrangiana del sistema clásico.

Los parámetros libres de cada camino discreto son las variables continuas x_n , con la excepción de x_0 y x_N , que están fijadas. Por lo tanto, la suma a todos los caminos es el límite al continuo de $N - 1$ integrales a todo el espacio de la exponencial de la acción discreta $S[\{x_n\}]$, en consecuencia, el núcleo tiene la siguiente forma:

$$K(b, a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A} e^{(i/\hbar)S[\{x_n\}]} \quad (2.10)$$

donde hemos escrito la constante de proporcionalidad como $1/A^N$, con $A = A(\varepsilon)$.

Definimos la medida de integración de la expresión (2.10) como:

$$\mathcal{D}x(t) := \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \prod_{n=1}^{N-1} \frac{dx_n}{A}. \quad (2.11)$$

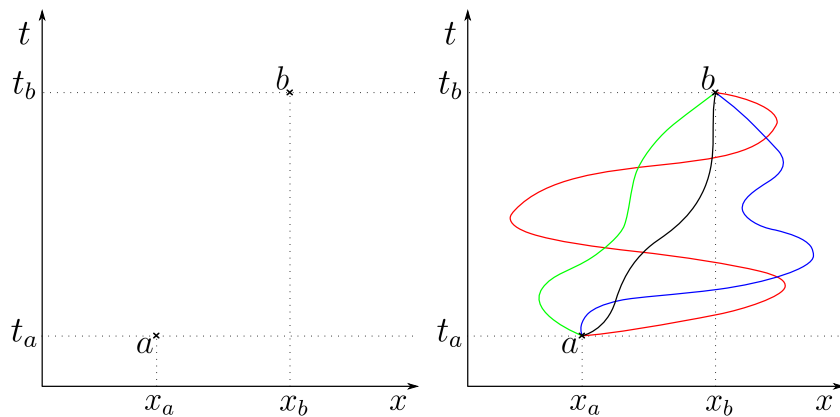
En esta situación, el objeto matemático que toma el papel de *variable de integración* es una función $x(t)$, es decir, integramos variando la forma de función $x(t)$. No nos interesa dar una definición formal de la medida de integración funcional, si no la idea pragmática que subyace de integrar a todo camino utilizando la discretización del tiempo, realizar las integrales y finalmente tomar el límite al continuo.

El núcleo resultante es igual a la **integral de camino de Feynman**:

$$K(b, a) = \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}x(t) e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \quad (2.12)$$

en la cual, se denotan explícitamente las condiciones de contorno. Esta integral debe interpretarse como la suma de todas las amplitudes de probabilidad asociadas a cada camino que conecta a y b por lo cuales la partícula puede viajar.

El proceso de cuantización ha consistido en dotar al sistema de un espacio de grados de libertad mucho mayor que los que clásicamente tiene. En el desarrollo anterior hemos dicho que $x(t)$ toma el papel de variable de integración, porque cualquier camino contribuye a la descripción del sistema. Desde el punto de vista clásico, $x(t)$ es una única trayectoria, la trayectoria física que sigue la partícula. Consiguientemente, el número de grados de libertad que posee una partícula cuántica es inmensamente mayor que la clásica.



(a) Puntos de salida y detección de la partícula experimentalmente. (b) Estructura matemática de caminos transempíricos.

Figura 2.6: diferencia entre la información empírica y teórica sobre el viaje de una partícula.

Dado que empíricamente solo podemos ver en qué punto detectamos la partícula, toda la construcción realizada para codificar los grados de libertad que no podemos conocer mediante experimentos la denominaremos *construcción transempírica*. Este concepto, acuñado por Dirac, nos hace ver que necesitamos dotar a la naturaleza de una *entidad cuántica* (un espacio de grados libertad adicionales), accesible únicamente mediante las matemáticas para poder describir las observaciones empíricas [6].

En la figura 2.6 observamos la diferencia entre la información que está disponible empíricamente y la estructura matemática que creamos para dar sentido a las observaciones. El nexo entre lo observable y la entidad cuántica es la medida, ya que en esta situación la entidad cuántica debe adaptarse a los grados de libertad que dispone la partícula en *nuestra realidad clásica*. Por eso mismo, es menester enunciar el postulado de la medida.

2.5. Regla de composición de amplitudes de probabilidad

Supongamos que tenemos una partícula cuántica que parte de un punto inicial $a = (x_a, t_a)$, la amplitud de probabilidad de presencia en un punto final $b = (x_b, t_b)$, vendrá dada por la integral de camino:

$$K(b, a) = \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}_{(a,b)}x(t) e^{(i/\hbar)S_{(a,b)}[x(t)]}. \quad (2.13)$$

Sea t_c un tiempo intermedio entre t_a y t_b , descomponemos cualquier camino entre a y b en dos partes, tal y como se muestra en la figura 2.7. Una primera con el punto inicial en $x(t_a) = x_a$ y el punto final en $x(t_c) = x_c$; y una segunda parte que comienza en $x(t_c) = x_c$ y finaliza en $x(t_b) = x_b$.

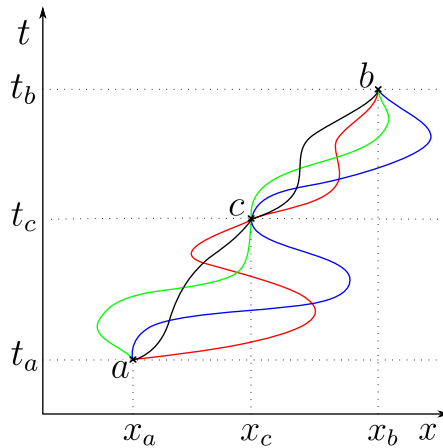


Figura 2.7: cuatro caminos cualesquiera por los cuales la partícula puede viajar de a a b pasando por el punto, temporalmente intermedio, c .

Remarquemos que este punto intermedio no corresponde a una medida, sino a una suposición de que la partícula pase por c en su viaje de a a b . La acción entre a y b puede descomponerse como sigue:

$$S_{(a,b)}[x(t)] = S_{(a,c)}[x(t)] + S_{(c,b)}[x(t)]. \quad (2.14)$$

Asimismo, la medida de integración del núcleo $K(b, a)$ la podemos factorizar de la siguiente manera:

$$\mathcal{D}_{(a,b)}x(t) = \mathcal{D}_{(a,c)}x(t) dx_c \mathcal{D}_{(c,b)}x(t). \quad (2.15)$$

Por lo tanto el propagador del sistema es la siguiente integral:

$$K(b, a) = \int_{\substack{x(t_c)=x_c \\ x(t_a)=x_a}}^{\infty} \mathcal{D}_{(a,c)} x(t) \int_{-\infty}^{\infty} dx_c \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_c)=x_c}}^{\infty} \mathcal{D}_{(c,b)} x(t) e^{(i/\hbar)S_{(a,c)}[x(t)] + (i/\hbar)S_{(c,b)}[x(t)]} \quad (2.16)$$

la cual es separable y podemos agruparla como sigue:

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c \underbrace{\left(\int_{\substack{x(t_c)=x_c \\ x(t_a)=x_a}}^{\infty} \mathcal{D}_{(a,c)} x(t) e^{(i/\hbar)S_{(a,c)}[x(t)]} \right)}_{K(c,a)} \underbrace{\left(\int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_c)=x_c}}^{\infty} \mathcal{D}_{(c,b)} x(t) e^{(i/\hbar)S_{(c,b)}[x(t)]} \right)}_{K(b,c)}. \quad (2.17)$$

Se llama **regla de composición de amplitudes de probabilidad** a la relación:

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K(b, c) K(c, a) \quad (2.18)$$

la cual nos dice que la amplitud de probabilidad de detectar a la partícula en x_b en el tiempo t_b sabiendo que en t_a estaba en x_a , es el producto de amplitudes de transición de a a c y de c a b , integrada para todos los posibles x_c a los que puede ir la partícula. Se puede interpretar este resultado como una división del trayecto total de la partícula en $t = t_c$, donde hay una parte formada por todos los caminos que han contribuido en su pasado para llegar desde x_a hasta x_c y un segundo conjunto conformado por las trayectorias que tomará en un futuro para acabar llegando al punto final; de tal forma que hay dos propagadores: uno que explica su pasado y otro que predice su futuro [4], [6]. Esto nos recuerda al principio de Huygens de óptica ondulatoria por el hecho de que la amplitud total $K(b, a)$ sea la suma de todas las contribuciones $K(b, c)$ que aportan los puntos x_c a los que anteriormente les ha llegado una cierta amplitud $K(c, a)$ [2].

Aplicando esta regla de composición una cantidad muy grande de veces, de tal manera que hemos dividido el intervalo temporal $t_b - t_a$ en N intervalos infinitesimales de una duración ε , el núcleo $K(b, a)$ se puede descomponer de la siguiente manera:

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1} K(b, N-1) \dots K(n+1, n) \dots K(1, a) \quad (2.19)$$

donde, cada núcleo entre dos instantes de tiempo infinitesimalmente consecutivos, es igual a:

$$K(x_{n+1}, t_{n+1}; x_n, t_n) = \frac{1}{A} \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} L \left(x_{n+1}, \frac{x_{n+1} - x_n}{\varepsilon}, \varepsilon \right) \right] \quad (2.20)$$

que es una definición alternativa del propagador, válida a primer orden en ε . Esta ecuación nos da la amplitud de probabilidad de transición de una partícula que se encuentra en x_n al punto x_{n+1} tras un intervalo de tiempo infinitesimal ε . Este núcleo infinitesimal lo podemos definir gracias a que el lagrangiano no depende de derivadas temporales de la posición de orden mayor que uno, porque de ser así, se necesitarían más de dos puntos para expresarlas de forma discreta [2], [6].

3 Mecánica cuántica

A continuación mostraremos cómo se define la función de onda dentro de este marco teórico. Posteriormente, con la demostración de la ecuación de Schrödinger y el estudio de los elementos de transición obtendremos la equivalencia con la mecánica cuántica tradicional. Para finalizar el capítulo, analizaremos cómo se entiende el núcleo dentro del formalismo tradicional y hallaremos la integral de camino utilizando las herramientas mecanocuánticas usuales.

3.1. La función de onda

Hasta el momento, hemos necesitado conocer la posición de partida de la partícula (x_a, t_a) para calcular las amplitudes de probabilidad de presencia en un punto (x_b, t_b) . Normalmente no conocemos con exactitud la posición inicial la partícula en t_a , lo más usual es conocer que proviene de una cierta región. Por consiguiente, vamos a plantear la existencia de una amplitud de probabilidad de presencia en un punto x en un instante t independiente de dónde provenga la partícula. Llamaremos *función de onda* a esta amplitud de probabilidad total y la denotaremos con $\psi(x, t)$ [4].

La función de onda debe satisfacer una ecuación similar a la regla de composición (2.18), ya que es una amplitud de probabilidad. En particular, definimos la función de onda como:

$$\psi(x_b, t_b) := K(x_b, t_b; \cancel{x_a, t_a}) \quad (3.1)$$

que es independiente de la posición inicial. Puesto que la regla de composición de amplitudes de probabilidad se verifica para cualquier (x_a, t_a) , podemos eliminar esta dependencia llegando a la ecuación que debe cumplir la función de onda:

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K(x_b, t_b; x_c, t_c) \psi(x_c, t_c). \quad (3.2)$$

Por lo tanto, la función de onda en el tiempo de llegada $\psi(x_b, t_b)$ es la suma integral a todos los puntos x_c del valor la función de onda en un tiempo anterior $\psi(x_c, t_c)$ modulada por la amplitud de ir desde c a b . Esta forma integral con la cual evoluciona la función de onda nos ratifica que la teoría desarrollada es causal y determinista (en lo que a la evolución se refiere, puesto que en el proceso de la medida tenemos distribuciones de probabilidad) [8].

Luego, si conocemos la función de onda de una partícula en un tiempo determinado, podemos calcular cualquier amplitud de probabilidad de llegada a cualquier punto en un tiempo posterior. En consecuencia, al cuantizar el viaje de una partícula, la condición inicial que necesitamos conocer para determinar su evolución es una función $\psi(x)$, lo cual

remarca la cantidad de grados de libertad que tiene ahora el sistema, ya que clásicamente con dos valores basta (la posición y la velocidad iniciales).

La probabilidad de encontrar a la partícula en cualquier punto del espacio debe ser 1, por lo tanto la función de onda utilizada como condición inicial debe estar normalizada:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1. \quad (3.3)$$

Debido a que no estamos considerando procesos de desintegración, el propagador debe asegurarnos que la función de onda en un tiempo posterior sigue normalizada. Esta será la condición que impondremos para encontrar a la constante A , presente en la definición de integral de camino.

3.2. Ecuación de Schrödinger

Tal y como hemos visto, la evolución de la función de onda viene descrita a través de una integral. Nos preguntamos entonces si podemos codificar la información del sistema que alberga el núcleo en una ecuación diferencial en derivadas parciales para la función de onda. Para ello, veamos cómo cambia una función de onda inicial $\psi(x', t)$, tras un intervalo de tiempo infinitesimal ε [4].

Consideramos que la partícula está sometida a un potencial dependiente del tiempo e independiente de las velocidades $V(x, t)$, de tal forma que la lagrangiana es:

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x, t). \quad (3.4)$$

Introducimos la expresión del núcleo entre dos tiempos infinitesimalmente consecutivos (2.20) y la lagrangiana del sistema (3.4) en la ecuación (3.2), obteniendo:

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{1}{2}m \left(\frac{x - x'}{\varepsilon} \right)^2 - V(x, t) \right] \right\} \psi(x', t). \quad (3.5)$$

Para realizar esta integral necesitaríamos conocer la forma del potencial, pero queremos obtener una expresión general para cualquier $V(x, t)$, así que tenemos que recurrir a aproximaciones.

Cuando el término de la energía cinética es muy grande, esto es:

$$\frac{m(x - x')^2}{2\hbar\varepsilon} \gg 1 \quad (3.6)$$

la fase del integrando oscila mucho con x' , por lo que la integral se cancela en esa región. Solo tendremos una contribución significativa a la integral cuando

$$\eta \sim \left(\frac{\hbar\varepsilon}{m} \right)^{1/2}; \quad \text{con} \quad [\eta = x' - x; \quad d\eta = dx'] \quad (3.7)$$

Utilizando ese cambio de variable, la evolución de la función de onda se escribe:

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp \left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon} \right) \exp \left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, t) \right) \psi(x + \eta, t). \quad (3.8)$$

Desarrollamos en serie de Taylor hasta primer orden en ε los siguientes términos, teniendo en cuenta que $O(\varepsilon) \sim O(\eta^2)$:

$$\begin{aligned}\psi(x, t + \varepsilon) &= \psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + O(\varepsilon^2) \\ \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, t)\right) &= 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, t) + O(\varepsilon^2) \\ \psi(x + \eta, t) &= \psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \eta^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + O(\varepsilon^{3/2}).\end{aligned}\quad (3.9)$$

Introduciendo las tres expresiones en (3.8) con la notación $\psi \equiv \psi(x, t)$, $V \equiv V(x, t)$ se tiene:

$$\psi + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{im\eta^2/(2\hbar\varepsilon)} \underbrace{\left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V\right)}_{\text{constante bajo la integral}} \left(\psi + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{2} \eta^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right). \quad (3.10)$$

Integramos las gaussianas imaginarias utilizando las siguientes fórmulas:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\pm \frac{i}{2} ax^2} = e^{\pm i\frac{\pi}{4}} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{1/2}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{\pm \frac{i}{2} ax^2} = e^{\mp i\frac{\pi}{4}} \left(\frac{2\pi}{a^3}\right)^{1/2}, \quad a \in \mathbb{R}^+ \quad (3.11)$$

con las que obtenemos la siguiente ecuación válida a primer orden en ε :

$$\psi + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{A} \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{1/2} \left(\psi + \frac{i \hbar \varepsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V \psi\right). \quad (3.12)$$

Cuando $\varepsilon \rightarrow 0$ debemos tener lo mismo a ambos lados de la ecuación, ya que la función de onda no ha tenido tiempo para evolucionar; por consiguiente, el valor de la constante de proporcionalidad A es:

$$A = \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{1/2}. \quad (3.13)$$

Sustituyendo el valor de A en (3.12), obtenemos la **ecuación de Schrödinger** dependiente del tiempo:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \psi(x, t) \quad (3.14)$$

Esta ecuación en derivadas parciales nos describe de forma determinista la evolución de la función de onda asociada a una partícula en una dimensión. Definiendo el operador hamiltoniano como $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$, la ecuación de Schrödinger se reduce a:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, t). \quad (3.15)$$

Como la evolución de la función de onda puede describirse de forma equivalente mediante la integral que involucra al propagador (3.2) o con la resolución de la ecuación de Schrödinger (3.14), podríamos construir la mecánica cuántica a partir de esta ecuación. Este «nuevo» enfoque propuesto se conoce como mecánica cuántica ondulatoria, la cual

postula la ecuación de Schrödinger como una ecuación de ondas para la materia. Por consiguiente, podemos describir los sistemas cuánticos a través de cualquiera de estas dos formulaciones.

Era necesario encontrar la mecánica cuántica tradicional (en este caso hemos encontrado la imagen de Schrödinger) a partir de las integrales de camino, porque ambas teorías describen los mismos fenómenos.

3.3. Elementos de transición

Si nuestro sistema cuántico está descrito por $\psi(x_a, t_a)$, la amplitud de probabilidad de que pase a estar descrito por $\chi(x_b, t_b)$ en un tiempo posterior $t_b > t_a$ se denomina *amplitud de transición*, y su expresión como una integral de camino es:

$$\langle \chi | \psi \rangle_S = \int dx_a \int dx_b \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}x(t) \chi^*(b) e^{(i/\hbar)S} \psi(a). \quad (3.16)$$

donde el subíndice S hace explícita la dependencia con la acción.

Cualquier cantidad física medible tendrá asociado un determinado funcional dependiente de la trayectoria [2]. Si $\mathcal{F}[x(t)]$ es un funcional cualesquiera, definimos *elemento de transición* como el «promedio» del valor que adopta el funcional a lo largo de todos los caminos entre dos tiempos (inicial y final), en los cuales el sistema está descrito por ψ y χ , respectivamente.

$$\langle \chi | \mathcal{F} | \psi \rangle_S = \int dx_a \int dx_b \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}x(t) \chi^*(b) \mathcal{F}[x(t)] e^{(i/\hbar)S} \psi(a). \quad (3.17)$$

Como la integral es a todos los caminos, el elemento de transición debe ser invariante bajo un cambio de «variable» dado por:

$$x(t) \mapsto x'(t) = x(t) + \eta(t), \quad \mathcal{D}x'(t) = \mathcal{D}x(t) \quad (3.18)$$

donde $\eta(t)$ una función arbitraria fija que adopta valores pequeños. Por consiguiente, si realizamos el cambio de variable en (3.17) y expandimos en serie de Taylor hasta primer orden en η , despreciando el resto de términos, obtenemos la siguiente ecuación:

$$\left\langle \chi \left| \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x(s)} \right| \psi \right\rangle_S = -\frac{i}{\hbar} \left\langle \chi \left| \mathcal{F} \frac{\delta S}{\delta x(s)} \right| \psi \right\rangle_S. \quad (3.19)$$

Donde s es el tiempo en el cual se realiza la derivada funcional de \mathcal{F} y de la acción. Suele escribirse con diferenciales como sigue:

$$\langle \chi | \delta \mathcal{F} | \psi \rangle_S = -\frac{i}{\hbar} \langle \chi | \mathcal{F} \delta S | \psi \rangle_S. \quad (3.20)$$

Esta ecuación diferencial contiene la información de la evolución de un sistema cuántico, así pues, Julian Schwinger la tomó como punto de partida para desarrollar la mecánica cuántica en 1973. Según el propio Schwinger, este enfoque resulta más elegante y más útil que el formalismo hamiltoniano [4], [9].

Elementos de transición para algunos funcionales

Para los siguientes ejemplos, tomaremos la misma acción que en la sección anterior, por lo que el diferencial funcional de la misma es:

$$\delta S = - \int_{t_a}^{t_b} dt [m\ddot{x} + \partial_x V(x, t)] \delta x(t), \quad \partial_x \equiv \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.21)$$

- Si el funcional es una constante, $\mathcal{F} = \text{const.} \rightarrow \delta \mathcal{F} = 0$, la ecuación (3.20) queda:

$$\langle \chi | m\ddot{x} | \psi \rangle_S = - \langle \chi | \partial_x V(x, t) | \psi \rangle_S. \quad (3.22)$$

Que corresponde al análogo cuántico de la segunda ley de Newton.

- Si el funcional \mathcal{F} depende únicamente de la posición en un tiempo concreto t_c ($t_a < t_c < t_b$), se puede demostrar a partir de la definición de elemento de transición que $\langle \chi | \mathcal{F} | \psi \rangle_S$ es la siguiente integral:

$$\langle \chi | \mathcal{F} | \psi \rangle_S = \int dx_c \chi^*(x_c, t_c) \mathcal{F} \psi(x_c, t_c) \quad (3.23)$$

donde las funciones de onda ψ y χ se evalúan en el mismo tiempo t_c .

- Si discretizamos el tiempo como hemos hecho anteriormente, el siguiente funcional representa el momento lineal en el instante t_k (o en t_{k+1} dependiendo de cómo se defina la velocidad discreta):

$$\mathcal{F} = m \frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon}. \quad (3.24)$$

El elemento de transición entre ψ y χ utilizando (3.23) es:

$$\begin{aligned} \left\langle \chi \left| m \frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right| \psi \right\rangle_S &= \frac{m}{\varepsilon} \langle \chi | x_{k+1} | \psi \rangle_S - \frac{m}{\varepsilon} \langle \chi | x_k | \psi \rangle_S \\ &= \frac{m}{\varepsilon} \left(\int dx \chi^*(x, t + \varepsilon) x \psi(x, t + \varepsilon) - \int dx \chi^*(x, t) x \psi(x, t) \right). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Desarrollando en serie de Taylor las funciones de onda en la variable temporal de la primera integral, tomando el límite al continuo $\varepsilon \rightarrow 0$ y sustituyendo las derivadas temporales según la ecuación de Schrödinger (3.14), obtenemos que el elemento de transición es:

$$\langle \chi | m\dot{x} | \psi \rangle_S = \int dx \chi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x}. \quad (3.26)$$

Por lo tanto, podemos asociar el operador $-i\hbar\partial_x$ al momento lineal de la partícula, de tal forma que los elementos de transición de ambos objetos (el funcional y el operador) son iguales.

- Para cualquier funcional \mathcal{F} que no dependa explícitamente del tiempo, se puede demostrar siguiendo el mismo procedimiento que hemos hecho con el momento lineal,

que el elemento de transición de su derivada temporal en un tiempo intermedio t_c se puede escribir como:

$$\left\langle \chi \left| \frac{d\mathcal{F}}{dt} \right| \psi \right\rangle_S = \frac{1}{i\hbar} \int dx \chi^* (\mathcal{F}H - H\mathcal{F})\psi. \quad (3.27)$$

Con lo cual, el operador asociado a la cantidad \mathcal{F} , $\hat{\mathcal{F}}$, cumplirá la siguiente ecuación:

$$i\hbar \frac{d\hat{\mathcal{F}}}{dt} = [\hat{\mathcal{F}}, \hat{H}], \quad [\hat{\mathcal{F}}, \hat{H}] = \hat{\mathcal{F}}\hat{H} - \hat{H}\hat{\mathcal{F}} \quad (3.28)$$

siempre que se esté operando dentro de un elemento de transición [4].

Estos operadores que hemos asociado a los funcionales que representan a nuestras cantidades físicas, son las entidades matemáticas con las que se trabaja en el enfoque tradicional de la mecánica cuántica. Asimismo, la expresión (3.28) es la ecuación del movimiento de los observables en la imagen de Heisenberg, emergiendo así la equivalencia entre las diferentes formulaciones. Sin embargo, desde el punto de vista de la formulación de Feynman, es indispensable discretizar el tiempo para realizar las operaciones intermedias, ¿qué sentido tiene este hecho? Es sin duda alguna la parte contraintuitiva que tiene este formalismo [2].

3.4. Núcleo en la mecánica cuántica ondulatoria

El elemento clave que tenemos en la formulación mecanocuántica de las integrales de camino es el núcleo del sistema. En la mecánica cuántica tradicional, esta cantidad no suele definirse porque no es necesaria para describir la evolución de la función de onda. Ahora bien, sí podemos encontrar el propagador del sistema utilizando las matemáticas de la mecánica cuántica usual; lo cual es interesante ya que, junto a la función de onda, es el nexo entre el formalismo de integrales de camino y el tradicional.

Mostraremos dos formas de escribir el núcleo utilizando las herramientas de la mecánica cuántica ondulatoria. Asimismo, veremos la relación que existe entre el propagador y la ecuación de Schrödinger.

Representación espectral del núcleo

Sea un sistema regido por un hamiltoniano que no depende explícitamente del tiempo, sabemos que la ecuación de Schrödinger puede solucionarse con una separación de variables y la resolución de un problema de valores propios. Sean $\{\phi_n(x)\}$ las autofunciones de \hat{H} y E_n las energías propias, podemos expresar la evolución de cualquier función de onda $\psi(x, t_a)$ para $t_b > t_a$ como sigue:

$$\psi(x, t_b) = \sum_n c_n \phi_n(x) e^{-(i/\hbar)E_n(t_b-t_a)}. \quad (3.29)$$

donde los coeficientes c_n se obtienen tras utilizar las relaciones de ortonormalidad:

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_n^*(x) \psi(x, t_a). \quad (3.30)$$

Podemos obtener el propagador $K(b, a)$, definido en el capítulo 2 con la integral de camino, a partir de las soluciones del problema de valores propios del hamiltoniano. Para ello, introducimos la expresión de c_n (3.30) en la evolución de la función de onda (3.29):

$$\begin{aligned}\psi(x_b, t_b) &= \sum_n \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx_a \phi_n^*(x_a) \psi(x_a, t_a) \right)}_{c_n} \phi_n(x_b) e^{-(i/\hbar)E_n(t_b-t_a)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_a \underbrace{\sum_n \phi_n^*(x_a) \phi_n(x_b) e^{-(i/\hbar)E_n(t_b-t_a)}}_{K(b,a)} \psi(x_a, t_a).\end{aligned}\tag{3.31}$$

Comparando este resultado con la expresión (3.2), identificamos que el núcleo en términos de los valores y funciones propias es:

$$K(b, a) = \sum_n \phi_n^*(x_a) \phi_n(x_b) e^{-(i/\hbar)E_n(t_b-t_a)}; \quad t_b > t_a.\tag{3.32}$$

Esta relación se denomina *representación espectral del núcleo* [4].

Núcleo y operador evolución

En la mecánica cuántica tradicional es habitual trabajar con vectores-estado o kets $|\psi(t)\rangle$ en vez de funciones de onda, de tal manera que se define la función de onda como la proyección del estado $|\psi(t)\rangle$ sobre el estado posición $|x\rangle$, i.e.: $\psi(x, t) := \langle x|\psi(t)\rangle$ [8].

La evolución de un estado inicial $|\psi(t_a)\rangle$ a un tiempo final t_b , viene descrita por la aplicación del operador evolución $\hat{U}(t_b, t_a)$ a dicho estado. Por lo tanto:

$$|\psi(t_b)\rangle = \hat{U}(t_b, t_a)|\psi(t_a)\rangle\tag{3.33}$$

donde $\hat{U}(t_b, t_a)$ es un operador unitario¹. Introduciendo entre el operador y el ket la siguiente relación de completitud:

$$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_a |x_a\rangle \langle x_a|\tag{3.34}$$

y proyectado la ecuación (3.33) sobre la base de posiciones $|x_b\rangle$, se tiene:

$$\langle x_b|\psi(t_b)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx_a \langle x_b|\hat{U}(t_b, t_a)|x_a\rangle \langle x_a|\psi(t_a)\rangle.\tag{3.35}$$

Por lo tanto, identificamos el propagador como el elemento de matriz del operador evolución en la base de posiciones [5], [10]:

$$K(b, a) = \langle x_b|\hat{U}(t_b, t_a)|x_a\rangle.\tag{3.36}$$

¹Si el hamiltoniano \hat{H} no depende explícitamente del tiempo $\hat{U}(t_b, t_a) = e^{-i\hat{H}(t_b-t_a)/\hbar}$, mientras que si $\hat{H} = \hat{H}(t)$ el operador evolución es $\hat{U}(t_b, t_a) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \hat{H}(t)\right]$.

Núcleo como función de Green

Dado que el operador evolución $\hat{U}(t_b, t_a)$ cumple la ecuación de Schrödinger cuando $t_b - t_a > 0$ tenemos que:

$$\left(i\hbar \frac{d}{dt_b} - \hat{H} \right) \hat{U}(t_b, t_a) \theta(t_b - t_a) = i\hbar \delta(t_b - t_a) \quad (3.37)$$

donde la función de Heaviside $\theta(t_b - t_a)$ refleja la causalidad del operador. Si proyectamos la ecuación a la base de posiciones, el elemento de matriz del operador evolución (el propagador) verifica:

$$\left(i\hbar \frac{d}{dt_b} - \hat{H} \right) K(b, a) \theta(t_b - t_a) = i\hbar \delta(x_b - x_a) \delta(t_b - t_a). \quad (3.38)$$

Esta expresión nos dice que la función de Green de la ecuación de Schrödinger, es el núcleo $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ [5], [10]. Esto no nos sorprende, ya que hemos partido de una ecuación integral que nos da el comportamiento de la función de onda en un tiempo $t_b > t_a$, donde el núcleo de esa ecuación integral es la función de Green de la ecuación diferencial que verifica la función de onda.

3.5. Integral de camino a partir de la cuántica tradicional

Dada la equivalencia entre ambos enfoques a la mecánica cuántica, nos proponemos obtener la integral de camino de Feynman a partir de la definición del operador evolución, el cual es clave en la mecánica cuántica tradicional. Partiendo de la imagen de Schrödinger, nos encontraremos con la integral de camino en el espacio de fases, la cual merece la pena interpretar [5], [11].

Queremos calcular el elemento de matriz del operador evolución (de un hamiltoniano que no depende explícitamente del tiempo por simplicidad) en la base de estados posición:

$$K(b, a) = \langle x_b | \hat{U}(t_b, t_a) | x_a \rangle = \langle x_b | e^{-i\hat{H}(t_b - t_a)/\hbar} | x_a \rangle. \quad (3.39)$$

Podemos dividir $t_b - t_a$ en N intervalos de duración ε , $t_b - t_a = N\varepsilon$, donde $N \gg 1$. Entonces, el operador evolución se escribe:

$$e^{-i\hat{H}(t_b - t_a)/\hbar} = \left(e^{-i\hat{H}\varepsilon/\hbar} \right)^N \quad (3.40)$$

donde el hamiltoniano del sistema es del estilo $H(\hat{x}, \hat{p}) = T(\hat{p}) + V(\hat{x})$. Como ε es un tiempo muy pequeño, podemos aproximar el operador evolución infinitesimal como sigue²:

$$e^{-i\hat{H}\varepsilon/\hbar} = e^{-i\hat{T}\varepsilon/\hbar} e^{-i\hat{V}\varepsilon/\hbar} + O(\varepsilon^2). \quad (3.41)$$

A primer orden en ε , el propagador es:

$$K_\varepsilon(b, a) = \langle x_b | \underbrace{\mathbb{1} e^{-i\hat{T}\varepsilon/\hbar} e^{-i\hat{V}\varepsilon/\hbar}}_{N \text{ veces}} \mathbb{1} \dots \mathbb{1} e^{-i\hat{T}\varepsilon/\hbar} e^{-i\hat{V}\varepsilon/\hbar} | x_a \rangle, \quad K(b, a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} K_\varepsilon(b, a). \quad (3.42)$$

²Es una aproximación debido a que los operadores \hat{x} y \hat{p} no conmutan, $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

A continuación, en cada posición donde hemos escrito $\mathbb{1}$ introduciremos una doble relación de cierre en las bases $|x\rangle$ y $|p\rangle$:

$$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \int_{-\infty}^{\infty} dp_n |x_n\rangle\langle x_n|p_n\rangle\langle p_n|; \quad \langle x|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{ipx/\hbar} \quad (3.43)$$

donde etiquetamos con n a cada par de relaciones de completitud insertadas, $n = 1, 2, \dots, N$; con $x_0 = x_a$ y $x_N = x_b$.

El operador energía cinética es una función del momento lineal, entonces los kets $|p\rangle$ son estados propios de \hat{T} ; por otra parte, el operador potencial $\hat{V} = V(\hat{x})$ tiene como estados propios los kets posición $|x\rangle$. Entonces, para cada identidad introducida en el núcleo, las exponenciales de energía cinética y potencial actúan sobre sus kets y bras propios de la siguiente forma:

$$\langle p_n|e^{-(i/\hbar)\varepsilon T(\hat{p})} = \langle p_n|e^{-(i/\hbar)\varepsilon T(p_n)}; \quad e^{-(i/\hbar)\varepsilon V(\hat{x})}|x_n\rangle = e^{-(i/\hbar)\varepsilon V(x_n)}|x_n\rangle. \quad (3.44)$$

El propagador podemos escribirlo como $2N - 1$ integrales (puesto que la integral en x_N es trivial):

$$K_\varepsilon(b, a) = \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right) e^{i\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N (p_n \frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} - T(p_n) - V(x_{n-1}))} \quad (3.45)$$

que es una expresión exacta a primer orden en ε . Si tomamos el límite $\varepsilon \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$ tal que $t_b - t_a$ lo mantenemos fijo, el conjunto de puntos $\{x_n\}_{n=0}^N$ se convierte en un camino continuo $x(t)$ parametrizado por el tiempo. Este paso al continuo implica las siguientes transformaciones:

$$\begin{aligned} \varepsilon \sum_{n=1}^N &\rightarrow \int_{t_a}^{t_b} dt \\ \frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} &\rightarrow \frac{dx(t)}{dt} \\ T(p_n) + V(x_{n-1}) &\rightarrow T(p(t)) + V(x(t)). \end{aligned} \quad (3.46)$$

El argumento de la exponencial, una vez pasado al continuo, es un funcional de las posiciones y momentos, $S[x(t), p(t)]$. Es decir, la acción en este enfoque tiene como integrando la transformada de Legendre $\dot{x} \rightarrow p$ de la lagrangiana:

$$S[x(t), p(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt [p \dot{x}(x, p) - H(x, p)] \quad (3.47)$$

donde consideramos que el hamiltoniano del sistema es $H(x, p) = T(p) + V(x)$.

La medida funcional en posiciones y momentos cuando pasamos al continuo, se define como sigue:

$$\int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}[x(t), p(t)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right). \quad (3.48)$$

Obteniéndose así la **integral de camino en el espacio de fases**:

$$K(b, a) = \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}[x(t), p(t)] e^{(i/\hbar)S[x(t), p(t)]}. \quad (3.49)$$

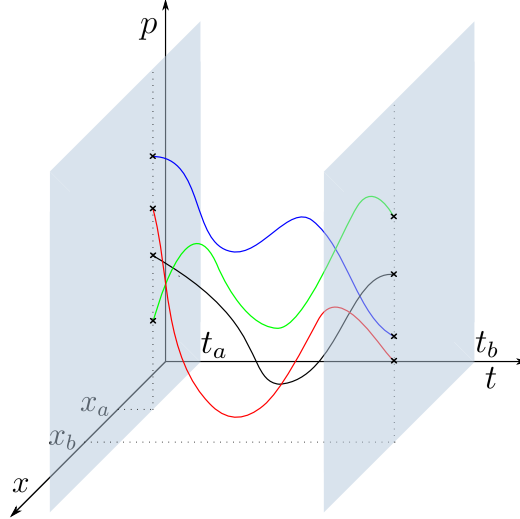


Figura 3.1: cuatro caminos transempíricos del espacio de fases que conectan a con b .

En esta representación del propagador estamos sumando a todos los caminos del espacio de fases caracterizados por $(x(t), p(t))$. Por ende, hemos dotado al sistema del doble de grados de libertad. En la figura 3.1 están representados cuatro posibles caminos por los cuales la partícula ha podido ir desde a hasta b , que son las condiciones de contorno que se aplican en la integral de camino. Sin embargo, no tenemos ninguna condición de contorno sobre los momentos inicial y final ya que estos quedan totalmente determinados al elegir el camino entre a y b . Así pues, el momento inicial y final de la partícula toma todos los valores posibles (debido a que decimos que la partícula evoluciona por todos los caminos).

Si integramos funcionalmente sobre los momentos lineales, recuperaremos la integral de camino de Feynman dependiente de posiciones y velocidades. Pero, ¿cómo se realiza una integral de este estilo? La forma que seguiremos de aquí en adelante para integrar funcionalmente será la siguiente: consideraremos al tiempo como una variable discreta, integraremos las N integrales y posteriormente tomaremos el límite $N \rightarrow \infty$, de forma análoga al proceso que hemos seguido para definir las integrales de camino.

Comencemos discretizando el tiempo de la misma forma que hemos hecho anteriormente y tomemos la integral de momentos de (3.45) con la energía cinética $T = p^2/(2m)$. Tenemos que calcular:

$$I = \left(\prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right) e^{i\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left(p_{n+1} \dot{x}_n - \frac{p_n^2}{2m} \right)}; \quad \dot{x}_n = \frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon}. \quad (3.50)$$

Podemos entender las variables de integración como elementos de un vector N -dimensional \mathbf{p} . Esto nos permite escribir la integral de la siguiente forma:

$$I = C \int_{\mathbb{R}^N} d^N \mathbf{p} \exp \left(\frac{i}{2} \mathbf{p}^t \mathbf{A} \mathbf{p} - i \mathbf{b} \cdot \mathbf{p} \right) \quad (3.51)$$

donde:

$$(\mathbf{A})_{jk} = -\frac{\varepsilon}{\hbar m} \delta_{jk}; \quad \mathbf{b} = \frac{\varepsilon}{\hbar} \dot{\mathbf{x}}; \quad C = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N}. \quad (3.52)$$

Siendo conocida la siguiente fórmula para una matriz \mathbf{A} real, simétrica, no degenerada,

de signatura $(\mathcal{N}_+, \mathcal{N}_-)$ y un vector \mathbf{b} real:

$$\int_{\mathbb{R}^n} d^n \mathbf{x} \exp\left(\frac{i}{2} \mathbf{x}^t \mathbf{A} \mathbf{x} \pm i \mathbf{b} \cdot \mathbf{x}\right) = \frac{(2\pi)^{n/2}}{|\det \mathbf{A}|^{1/2}} e^{i\frac{\pi}{4}(\mathcal{N}_+ - \mathcal{N}_-)} \exp\left(-\frac{i}{2} \mathbf{b}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}\right) \quad (3.53)$$

tenemos que (3.51) vale:

$$I = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{N/2} e^{i\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} m \dot{x}_n^2}. \quad (3.54)$$

Por lo tanto, sustituyendo este valor en el núcleo $K_\varepsilon(b, a)$, se tiene:

$$K_\varepsilon(b, a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{N/2} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_n\right) e^{i\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N (\frac{1}{2} m \dot{x}_n^2 - V(x_{n-1}))} \quad (3.55)$$

que llevado al límite $\varepsilon \rightarrow 0$, recuperamos la expresión de la integral de camino de Feynman para el propagador:

$$K(b, a) = \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}x(t) e^{(i/\hbar)S[x(t)]}. \quad (3.56)$$

De esta manera, completamos la equivalencia entre la imagen de Schrödinger y la formulación de las integrales de camino, ya que utilizando las herramientas de cada uno hemos recuperado el elemento clave del otro, ya sea la integral de camino o la ecuación de Schrödinger.

Cabe destacar que hemos hallado el elemento de matriz de $\hat{U}(t_b, t_a)$ cuando el hamiltoniano (o el potencial) no depende explícitamente del tiempo; sin embargo, si sí consideramos la dependencia temporal, mediante un procedimiento similar obtenemos los mismos resultados (3.49) y (3.56).

4 Resolución de sistemas físicos

En este capítulo nos centraremos en el cálculo de los núcleos, ya que estos determinan de forma unívoca la evolución de los sistemas cuánticos. Resolveremos analíticamente los sistemas más sencillos y útiles que nos pueden aparecer: la partícula libre y el oscilador armónico, elementales en cualquier teoría. Lamentablemente, si el potencial de interacción tiene una forma más complicada, no podremos obtener el propagador de forma exacta, por lo que deberemos recurrir a aproximaciones. Desarrollaremos dos aproximaciones válidas en diferentes regímenes: la aproximación semiclásica y la teoría de perturbaciones.

4.1. La partícula libre

Sea una partícula de masa m que puede moverse por una dimensión x cuya lagrangiana es $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2$. Queremos utilizar la integral de camino de Feynman para describir la evolución del sistema cuántico sea cual sea la condición inicial que impongamos, esto es, hallar el núcleo $K(b, a)$. Para ello, necesitamos realizar la integral funcional. Resolveremos analíticamente $N - 1$ integrales asociadas a la suma sobre caminos discretos y posteriormente tomaremos el límite $N \rightarrow \infty$ [4]. El núcleo con el tiempo discretizado es:

$$K_\varepsilon(b, a) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} \left[\prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} \right] e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \sum_{n=1}^N (x_n - x_{n-1})^2}. \quad (4.1)$$

Dado que las integrales tienen forma gaussiana imaginaria, sabemos integrarlas una a una. Comenzamos integrando sobre x_1 , obteniendo lo siguiente:

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} e^{\frac{im}{\hbar\varepsilon} [(x_1 - x_0)^2 + (x_2 - x_1)^2]} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \frac{1}{2} (x_2 - x_0)^2}. \quad (4.2)$$

A continuación planteamos la integral en x_2 , obteniendo:

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} e^{\frac{im}{\hbar\varepsilon} (x_3 - x_2)^2} I_1(x_2) = \frac{1}{\sqrt{3}} e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \frac{1}{3} (x_3 - x_0)^2}. \quad (4.3)$$

Viendo cómo han cambiando los resultados de las integrales, proponemos que la integral n -ésima tenga la forma:

$$I_n = \frac{1}{\sqrt{n+1}} e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \frac{1}{n+1} (x_{n+1} - x_0)^2}. \quad (4.4)$$

Mediante inducción se demuestra que esta fórmula es correcta para todo n , por lo tanto, podemos utilizarla para calcular el núcleo ya que:

$$K_\varepsilon(b, a) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} I_{N-1} = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar N\varepsilon}\right)^{1/2} e^{\frac{im}{2\hbar N\varepsilon} (x_N - x_0)^2}. \quad (4.5)$$

Recuperando la notación usual de los extremos $x_0 = x_a$ y $x_N = x_b$ y notando que $N\varepsilon = t_b - t_a$, obtenemos un $K_\varepsilon(b, a)$ independiente de ε , por lo que el paso al tiempo continuo es trivial. El núcleo de la partícula libre en una dimensión es:

$$K(b, a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{1/2} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}}. \quad (4.6)$$

donde la fase es la acción de la trayectoria clásica dividida entre \hbar .

$$S_{(a,b)}[x_{\text{clás}}(t)] = \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a} \quad (4.7)$$

A continuación, estudiemos brevemente este propagador con el punto inicial $a = (x_a, t_a)$ fijo [4]. Para un tiempo final t_b también fijo, la tasa con la que varía la fase del propagador con respecto de la posición x_b es:

$$k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial S_{(a,b)}[x_{\text{clás}}(t)]}{\partial x_b}. \quad (4.8)$$

Esta tasa de cambio se suele denominar número de onda en física ondulatoria. Asimismo, dos puntos x_b cuyos núcleos difieren en una fase de 2π se encuentran a una distancia de una longitud de onda $\lambda = 2\pi/k$. Por otra parte, sabemos por la mecánica clásica que el momento final de una partícula $p_b \equiv p$ viene descrito por la derivada parcial de la acción con respecto de x_b , por lo tanto:

$$p = \hbar k, \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (4.9)$$

que es relación del momento de una partícula libre con la longitud de onda de de Broglie.

De manera análoga, estudiamos el comportamiento del propagador con respecto del tiempo final t_b para un punto x_b concreto. Se define ω como la variación negativa de la fase del propagador con respecto del tiempo:

$$\omega = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial S_{(a,b)}[x_{\text{clás}}(t)]}{\partial t_b}. \quad (4.10)$$

La energía clásica en el punto final sigue la siguiente expresión:

$$E = -\frac{\partial S_{(a,b)}[x_{\text{clás}}(t)]}{\partial t_b} \quad (4.11)$$

por lo tanto se tiene la relación:

$$E = \hbar\omega, \quad E = h\nu, \quad \nu = \frac{\omega}{2\pi} \quad (4.12)$$

que es la ecuación de Einstein para la energía de la partícula libre.

4.2. Aproximación semiclásica

La gran mayoría de problemas que aparecen en mecánica cuántica son irresolubles de forma analítica. El hecho de que el núcleo de la partícula libre se pueda obtener de forma exacta se debe a que las integrales que nos aparecen son gaussianas. Sin embargo, si la partícula está sometida a un potencial complicado, debemos recurrir a aproximaciones para obtener una descripción del sistema. Las condiciones a las cuales podremos calcular una aproximación del núcleo recaen en las escalas de masa, longitud y tiempo en las que se encuentre el sistema. Diremos que nos encontramos en el **régimen semiclásico** cuando el orden de magnitud de las variables que caracterizan al sistema son lo suficientemente grandes para que la descripción clásica del movimiento sea buena, prevaleciendo sobre los efectos cuánticos que se manifiestan como fluctuaciones de la solución clásica [5]. Esta situación se suele entender como el límite $\hbar \rightarrow 0$, el cual es un abuso de notación ya que \hbar es una constante. Podemos decir de forma equivalente que $\hbar \ll M\ell^2/T$ donde M, ℓ, T son las escalas de masa, longitud y tiempo que caracteriza al sistema. Asimismo, el **límite clásico** de un sistema físico, se da cuando todos los efectos cuánticos desaparecen, es decir, cuando $\hbar = 0$ o equivalentemente $\hbar \lll M\ell^2/T$. En este régimen, la fase del integrando cambia muchísimo cuando variamos el camino de integración $x(t)$; esto produce una cancelación de todas las contribuciones de los caminos que no dejan la fase estacionaria. De modo que el único camino que aporta un valor no nulo al núcleo, es el camino clásico $\bar{x}(t)$; recuperando así el *principio de la acción estacionaria* en el cual se basa la mecánica clásica [4], [10].

La aproximación semiclásica consiste en aplicar el teorema de la fase estacionaria a $e^{iS/\hbar}$ donde S es el funcional acción, de tal forma que únicamente los caminos contiguos a la trayectoria física contribuyan al núcleo. Por lo tanto, primero debemos encontrar el camino que nos deja la acción estacionaria, esto es, la trayectoria clásica $\bar{x}(t)$ que verifica:

$$\left. \frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} \right|_{\bar{x}} = 0. \quad (4.13)$$

A continuación, definimos $r(t) = x(t) - \bar{x}(t)$ como la desviación de un camino cualesquiera respecto del clásico. En la figura 4.1 se representa gráficamente la trayectoria clásica $\bar{x}(t)$

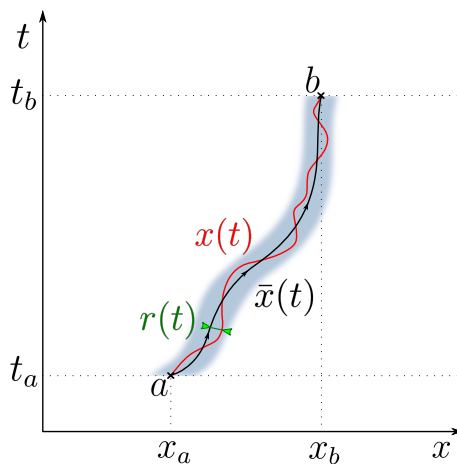


Figura 4.1: fluctuaciones semiclásicas respecto de la trayectoria física.

que une los puntos a y b , un camino $x(t)$ arbitrario en rojo y la fluctuación $r(t)$ en

verde. La región sombreada representa el conjunto de los caminos contiguos al clásico que contribuyen al núcleo. Evidentemente no existe una superficie que encierre a las fluctuaciones, pero es una forma eficaz de entender la aproximación.

Así pues, desarrollamos en *serie de Taylor funcional* la acción hasta segundo orden alrededor de $\bar{x}(t)$:

$$S[x] = S[\bar{x} + r] \approx S[\bar{x}] + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^{t_b} dt' r(t) \left. \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t) \delta x(t')} \right|_{\bar{x}} r(t') \quad (4.14)$$

donde $\left. \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t) \delta x(t')} \right|_{\bar{x}}$ es un operador diferencial que actúa sobre $r(t')$. La forma sencilla de interpretarlo es como la matriz hessiana del desarrollo en serie de Taylor llevada al continuo, en lo que se refiere a índices [5]. Ya que nos es complicado calcular segundas derivadas funcionales, es más sencillo desarrollar en serie de Taylor el lagrangiano del integrando $L(x, \dot{x}, t)$ hasta segundo orden en la fluctuación $r(t)$ alrededor de $\bar{x}(t)$:

$$S[x] = S[\bar{x} + r] \approx S[\bar{x}] + \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} r^2 + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} r \dot{r} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{r}^2 \right) \Big|_{\bar{x}(t)} + O(r^3) \quad (4.15)$$

donde consideraremos que:

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} = m \quad (4.16)$$

proviene exclusivamente de la energía cinética [4], [10]. El segundo término puede reescribirse como un término cuadrático en r tras integrar por partes. Denotaremos con $c(t)$ al coeficiente que acompaña a $r^2/2$, esto es:

$$c(t) = - \left. \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \right|_{\bar{x}(t)} + \frac{d}{dt} \left[\left. \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \right|_{\bar{x}(t)} \right]. \quad (4.17)$$

Por lo tanto, el núcleo semiclásico tiene la siguiente expresión integral:

$$K(b, a) \approx e^{(i/\hbar)S[\bar{x}]} \int_{\substack{r(t_b)=0 \\ r(t_a)=0}} \mathcal{D}r(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{r}^2 - \frac{1}{2} c(t) r^2 \right) \right\}. \quad (4.18)$$

Llamaremos *núcleo o propagador reducido* $F(t_b, t_a)$ a la integral funcional en $r(t)$:

$$F(t_b, t_a) = \int_{\substack{r(t_b)=0 \\ r(t_a)=0}} \mathcal{D}r(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{r}^2 - \frac{1}{2} c(t) r^2 \right) \right\}. \quad (4.19)$$

Discretizando el tiempo t de la misma manera que ya hemos hecho anteriormente, el núcleo reducido se escribe como sigue:

$$\begin{aligned} F(t_b, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N/2} \int_{\mathbb{R}^{N-1}} d^{N-1} \mathbf{r} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{m}{2\varepsilon} (r_j - r_{j-1})^2 - \frac{1}{2} \varepsilon c_j r_j^2 \right) \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N/2} \int_{\mathbb{R}^{N-1}} d^{N-1} \mathbf{r} \exp (i \mathbf{r}^t \mathbf{A} \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.20)$$

donde \mathbf{r} es un vector $(N - 1)$ -dimensional, $r_0 = r_N = 0$ y la matriz \mathbf{A} es una matriz $(N - 1) \times (N - 1)$ real, simétrica, no degenerada, tridiagonal de signatura $(\mathcal{N}_+, \mathcal{N}_-)$:

$$\mathbf{A} = \frac{m}{2\hbar\varepsilon} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & -1 & 2 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & -1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} - \frac{\varepsilon}{2\hbar} \begin{pmatrix} c_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & c_2 & 0 & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & c_3 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & c_{N-1} \end{pmatrix}$$

Utilizando la fórmula (3.53), tenemos que el propagador reducido es:

$$F(t_b, t_a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \frac{1}{|f_{\text{GY}}(t_b, t_a)|} \right)^{1/2} (e^{-i\pi/2})^{\mathcal{N}_-} \quad (4.21)$$

donde se define la función de Gel'fand y Yaglom como sigue:

$$f_{\text{GY}}(t_b, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \varepsilon \det \left(\frac{2\hbar\varepsilon}{m} \mathbf{A} \right). \quad (4.22)$$

Para resolver el límite $N \rightarrow \infty$ del determinante de la matriz $\frac{2\hbar\varepsilon}{m} \mathbf{A}$ utilizaremos el método desarrollado por Gel'fand y Yaglom [12], el cual nos permite hallar f_{GY} a través de la resolución de una ecuación diferencial.

Comencemos desarrollando el $(n + 1)$ -ésimo menor principal M_{n+1} en función de otros menores principales de menor tamaño, obteniendo la siguiente relación recursiva:

$$M_{n+1} = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_{n+1} \right) M_n - M_{n-1} \quad (4.23)$$

válida para todo natural $2 \leq n \leq N - 2$ si cogemos por convenio $M_0 = 1$. Podemos reordenar la ecuación recursiva como sigue:

$$\frac{M_{n+1} - 2M_n + M_{n-1}}{\varepsilon^2} = -\frac{c_{n+1}}{m} M_n. \quad (4.24)$$

Si tomamos el límite $N \rightarrow \infty$ ($\varepsilon \rightarrow 0$), $c_n \rightarrow c(t)$, $t_a \leq t \leq t_b$ la ecuación (4.24) se convierte en una ecuación diferencial ordinaria (EDO) para *el menor principal continuo*, la función de Gel'fand y Yaglom $f_{\text{GY}}(t, t_a)$:

$$\frac{\partial^2 f_{\text{GY}}(t, t_a)}{\partial t^2} = -\frac{c(t)}{m} f_{\text{GY}}(t, t_a) \quad (4.25)$$

con las condiciones iniciales:

$$\begin{aligned} f_{\text{GY}}(t_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \varepsilon M_0 = 0 \\ \frac{\partial f_{\text{GY}}(t, t_a)}{\partial t} \Big|_{t=t_a} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M_1 - M_0}{\varepsilon} = 1. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Por definición, $M_{N-1} = \det \left(\frac{2\hbar\varepsilon}{m} \mathbf{A} \right)$, así que el valor de $f_{\text{GY}}(t_b, t_a)$ debe interpretarse, salvo una constante, como el determinante de operador diferencial anteriormente mencionado:

$$\frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t) \delta x(t')} \Big|_{\bar{x}}. \quad (4.27)$$

Como corolario diremos que siendo conocido el lagrangiano $L(x, \dot{x}, t)$ y la trayectoria clásica $\bar{x}(t)$ de un sistema, podemos hallar el núcleo semiclásico del sistema resolviendo la EDO de Gel'fand y Yaglom con las condiciones iniciales mostradas. Asimismo, el propagador semiclásico es:

$$K(b, a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \frac{1}{|f_{\text{GY}}(t_b, t_a)|} \right)^{1/2} e^{(i/\hbar)S[\bar{x}]} (e^{-i\pi/2})^{\mathcal{N}_-} \quad (4.28)$$

donde la fase $(e^{-i\pi/2})^{\mathcal{N}_-}$ se conoce como *corrección de Maslov* [13]. Esta fase es debida al número de valores propios negativos que tiene la matriz \mathbf{A} . Utilizando álgebra lineal, sabemos que \mathcal{N}_- es el número de cambios de signo entre los elementos del conjunto ordenado de menores principales $\{M_n : 1 \leq n \leq N - 1\}$, que llevado al continuo se entiende como el número de ceros que tiene la función de Gel'fand y Yaglom en el intervalo $t_a < t < t_b$.

No obstante, la corrección de Maslov es una fase global, y por lo tanto no es observable cuando tratamos con una única partícula. Sin embargo, cuando el sistema está formado por más partículas, esta fase adicional es realmente importante porque puede provocar fenómenos de interferencia [13].

Lagrangianas cuadráticas

Si nuestro sistema está descrito por un lagrangiano cuadrático general:

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2}a(t)\dot{x}^2 + b(t)\dot{x}x - \frac{1}{2}c(t)x^2 + d(t)\dot{x} + e(t)x + f(t) \quad (4.29)$$

donde el primer término corresponde a la energía cinética, $a = \frac{1}{2}m$. Además podemos suprimir los coeficientes $b(t)$, $d(t)$ y $f(t)$, puesto que integrando por partes, se convierten en factores que multiplican a x^2 , x y términos de contorno, respectivamente, que no nos alteran las ecuaciones del movimiento clásicas. Por lo tanto, sin pérdida de generalidad, una lagrangiana cuadrática arbitraria es de la siguiente forma:

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}c(t)x^2 + e(t)x. \quad (4.30)$$

El núcleo entre dos puntos $a = (x_a, t_a)$ y $b = (x_b, t_b)$ de este sistema cuantizado viene dado de forma exacta por el propagador semiclásico, ya que no despreciamos ningún término en el desarrollo a segundo orden [4], [10].

4.3. Oscilador armónico

Estudiemos con integrales de camino uno de los sistemas más importantes de toda la física, el oscilador armónico. El potencial armónico es $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, donde ω es la frecuencia de la oscilación clásica. La lagrangiana de este sistema corresponde a una lagrangiana cuadrática con $c = m\omega^2$ y $e = 0$. Utilizaremos la aproximación semiclásica para obtener el propagador armónico exacto, por consiguiente, debemos resolver la ecuación diferencial de Gel'fand y Yaglom:

$$\frac{\partial^2 f_{\text{GY}}(t, t_a)}{\partial t^2} = -\omega^2 f_{\text{GY}}(t, t_a) \quad (4.31)$$

con las condiciones iniciales: $f(t_a, t_a) = 0$, $\dot{f}(t_a, t_a) = 1$. Casualmente, la ecuación que tenemos que resolver es la del oscilador armónico clásico con la misma frecuencia de oscilación. La función de Gel'fand y Yaglom es:

$$f_{\text{GY}}(t, t_a) = \frac{1}{\omega} \text{sen } \omega(t - t_a) \quad (4.32)$$

la cual tiene $\lfloor \frac{t_b - t_a}{\tau/2} \rfloor$ ceros en el intervalo $t_a < t < t_b$, donde $\tau = \frac{\omega}{2\pi}$ es el periodo de la oscilación clásica. Introduciendo este resultado junto a la acción armónica clásica (4.33):

$$S[\bar{x}] = \frac{m\omega}{2 \text{sen } \omega T} [(x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b]; \quad T = t_b - t_a \quad (4.33)$$

en la expresión del propagador semiclásico (4.28), obtenemos el propagador del oscilador armónico cuántico:

$$K(b, a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar |\text{sen } \omega T|} \right)^{1/2} e^{(i/\hbar) \frac{m\omega}{2 \text{sen } \omega T} [(x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b]} (e^{-i\pi/2})^{\lfloor \frac{T}{\tau/2} \rfloor}. \quad (4.34)$$

Cuando $\text{sen } \omega T = 0$ el propagador diverge, entonces ¿deja de ser válida la expresión (4.34) para tiempos posteriores a $T = \tau/2$?, a continuación veremos que no. Con el fin de ser más claros, adoptaremos la siguiente notación:

$$\begin{aligned} t_{\text{inicial}} = t_a = 0, \quad t_{\text{final}} = t_b = T, \quad 0 < t < T \\ K(x_b, t_b; x_a, t_a) \equiv K(x_b, x_a; t_b - t_a). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Así pues, estudiemos el comportamiento del núcleo dependiendo de la duración del intervalo T [13]:

- $T < \tau/2$.
El núcleo no diverge en ningún instante de tiempo, en consecuencia, no existe ninguna fase adicional.
- $T = \tau/2$.
El núcleo $K(x_b, x_a; \tau/2)$ diverge, sin embargo, si lo reescribimos en función de los propagadores $K(x_b, x_c; \tau/4)$ y $K(x_c, x_a; \tau/4)$ utilizando la regla de composición de amplitudes de probabilidad (2.18) con un punto intermedio $(x_c, \tau/4)$, evitamos la divergencia. Por consiguiente, el núcleo de un semiperiodo es:

$$K(x_b, x_a; \tau/2) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K(x_b, x_c; \tau/4) K(x_c, x_a; \tau/4). \quad (4.36)$$

Sustituyendo el valor de cada propagador del integrando e integrando con respecto de x_c , obtenemos que el núcleo de un semiperiodo es:

$$K(x_b, x_a; \tau/2) = e^{-i\pi/2} \delta(x_b + x_a). \quad (4.37)$$

Este resultado implica que la evolución de la función de onda del oscilador armónico tras un semiperiodo es igual a la misma función de onda con la parte espacial invertida y una fase $e^{-i\pi/2}$.

- $T = \mathcal{N}_- \tau/2$.

En este caso, tenemos que $\text{sen } \omega T = 0$ un total de \mathcal{N}_- veces. Aplicamos la regla de composición de amplitudes de probabilidad para \mathcal{N}_- núcleos que actúan durante un semiperiodo, obteniendo así que el propagador del oscilador armónico para esta situación es

$$K(x_b, x_a; \mathcal{N}_- \tau/2) = (e^{-i\pi/2})^{\mathcal{N}_-} \delta(x_b - (-1)^{\mathcal{N}_-} x_a). \quad (4.38)$$

- $\mathcal{N}_- \tau/2 < T < (\mathcal{N}_- + 1)\tau/2$ donde $\mathcal{N}_- = \lfloor \frac{T}{\tau/2} \rfloor$.

Finalmente, el núcleo para un intervalo T cualesquiera lo encontramos aplicando la regla de composición de amplitudes de probabilidades para los núcleos $K(x_c, x_a; \mathcal{N}_- \tau/2)$ y $K(x_b, x_c; T - (\mathcal{N}_-)\tau/2)$. El propagador resultante coincide con el que obtuvimos con la aproximación semiclásica (4.34), sin embargo, ahora sabemos que la expresión es válida para cualquier tiempo [13].

Ahora bien, veamos el significado que tiene la corrección de Maslov del núcleo en el marco de la mecánica cuántica ondulatoria. Para ello tomemos la evolución de una función de onda cualesquiera en un tiempo inicial $t = 0$ y la evolucionamos en el tiempo hasta $t = \tau/2$ utilizando la descomposición espectral (3.29):

$$\psi(x, \tau/2) = \sum_n c_n \phi_n(x) e^{-iE_n \tau/(2\hbar)}. \quad (4.39)$$

Asimismo, podemos realizar la evolución con el núcleo (4.37), consiguiendo la siguiente expresión para $\psi(x, \tau/2)$:

$$\psi(x, \tau/2) = e^{-i\pi/2} \sum_n c_n \phi_n(-x). \quad (4.40)$$

Siendo conocida la paridad de las funciones propias, $\phi_n(-x) = (-1)^n \phi_n(x)$, comparamos las dos expresiones término a término obteniendo que se debe verificar:

$$\begin{cases} e^{-iE_n \tau/(2\hbar)} = e^{-i\pi/2}, & \text{si } n = 2k, \quad k \in \mathbb{N}_0 \\ e^{-iE_n \tau/(2\hbar)} = e^{i\pi/2}, & \text{si } n = 2k + 1, \quad k \in \mathbb{N}_0. \end{cases} \quad (4.41)$$

Si suponemos que la energía es de la forma $E_n = \alpha + \beta n$, y sustituimos esta expresión en las dos últimas igualdades, obtenemos la forma de los dos coeficientes α y β :

$$\alpha = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + N_\alpha \right), \quad \beta = \hbar\omega N_\beta, \quad (4.42)$$

donde $N_\alpha \in \mathbb{Z}$ y $N_\beta \in \mathbb{N}$ (este último no puede ser negativo porque el hamiltoniano debe tener un estado fundamental). El hecho que no podamos fijar completamente estos dos coeficientes N_α y N_β se debe a la periodicidad de la exponencial imaginaria.

Entonces, la existencia de la fase de Maslov en el propagador nos está reflejando la linealidad de la energía del oscilador con el índice n que identifica los estados estacionarios.

Energías y estados estacionarios

Dada la estrecha relación que tiene el núcleo con la ecuación de Schrödinger, podemos intentar hallar las funciones propias del hamiltoniano utilizando la descomposición espectral del núcleo (3.32) [4]. Para ello, reescribimos los senos y cosenos del núcleo como

exponenciales imaginarias de fase ωT , para $T < \tau/2$ se tiene:

$$K(b, a) = \underbrace{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-i\omega T/2} (1 - e^{-2i\omega T})^{-1/2}}_{\text{primer término}} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} \left[(x_a^2 + x_b^2) \left(\frac{1 + e^{-2i\omega T}}{1 - e^{-2i\omega T}} \right) - \frac{4x_a x_b e^{-i\omega T}}{1 - e^{-2i\omega T}} \right] \right\}. \quad (4.43)$$

Desarrollando en serie de potencias de $e^{-i\omega T}$ en el primer término (que no depende de las posiciones), obtenemos que las energías son $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ con $n \in \mathbb{N}_0$. Desarrollando de la misma manera la exponencial de la derecha, podemos obtener las autofunciones de los estados estacionarios:

- Para el estado fundamental, $n = 0$, $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$, la función de onda asociada es:

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/(2\hbar)}. \quad (4.44)$$

- Para el primer estado excitado, $n = 1$, $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$, se tiene:

$$\phi_1(x) = \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x \phi_0(x). \quad (4.45)$$

De esta manera, se pueden obtener todas las funciones propias del hamiltoniano armónico. Aunque es evidente que este método es poco eficiente para hallar las autofunciones de n grandes, debemos remarcar que las integrales de camino también es un formalismo válido a la hora de calcular las funciones propias de los estados estacionarios sin resolver la ecuación de Schrödinger.

4.4. Teoría de perturbaciones

Sea un sistema cuántico cuyo núcleo no puede hallarse analíticamente, ¿cómo obtenemos una aproximación del propagador si el sistema está gobernado por efectos cuánticos? En esta situación, nos encontramos fuera del régimen semiclásico, por lo que debemos desarrollar otra manera de aproximar el núcleo. Cuando el potencial que provoca que la integral de camino no tenga solución puede ser tomado como una perturbación débil, podremos aplicar la teoría de perturbaciones [4].

Acto seguido, vamos a desarrollar la teoría de perturbaciones en el marco de las integrales de camino. Para ello, consideraremos una partícula en una dimensión de masa m sometida a un potencial $V(x, t)$ de tal manera que el núcleo del sistema lo podamos obtener de manera analítica. A continuación, añadimos una perturbación al sistema descrita por $W(x, t)$, el cual es mucho menor que $V(x, t)$. La evolución de la partícula de un punto a a un punto b viene descrita por el núcleo:

$$K(b, a) = \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}x(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x, t) - W(x, t) \right) \right\}. \quad (4.46)$$

Esta integral de camino no se puede hallar de manera analítica. Cuando los potenciales perturbativos son débiles, i.e.:

$$\left| \int_{t_a}^{t_b} dt W(x, t) \right| \ll \hbar, \quad (4.47)$$

podemos desarrollar en serie de Taylor la exponencial como sigue:

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt W(x, t) \right\} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt W(x, t) + \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt W(x, t) \right)^2 + \dots \quad (4.48)$$

Esto nos permite escribir el núcleo como una suma infinita de términos cuya contribución decrece según aumenta el orden de los mismos:

$$K(b, a) = K^{(0)}(b, a) + K^{(1)}(b, a) + K^{(2)}(b, a) + \dots \quad (4.49)$$

los núcleos de órdenes más bajos son:

$$\begin{aligned} K^{(0)}(b, a) &= \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}x(t) e^{(i/\hbar)S} \\ K^{(1)}(b, a) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}x(t) e^{(i/\hbar)S} \left(\int_{t_a}^{t_b} ds W(x(s), s) \right) \\ K^{(2)}(b, a) &= -\frac{1}{2\hbar^2} \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}x(t) e^{(i/\hbar)S} \left(\int_{t_a}^{t_b} ds W(x(s), s) \right) \left(\int_{t_a}^{t_b} ds' W(x(s'), s') \right) \end{aligned} \quad (4.50)$$

donde S es la acción del sistema sin perturbar, que cuenta con el potencial V :

$$S \equiv \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x, t) \right). \quad (4.51)$$

El núcleo de orden 0 corresponde al propagador del sistema cuando la perturbación es nula, el cual es conocido.

En el núcleo de primer orden podemos intercambiar el orden de integración de la siguiente manera:

$$K^{(1)}(b, a) = \int_{t_a}^{t_b} ds Q(s), \quad (4.52)$$

donde se define el propagador por unidad de tiempo $Q(s)$ como la siguiente integral:

$$Q(s) = -\frac{i}{\hbar} \int_{\substack{x(t_b)=x_b \\ x(t_a)=x_a}} \mathcal{D}x(t) e^{(i/\hbar)S} W(x(s), s). \quad (4.53)$$

Este término es la suma de las amplitudes de todos los caminos del sistema sin perturbar, pesada con el valor del potencial W en un tiempo concreto s . Dado que se trata de una integral funcional, el valor de $x(t = s)$ cambia, y por tanto el peso también lo hace. Sin embargo, el único punto de cualquier camino que caracteriza el peso de la integral es $x(s)$, independientemente del resto del camino; por consiguiente, como el potencial no

sabe de la posición de la partícula en cualquier otro tiempo, la evolución de la misma es independiente de W antes y después de $t = s$.

Por ende, la partícula se mueve desde a hasta $c = (x_c, t_c) = (x(s), s)$ como una partícula sometida a un potencial $V(x, t)$, en c interactúa con el potencial perturbativo y posteriormente continúa su evolución de c hasta b como una partícula sometida exclusivamente a V , tal y como se muestra en la figura 4.2.

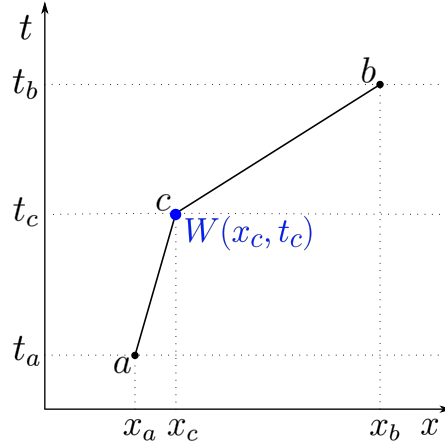


Figura 4.2: interacción de una partícula con W en un punto (x_c, t_c) .

Entonces, podemos integrar funcionalmente (4.53) en los intervalos (x_a, x_c) y (x_c, x_b) , obteniendo que Q para un tiempo fijo t_c es:

$$Q(t_c) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K^{(0)}(b, c) W(x_c, t_c) K^{(0)}(c, a). \quad (4.54)$$

Fijémonos que hemos convertido la integral funcional (4.53) en una integral ordinaria donde el integrando lo componen funciones conocidas. Por consiguiente, el núcleo de primer orden¹ es:

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt_c \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K^{(0)}(b, c) W(x_c, t_c) K^{(0)}(c, a). \quad (4.55)$$

¿Qué interpretación podemos dar a esta expresión?

Dado que el núcleo obtenido tiene cierta similitud con el que nos proporciona la regla de composición de amplitudes de probabilidad, podemos decir que:

$$-\frac{i}{\hbar} K^{(0)}(b, c) W(x_c, t_c) K^{(0)}(c, a) \quad (4.56)$$

es la amplitud de probabilidad por unidad de volumen y de tiempo de un camino concreto que conecta a y b para un c dado. En consecuencia, se interpreta $-iW(x_c, t_c)/\hbar$ como la amplitud de probabilidad por unidad de tiempo que tiene la partícula al interactuar con el potencial. Dado que la interacción con W se produce únicamente en un punto, diremos que la partícula experimenta un proceso de *scattering* o dispersión. Asimismo, la

¹Nótese que el núcleo de primer orden es $K^{(1)}$, mientras que el propagador del sistema hasta primer orden es $K^{(0)} + K^{(1)}$.

amplitud total con un solo scattering $K^{(1)}(b, a)$ será la suma de todas estas amplitudes para cualquier x_c y t_c , es decir, la integral (4.55).

Por ende, podemos interpretar el enésimo término en el desarrollo del núcleo total (4.49), $K^{(n)}(b, a)$, como la amplitud de probabilidad de que la partícula experimente n scatterings. Entonces, aplicando la regla de composición de amplitudes de probabilidad a los $n+1$ tramos y los n procesos de scattering en cada punto intermedio, podemos obtener la expresión de cualquier «núcleo» enésimo.

Luego si la partícula sufre dos scatterings en su viaje de a a b en los puntos $d = (x_d, t_d)$ y $c = (x_c, t_c)$, tal que $t_d \leq t_c$; la amplitud de probabilidad $K^{(2)}(b, a)$ sigue la expresión:

$$K^{(2)} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int d\tau_c \int d\tau_d K^{(0)}(b, c)W(c)K^{(0)}(c, d)W(d)K^{(0)}(d, a) \quad (4.57)$$

donde $d\tau = dx dt$ es el elemento de volumen espacio-temporal. Dado que el scattering en el punto c sucede antes que en el punto d , los dominios de integración respetan la causalidad:

$$\begin{aligned} x_d \in \mathbb{R}, & \quad t_a \leq t_d \leq t_b \\ x_c \in \mathbb{R}, & \quad t_d \leq t_c \leq t_b \end{aligned} \quad (4.58)$$

Podemos escribir la amplitud de probabilidad de transición de a a b total del sistema perturbado por W (4.49) de manera pictórica a modo de «diagrama de Feynman» como se muestra en la figura 4.3.

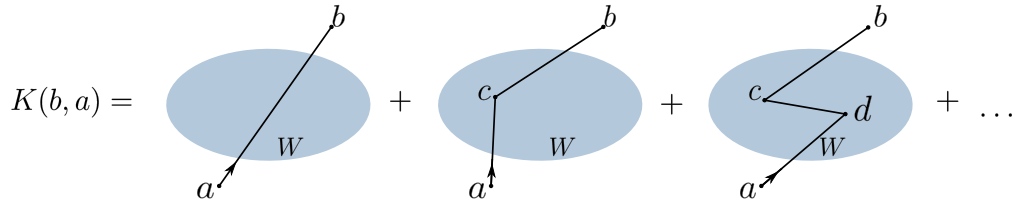


Figura 4.3: propagador de un sistema sometido a una perturbación W como suma de todas las amplitudes de los procesos de scattering.

Donde cada diagrama con n scatterings representa la amplitud de ese proceso $K^{(n)}(b, a)$; en consecuencia, es una expresión exacta si tenemos en cuenta todos los términos. Como el potencial es débil, con los de orden más bajo tendremos una buena descripción del sistema.

Ecuación integral para el núcleo perturbado

Debido a la forma que hemos encontrado para el núcleo $K(b, a)$ como una serie infinita, podemos reagrupar los términos como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} K(b, a) = & K^{(0)}(b, a) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c K^{(0)}(b, c)W(c)K^{(0)}(c, a) + \\ & + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int d\tau_c \int d\tau_d K^{(0)}(b, c)W(c)K^{(0)}(c, d)W(d)K^{(0)}(d, a) + \dots \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$\begin{aligned}
 K(b, a) = & K^{(0)}(b, a) + \\
 & - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c K^{(0)}(b, c) W(c) \underbrace{\left[K^{(0)}(c, a) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_d K^{(0)}(c, d) W(d) K^{(0)}(d, a) + \dots \right]}_{K(c, a)}
 \end{aligned} \tag{4.60}$$

donde hemos considerado que los dominios de integración respetan la causalidad de los scatterings. Así pues, obtenemos una ecuación integral que debe verificar el propagador:

$$K(b, a) = K^{(0)}(b, a) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c K^{(0)}(b, c) W(c) K(c, a). \tag{4.61}$$

Entonces, siendo conocido el núcleo del sistema sin perturbar $K^{(0)}$, el propagador total cuando tenemos $W(x, t)$ queda totalmente definido con esta expresión, la cual es exacta puesto que no hemos despreciado ningún término.

Desarrollo de la función de onda: aproximación de Born

Sea una función de onda en un tiempo inicial $\psi(x_a, t_a)$, sabemos que esta evoluciona hasta t_b según la ecuación (3.2). Por tanto, si utilizamos el núcleo exacto del sistema perturbado $K(b, a)$ de (4.59), la función de onda de la partícula en t_b es:

$$\begin{aligned}
 \psi(x_b, t_b) = & \varphi(b) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c K^{(0)}(b, c) W(c) \varphi(c) + \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int d\tau_c \int d\tau_d K^{(0)}(b, c) W(c) K^{(0)}(c, d) W(d) \varphi(d) + \dots
 \end{aligned} \tag{4.62}$$

donde $\varphi(b)$ es la función de onda $\psi(x_a, t_a)$ evolucionada en el tiempo hasta t_b del sistema sin perturbar (considerando solo el potencial V):

$$\varphi(b) = \int dx_a K^{(0)}(b, a) \psi(a). \tag{4.63}$$

Esta expansión de la función de onda de un sistema cuántico que evoluciona en el tiempo basado en el desarrollo de potencias del potencial perturbativo W , el cual es débil, se denomina *expansión de Born*. Dependiendo del número de términos que consideremos, nos encontraremos en la aproximación de Born de primer orden (si tomamos 2 términos), de segundo orden (tomando 3 términos), etc.

Este resultado juega un papel fundamental en la teoría de scattering que hemos estudiado en el grado, sin embargo, hemos llegado a ella sin la necesidad de plantear la ecuación de Lippmann–Schwinger. Por lo tanto, podríamos estudiar el scattering de un electrón por un átomo con las ecuaciones que hemos planteado, y obtener así la amplitud de scattering, sección eficaz o cualquier otra cantidad interesante del proceso [8].

5 Conclusiones

La formulación de la mecánica cuántica mediante integrales de camino es un formalismo desarrollado por Richard Feynman para describir los sistemas cuánticos no relativistas.

Partiendo del experimento de la doble rendija con materia, hemos visto que no la podemos explicar con la mecánica clásica. Por lo tanto, necesitamos otra teoría que lo explique: la mecánica cuántica. A partir de varias suposiciones plausibles sobre el comportamiento de la materia hemos enunciado cinco postulados con los cuales construir la formulación. Estos sugieren que la partícula no recorre la trayectoria física dada por el principio de la acción estacionaria, sino que esta evoluciona por todos los caminos que le llevan del punto inicial al final. Utilizando el concepto de amplitud de probabilidad conseguimos explicar los patrones observados. Por ende, vemos necesario definir el núcleo como una amplitud de probabilidad total entre dos puntos.

El propagador es una cantidad propia de cada sistema cuántico que contiene la información de dinámica del mismo. Así pues, el núcleo es la suma a todos los caminos de la amplitud de cada camino. El problema matemático que se plantea es una integral funcional a todos los caminos de la exponencial imaginaria de la acción de cada camino, lo que se conoce como *integral de camino*.

Desde este enfoque, hemos definido la función de onda como la amplitud de probabilidad de detectar a una partícula en un punto concreto independientemente de la posición inicial de la cual ha comenzado su viaje. Posteriormente, hemos visto que estas amplitudes de probabilidad son soluciones de la ecuación de Schrödinger, en la cual está codificada la información dinámica que contiene la integral de camino.

Resulta interesante estudiar cómo a partir de una formulación basada en el viaje de la partícula por caminos, aparece la naturaleza ondulatoria de la materia. En consecuencia, hemos obtenido la equivalencia entre las integrales de camino, la imagen de Schrödinger y la imagen de Heisenberg. Por lo tanto, no debemos asumir como «verdad» los conceptos que un modelo nos proporciona sobre la naturaleza cuántica de la materia, ya que a partir de otra formulación sustentada en otras premisas somos capaces de describirla. Con esto quiero decir que este trabajo me ha proporcionado una visión más amplia de la mecánica cuántica, la cual no debe tomarse como unos conceptos preestablecidos, sino como un campo de conocimiento que describe a la naturaleza. Así pues, dependiendo de las herramientas matemáticas que dispongamos y los postulados que tomemos, podremos crear diferentes marcos teóricos. Estos modelos nos darán la misma respuesta a las observaciones experimentales, sin embargo, el porqué de las medidas dependerá de la estructura transempírica construida. En el caso de las integrales de camino, la idea de sumar a todos los caminos constituye la parte transempírica de la teoría, mientras que en la cuántica tradicional la parte transempírica corresponde al espacio de Hilbert.

Es satisfactorio ver que a partir de este enfoque podemos resolver sistemas cuánticos

de forma exacta como lo son la partícula libre y el oscilador armónico. También hemos logrado aproximar el núcleo de un sistema que no tiene solución analítica utilizando la aproximación semiclásica o la teoría de perturbaciones, dependiendo del régimen en el que se encuentre el sistema. Sin embargo, esta formulación tiene las siguientes desventajas:

- Es completamente necesario discretizar el tiempo para realizar cualquier cálculo. Aunque el cálculo diferencial que utilizamos en física se basa en el mismo principio (recordemos la definición de derivada o integral), normalmente se tienen métodos conocidos que no requieren hacer explícita la discretización del tiempo.
- En la mecánica cuántica basada en los espacios de Hilbert, la física es invariante bajo ciertas transformaciones unitarias, sin embargo, ver las simetrías en esta formulación se hace más complicado.
- Por lo general, la resolución de los sistemas físicos utilizando integrales de camino resulta más complicado que resolviendo la ecuación de Schrödinger.
- Si el sistema cuántico goza del grado de libertad de espín, introducirlo dentro del marco teórico que hemos desarrollado como «caminos de espín» resulta una tarea más complicada que la inclusión del espín en la mecánica cuántica tradicional. Esta tarea resultó imposible para el propio Feynman, sin embargo, cuatro décadas más tarde se logró desarrollar utilizando matemáticas considerablemente más complicadas.

No obstante, cabe destacar que la idea de integral de camino como una integral funcional resulta útil en otras disciplinas: en mecánica estadística puede utilizarse para calcular la función de partición, en materia condensada con el gas de instantones [5], en el estudio de los estados coherentes del oscilador armónico [11] o en teoría cuántica de campos. En esta última, el sistema queda caracterizado por campos en vez de posiciones, por lo tanto, se generaliza la integral funcional donde los campos pasan a ser las variables de integración [14].

Bibliografía

- [1] R. Eisberg y R. Resnick, *Quantum Physics of Atoms Molecules, Solids, Nuclei and Particles*, Second Edition. John Wiley & Sons, 1985, ISBN: 0-471-87373-X.
- [2] R. P. Feynman, «Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics,» *Rev. Mod. Phys.*, vol. 20, págs. 367-387, 2 1948. DOI: [10.1103/RevModPhys.20.367](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.20.367). dirección: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.20.367>.
- [3] R. Feynman, «The principle of least action in quantum mechanics /,» ago. de 2005. DOI: [10.1142/9789812567635_0001](https://doi.org/10.1142/9789812567635_0001).
- [4] R. P. Feynman y A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, Emended Edition by D. F. Styer. Dover Publications, 2010, ISBN: 978-0-486-47722-0.
- [5] A. Atland y B. Simons, *Condensed Matter Field Theory*, 2.^a ed. Cambridge University Press, 2010, ISBN: 978-0-521-76975-4. DOI: [10.1017/CB09780511789984](https://doi.org/10.1017/CB09780511789984).
- [6] B. E. Baaquie, *The Theoretical Foundations of Quantum Mechanics*, First Edition. Springer, 2013, ISBN: 978-1-4614-6223-1.
- [7] P. Zyla y col., «Review of Particle Physics,» *PTEP*, vol. 2020, n.º 8, pág. 083C01, 2020. DOI: [10.1093/ptep/ptaa104](https://doi.org/10.1093/ptep/ptaa104).
- [8] J. J. Sakurai y J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, 3.^a ed. Cambridge University Press, 2020, ISBN: 978-1-108-47322-4. DOI: [10.1017/9781108587280](https://doi.org/10.1017/9781108587280).
- [9] K. A. Milton, *Schwinger's Quantum Action Principle*, ép. SpringerBriefs in Physics. Cham: Springer International Publishing, 2015, ISBN: 978-3-319-20127-6. DOI: [10.1007/978-3-319-20128-3](https://doi.org/10.1007/978-3-319-20128-3). dirección: <http://link.springer.com/10.1007/978-3-319-20128-3> (visitado 14-06-2021).
- [10] R. Rosenfelder, «Path Integrals in Quantum Physics,» 2017. dirección: <https://arxiv.org/pdf/1209.1315.pdf>.
- [11] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, Second Edition. Springer, 2012, ISBN: 0-306-44790-8.
- [12] I. M. Gel'fand y A. M. Yaglom, «Integration in Functional Spaces and its Applications in Quantum Physics,» *Journal of Mathematical Physics*, vol. 1, n.º 1, págs. 48-69, 1960. DOI: [10.1063/1.1703636](https://doi.org/10.1063/1.1703636). eprint: <https://doi.org/10.1063/1.1703636>. dirección: <https://doi.org/10.1063/1.1703636>.
- [13] P. A. Horváthy, «The Maslov correction in the semiclassical Feynman integral,» *Central European Journal of Physics*, vol. 9, n.º 1, págs. 1-12, 2011, ISSN: 1644-3608. DOI: [10.2478/s11534-010-0055-3](https://doi.org/10.2478/s11534-010-0055-3). dirección: <https://doi.org/10.2478/s11534-010-0055-3>.
- [14] M. E. Peskin y D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, 1.^a ed., ép. Frontiers in Physics. Avalon Publishing, 1995, ISBN: 9780813345437.