martes, 10 de abril de 2007
11:34 p.m.

$$\mathcal{O}^{\dagger}_{mn} \equiv \langle b_m | \hat{\mathcal{O}}^{\dagger} | b_n \rangle = \langle b_m | \hat{\mathcal{O}}^{\dagger} b_n \rangle = \langle \underbrace{(\hat{\mathcal{O}}^{\dagger})^{\dagger}}_{=\hat{\mathcal{O}}} b_m | b_n \rangle$$

$$= \langle b_n | \hat{\mathcal{O}} b_m \rangle^* = \langle b_n | \hat{\mathcal{O}} | b_m \rangle^*$$

$$\equiv \mathcal{O}^*_{nm},$$ como hubiéramos esperado.

Tomando como base a los propios autovectores de $\hat{\mathcal{O}}$, $|b_n\rangle = |\mathcal{O}_n\rangle$, la ecuación $\hat{\mathcal{O}}|\mathcal{O}_n\rangle = \mathcal{O}_n|\mathcal{O}_n\rangle$ implica que la matriz $\mathcal{O}_{mn} \equiv \langle \mathcal{O}_m | \hat{\mathcal{O}} | \mathcal{O}_n \rangle = \mathcal{O}_n \delta_{mn} \equiv \mathcal{O}_n \times \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq n \\ 1 & \text{si } m = n \end{cases}$

delta de Kronecker

es diagonal, y $\therefore$ $\mathcal{O}^{\dagger}_{mn}$ también:

$$\mathcal{O}^{\dagger}_{mn} \equiv \langle \mathcal{O}_m | \hat{\mathcal{O}}^{\dagger} | \mathcal{O}_n \rangle = \mathcal{O}^*_{nm} = \mathcal{O}^*_n \delta_{nm},$$

lo cual equivale a decir que $\hat{\mathcal{O}}^{\dagger}|\mathcal{O}_n\rangle = \mathcal{O}^*_n|\mathcal{O}_n\rangle$.

Claramente $\hat{\mathcal{O}}$ tendrá autovalores reales, $\mathcal{O}^*_n = \mathcal{O}_n$, si es hermitiano, $\hat{\mathcal{O}}^{\dagger} = \hat{\mathcal{O}}$, y esto es justo lo que exigimos de cualquier operador $\hat{\mathcal{O}}$ asociado a una observable $\mathcal{O}$ (porque los autovalores son entonces los posibles resultados de una medición de $\mathcal{O}$).

Es importante notar que cuando la partícula está en un cierto estado $|\psi\rangle$, tendrá valores completamente definidos de 2 observables distintas $\mathcal{O}$ y $\mathcal{O}'$ solo si $|\psi\rangle$ es simultáneamente autovector de $\hat{\mathcal{O}}$ y $\hat{\mathcal{O}}'$, es decir, $\hat{\mathcal{O}}|\psi\rangle = \mathcal{O}_\psi|\psi\rangle$, $\hat{\mathcal{O}}'|\psi\rangle = \mathcal{O}'_\psi|\psi\rangle$, lo cual NO siempre es siquiera posible, porque implica que el conmutador

$$[\hat{\mathcal{O}},\hat{\mathcal{O}}'] \equiv \hat{\mathcal{O}}\hat{\mathcal{O}}' - \hat{\mathcal{O}}'\hat{\mathcal{O}}$$

satisface $[\hat{\mathcal{O}},\hat{\mathcal{O}}']=0$, es decir, que las matrices $\mathcal{O}_{mn}$ y $\mathcal{O}'_{mn}$ conmutan.

Esto en general no es cierto, y en particular, podemos ver que no sucede para $\hat{\vec{x}}$ y $\hat{\vec{p}}$. Notemos primero que

$$\underbrace{e^{-i\hat{\vec{p}}\cdot\vec{a}}}_{\equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\hat{\vec{p}}\cdot\vec{a})^n}{n!}}|\vec{x}\rangle = \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\underbrace{e^{-i\hat{\vec{p}}\cdot\vec{a}}|\vec{p}\rangle}_{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{a}}|\vec{p}\rangle}\underbrace{\langle\vec{p}|\vec{x}\rangle}_{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}} = \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{x}+\vec{a})}|\vec{p}\rangle$$

$$= |\vec{x}+\vec{a}\rangle,$$

por lo que llamamos a $\hat{T}(\vec{a}) \equiv e^{-i\hat{\vec{p}}\cdot\vec{a}}$ (ó $e^{-i\hat{\vec{p}}\cdot\vec{a}/\hbar}$, si no ponemos $\hbar=1$,) el operador de translación, y a $\hat{p}^i$ el generador de translaciones en la dirección x^i.

Considerando una translación infinitesimal, tenemos

$$|\vec{x}+\delta\vec{x}\rangle = e^{-i\hat{\vec{p}}\cdot\delta\vec{x}}|\vec{x}\rangle \simeq (1-i\hat{\vec{p}}\cdot\delta\vec{x})|\vec{x}\rangle,$$

de donde

$$\hat{\vec{p}}\cdot\delta\vec{x}\,|\vec{x}\rangle = i(|\vec{x}+\delta\vec{x}\rangle - |\vec{x}\rangle), \quad \text{es decir,}$$

$$\hat{\vec{p}}|\vec{x}\rangle = i\vec{\nabla}|\vec{x}\rangle \qquad \left(\leftrightarrow \quad \hat{p}^j|\vec{x}\rangle = i\frac{\partial}{\partial x^j}|\vec{x}\rangle \equiv i\lim_{\delta x\to 0}\frac{|\vec{x}+\delta x\,\check{\vec{x}}^j\rangle - |\vec{x}\rangle}{\delta x}\right).$$

Esto implica en particular que

$$\langle\vec{x}|\hat{p}^j|\psi\rangle = \langle\vec{x}|\hat{p}^j\psi\rangle = \langle\hat{p}^j\vec{x}|\psi\rangle \quad (\text{porque } \hat{p}^{j\dagger} = \hat{p}^j)$$

$$= (\langle\psi|\hat{p}^j\vec{x}\rangle)^* = \left(\langle\psi|\,i\frac{\partial}{\partial x^j}|\vec{x}\rangle\right)^*$$

$$= \left(i\frac{\partial}{\partial x^j}\langle\psi|\vec{x}\rangle\right)^* = -i\frac{\partial}{\partial x^j}\langle\vec{x}|\psi\rangle$$

12:27/09

$$= -i\frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial x^j} \qquad \left(= -i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial x^j}\right),$$

lo cual explica la forma del término cinético en la ec. de Schrödinger como se escribe en cursos introductorios.

Y también podemos deducir que

$$\hat{x}^j\hat{p}^j|\vec{x}\rangle = \hat{x}^j\,i\frac{\partial}{\partial x^j}|\vec{x}\rangle = i\lim_{\delta x\to 0}\hat{x}^j\left(\frac{|\vec{x}+\delta x\,\check{\vec{x}}^j\rangle - |\vec{x}\rangle}{\delta x}\right),$$

es decir,

$$\hat{x}^j \hat{p}^j |\vec{x}\rangle = i \lim_{\delta x \to 0} \frac{(x^j + \delta x)|\vec{x} + \delta x \check{\vec{x}}^j\rangle - x^j |\vec{x}\rangle}{\delta x}$$

$$= i \lim_{\delta x \to 0} x^j \left(\frac{|\vec{x} + \delta x \check{\vec{x}}^j\rangle - |\vec{x}\rangle}{\delta x} \right) + i \lim_{\delta x \to 0} \frac{\delta x |\vec{x} + \delta x \check{\vec{x}}^j\rangle}{\delta x}$$

$$= i x^j \frac{\partial}{\partial x^j} |\vec{x}\rangle + i |\vec{x}\rangle ,$$

y por otro lado

$$\hat{p}^j \hat{x}^j |\vec{x}\rangle = \hat{p}^j x^j |\vec{x}\rangle = x^j \hat{p}^j |\vec{x}\rangle = i x^j \frac{\partial}{\partial x^j} |\vec{x}\rangle$$

así que

$$[\hat{x}^i, \hat{p}^j] |\vec{x}\rangle = i \delta_{ij} |\vec{x}\rangle$$

porque para $i \neq j$ nos sale cero

y ∴

$$\boxed{[\hat{x}^i, \hat{p}^j] = i \delta_{ij}} \quad (= i\hbar \delta_{ij}) .$$

Esta relación de conmutación se puede tomar como definición de la teoría cuántica, e implica como hemos dicho que NO existe ningún estado en el cual la partícula tiene simultáneamente valores completamente definidos de x^i y p^i (y más en general, implica que en cualquier estado $|\psi\rangle$ se satisface el principio de incertidumbre $(\Delta x^i)_\psi (\Delta p^i)_\psi \geq \hbar/2$, donde

jueves, 12 de abril de 2007
12:53 p.m.

$$(\Delta\hat{O})_\psi \equiv \sqrt{\langle\psi|(\hat{O}-\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle)^2|\psi\rangle} \quad .)$$

Ahora, notemos que, debido a que $\hat{\vec{p}}$ es hermitiano ($\hat{p}^\dagger=\hat{p}$), el operador de translación satisface

$$\hat{T}(\vec{a})^\dagger = (e^{-i\hat{\vec{p}}\cdot\vec{a}})^\dagger = e^{+i\hat{\vec{p}}\cdot\vec{a}} = \hat{T}(-\vec{a}) = \hat{T}(\vec{a})^{-1},$$

es decir, es un operador unitario. Este tipo de operadores tienen la importante propiedad de que no cambian la norma de los estados: $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$

$$\Rightarrow \langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\hat{U}\psi|\hat{U}\psi\rangle = \langle\psi|\underbrace{\hat{U}^\dagger\hat{U}}_{\hat{1}}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

si $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$, lo cual como sabemos significa físicamente que la probabilidad total se mantiene correctamente en 100%.

Hasta ahora hemos construido solo la parte 'cinemática' de la mecánica cuántica, considerando el estado del sistema en un momento dado, pero podemos hablar de la dinámica justamente en estos términos: si empezamos con un estado arbitrario $|\psi\rangle \equiv |\psi(t_0)\rangle$ en el instante $t=t_0$, y dejamos transcurrir el tiempo, la partícula evolucionará

jueves, 12 de abril de 2007
01:23 p.m.

para llegar al estado $|\psi'\rangle \equiv |\psi(t)\rangle$ al tiempo t, evolución que define un operador unitario

$$|\psi(t)\rangle \equiv \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$$ (que es lineal por el ppio. de superposición).

Si el entorno de la partícula es independiente del tiempo,

$\hat{U}(t,t_0) = \hat{U}(t-t_0)$ se puede considerar un operador de translaciones en el tiempo completamente análogo al operador de translaciones espaciales $\hat{T}(\vec{a}) = e^{-i\hat{\vec{p}}\cdot\vec{a}}$.

En particular, podemos escribir

$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}$, donde $\hat{H} = \hat{H}^{\dagger}$ es por definición el generador de translaciones en el tiempo.

A partir de $|\psi(t+\delta t)\rangle = e^{-i\hat{H}\delta t}|\psi(t)\rangle \simeq (1-i\hat{H}\delta t)|\psi(t)\rangle$

vemos que
$$\boxed{\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle},$$

igualdad que reconocemos como la ecuación de Schrödinger siempre y cuando identifiquemos a $\hat{H} = H(\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}})$ como el Hamiltoniano de la partícula, es decir, el operador

jueves, 12 de abril de 2007
01:44 p.m.

asociado a su energía total. P.ej., para una partícula no relativista en un potencial externo, tenemos

$H(\vec{x},\vec{p}) = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{x})$, y actuando sobre

$$\hat{H}\,|\psi(t)\rangle = \left(\frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} + V(\hat{\vec{x}})\right)|\psi(t)\rangle = i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle$$

con el bra $\langle\vec{x}|$ obtenemos la forma familiar

$$\underbrace{\langle\vec{x}|\left(\frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} + V(\hat{\vec{x}})\right)|\psi(t)\rangle}_{\left(-\frac{\vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x},t)} = i\,\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\langle\vec{x}|\psi(t)\rangle}_{\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial t}} .$$

Podemos notar ahora que los <u>elementos de matriz</u> (y en particular, los <u>valores esperados</u>) de un operador $\hat{O}$ evolucionan en el tiempo de acuerdo con

$$\langle\varphi(t)|\,\hat{O}\,|\psi(t)\rangle = \langle e^{-i\hat{H}t}\varphi(0)|\,\hat{O}\,|e^{-i\hat{H}t}\psi(0)\rangle$$

$$= \langle\varphi(0)|\,e^{+i\hat{H}t}\,\hat{O}\,e^{-i\hat{H}t}\,|\psi(0)\rangle ,$$

y son ∴ <u>independientes</u> del tiempo si y solo si $[\hat{H},\hat{O}]=0$, que es entonces el requisito para que la observable $\hat{O}$ sea una cantidad conservada.

Ahora, cualquier cantidad física se puede siempre construir a partir de estos elementos de matriz, por lo que resulta interesante notar que en lugar de escribir estos objetos en la forma

$$\langle\varphi| e^{i\hat{H}t}\hat{O}e^{-i\hat{H}t}|\psi\rangle = \langle\varphi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle,$$

operador independiente del tiempo

estados dependientes del tiempo

que es la descripción en el llamado cuadro de Schrödinger, podemos optar por reinterpretar

$$\langle\varphi| e^{i\hat{H}t}\hat{O}\,e^{-i\hat{H}t}|\psi\rangle = {}_H\langle\varphi|\hat{O}_H(t)|\psi\rangle_H,$$

operador dependiente de t

estados independientes de t

con $\hat{O}_H(t) \equiv e^{i\hat{H}t}\hat{O}e^{-i\hat{H}t}$

y $\quad |\psi\rangle_H \equiv |\psi(t=0)\rangle, \quad |\varphi\rangle_H \equiv |\varphi(t=0)\rangle,$

que es la descripción en el llamado cuadro de Heisenberg.

Aquí la evolución es controlada por la ecuación de Heisenberg

$$\frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} = i[\hat{H},\hat{O}_H(t)] + \frac{\partial\hat{O}_H(t)}{\partial t}.$$

martes, 17 de abril de 2007
08:22 p.m.

Regresando al cuadro de Schrödinger, notemos que la amplitud de que, empezando al tiempo t con la partícula en el estado $|\psi\rangle$, la encontremos al tiempo t' en el estado $|\varphi\rangle$, se puede escribir

$$\langle\varphi|\,\hat{U}(t'-t)\,|\psi\rangle = \langle\varphi|\left(\int d^3x'\,|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\right)e^{-i\hat{H}(t'-t)}\left(\int d^3x\,|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\right)|\psi\rangle$$

$$= \int d^3x'\,d^3x\,\underbrace{\langle\varphi|\vec{x}'\rangle}_{\varphi(\vec{x}',t')^*}\underbrace{\langle\vec{x}'|e^{-i\hat{H}(t'-t)}|\vec{x}\rangle}_{\langle\vec{x}'|\hat{U}(t'-t)|\vec{x}\rangle}\underbrace{\langle\vec{x}|\psi\rangle}_{\psi(\vec{x},t)},$$

por lo que para tener pleno conocimiento respecto a la evolución dinámica de los estados basta con determinar el propagador

$$\langle\vec{x}'|\,\hat{U}(t'-t)\,|\vec{x}\rangle = \langle\vec{x}'|\,e^{-i\hat{H}(t'-t)}\,|\vec{x}\rangle \equiv {}_H\langle\vec{x}',t'\,|\,\vec{x},t\rangle_H\,,$$

donde $|\vec{x},t\rangle_H \equiv e^{i\hat{H}t}|\vec{x}\rangle$ y $|\vec{x}',t'\rangle_H \equiv e^{i\hat{H}t'}|\vec{x}'\rangle$ son estados en el cuadro de Heisenberg, que, como siempre, coinciden con los estados de Schrödinger correspondientes al tiempo $t=0$, puesto que $e^{i\hat{H}t} = \hat{U}(0-t)$ es precisamente el operador que hace evolucionar al estado $\vec{x}$ para atrás en el tiempo, desde $t=t$ hasta $t=0$.

Por construcción $|\vec{x},t)_H$ y $|\vec{x}',t'\rangle_H$ son autoestados del operador $\hat{\vec{x}}_H(t)$ evaluado en los tiempos correspondientes:

$$\hat{\vec{x}}_H(t')\,|\vec{x}',t'\rangle_H = \left(e^{i\hat{H}t'}\hat{\vec{x}}\,e^{-i\hat{H}t'}\right)e^{i\hat{H}t'}|\vec{x}'\rangle = e^{i\hat{H}t'}\underbrace{\hat{\vec{x}}\,|\vec{x}'\rangle}_{\vec{x}'|\vec{x}'\rangle}$$

$$= \vec{x}'\underbrace{e^{i\hat{H}t'}|\vec{x}'\rangle}_{|\vec{x}',t'\rangle_H}$$

(y de manera similar, $\hat{\vec{x}}_H(t)\,|\vec{x},t)_H = \vec{x}\,|\vec{x},t\rangle_H$), así que, como sugiere la notación, $|\vec{x}',t'\rangle_H$ representa el estado donde la partícula está con toda seguridad en $\vec{x}'$ al tiempo t'.

El punto a resaltar es que como en el cuadro de Heisenberg los estados <u>no</u> evolucionan, tiene sentido formar directamente el traslape ${}_H\langle\vec{x}',t'|\vec{x},t\rangle_H$ para obtener la amplitud de propagación deseada. Nosotros trabajaremos principalmente en el cuadro de Schrödinger, por lo que, si queremos, podemos pensar que ${}_H\langle\vec{x}',t'|\vec{x},t\rangle_H$ es simplemente una forma abreviada para denotar al propagador $\langle\vec{x}'|\hat{U}(t'-t)|\vec{x}\rangle$.

jueves, 19 de abril de 2007
08:38 a.m.

Para una partícula no relativista libre, tenemos:
$H = \vec{P}^2/2m$, y podemos calcular el propagador

$${}_H\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t\rangle_H = \langle \vec{x}' | \exp\left[-i\left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\right)(t'-t)\right] | \vec{x}\rangle$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \underbrace{\underbrace{\langle \vec{x}' | \underbrace{\exp\left[-i\left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\right)(t'-t)\right] | \vec{p}\rangle}_{\exp\left[-i\left(\frac{\vec{p}^2}{2m}\right)(t'-t)\right] | \vec{p}\rangle}}_{\exp\left[-i\left(\frac{\vec{p}^2}{2m}\right)(t'-t)\right] \underbrace{\langle \vec{x}' | \vec{p}\rangle}_{e^{+i\vec{p}\cdot\vec{x}'}}}} \underbrace{\langle \vec{p} | \vec{x}\rangle}_{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}},$$

es decir,

$${}_H\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t\rangle_H = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{-i\frac{(t'-t)}{2m}\vec{p}^2 + i\vec{p}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}$$

Estas son 3 integrales gaussianas. Para hacerlas, primero completamos el cuadrado en el exponente:

$$-i\frac{(t'-t)}{2m}\Big[\underbrace{\vec{p}^2 - \frac{2m}{t'-t}\vec{p}\cdot(\vec{x}'-\vec{x}) + \frac{m^2}{(t'-t)^2}(\vec{x}'-\vec{x})^2}_{\left[\vec{p} - \frac{m}{t'-t}(\vec{x}'-\vec{x})\right]^2 \equiv \vec{p}'^2} - \frac{m^2}{(t'-t)^2}(\vec{x}'-\vec{x})^2\Big],$$

de modo que cambiando la variable de integración $\vec{p} \to \vec{p}'$,

jueves, 19 de abril de 2007
08:50 a.m.

$$ {}_H\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle_H = \exp\left[\frac{im}{2(t'-t)} (\vec{x}'-\vec{x})^2 \right] \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \, e^{-i\frac{(t'-t)}{2m}\vec{p}'^2} . $$

Usando la fórmula

$$ I(a) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} du \, e^{-au^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} $$

(que proviene de

$$ I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} du dv \, e^{-a(u^2+v^2)} \underset{\substack{u \equiv r\cos\theta \\ v \equiv r \operatorname{sen}\theta}}{=} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} r dr \, e^{-ar^2} \underset{\rho \equiv r^2}{=} 2\pi \int_0^{\infty} \frac{d\rho}{2} e^{-a\rho} = \frac{\pi}{a}), $$

tenemos finalmente

$$ {}_H\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle_H = \frac{1}{(2\pi)^3} \left[\frac{2m\pi}{i(t'-t)} \right]^{3/2} e^{\frac{im}{2(t'-t)}(\vec{x}'-\vec{x})^2} . $$

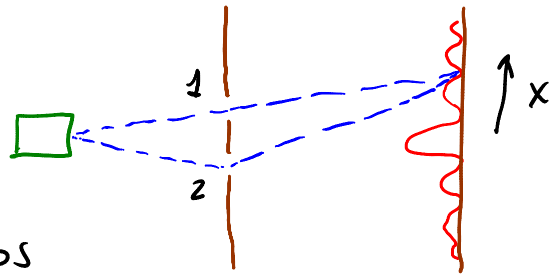
Notar que esta amplitud de probabilidad implica una (densidad de) probabilidad <u>constante</u>,

$$ P(\vec{x}, t \to \vec{x}', t') \equiv \left| {}_H\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle_H \right|^2 = \left[\frac{m}{2\pi(t'-t)} \right]^3 , $$

lo cual es consistente con el principio de incertidumbre: Dado que la posición inicial está completamente determinada, el momento inicial está totalmente <u>in</u>determinado, así que la partícula tiene igual probabilidad de llegar a cualquier sitio.

jueves, 19 de abril de 2007
08:17 p.m.

Con lo que hemos aprendido, estamos listos para mostrar algo nuevo: que es posible describir la evolución temporal no a través de la ec. de Schrödinger (de donde viene $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}$) sino en términos del formalismo de 'integral de trayectoria' inventado por Feynman. La base física de este formalismo puede motivarse recordando el experimento de la doble rendija, donde la interferencia resultante nos indica que la amplitud de probabilidad de que una partícula (p.ej. fotón, o electrón) llegue a un punto dado de la pantalla es una <u>suma</u> de las amplitudes asociadas a trayectorias que pasan por cada una de las 2 rendijas:



$$\psi_{Tot}(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$$

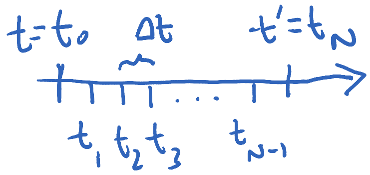
Si generalizamos a N rendijas tendríamos $\psi_{Tot}(x) = \sum_{n=1}^{N} \psi_n(x)$, y tomando el límite $N \to \infty$ (es decir, quitando por completo la placa intermedia) debiéramos tener $\psi_{Tot}(x) \sim \sum_{c \in \text{Caminos}} \psi_c(x)$.

L13: 29/09

lunes, 23 de abril de 2007
08:39 p.m.

Ahora, para mostrar esto en términos cuantitativos, supongamos que queremos calcular el propagador ${}_H\langle\vec{x}',t'|\vec{x},t\rangle_H$. Dividamos el intervalo temporal $[t,t']$ en N subintervalos, de igual duración (por simplicidad) $\Delta t \equiv (t'-t)/N$, con N grande (eventualmente $N\to\infty$).

Denotando $t_0 \equiv t$, $t_n \equiv t_{n-1} + \Delta t = t_0 + n\Delta t \quad \forall\ 1\le n\le N$ ($\Rightarrow t_N = t'$) y $\vec{x}_0 \equiv \vec{x}$, $\vec{x}_N \equiv \vec{x}'$, tenemos



$$\underbrace{{}_H\langle\vec{x}',t'|\vec{x},t\rangle_H}_{\text{omitiremos}} = \langle\vec{x}'|\exp(-i\hat{H}(t'-t))|\vec{x}\rangle$$

$$= \underbrace{\langle\vec{x}'|}_{\langle\vec{x}_N|}\overbrace{\underbrace{e^{-i\hat{H}\Delta t}}_{\hat{U}(t_N-t_{N-1})}e^{-i\hat{H}\Delta t}\cdots\underbrace{e^{-i\hat{H}\Delta t}}_{\hat{U}(t_1-t_0)}}^{N\text{ veces}}\underbrace{|\vec{x}\rangle}_{|\vec{x}_0\rangle},$$

e insertando la identidad $N-1$ veces, $\hat{\mathbb{1}} = \int d^3x_n\, |\vec{x}_n\rangle\langle\vec{x}_n|$,

$$\langle\vec{x}',t'|\vec{x},t\rangle = \int d^3x_{N-1}\cdots d^3x_1\, \langle\vec{x}_N|e^{-i\hat{H}\Delta t}|\vec{x}_{N-1}\rangle\langle\vec{x}_{N-1}|e^{-i\hat{H}\Delta t}|\vec{x}_{N-2}\rangle \cdots \langle\vec{x}_1|e^{-i\hat{H}\Delta t}|\vec{x}_0\rangle.$$

El objeto básico que debemos calcular es entonces el propagador en un intervalo infinitesimal, $\langle\vec{x}_n|e^{-i\hat{H}\Delta t}|\vec{x}_{n-1}\rangle$.

Si tomamos el caso usual de la partícula no relativista,

lunes, 23 de abril de 2007
08:57 p.m.

$$\langle \vec{x}_n | e^{-i\hat{H}\Delta t} | \vec{x}_{n-1} \rangle = \langle \vec{x}_n | \left[1 - i \underbrace{\hat{H}(\hat{p}, \hat{x})}_{\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{x}})} \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right] | \vec{x}_{n-1} \rangle$$

$$= \int \frac{d^3 p_n}{(2\pi)^3} \underbrace{\langle \vec{x}_n | \vec{p}_n \rangle}_{e^{i\vec{p}_n \cdot \vec{x}_n}} \underbrace{\langle \vec{p}_n | \left[1 - i \left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{x}}) \right) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right] | \vec{x}_{n-1} \rangle}_{\underbrace{\left[1 - i \left(\frac{\vec{p}_n^2}{2m} + V(\vec{x}_{n-1}) \right) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right]}_{\exp\left[i \left(\frac{\vec{p}_n^2}{2m} + V(\vec{x}_{n-1}) \right) \Delta t \right] + \mathcal{O}(\Delta t^2)} \underbrace{\langle \vec{p}_n | \vec{x}_{n-1} \rangle}_{e^{-i\vec{p}_n \cdot \vec{x}_{n-1}}}}$$

$$= \int \frac{d^3 p_n}{(2\pi)^3} \, e^{i\vec{p}_n \cdot (\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1}) - i \left(\frac{\vec{p}_n^2}{2m} + V(\vec{x}_{n-1}) \right) \Delta t}$$

Completando el cuadrado en el exponente y haciendo la integral gaussiana obtenemos

$$\langle \vec{x}_n | e^{-i\hat{H}\Delta t} | \vec{x}_{n-1} \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \Delta t} \right)^{3/2} e^{i \left[\frac{m}{2\Delta t} (\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1})^2 - V(\vec{x}_{n-1}) \Delta t \right]}$$

y ∴

$$\langle \vec{x}_f t_f | \vec{x}_i t_i \rangle = \lim_{N\to\infty} \int d^3x_{N-1} \cdots d^3x_1 \left(\frac{m}{2\pi i \Delta t} \right)^{\frac{3N}{2}} \exp \underbrace{\left[i \sum_{n=1}^{N} \Delta t \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1}}{\Delta t} \right)^2 - V(\vec{x}_{n-1}) \right\} \right]}$$

$$\xrightarrow[N\to\infty]{} i \int_t^{t'} dt \underbrace{\left\{ \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 - V(\vec{x}) \right\}}_{\text{Lagrangiano } L(\vec{x}, \dot{\vec{x}})} \equiv i S[\vec{x}(t)]$$

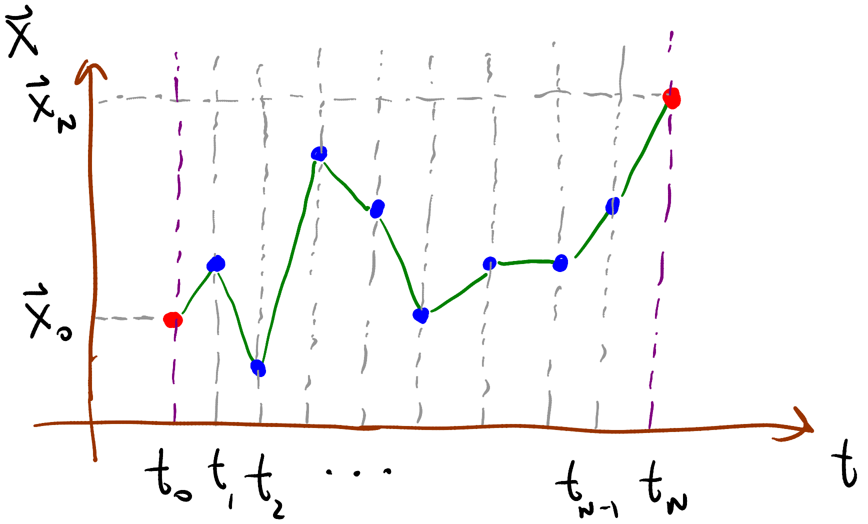
Acción

resultado que resumimos definiendo la integral de trayectoria o integral funcional

$$\boxed{\langle \vec{x}\,',t'|\vec{x},t\rangle = \int_{\vec{x}(t)=\vec{x}}^{\vec{x}(t')=\vec{x}\,'} \mathcal{D}\vec{x}(t)\; e^{iS[\vec{x}(t)]}} \quad \left(\leftarrow e^{iS[\vec{x}(t)]/\hbar}\right)$$

Moralmente, "suma sobre todas las funciones" (que satisfacen las condiciones inicial y final indicadas);

en la práctica, límite de suma sobre funciones del tipo



Para un Hamiltoniano $\hat{H}(\hat{\vec{p}},\hat{\vec{x}})$ más general, ordenado de tal manera que en cualquier término los $\hat{\vec{p}}$'s estén a la izquierda de las $\hat{\vec{x}}$'s, obtenemos de manera similar la integral de trayectoria Hamiltoniana

lunes, 23 de abril de 2007
09:37 p.m.

$$\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle = \lim_{N\to\infty} \int d^3x_{N-1} \cdots d^3x_1 \int \frac{d^3p_N}{(2\pi)^3} \cdots \frac{d^3p_1}{(2\pi)^3}$$

$$\exp\left[i \sum_{n=1}^{N} \Delta t \left\{ \vec{p}_n \cdot \left(\frac{\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1}}{\Delta t} \right) - H(\vec{p}_n, \vec{x}_{n-1}) \right\} \right]$$

$$\equiv \int_{\vec{x}(t)=\vec{x}}^{\vec{x}(t')=\vec{x}'} \mathcal{D}\vec{x}(t)\mathcal{D}\vec{p}(t) \; \exp\left[i \underbrace{\int_t^{t'} dt \left\{ \vec{p}\cdot\dot{\vec{x}} - H(\vec{p},\vec{x}) \right\}} \right]$$

~ Acción escrita en formalismo Hamiltoniano, puesto que

$$H(\vec{p},\vec{x}) \equiv \left(\vec{p}\cdot\dot{\vec{x}} - L(\vec{x},\dot{\vec{x}})\right)\Big|_{\dot{\vec{x}}=\dot{\vec{x}}(\vec{p})}$$

Si $H(\vec{p},\vec{x})$ es cuadrático en $\vec{p}$, la integral $\int \mathcal{D}\vec{p}(t)$ nuevamente es Gaussiana, y al hacerla obtenemos otra vez la integral de trayectoria Lagrangiana

$$\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle = \int_{\vec{x}(t)=\vec{x}}^{\vec{x}(t')=\vec{x}'} \mathcal{D}\vec{x}(t) \, e^{i\int_t^{t'} dt \, L(\vec{x},\dot{\vec{x}})} \qquad \left(= \int \mathcal{D}\vec{x}(t) \, e^{iS[\vec{x}(t)]/\hbar} \right)$$

Lo sorprendente de esta reformulación de la evolución temporal es que ¡¡no hace referencia a operadores!!

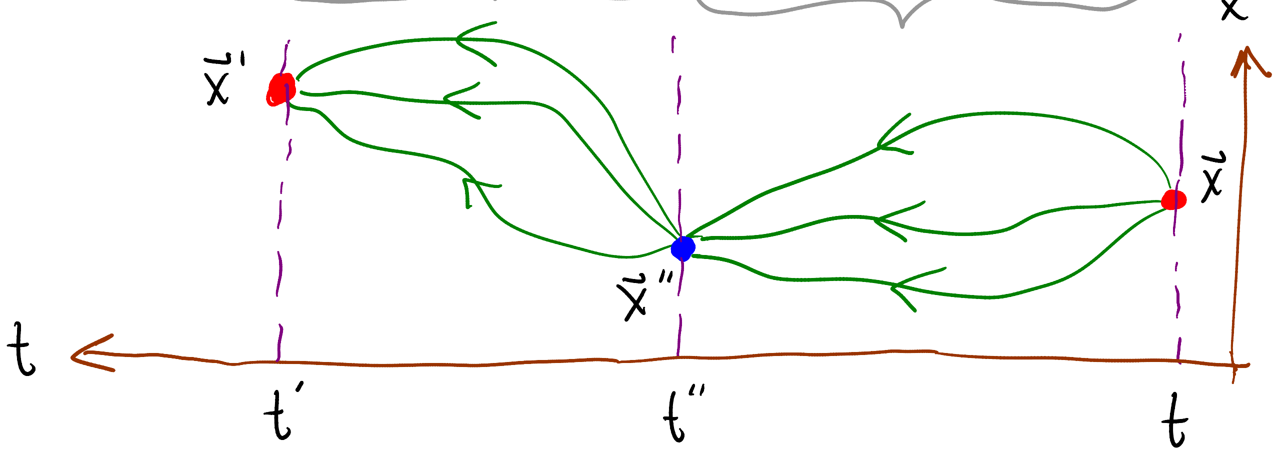
lunes, 23 de abril de 2007
09:50 p.m.

Notar que en esta expresión podemos dejar una de las integrales $\int d^3x_1 \cdots d^3x_{N-1}$ para el final; digamos aquella sobre $\vec{x}_I$, que corresponde al tiempo intermedio $t_I = t_0 + I\Delta t$. Si tomamos $I \propto N \to \infty$ de tal manera que $t_I \equiv t''$ esté fijo, tenemos entonces

$$\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle = \int d^3x'' \lim_{I,N\to\infty} \int d^3x_{N-1} \cdots d^3x_{I+1} \left(\frac{m}{2\pi i \Delta t}\right)^{\frac{3}{2}(N-I)} \exp\left[i \sum_{n=I+1}^{N} \Delta t \, L\left(\vec{x}_n, \frac{\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1}}{\Delta t}\right)\right]$$

$$\times \lim_{I\to\infty} \int d^3x_{I-1} \cdots dx_1 \left(\frac{m}{2\pi i \Delta t}\right)^{\frac{3}{2}I} \exp\left[i \sum_{n=1}^{I} \Delta t \, L\left(\vec{x}_n, \frac{\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1}}{\Delta t}\right)\right]$$

$$= \int d^3x'' \underbrace{\int_{\vec{x}(t'')=\vec{x}''}^{\vec{x}(t')=\vec{x}'} \mathcal{D}\vec{x}(t)\, e^{i\int_{t''}^{t'} dt\, L(\vec{x}, \dot{\vec{x}})}} \underbrace{\int_{\vec{x}(t)=\vec{x}}^{\vec{x}(t'')=\vec{x}''} \mathcal{D}\vec{x}(t)\, e^{i\int_{t}^{t''} dt\, L(\vec{x}, \dot{\vec{x}})}},$$



es decir,

$$\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle = \int d^3x'' \langle \vec{x}', t' | \vec{x}'', t'' \rangle \langle \vec{x}'', t'' | \vec{x}, t \rangle,$$

lo cual es obvio también en el lenguaje de operadores:

$$\langle \vec{x}, t' | \vec{x}, t\rangle = \langle \vec{x}' | \underbrace{e^{-i\hat{H}(t'-t)}}_{\hat{U}(t'-t)} | \vec{x}\rangle$$

$$= \langle \vec{x}' | \underbrace{e^{-i\hat{H}(t'-t'')}}_{\hat{U}(t'-t'')} \underbrace{\int d^3x'' |\vec{x}''\rangle\langle \vec{x}''|}_{\hat{1}} \underbrace{e^{-i\hat{H}(t''-t)}}_{\hat{U}(t''-t)} |\vec{x}\rangle$$

$$= \int d^3x'' \underbrace{\langle \vec{x}' | e^{-i\hat{H}(t'-t'')} | \vec{x}''\rangle}_{\langle \vec{x}, t' | \vec{x}'', t''\rangle} \underbrace{\langle \vec{x}'' | e^{-i\hat{H}(t''-t)} | \vec{x}\rangle}_{\langle \vec{x}'', t'' | \vec{x}, t\rangle} .$$

Ahora, dado que las variables dentro de una integral funcional son números (o funciones) y no operadores, definitivamente conmutan. Pero entonces, si regresáramos al formalismo 'canónico', donde estos números son reemplazados por operadores que en general no conmutan, ¿en qué orden deben aparecer estos últimos?

Consideremos, p.ej., la integral funcional con la inserción de $x^i(t'')x^j(t''') = x^j(t''')x^i(t'')$ en el integrando, con $i,j = 1,2,3$ y $t'', t''' \in (t, t')$.

Supongamos primero que $t'' < t'''$. Entonces podemos escribir

$$\int_{\vec{x}(t)=\vec{x}}^{\vec{x}(t')=\vec{x}'} \mathcal{D}\vec{x}(t)\; x^i(t'')\, x^j(t''')\, e^{i\int_t^{t'} dt\, L}$$

$$= \int d^3x'''\, d^3x'' \int_{\vec{x}(t''')=\vec{x}'''}^{\vec{x}(t')=\vec{x}'} \mathcal{D}\vec{x}(t)\; e^{i\int_{t'''}^{t'} dt\, L}\; \underbrace{x^j(t''')}_{x'''^{\,j}} \int_{\vec{x}(t'')=\vec{x}''}^{\vec{x}(t''')=\vec{x}'''} \mathcal{D}\vec{x}(t)\; e^{i\int_{t''}^{t'''} dt\, L}\; \underbrace{x^i(t'')}_{x''^{\,i}} \int_{\vec{x}(t)=\vec{x}}^{\vec{x}(t'')=\vec{x}''} \mathcal{D}\vec{x}(t)\; e^{i\int_t^{t''} dt\, L}$$

$$= \int d^3x'''\, d^3x''\, \langle \vec{x}' | e^{-i\hat{H}(t'-t''')} \underbrace{|\vec{x}'''\rangle x'''^{\,j}}_{\hat{x}^j |\vec{x}'''\rangle} \langle \vec{x}''' | e^{-i\hat{H}(t'''-t'')} \underbrace{|\vec{x}''\rangle x''^{\,i}}_{\hat{x}^i |\vec{x}''\rangle}$$

$$* \langle \vec{x}'' | e^{-i\hat{H}(t''-t)} |\vec{x}\rangle$$

$$= \underbrace{\langle \vec{x}' | e^{-i\hat{H}t'}}_{{}_H\langle \vec{x}', t'|}\; \underbrace{e^{i\hat{H}t'''}\hat{x}^j e^{-i\hat{H}t'''}}_{\hat{x}^j_H(t''')}\; \underbrace{e^{i\hat{H}t''}\hat{x}^i e^{-i\hat{H}t''}}_{\hat{x}^i_H(t'')}\; \underbrace{e^{i\hat{H}t}|\vec{x}\rangle}_{|\vec{x}, t\rangle_H}$$

en cuadro de Heisenberg

Recordar: $\hat{x}^l_H(t)\,|\vec{x}, t\rangle = x^l\,|\vec{x}, t\rangle$

$$= {}_H\langle \vec{x}', t' |\, \hat{x}^j_H(t''')\, \hat{x}^i_H(t'')\, |\vec{x}, t\rangle_H \,.$$

el operador que queda a la <u>izquierda</u>
es el que corresponde a un tiempo <u>mayor</u>