El propagador de la ecuación de Schrödinger

Desarrollo de un $|\psi, t\rangle$ arbitrario en la base $\{|E\rangle\}$ de autoestados de H, $H|E\rangle = E|E\rangle$

$$|\psi, t\rangle = \sum_E |E\rangle\langle E|\psi, t\rangle \qquad \rightarrow \qquad |\psi, t'\rangle = \sum_E \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E(t'-t)}|E\rangle\langle E|\psi, t\rangle$$

Multiplicando por $\langle \boldsymbol{r}'|$, insertando $\hat{1} = \int |\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r}|\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$, y usando $\langle \boldsymbol{r}'|\psi, t'\rangle = \psi(\boldsymbol{r}', t')$:

$$\psi(\boldsymbol{r}', t') = \int \left[\sum_E \langle \boldsymbol{r}'|E\rangle\langle E|\boldsymbol{r}\rangle \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E(t'-t)}\right] \psi(\boldsymbol{r}, t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

$$\psi(\boldsymbol{r}', t') = \int K(\boldsymbol{r}'t', \boldsymbol{r}\,t)\,\psi(\boldsymbol{r}, t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \qquad \text{con} \qquad \boxed{K(\boldsymbol{r}'t', \boldsymbol{r}\,t) \equiv \sum_E \langle \boldsymbol{r}'|E\rangle\langle E|\boldsymbol{r}\rangle\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E(t'-t)}}$$

La amplitud de encontrar el sistema en $(\boldsymbol{r}', t')$ es:

1. la amplitud la amplitud de encontarlo en $(\boldsymbol{r}, t)$
2. por la amplitud que se “propague” de $(\boldsymbol{r}, t)$ a $(\boldsymbol{r}', t')$
3. integrado sobre todo $\boldsymbol{r}$.

El propagador en términos de la representación de Heisenberg

$$
\begin{aligned}
K(\boldsymbol{r}'t',\boldsymbol{r}\,t) &= \sum_E \langle \boldsymbol{r}'|E\rangle\langle E|\boldsymbol{r}\rangle\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E(t'-t)} \\
&= \sum_E \langle\, \boldsymbol{r}'\,|\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H(t'-t)}\,|E\rangle\langle E|\,\boldsymbol{r}\,\rangle \\
&= \langle\, \boldsymbol{r}'\,|\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H(t'-t)}\,|\,\boldsymbol{r}\,\rangle \\
&= \langle\, \boldsymbol{r}'\,|\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H\,t'}\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}H\,t}\,|\,\boldsymbol{r}\,\rangle
\end{aligned}
$$

$$
\boxed{K(\boldsymbol{r}'t',\boldsymbol{r}\,t) = \langle\, \boldsymbol{r}'t'\,|\,\boldsymbol{r}\,t\,\rangle}
$$

donde $|\,\boldsymbol{r}'t'\rangle$ es el autoestado de $\boldsymbol{R}^H(t')$, el operador posición en la representación de Heisenberg en el instante t': $\quad \boldsymbol{R}^H(t')\,|\,\boldsymbol{r}'t'\rangle = \boldsymbol{r}'\,|\,\boldsymbol{r}'t'\rangle$

Interpretación del propagador como suma de caminos

Podemos descomponer el propagador en paso intermedios, utilizando

la relación de completitud a t fijo, $\int |\,\boldsymbol{r}_i\, t_i\,\rangle\langle\,\boldsymbol{r}_i\, t_i\,|\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i = \hat{1}$, con $t_n > t_i > t_1$:

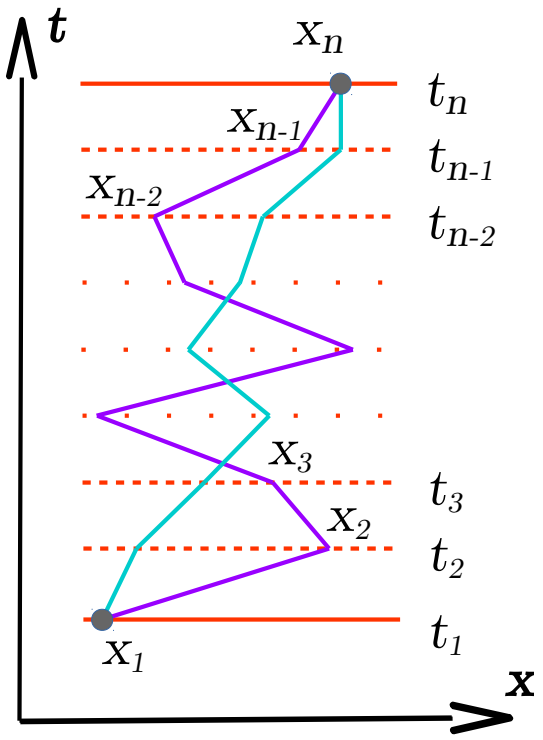
$$\langle\,\boldsymbol{r}_n\, t_n\,|\,\boldsymbol{r}_1\, t_1\,\rangle = \int \langle\,\boldsymbol{r}_n\, t_n|\,\boldsymbol{r}_i t_i\rangle\langle\,\boldsymbol{r}_i t_i|r_1 t_1\rangle\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i$$

Dividiendo (t_1, t_n) en n -1 partes iguales, $t_i - t_{i\text{-}1} = \dfrac{t_n - t_1}{n - 1}$,

con $t_n > t_{n\text{-}1} > t_{n\text{-}2} > \cdots > t_3 > t_2 > t_1$:

$$\langle\,\boldsymbol{r}_n\, t_n\,|\,\boldsymbol{r}_1\, t_1\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{n\text{-}1} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{n\text{-}2} \cdots \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_3 \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\, \langle\,\boldsymbol{r}_n\, t_n|\boldsymbol{r}_{n\text{-}1} t_{n\text{-}1}\rangle \times$$

$$\times\, \langle\,\boldsymbol{r}_{n\text{-}1} t_{n\text{-}1}|\boldsymbol{r}_{n\text{-}2} t_{n\text{-}2}\rangle \times \cdots \times \langle\,\boldsymbol{r}_3 t_3|r_2 t_2\rangle \times \langle\,\boldsymbol{r}_2 t_2|r_1 t_1\rangle$$



El propagador es una suma sobre todos los caminos que

van de $(\boldsymbol{r}_1, t_1)$ a $(\boldsymbol{r}_n, t_n)$.

La integral de camino en Mecánica Clásica

El principio de Hamilton establece que la dinámica de una partícula está gobernada por la acción S:

$$S \equiv \int_{t_1}^{t_2} \mathscr{L}(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}, t)\, \mathrm{d}t$$

donde la integral depende del camino $\boldsymbol{r}(t)$, y $\mathscr{L}(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}, t)$ es el lagrangiano.

Para una partícula en un potencial $V(\boldsymbol{r})$, $\mathscr{L} = \frac{1}{2} m \dot{\boldsymbol{r}}^2 - V(\boldsymbol{r})$.

La trayectoria $\boldsymbol{r}(t)$ seguida para ir de $(\boldsymbol{r}_1, t_1)$ a $(\boldsymbol{r}_2, t_2)$ será aquella que hace estacionaria la acción, y satisface $\boldsymbol{r}(t_1) = \boldsymbol{r}_1$ y $\boldsymbol{r}(t_2) = \boldsymbol{r}_2$.

Cuantización à la Feynman

La acción clásica determina cuanto contribuye cada camino al propagador cuántico

$$\langle x_k\, t_k \,|\, x_{k\text{-}1} t_{k\text{-}1} \rangle \;\sim\; \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\, S(k,\, k\text{-}1)} \qquad \text{con} \qquad S(k,\, k\text{-}1) \equiv \int_{t_{k\text{-}1}}^{t_k} \mathscr{L}(x, \dot{x}, t)\, \mathrm{d}t$$

Así, *producto* de las amplitudes corresponde a *suma* de las acciones

$$\langle x_n t_n \,|\, x_1 t_1 \rangle = \prod_{k=2}^{n} \langle x_k t_k \,|\, x_{k\text{-}1} t_{k\text{-}1} \rangle \sim \prod_{k=2}^{n} \exp\Big[\tfrac{i}{\hbar}\, S(k, k\text{-}1)\Big] = \exp\Big[\tfrac{i}{\hbar} \sum_{k=2}^{n} S(k, k\text{-}1)\Big] = \exp\big[\tfrac{i}{\hbar} S(n, 1)\big]$$

El propagador se obtiene sumando sobre todos los caminos

$$\langle x_n t_n \,|\, x_1 t_1 \rangle \sim \sum_{\text{caminos}} \exp\Big[\tfrac{i}{\hbar}\, S(n, 1)\Big]$$

La integral de camino de Feynman

Para que S determine la contribución de cada camino, tiene que ir en el exponente.

Por unidades, hay que dividir por una constante que tenga unidades de acción: $\hbar$

Su magnitud hay que medirla, determina la importancia relativa de caminos vecinos.

Para $\hbar \to 0$, sólo contribuyen las trayectorias vecinas a las clásicas.

Para hallar la constante de proporcionalidad C (que tiene unidades $[L]^{-1}$)

$$\langle x_k\, t_k \,|\, x_{k\text{-}1} t_{k\text{-}1} \rangle = C \,\exp\left[\, \tfrac{i}{\hbar}\, S(k, k\text{-}1)\right]$$

pedimos $\lim\limits_{\Delta t \to 0} \langle x_k\, t_k \,|\, x_{k\text{-}1} t_{k\text{-}1} \rangle = \delta(x_k - x_{k\text{-}1})$ con $\Delta t = t_{k\text{-}1} - t_k$.

La integral de camino de Feynman

$$\lim_{\Delta t\to 0} S(k,k\text{-}1) = \int_{t_{k\text{-}1}}^{t_k} \mathscr{L}\,\mathrm{d}t = \Delta t\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_k - x_{k\text{-}1}}{\Delta t}\right)^2 - V\left(\frac{x_k + x_{k\text{-}1}}{2}\right)\right] = \frac{m\,(x_k - x_{k\text{-}1})^2}{2\,\Delta t}$$

$$\lim_{\Delta t\to 0}\langle\, x_k\, t_k \,|\, x_{k\text{-}1} t_{k\text{-}1}\rangle = \lim_{\Delta t\to 0} C\,\exp\left[\,\tfrac{i}{\hbar}\,S(k,k\text{-}1)\right] = C\lim_{\Delta t\to 0}\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\,\frac{(x_k - x_{k\text{-}1})^2}{\Delta t}\right] =$$

$$= C\sqrt{i\pi\,\frac{2\hbar\Delta t}{m}}\,\delta(x_k - x_{k\text{-}1}) \qquad \text{pues} \qquad \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\sqrt{i\pi\epsilon}}\,\exp\left[\frac{i\,x^2}{\epsilon}\right] = \delta(x)$$

Entonces $\lim_{\Delta t\to 0}\langle\, x_k\, t_k \,|\, x_{k\text{-}1} t_{k\text{-}1}\rangle = \delta(x_k - x_{k\text{-}1}) \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{C = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}}$

La integral de camino de Feynman

$$\lim_{\Delta t \to 0} \langle x_k\, t_k \,|\, x_{k\text{-}1} t_{k\text{-}1} \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[\tfrac{i}{\hbar}\, S(k, k\text{-}1) \right]$$

$$\langle x_f\, t_f \,|\, x_i\, t_i \rangle = \lim_{n \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{n-1}{2}} \int \mathrm{d}x_{n\text{-}1} \int \mathrm{d}x_{n\text{-}2} \cdots \int \mathrm{d}x_3 \int \mathrm{d}x_2 \prod_{k=2}^{n} \exp\left[\tfrac{i}{\hbar}\, S(k, k\text{-}1) \right]$$

Definiendo $$\int_{x_i}^{x_f} \mathscr{D}[x(t)] \equiv \lim_{n \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{n-1}{2}} \int \mathrm{d}x_{n\text{-}1} \int \mathrm{d}x_{n\text{-}2} \cdots \int \mathrm{d}x_3 \int \mathrm{d}x_2$$

$$\boxed{\langle x_f\, t_f \,|\, x_i\, t_i \rangle = \int_{x_i}^{x_f} \mathscr{D}[x(t)] \, \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \mathscr{L}\, \mathrm{d}t \right]}$$

El efecto Bohm-Aharonov

En presencia de un campo $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$, el lagrangiano es $\mathscr{L} = \frac{1}{2}\, m\, \dot{\boldsymbol{r}} + \frac{q}{c}\, \dot{\boldsymbol{r}} \cdot \boldsymbol{A} = \mathscr{L}_{\mathrm{o}} + \frac{q}{c}\, \dot{\boldsymbol{r}} \cdot \boldsymbol{A}$

Para un dado camino $\boldsymbol{r}(t)$ la acción es $S = \int_{\mathrm{o}}^{t} \mathscr{L}_{\mathrm{o}}\, \mathrm{d}t + \frac{q}{c} \int_{\mathrm{o}}^{t} \mathrm{d}t\, \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \cdot \boldsymbol{A} = S_{\mathrm{o}} + \frac{q}{c} \int_{\mathrm{o}}^{t} \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}$

$$
\begin{aligned}
\langle\, x_f\, t_f \,|\, x_i\, t_i \,\rangle = \int \mathscr{D}[\boldsymbol{r}(t)]\, \exp\left[\tfrac{i}{\hbar}\, S\right] &= \int_U \mathscr{D}[\boldsymbol{r}(t)]\, \exp\left[\tfrac{i}{\hbar}\, S_{\mathrm{o}}\right]\, \exp\left[\tfrac{iq}{\hbar c} \int \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}\right] + \\
&+ \int_D \mathscr{D}[\boldsymbol{r}(t)]\, \exp\left[\tfrac{i}{\hbar}\, S_{\mathrm{o}}\right]\, \exp\left[\tfrac{iq}{\hbar c} \int \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}\right] \\
&= \exp\left[\tfrac{iq}{\hbar c} \int_U \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}\right]\, \int_U \mathscr{D}[\boldsymbol{r}(t)]\, \exp\left[\tfrac{i}{\hbar}\, S_{\mathrm{o}}\right] + \\
&+ \exp\left[\tfrac{iq}{\hbar c} \int_D \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}\right]\, \int_D \mathscr{D}[\boldsymbol{r}(t)]\, \exp\left[\tfrac{i}{\hbar}\, S_{\mathrm{o}}\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left|\langle\, x_f\, t_f \,|\, x_i\, t_i \,\rangle\right|^2 = \left| \int_U \mathscr{D}[\boldsymbol{r}(t)]\, \exp\left[\tfrac{i}{\hbar}\, S_{\mathrm{o}}\right] \right|^2 &+ \left| \int_D \mathscr{D}[\boldsymbol{r}(t)]\, \exp\left[\tfrac{i}{\hbar}\, S_{\mathrm{o}}\right] \right|^2 + \\
&+ 2\Re \left\{ \left[\int_U \mathscr{D}\right] \left[\int_D \mathscr{D}\right]^* \underbrace{\exp\left[\tfrac{iq}{\hbar c} \int_U \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} - \tfrac{iq}{\hbar c} \int_D \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}\right]}_{\exp\left[\frac{iq}{\hbar c} \oint \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}\right] = \exp\left[\frac{iq}{\hbar c}\, \Phi_B\right]} \right\}
\end{aligned}
$$

El efecto Bohm-Aharonov

Por simetría

$$\int_U \mathscr{D}[\boldsymbol{r}(t)]\ \exp\left[\tfrac{i}{\hbar}\, S_{\rm o}\right] = \int_D \mathscr{D}[\boldsymbol{r}(t)]\ \exp\left[\tfrac{i}{\hbar}\, S_{\rm o}\right] \equiv\ I$$

Entonces

$$\begin{aligned}
\left|\langle\, x_f\, t_f \mid x_i\, t_i\,\rangle\right|^2 &= 2\,|I|^2 + 2\,\Re\left\{|I|^2 \exp\left[\tfrac{iq}{\hbar c}\,\Phi_B\right]\right\} \\
&= 2\,|I|^2\left(1+\cos\tfrac{2\pi q}{\hbar c}\,\Phi_B\right) \\
&=\ 4\,|I|^2 && \text{para} \quad \Phi_B = 0 \\
&=\quad 0 && \text{para} \quad \Phi_B = \frac{\pi\hbar c}{q} \\
&=\ 4\,|I|^2 && \text{para} \quad \Phi_B = \frac{2\pi\hbar c}{q}
\end{aligned}$$

$$\frac{2\pi\hbar c}{e}\ =\ 4.13\times 10^{-7}\,\mathrm{G\,cm}^2$$

Cuántica en un campo gravitatorio

En clásica la masa se cancela: $H = \dfrac{P^2}{2m} + mV_g \quad \longrightarrow \quad \ddot{\boldsymbol{r}} + \vec{\nabla} V_g = 0$

En cuántica, no: $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + m\,V_g\,\psi = i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} \quad \longrightarrow \quad -\dfrac{1}{2}\left[\dfrac{\hbar}{m}\right]^2\nabla^2\psi + V_g\,\psi = i\left[\dfrac{\hbar}{m}\right]\dfrac{\partial\psi}{\partial t}$

Lo mismo pasa en la cuantización de Feynman:

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{r}_k\, t_k \,|\, \boldsymbol{r}_{k\text{-}1} t_{k\text{-}1}\rangle &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\ \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_{k\text{-}1}}^{t_k}\mathscr{L}\,\mathrm{d}t\right] \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\ \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_{k\text{-}1}}^{t_k}\left(\tfrac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}^2 - mgz\right)\mathrm{d}t\right] \\
&= \sqrt{\frac{m}{\hbar}\,\frac{1}{2\pi i\hbar\Delta t}}\ \exp\left[i\,\frac{m}{\hbar}\int_{t_{k\text{-}1}}^{t_k}\left(\tfrac{1}{2}\,\dot{\boldsymbol{r}}^2 - gz\right)\mathrm{d}t\right]
\end{aligned}$$

- La masa aparece en la combinación $\frac{\hbar}{m}$
- Los estados ligados gravitatorios dependen de la masa (p. ej, “átomo” n - e)
- $\hbar \to 0$ (cuántica $\to$ clásica): desaparece la dependencia en m
- Tambien desaparece si se calcula $\langle \boldsymbol{R}\rangle(t)$ a partir de Schrödinger: $\dfrac{\mathrm{d}^2\langle \boldsymbol{R}\rangle}{\mathrm{d}t^2} = -g\,\hat{\boldsymbol{z}}$

La fuerza de Coriolis en cuántica

$$\mathscr{L}(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}}) = \tfrac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}^2 - V(\boldsymbol{r}) + m\,(\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})\cdot\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{1}{2}m\left[r^2\Omega^2 - (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\Omega})^2\right]$$

Remplazando en las ecuaciones de Lagrange $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\dfrac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\boldsymbol{r}}}\right) - \dfrac{\partial\mathscr{L}}{\partial\boldsymbol{r}} = 0$

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = -\boldsymbol{\nabla}V(\boldsymbol{r}) - 2m\,\boldsymbol{\Omega}\times\dot{\boldsymbol{r}} - m\,\boldsymbol{\Omega}\times(\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{F}_{\text{ext}} + \boldsymbol{F}_{\text{cor}} + \boldsymbol{F}_{\text{centr}}$$

Coriolis agrega un término a la acción:

$$S = S_{\text{o}} + \int m\,(\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})\cdot\dot{\boldsymbol{r}}\;\mathrm{d}t = S_{\text{o}} + \int m\,(\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{\ell}$$

e introduce una diferencia de fase entre caminos alternativos:

$$\Delta\Phi = \frac{1}{\hbar}\int_2\mathscr{L}\,\mathrm{d}t - \frac{1}{\hbar}\int_1\mathscr{L}\,\mathrm{d}t = \frac{1}{\hbar}\oint\mathscr{L}\,\mathrm{d}t = \frac{m}{\hbar}\oint(\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{\ell}$$
$$= \frac{m}{\hbar}\iint\left[\boldsymbol{\nabla}\times(\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})\right]\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} = \frac{m}{\hbar}\iint 2\,\boldsymbol{\Omega}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} = \frac{2m}{\hbar}\,\boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{A}$$

Rotación en 4π del neutrón

El momento magnético de una partícula es proporcional a su espín: $\boldsymbol{\mu} = \gamma\, \boldsymbol{S}$

Para el neutrón $S_z = \frac{\hbar}{2}$ resulta $\mu_n = \mu_z = \dfrac{\gamma\hbar}{2} = \dfrac{\gamma h}{4\pi} \quad \rightarrow \quad \gamma = \dfrac{4\pi\mu_n}{h}$

El hamiltoniano en un $\boldsymbol{B} = B\hat{z}$ es: $H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\mu_z B = -\gamma B S_z$

y la evolución temporal equivale a una rotación en z:

$$U_T(t) = \exp\left(-\tfrac{i}{\hbar}\, tH\right) = \exp\left(\tfrac{i}{\hbar}\, t\gamma B\, S_z\right) \qquad U_R(\hat{z},\theta) = \exp\left(-\tfrac{i}{\hbar}\, \theta\, S_z\right) \quad \rightarrow \quad \Delta\theta = t\gamma B$$

En una rotación $\Delta\theta$, un espín $\frac{\hbar}{2}$ cambia su fase en $\beta = \dfrac{\Delta\theta}{2}$:

$$\exp\left(-\tfrac{i}{\hbar}\Delta\theta\, S_z\right) = \exp\left(-\tfrac{i\Delta\theta}{2}\right)$$

Si recorre una distancia ℓ : $t = \dfrac{\ell}{v} = \dfrac{m\ell}{mv} = \dfrac{m\ell}{p} = \dfrac{ml\lambda}{h} = t$

$$\Delta\theta = t\gamma B = \frac{ml\lambda}{h}\,\frac{4\pi\mu_n}{h}\,B \qquad \longrightarrow \qquad \beta = \frac{\Delta\theta}{2} \qquad \longrightarrow \qquad \boxed{\beta = \frac{2\pi\mu_n B\ell\lambda}{h^2}}$$