## Capítulo 1

# El oscilador armónico

Clásicamente la cosa venía de una partícula sometida a un potencial

$$V(x) = \frac{kx^2}{2} \qquad \qquad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Para el oscilador armónico cuántico 1D el hamiltoniano y energía son

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \qquad E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

donde  $\omega^2$  es la constante del resorte cuántico. Este problema puede resolverse usando un nuevo operador  $\hat{a}$  (operadores de aniquilación y creación)

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + i \frac{p}{m\omega} \right)$$
 con  $\hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x - i \frac{p}{m\omega} \right)$ 

que es suma de  $\hat{x}, \hat{p}$  pero que no es hermítico. Cumple que

$$[a,a^{\dagger}]=1 \qquad aa^{\dagger}=\frac{H}{\hbar\omega}-1 \qquad H=\hbar\omega\left(aa^{\dagger}+\frac{1}{2}\right),$$

donde se define el operador número  $\hat{N} \equiv a^{\dagger}a$  que al verificar  $[\hat{N}, \hat{H}] = 0$  tienen base de autoestados en común  $\{|n\rangle\}$ . En efecto

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle$$
  $\hat{H} |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle$ 

siendo n el número de cuantos de energía. Se cumplen además

$$[N,a]=[a^\dagger a,a]=-[a,a^\dagger a]=-\left(a^\dagger [a,a]+[a,a^\dagger]a\right)=-a$$

$$[N, a^{\dagger}] = [a^{\dagger}a, a^{\dagger}] = -[a^{\dagger}, a^{\dagger}a] = -(a^{\dagger}[a^{\dagger}, a] + [a^{\dagger}, a]a^{\dagger}) = a^{\dagger}$$

Queremos ver que le hace  $a^{\dagger}$  a un autoestado  $|n\rangle$  y luego a sobre el mismo.

$$\begin{split} Na^{\dagger} \left| n \right\rangle &= ([N,a^{\dagger}] + a^{\dagger}N) \left| n \right\rangle = a^{\dagger} \left| n \right\rangle + a^{\dagger}n \left| n \right\rangle \\ \hat{N}(a^{\dagger} \left| n \right\rangle) &= (n+1)(a^{\dagger} \left| n \right\rangle) \end{split}$$

Entonces, como no hay degeneración y tenemos  $N | n' \rangle = n' | n' \rangle$  entonces

$$a^{\dagger} |n\rangle = c_1 |n+1\rangle$$
,

y procediendo de modo idem para  $a | n \rangle$  será

$$a|n\rangle = c_2|n-1\rangle$$

Luego,

$$a^{\dagger} | n \rangle = c_1 | n + 1 \rangle \xrightarrow{DC} \langle n + 1 | c_1^* = \langle n | a \rangle$$
$$a | n \rangle = c_2 | n - 1 \rangle \xrightarrow{DC} \langle n - 1 | c_2^* = \langle n | a^{\dagger} \rangle$$

y entonces

$$\begin{split} &\langle n\,|\,N\,|\,n\rangle = n\,\langle n\,|\,n\rangle = n = \langle n\,\big|\,a^\dagger a\,\big|\,n\rangle = \langle n-1\,|\,c_2^*c_2\,|\,n-1\rangle = |c_2|^2\,\langle n-1\,|\,n-1\rangle \\ &n = \langle n\,\big|\,aa^\dagger - 1\,\big|\,n\rangle = -1 + \langle n\,\big|\,aa^\dagger\,\big|\,n\rangle = -1 + \langle n+1\,|\,c_1^*c_1\,|\,n+1\rangle = -1 + |c_1|^2\,\langle n+1\,|\,n+1\rangle \\ &\text{siendo} \end{split}$$

$$\begin{split} |c_2| &= \sqrt{n} \qquad |c_1| = \sqrt{n+1} \\ \hat{a}^\dagger \left| n \right> &= \sqrt{n+1} \left| n+1 \right> \qquad \hat{a} \left| n \right> &= \sqrt{n} \left| n-1 \right> \end{split}$$

y entonces de esta forma  $\hat{a}^{\dagger}$  es el operador de creación de cuantos y  $\hat{a}$  el de aniquilación. Estos operadores permiten ir saltando de niveles de energía y pasar entre estados definidos estos por el número de cuantos. Nótese que  $\hat{a}$  es operador de aniquilación cuando actúa sobre kets; sobre bras los crea.

Del producto interno se tiene

$$(\langle n | a^{\dagger})(a | n \rangle) \ge 0$$

lo cual conduce a  $n \geq 0$ .

## 1.0.1 El estado fundamental $\langle 0 \rangle$

$$a \left| n \right\rangle \stackrel{DC}{\longrightarrow} \left\langle n \right| a^{\dagger}$$

y desde el postulado para productos internos,

$$(\langle n | a^{\dagger})(a | n \rangle) \ge 0 \quad n \langle n | n \rangle \ge 0 \Rightarrow n \ge 0$$

entonces n cabalga por los naturales. Si hacemos

$$a\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle, \quad a^{2}\left|n\right\rangle = \sqrt{n(n-1)}\left|n-2\right\rangle \quad aa^{2}\left|n\right\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)}\left|n-3\right\rangle \ \dots \ aa^{2}\left|n\right\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)}\left|n\right\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)}\left|$$

en algún momento (dado que  $n \geq 0$ ) se llega a  $|n=0\rangle$ , entonces  $E_0 = \hbar\omega/2$  y

$$|0\rangle \equiv \text{El fundamental}$$

y no se puede bajar más,

$$\hat{a} |0\rangle = 0.$$

Por otra parte, con el  $\hat{a}^{\dagger}$  se puede llegar a cualquier estado

$$a^{\dagger} |0\rangle = \sqrt{1} |1\rangle$$
,  $a^{\dagger 2} |0\rangle = \sqrt{1} \sqrt{2} |2\rangle = \sqrt{1} \sqrt{2} \sqrt{3} |3\rangle$ 

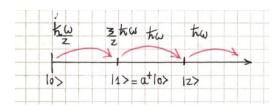


Figura 0.1

Se tienen todos los valores de energía a partir de uno solo,

$$\frac{\left(a^{\dagger}\right)^{n}}{\sqrt{n}!}\left|0\right\rangle = \left|n\right\rangle \qquad \qquad E_{n} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Las matrices de  $\hat{a},\hat{a}^{\dagger}$  sólo tienen una diagonal corrida de elementoss

$$\begin{split} \left\langle n' \mid a \mid n \right\rangle &= \sqrt{n} \left\langle n' \mid n-1 \right\rangle = \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \\ \left\langle n' \mid a^{\dagger} \mid n \right\rangle &= \sqrt{n-1} \left\langle n' \mid n+1 \right\rangle = \sqrt{n-1} \delta_{n',n+1} \end{split}$$

Es decir, que pictóricamente serían algo como

$$a^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & \dots & & & \\ 0 & \dots & & & \sqrt{n} \\ 0 & \dots & & & 0 \end{pmatrix}$$

У

$$a = \begin{pmatrix} 0 & 0 & & & & \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & & \dots & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & & \dots & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & & \dots & \\ \dots & & & & \sqrt{n} & 0 \end{pmatrix}$$

Los elementos de las matrices

$$\begin{split} \left\langle n' \mid x \mid n \right\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1}) \\ \left\langle n' \mid p \mid n \right\rangle &= i \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (-\sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1}) \end{split}$$

no pueden ser matrices diagonales porque no conmutan con el hamiltoniano.

También puede verse que

$$\langle x \rangle = \langle n \mid x \mid n \rangle = 0 \qquad \langle p \rangle = \langle n \mid p \mid n \rangle = 0,$$

lo cual difiere de lo que esperaríamos clásicamente. Es más, se tienen también

$$x^{2} = \frac{\hbar}{2m\omega} (a^{2} + a^{\dagger 2} + aa^{\dagger} + a^{\dagger}a) \tag{1}$$

y consecuentemente

$$\langle 0 | x^2 | 0 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$$
  $\langle 0 | p^2 | 0 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}$ 

de manera que resulta

$$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle_{|0\rangle} \left\langle (\Delta p)^2 \right\rangle_{|0\rangle} = \frac{\hbar^2}{4}$$

el estado fundamental es el de incerteza mínima. Esto es así porque estamos en el fundamental y es un pack gaussiano.

Veamos ahora la forma que tiene la función de onda. A tiempo cero. Siendo  $\Psi_n(x')=\langle x'\,|\,n\rangle$  quiero evaluar  $\Psi_0(x')=\langle x'\,|\,0\rangle$  y ver que como

$$\langle x' \mid a \mid 0 \rangle = 0$$

tengo

$$\begin{split} 0 &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left\langle x' \left| \, x + \frac{ip}{m\omega} \right| 0 \right\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left[ x' \left\langle x' \right| 0 \right\rangle + \frac{i}{m\omega} \left\langle x' \right| p \left| \, 0 \right\rangle \right] \\ & x' \left\langle x' \right| 0 \right\rangle + \frac{i}{m\omega} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \left\langle x' \right| 0 \right\rangle = 0 \end{split}$$

entonces

$$x' \langle x' | 0 \rangle = -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | 0 \rangle$$
$$-\int \frac{m\omega}{\hbar} x' dx' = \int \frac{d \langle x' | 0 \rangle}{\langle x' | 0 \rangle} \Rightarrow \langle x' | 0 \rangle = \kappa e^{-m\omega x'^2/(2\hbar)}$$

y entonces

$$\begin{split} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle 0 \left| \left. x' \right\rangle \left\langle x' \right| 0 \right\rangle dx' = \int_{-\infty}^{\infty} |\kappa|^2 \, \mathrm{e}^{-m\omega x^{'2}/\hbar} dx' = |\kappa|^2 \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m \omega}} \\ &|\kappa| = \left(\frac{m \omega}{\pi \hbar}\right)^{1/2} = \frac{1}{(\pi x_0^2)^{1/4}} \end{split}$$

donde usamos el conocido resultado  $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\pi/a},$ llegamos al llamado pack gaussiano.

$$\langle x' | 0 \rangle = \frac{1}{(\pi x_0^2)^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}(x'/x_0)^2}$$

El estado fundamental tiene incerteza mínima y debe corresponder a un paquete gaussiano.

Se ven que

$$\langle x' | 1 \rangle = \langle x' | a^{\dagger} | 0 \rangle$$

y lo escribo en función de x y p que sé cómo operan sobre x'. Entonces

$$\langle x' \, | \, 1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left( x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right) \langle x' \, | \, 0 \rangle$$

y se puede demostrar que vale

$$\langle x' | n \rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} \frac{1}{x_0^{n+1/2}} \left( x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right)^n e^{-1/2(x'/x_0)^2}.$$

Los operadores  $a, a^{\dagger}$  son útiles para la resolución de problemas discretos. En el oscilador armónico las energías son discretas, hasta el infinito, y están equiespaciadas  $\hbar\omega$ .

Notemos que  $\hat{a}^{\dagger}$  crea sobre ket y aniquila sobre bra, mientras que  $\hat{a}$  aniquila sobre ket y crea sobre bra,

Esto ya se dijo en otra parte y está descolgado aquí.

$$a^{\dagger} | n \rangle = \sqrt{n+1} | n+1 \rangle \Rightarrow \langle n | a = \langle n+1 | \sqrt{n+1} \rangle$$
  
 $a | n \rangle = \sqrt{n} | n-1 \rangle \Rightarrow \langle n | a^{\dagger} = \langle n-1 | \sqrt{n} \rangle$ 

#### EJEMPLO 0.1 Ejercicio 8

Tiene muchos resultados de la teoría que no repetiré aquí. Para evaluar  $\langle m \, | \, \hat{x} \, | \, n \rangle$  se lo escribe en términos de  $a, a^{\dagger}$ , luego se opera. Vemos que  $\langle m \, | \, \hat{x} \, | \, n \rangle$  y  $\langle m \, | \, \hat{p} \, | \, n \rangle$  no son diagonales en esta base y que los elementos diagonales son nulos.

El cálculo de  $\langle m | \hat{x}^2 | n \rangle$  es directo pero engorroso. Se puede ver que usando la expresión de  $x^2$  en términos de  $a, a^{\dagger}$  dada por la (1) se puede ver que vale n

$$\begin{split} \left\langle m \, \big| \, \hat{x}^2 \, \big| \, n \right\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[ \sqrt{n(n+1)} \delta_{m,n-2} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} + 2(n+1) \delta_{mn} \right] \\ \left\langle m \, \big| \, \hat{p}^2 \, \big| \, n \right\rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2} \left[ -(2n+1) \delta_{mn} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} + \sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} \right] \end{split}$$

Entonces tenemos

$$\langle n \, | \, \hat{p}^2 \, | \, n \rangle = \frac{m\hbar\omega}{2} (2n+1) \qquad \langle n \, | \, \hat{x}^2 \, | \, n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1)$$

y con esto se puede verificar el teorema del virial. Para autoestados de H se da que

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \qquad (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$$

y usando lo obtenido arriba

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2=\frac{\hbar^2}{4}(2n+1)^2\geq\frac{\hbar^2}{4}$$

y se ve que el signo de igualdad vale para el n = 0, el fundamental.

La función de onda del fundamental será  $\langle x' | 0 \rangle$  y podemos usar que

$$\langle x' \mid a \mid 0 \rangle = \langle x' \mid \left( x + \frac{i}{m \omega} p \right) \mid 0 \rangle \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} = 0$$

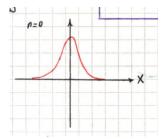
lo que resulta en

$$x'\langle x' | 0 \rangle + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x} \langle x' | 0 \rangle = 0,$$

que es una ecuación diferencial para la función de onda cuya solución se puede escribir, definiendo  $x_0 \equiv \hbar/(m\omega),$ 

$$\langle x \, | \, 0 \rangle = \frac{1}{\hbar^{1/4} \sqrt{x_0}} \, \mathrm{e}^{-1/2(x'/x_0)^2}$$

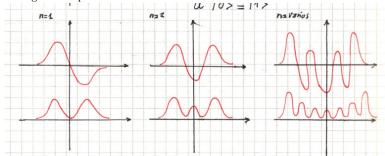
una gaussiana centrada en el origen.



El siguiente estado lo generamos con el operador de creación,

$$a^{\dagger} |0\rangle = |1\rangle$$

de manera que en la pic de abajo podemos ver en la primer fila las funciones de onda y en la segunda la probabilidad resultante.



Veamos ahora la evolución temporal en la representación de Heisenberg. Todos los operadores dependen del tiempo, luego

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[p,H] = -m\omega^2 x \qquad \qquad \frac{dx}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[x,H] = \frac{p}{m}$$

y asimismo,

$$[p, \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}] = \frac{m\omega^2}{2}[p, x^2] = \frac{m\omega^2}{2}(-2i\hbar)$$

Es conveniente hacer una transformación canónica  $x,p\rightarrow a,a^{\dagger},$  luego

$$rac{da}{dt} = -i\omega a$$
  $rac{da^{\dagger}}{dt} = i\omega a^{\dagger}$ 

siendo el conmutador

$$[a,H]=\hbar\omega[a,a^{\dagger}a]=\hbar\omega(a^{\dagger}[a,a]+[a,a^{\dagger}]a)$$

con

$$a(t) = a(0) \, \mathrm{e}^{-i\omega t} \qquad \qquad a^\dagger(t) = a^\dagger(0) \, \mathrm{e}^{i\omega t}$$

Poniendo  $a, a^{\dagger}$  en términos de x, p con

$$x(t) + i \frac{p(t)}{m\omega} = x(0) \, \mathrm{e}^{i\omega t} + i \frac{p(0)}{m\omega} \, \mathrm{e}^{-i\omega t}$$

$$x(t) - i \frac{p(t)}{m\omega} = x(0) e^{i\omega t} - i \frac{p(0)}{m\omega} e^{-i\omega t}$$

y equating ambas

$$x(t) = x(0)\cos(\omega t) + \frac{p(0)}{m\omega}\sin(\omega t)$$
$$p(t) = -m\omega x(0)\sin(\omega t) + p(0)\cos(\omega t).$$

Esto también se puede calcular con el operador evolución, a través de

$$x(t) = e^{iH/\hbar t} x e^{-iH/\hbar t}$$
.

aunque es un camino mucho más painful. Facilitamos un poco con el **lema de Baker-Hausdorff** que dice que

$$\mathrm{e}^{[iG\lambda]}\hat{A}\,\mathrm{e}^{-[iG\lambda]} = \hat{A} + i\lambda[G,A] + \frac{i^2\lambda^2}{2!}[G,[G,A]] + \ldots + \frac{i^2\lambda^n}{n!}[G,[G,[G,...[G,A]]]]$$

con G hermítico y  $\lambda$  real.

El primer término es x luego se tienen

$$2)\quad [H,x(0)]=-\frac{i\hbar p(0)}{m}$$

$$\begin{aligned} 3) \quad [H,[H,x(0)]] = [H,-\frac{i\hbar p(0)}{m}] = -[H,p(0)]\frac{i\hbar}{m} = \hbar^2 m x(0) \\ 4) \quad [H,[H,[H,x(0)]]] = [H,-i\hbar^2 x(0)] = [H,x(0)]\hbar^2 \end{aligned}$$

amasando todo esto se llega a

$$x(t) = x(0) + \left\lceil \frac{p(0)}{m} \right\rceil t - \frac{1}{2!} t^2 \omega^2 x(0) - \frac{1}{3!} \frac{t^3 \omega^2 p(0)}{m} + \dots$$

y con un poco de buena vista se pueden identificar en esta serie las expresiones de

$$\sin(\omega t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\omega t)^{2n+1}}{(2n+1)!} (-1)^n$$

$$\cos(\omega t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\omega t)^{2n}}{(2n)!} (-1)^n$$

Faltaría ver la evolución de los valores medios  $\langle n \, | \, x(t) \, | \, n \rangle = 0$  y  $\langle n \, | \, p(t) \, | \, n \rangle = 0$ , pero se quedan en cero por ser estacionarios [?]. Las oscilaciones solamente aparecerán en estados que son combinación lineal de autoestados de energía.

### 1.0.2 Interferencia en experimento de Young

Consideremos la situación depicted en la figura bajo estas líneas, que es reminiscente de la del experimento de Young aunque la fuente no necesariamente es de luz.

Uso  $\hat{H}$  de partículas libres y que  $|\alpha\rangle$  es el generado por la fuente. Suponemos que en t=0 al pasar por las aberturas se da

$$\frac{1}{2}\left|\alpha\right\rangle = \left|\alpha_1\right\rangle = \left|\alpha_2\right\rangle$$

y luego para t > 0 se tiene

$$\left|\tilde{\alpha_{1}}\right\rangle = \,\mathrm{e}^{-iHt/\hbar}\left|\alpha_{1}\right\rangle = \,\mathrm{e}^{-iE_{\alpha}t/\hbar}\left|\alpha_{1}\right\rangle$$

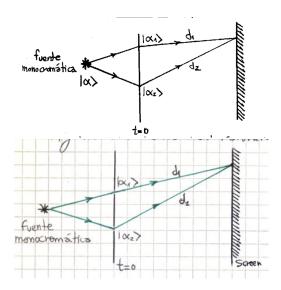


Figura 0.2

$$|\tilde{\alpha}_2\rangle = e^{-iE_{\alpha}t/\hbar} |\alpha_2\rangle$$

En la pantalla debe verse la interferencia de los dos estados solapados. La diferencia de caminos es la que genera la interferencia, y usando que los tiempos son  $t_i=d_i/v$  se da

$$\begin{split} |\tilde{\alpha}\rangle &= |\tilde{\alpha_1}\rangle + |\tilde{\alpha_2}\rangle = \,\mathrm{e}^{-iE_\alpha\frac{d_1}{v}/\hbar}\,|\alpha_1\rangle + \,\mathrm{e}^{-iE_\alpha\frac{d_2}{v}/\hbar}\,|\alpha_2\rangle \\ |\tilde{\alpha}\rangle &= \frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{-iE_\alpha\frac{d_1}{v}/\hbar}\left[1 + \,\mathrm{e}^{-iE_\alpha\frac{d_2-d_1}{v}/\hbar}\right]|\alpha_1\rangle \end{split}$$

y si definimos

$$\beta = E_{\alpha} \frac{d_2 - d_1}{v} / \hbar,$$

resulta entonces

$$\langle \tilde{\alpha} \, | \, \tilde{\alpha} \rangle = \frac{1}{4} |1 + e^{-iE_{\alpha} \frac{d_2 - d_1}{v} / \hbar}|^2 = \frac{1}{4} ((1 + \cos \beta)^2 + \sin^2 \beta) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos (\beta) \,.$$

Esto sería la intensidad si de radiación electromagnética se tratase.

Al partir el estado  $|\alpha_1\rangle$  y volver a unirlo en  $|\alpha_1\rangle+|\alpha_2\rangle$  vemos una intensidad que depende de la diferencia de camino.

### 1.0.3 Cambio de cero del potencial

Consideramos una partícula sometida a potencial externo. El potencial es una maquinación matemática conveniente para el concepto más físico de fuerza. Es un caso particular de cambio de gauge.

En mecánica clásica la física de un problema no se ve afectada por un cambio de gauge. Si movemos el cero de potencial, la situación física es la misma. Veamos qué sucede en mecánica cuántica.

$$\begin{split} |\alpha,t,t_0\rangle &= \,\mathrm{e}^{-i(p^2/2m+V(x))(t-t_0)/\hbar}\,|\alpha,t_0\rangle \\ |\tilde{\alpha},t,t_0\rangle &= \,\mathrm{e}^{-i(p^2/2m+V(x)+V_0)(t-t_0)/\hbar}\,|\alpha,t_0\rangle \\ |\tilde{\alpha},t,t_0\rangle &= \,\mathrm{e}^{-iV_0(t-t_0)/2}\,|\alpha,t,t_0\rangle \end{split}$$

y entonces vemos que  $|\tilde{\alpha},t\rangle$  y  $|\alpha,t\rangle$  difieren en una fase, de manera que los valores de expectación (las magnitudes físicas) no cambian (con  $V_0$  constante). El efecto fue meter una fase.

Si el potencial es tal que  $V_0 = V_0(t)$  entonces

$$|\tilde{\alpha},t,t_0\rangle = \, \mathrm{e}^{-i\int_{t_1}^{t_2} V(t) dt} \, |\alpha,t,t_0\rangle \, .$$

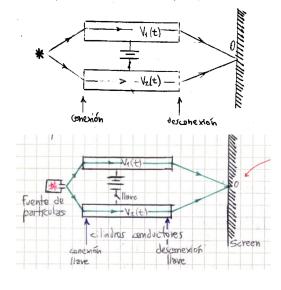


Figura 0.3

Consideremos ahora un experimento ideal (pensado). Dentro de los cilindros hay campo nulo siempre. Se varia el V abriendo y cerrando la llave a la entrada y a la salida; se varía el cero de potencial pero no el campo. Se cambia la fase de las partículas inferiores respecto de las superiores, entonces habrá interferencia en O.

Clásicamente no hay variación, pero cuánticamente

$$\Delta {\rm fase} = -\frac{i}{\hbar} \; {\rm e} \int_{t_1}^{t_2} V_1(t) - V_2(t) dt = -\frac{i}{\hbar} \; {\rm e} \Delta V$$

Notemos que con el límite  $\hbar \to 0$  el efecto desaparece [no será el otro límite o hay algo mal?].

Lo que realmente cuenta es la diferencia de potencial  $\Delta V$ , la cual sí tiene sentido físico porque es independiente de la medida y porque pueden escribirse los campos en función de aquella.

#### EJEMPLO 0.2 Caso gravitatorio

Clásicamente la masa inercial con la gravitatoria se cancelan,

$$m\ddot{x} = -m\nabla\phi_a$$

y esto lleva a que la aceleración sea g, luego la gravedad es algo geométrico porque no depende de la masa. Cuánticamente,

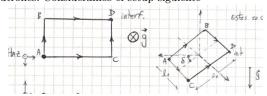
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+m\phi_g\right)\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

la masa no se simplifica. Aún así

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -g.$$

#### EJEMPLO 0.3 Experimento Colella/Overhauser/Werner

Esto viene de un artículo de Physical Review Letters. Se utilizan partículas neutras: neutrones. Consideramos el setup siguiente



La diferencia de altura es  $\Delta h = \ell_2 \sin \delta$  pero en la derecha se tiene que BD está a mayor altura que AC que está más baja. Luego, la longitud de onda Compton

$$v = \frac{p}{m} = \frac{1}{m} \frac{2m\hbar}{\lambda} = \frac{\hbar}{m\lambda_c}$$

y entonces

$${\rm e}^{-i/\hbar mg\ell_x\sin\delta\ell_1/v}$$

de manera que

$$\phi_{ABC} - \phi_{ACD} = \frac{m^2 g \ell_1 \ell_2 \lambda_c \sin \delta}{\hbar^2}$$

se tiene un fenómeno puramente cuántico (aparece  $\hbar$ ) y depende de la masa.

### 1.0.4 Caso del EM y la invariancia de gauge

Recordemos algunos resultados del electromagnetismo.

$$E = -\nabla \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

Si el cuadrivector de momento es  $p^{\mu}=(E/c, \mathbf{p})$  y el de cuadri potencial es  $A^{\mu}=(\phi, \mathbf{A})$  se veía que el reemplazo

$$p^\mu \to p^\mu - \frac{e}{c} A^\mu$$

era covariante. Luego, el hamiltoniano covariante era

$$H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 + e\phi \tag{2}$$

En el formalismo de Heisenberg

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[x_i, H] = \frac{p_i - eA_i/c}{m}$$

puesto que p y A no conmutan. Los momentos son justamente  $\pi_i = p_i - e/cA_i.$  Luego,

$$[p_i, p_j] = 0$$
  $[\pi_i, \pi_j] = \frac{i\hbar e}{c} \epsilon_{ilk} B_k$ 

La invariancia de gauge hace que

$$\phi o \phi - rac{1}{c} rac{\partial \Lambda}{\partial t}$$
  $m{A} o m{A} + 
abla \Lambda$ 

que es un cambio que deja los campos E, B invariantes. Si la función  $\Lambda \neq \Lambda(x)$  entonces el cambio es como un cambio de cero del potencial, pues

$$\phi \to \phi + \lambda(t)$$
  $A \to A$ .

La mecánica cuántica incluye la invariancia de gauge de modo que los valroes de expectación, que es lo físico, no se alteran. El cambio de fase implicado por la transformación de gauge no pasa a los valores de expectación.

Considerando la versión operacional del hamiltoniano (2) y la ecuación de Schrödinger,

$$H\left|\alpha,t_{0},t\right\rangle =i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\alpha,t_{0},t\right\rangle$$

Ahora quiero hacer una transformación de gauge para ver si obtengo las mismas mediciones. Reemplazando los operadores p y A por los transformados según el cambio de gauge se obtiene (luego veremos la justificación, creámoslo por ahora)

$$|\tilde{\alpha}, t_0, t\rangle = e^{ie\Lambda(x,t)/(\hbar c)} |\alpha, t_0, t\rangle$$

y a esta fase la denominaresmos  $\hat{g}(x,t)$  (un operador?) luego, la transformación de gauge implica

$$\langle \alpha \, | \, x \, | \, \alpha \rangle \to \langle \tilde{\alpha} \, | \, x \, | \, \tilde{\alpha} \rangle = \langle \alpha \, | \, g^{\dagger} x g \, | \, \alpha \rangle$$

y como conmutan,

$$\langle \alpha \, | \, x g^{\dagger} g \, | \, \alpha \rangle = \langle \alpha \, | \, x \, | \, \alpha \rangle$$

donde el último paso es por la unitariedad. Luego, el x no cambia por una transformación de gauge.

Veamos qué le pasa al momento conjugado  $\pi$ , teniendo en cuenta que el momento lineal mecánico p no varía pero sí el potencial A, i.e.

$$\left\langle \alpha \,|\, \pi \,|\, \alpha \right\rangle \to \left\langle \tilde{\alpha} \,|\, \tilde{\pi} \,|\, \tilde{\alpha} \right\rangle = \left\langle \tilde{\alpha} \,\left|\, p - \frac{e\tilde{A}}{c} \,\right| \tilde{\alpha} \right\rangle$$

Luego,

$$\left\langle \tilde{\alpha} \left| g^{\dagger} \left( p - \frac{eA}{c} - \frac{e}{c} \nabla \Lambda \right) g \right| \tilde{\alpha} \right\rangle$$

donde hay que recordar que p tiene metida la derivada respecto de x y  $A, \Lambda$  son sólo dependientes de x, t y conmutan con g(x, t). Se ve que resulta todo el operador p-e/cA y la transformación cumple además que  $\langle \alpha \, | \, \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} \, | \, \tilde{\alpha} \rangle$  de forma que se ha demostrado lo que se propusiera antes. Tenemos

$$\label{eq:energy_equation} \begin{split} \left[\frac{1}{2m}\left(p-\frac{eA}{c}-\frac{e\nabla\Lambda}{c}\right)^2+e\;\phi-\frac{e}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right]\;\mathrm{e}^{ie\Lambda/(\hbar c)}\left|\alpha,t_0,t\right> = \\ &\mathrm{e}^{ie\Lambda/(\hbar c)}\left(-\frac{e}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\left|\alpha,t_0,t\right> \end{split} \tag{3}$$

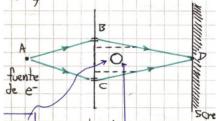
donde se ve que valen varias cosas

$$gg^{\dagger}\left(p-\frac{eA}{c}-\frac{e\nabla\Lambda}{c}\right)g=g\left(p-\frac{eA}{c}\right)$$

Con esto debería ser suficiente para confirmar el resultado [confirmarlo]. La mecánica cuántica es, entonces, invaraitne de gauge al igual que lo que sucedía en mecánica clásica.

#### EJEMPLO 0.4 Experimento de Aharonov y Bohm

Vemos en la figura que las partículas no interactúan con el campo  $\boldsymbol{B}$  y el circulito es un solenoide infinito. Hay campo magnético dentro pero es nula afuera. Tengo, no obstante, potencial  $\boldsymbol{A}$  en todas partes.



Luego, resulta que hay interferencia en D sin campo  $\boldsymbol{B}$  por al diferencia de fases originada por el potencial  $\boldsymbol{A}$ .

La fase es

$$-\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2} \left( -\frac{e}{c}\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} \cdot \boldsymbol{A} \right) dt = \frac{ie}{\hbar c} \int_{x_1}^{x_2} \boldsymbol{A} \cdot d\boldsymbol{x}.$$

Recordemos que el lagrangiano de la situación<sup>1</sup> [?]

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \left( \frac{d\boldsymbol{x}}{dt} \right)^2 + \frac{e}{c} \frac{d\boldsymbol{x}}{dt} \cdot \boldsymbol{A}$$

Quisiéramos ver cuál es la diferencia de fase entre los dos caminos ABD y ACD, que será

$$\frac{ie}{\hbar c} \left( \int_{ABD} \boldsymbol{A} \cdot d\boldsymbol{x} - \int_{ACD} \boldsymbol{A} \cdot d\boldsymbol{x} \right) = \frac{ie}{\hbar c} \left( \int_{ABD} \boldsymbol{A} \cdot d\boldsymbol{x} + \int_{DCA} \boldsymbol{A} \cdot d\boldsymbol{x} \right) = \frac{ie}{\hbar c} \int_{cerrada} \boldsymbol{A} \cdot d\boldsymbol{x}$$

que conduce a

$$\frac{ie}{\hbar c} \int_{cerrada} \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A} \, d\boldsymbol{S} = \frac{ie}{\hbar c} \phi_B \neq 0$$

es decir que hay efecto de interferencia. Notemos que el rotor sigue siendo invariante de gauge [?].

Físicamente el campo  $\boldsymbol{B}$  no interactúa con el ahz de partículas, con lo cual parecería una interacción del potencial con las partículas.

# 1.1 El propagador

Físicamente representa la proababilidad de transición entre autoestados por el paso del tiempo,  $|x'\rangle_{t_0} \longrightarrow |x''\rangle_t$ . La idea es que si en t=0 el estado del sistema es un autoestado  $|x'\rangle$ , interesará ver cuál es la probabilidad de hallarse en  $|x''\rangle$  en t. El propagador se define como:

$$\langle x'' \mid e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \mid x' \rangle \equiv K(x', t; x, t_0),$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Hay un lagrangiano para cada momento, como para ahora que me estoy tomando una copa de vino.

pero veamos cómo aparece en el curso de un cálculo. Consideremos

$$\begin{split} \left\langle x'' \mid \alpha, t_0, t \right\rangle &= \left\langle x'' \mid \mathrm{e}^{-iH(t-t_0)/\hbar} \mid \alpha, t_0 \right\rangle, \\ \left\langle x'' \mid \alpha, t_0, t \right\rangle &= \int dx' \left\langle x'' \mid \mathrm{e}^{-iH(t-t_0)/\hbar} \mid x' \right\rangle \left\langle x' \mid \alpha, t_0 \right\rangle. \end{split}$$

Entonces la función de onda se escribe

$$\Psi_{\alpha}(x'',t) = \int dx' K(x'',t;x',t) \Psi_{\alpha}(x',t). \label{eq:psi_alpha}$$

Podemos pensar que el propagador lleva o "propaga" la función de onda desde  $t_0$  a t. Se puede escribir:

$$K(x',t;x,t_0) = \sum_{a'} \left\langle x'' \mid a' \right\rangle \left\langle a' \mid x' \right\rangle \, \mathrm{e}^{-iE_a(t-t_0)/\hbar}$$

y metemos un observable  $\hat{A}$  donde [A, H] = 0 y  $A |a'\rangle = a |a'\rangle$ .

El propagador depende del potencial, pero no de la función de onda inicial. Se debe cumplir que:

$$\begin{split} \lim_{t \to t_0} K(x',t;x,t_0) &= \delta^3(x''-x') \\ K(x'',t;x,t_0) &= \left\langle x'' \mid \operatorname{e}^{-iH(t-t_0)/\hbar} \mid a' \right\rangle \left\langle a' \mid x' \right\rangle = \sum_{a'} \Psi_{\mid a' \rangle}(x'',t) \left\langle a' \mid x' \right\rangle \\ K(x'',t;x,t_0) &= \sum_{a'} c_{a'}(x') \Psi_{\mid a' \rangle}(x'',t) \end{split}$$

y entonces el propagador es una función de Green que satisface

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x'') - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)K(x',t;x,t_0) = -i\hbar\delta^3(x''-x')\delta(t-t_0)$$

con  $K(x'', t; x', t_0) = 0$  si t < 0 que es la condición de contorno.

#### EJEMPLO 1.1 El propagador de la partícula libre

Escribimos el propagador como integral en el momento de acuerdo con

$$\begin{split} K(x'',t;x,t_0) &= \int dp' \left\langle x'' \, \middle| \, \operatorname{e}^{-ip^2(t-t_0)/2m\hbar} \left| \, p' \right\rangle \left\langle p' \, \middle| \, x' \right\rangle = \\ &\int dp' \, \operatorname{e}^{-ip'^2(t-t_0)/2m\hbar} \left\langle x'' \, \middle| \, p' \right\rangle \left\langle p' \, \middle| \, x' \right\rangle = \\ &\frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' \, \operatorname{e}^{-ip'^2(t-t_0)/2m\hbar} \, \operatorname{e}^{-ip'(x'-x'')/\hbar} \end{split}$$

y entonces el propagador de una partícula libre es

$$K(x'',t;x,t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t_0)}} \, \mathrm{e}^{i \frac{m(x''-x')^2}{2\hbar (t-t_0)}}$$

También se puede escribir el propagador en la representación de Heisenberg,

$$\left\langle x'' \mid \mathrm{e}^{-iH(t-t_0)/\hbar} \mid x' \right\rangle = \left\langle x'' \mid \mathrm{e}^{-iHt/\hbar} \, \mathrm{e}^{iHt_0/\hbar} \mid x' \right\rangle = \left\langle x'', t \mid x', t_0 \right\rangle$$

y entonces

$$K(x'', t; x', t_0) = \langle x'', t \mid x', t_0 \rangle,$$

el propagador es la probabilidad de transición de pasar entre puntos x' y x''.

El propagador tienq que cumplir la propiedad del operador evolución, esto es la propiedad de composición (como el  $U(t, t_0)$ ), es decir:

$$K(x'',t;x,t_0) = K(x'',t;x,t_1)K(x'',t_1;x,t_0) \qquad t > t_1 > t_0,$$

lo cual se puede ver explícitamente considerando

$$\left\langle x'' \mid \mathrm{e}^{-iH/\hbar(t-t_1+t_1-t_0)} \mid x' \right\rangle = \int dx_1 \left\langle x'' \mid \mathrm{e}^{-iH(t-t_1)/\hbar} \mid x_1 \right\rangle \left\langle x_1 \mid \mathrm{e}^{-iH(t_1-t_0)/\hbar} \mid x' \right\rangle$$

de lo cual vemos

$$\left\langle x'' \bigm| \mathrm{e}^{-iH/\hbar(t-t_1+t_1-t_0)} \middle| x' \right\rangle = \left\langle x'', t \middle| x_1, t_1 \right\rangle \left\langle x_1, t_1 \middle| x', t_0 \right\rangle.$$

## 1.2 Integrales de camino de Feynmann

Consideramos una partícula yendo de  $(x_1,t_1)$  a  $(x_N,t_N).$  Dividimos el tiempo

$$\delta t = \frac{t_N - t_1}{(N - 1)}$$

y queremos ver la amplitud de transición desde el estado 1 al N. Es decir,

$$\begin{split} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \ \dots \\ & \dots \int dx_2 \left\langle x_N, t_N \, | \, x_{N-1}, t_{N-1} \right\rangle \dots \left\langle x_2, t_2 \, | \, x_1, t_1 \right\rangle \end{split}$$

Se puede pensar como que estamos sumando sobre todos los posibles caminos entre  $(x_1,t_1)$  y  $(x_N,t_N)$  fijos. En mecánica clásica teníamos un solo camino, el que minimizaba la acción S

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt = \delta S = 0$$

pero en cambio en mecánica cuántica todos los caminos aportan (e interfieren entre sí). En un libro de Dirac, Feymann lee

$$\langle x_2, t_2 \, | \, x_1, t_1 \rangle$$
 corresponde a  $\mathrm{e}^{i \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}/\hbar \, dt}$ 



Figura 2.4

y entonces propone

$$\langle x_2, t_2 \, | \, x_1, t_1 \rangle \approx \sum_{\text{caminos}} \mathrm{e}^{i \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}_{\text{clasico}}(x, \dot{x}) / \hbar \, dt}$$

Definiremos

$$S_{(n,n-1)} \equiv \int_{t_{n-1}}^{t_n} \mathcal{L}(x,\dot{x}) dt$$

Luego para considerar la suma sobre todos los segmentillos a lo largo de un camino tendremos

$$\prod_{n=2}^{N} e^{i/\hbar S(n,n-1)} = e^{i/\hbar \prod_{n=2}^{N} S(n,n-1)} = e^{iS(N,1)/\hbar}$$

y hay que considerar TODOS los posibles caminos (cada uno de los cuales aporta un  $e^{iS/\hbar}$ )

$$\propto \sum_{caminos} e^{i/\hbar S(N,1)}$$

cuando  $\hbar \to 0$  las trayectorias contribuyen con una cantidad que oscila loca y violentamente. Tienden a la cancelación para caminos aledaños. Por el  $\hbar \sim 0$  la fase es grande y entonces se cancelan. Esto no ocurre cerca del camino (real) que cumple

$$\delta S(N,1)=0$$

Para trayectorias cercanas la  $\Delta fase$  no es grande y hay interferencia constructiva. Para un  $\delta t$  infinitesimal cualquier trayectoria puede verse como una línea recta y es

$$\langle x_n, t_n \, | \, x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = N \, e^{iS(n, n-1)/\hbar}$$

$$\begin{split} S(n,n-1) &= \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x)\right) dt \\ &\approx \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\frac{m}{2} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\delta t^2} - V\left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2}\right)\right) dt \end{split}$$

donde la última expresión es a orden 1 en el tiempo y en la posición (pues  $\delta t \sim 0$ ).

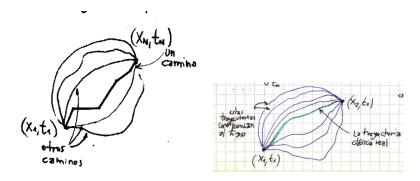


Figura 2.5

Consideremos, por ejemplo, una partícula libre, entonces V=0 de modo que resolviendo se obtiene

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = N e^{im(x_n - x_{n-1})^2 / 2\hbar \delta t},$$

que no es otra cosa que el propagador de una partícula libre. La normalización N se puede evaluar tomando

$$\lim_{\Delta t \to 0} N e^{im(x_n - x_{n-1})^2/2\hbar \delta t} = \delta(x_n - x_{n-1})$$

y usando el resultado de que

$$\lim_{\Delta t \to 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} e^{imy^2/(2\hbar)\delta t} = \delta(y),$$

se obtiene

$$N = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \Delta t}}.$$

La normalización no depende del potencial V en el lagrangiano.

Veamos cómo se comporta para un  $\Delta t$  finito será

$$\begin{split} \langle x_n, t_n \, | \, x_1, t_1 \rangle &= \lim_{N \to \infty} \left( \frac{m}{i 2\pi \hbar \delta t} \right)^{(N-1)/2} \int dx_{n-1} \int dx_{n-2} \, \dots \\ &\int dx_2 \, \prod_{n=2}^N \, \mathrm{e}^{i S(n,n-1)/\hbar} \end{split}$$

y defino una integral de medida dada por toda la sucesión de integraciones anidadas en la anterior exprsión, nomenclada como  $\int_{x_1}^{x_n} D[x(t)]$  de suerte que resulta

$$\langle x_n,t_n\,|\,x_1,t_1\rangle = \int_{x_1}^{x_n} D[x(t)] \,\operatorname{e}^{i\int_{t_1}^{t_n} \mathcal{L}(x,\dot{x})/\hbar} dt$$

siendo esta última la integral de camino de Feynmann. La acción es una fase aquí. Las integrales on los caminos cuánticos y por ello esto tiene toda la información del sistema cuántico.

En base a las integrales de camino, Feynamn desarrolla una formulación equivalente de la mecánica cuántica que utiliza los conceptos de:

- 1. Superposición
- 2. Composición de la transición
- 3. Límite clásico con  $\hbar \to 0$

Estas integrales contienen toda la información del sistema cuántico, aunque no sea sencillo extraerla.

#### EJEMPLO 2.1 Integral de camino para partícula libre

Para una partícula libre la expresión se puede evaluar,

$$\begin{split} \lim_{N \to \infty} \Big( \frac{m}{i 2\pi \hbar \delta t} \Big)^{(N-1)/2} & \int dx_{n-1} \int dx_{n-2} \, \dots \int dx_2 \prod_{n=2}^N \, \mathrm{e}^{\frac{i m}{2 \hbar} \frac{(x_n - x_{n-1})}{\Delta t} \Delta t} \\ & \mathrm{e}^{\frac{i m}{2 \hbar \Delta t}} \sum_{j=2}^N (x_j - x_{j-1})^2 \\ & (x_N - x_{N-1})^1 + (x_{N-1} - x_{N-2})^2 + \dots + ()^2 + ()^2 \end{split}$$

Al final del día esta cuenta da

$$\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(N-1)\delta t}\right)^{\frac{1}{2}}\,\mathrm{e}^{im(x_N-x_{N-1})^2/(2(N-1)\hbar\delta t)}$$

donde el límite fue  $(N-1)\Delta t \rightarrow (t_N-t_1)$ .

Consideremos un propagador de  $(x',0) \rightarrow (x',t)$ 

$$G(t) = \int dx' K(x',t;x',0) = \int dx' \left\langle x' \left| \right. \mathrm{e}^{-iHt/\hbar} \left| \left. x' \right\rangle \right. \right.$$

$$\begin{split} G(t) = \sum_{a'} \int dx' \left\langle x' \left| \right. \mathrm{e}^{-iHt/\hbar} \left| \left. a' \right\rangle \left\langle a' \right| x' \right\rangle = \\ \sum_{a'} \left. \mathrm{e}^{-iE_{a'}t/\hbar} \int dx' \left\langle x' \right| a' \right\rangle \left\langle a' \left| x' \right\rangle \end{split}$$

$$G(t) = \sum_{a'} \, \mathrm{e}^{-iE_{a'}t/\hbar} \int dx' |\left\langle x' \,|\, a' \right\rangle|^2 = \sum_{a'} \, \mathrm{e}^{-iE_{a'}t/\hbar}$$

que es reminiscencia de la función de partición de mecánica estadística. Tomando Laplace-Fourier

$$\tilde{G}(E) = -i \int dE \frac{G(t)}{\hbar} e^{iEt/\hbar} = \sum_{a'} \frac{1}{E - E_{a'}}$$

y el espectro de autoenergías son los polos de  $\tilde{G}(E)$ . O, dicho de otra manera, los polos de la función G propagador integrada en x y luego de haberle hecho Fourier, son la autoenergías.

La expresión

$$\langle x, t \, | \, x_1, t_1 \rangle \equiv$$
 Integral de camino de Feynmann

satisface la ecuación de Schrödinger y es una alternativa a la formulación de la cuántica usual.