

Propagador de la ecuación de Schrödinger

Francisco José Palmero Moya | Daniel García García

Curso 21-22

Resumen

La evolución temporal de una función de onda puede ser expresada en términos de un propagador. Esta forma de abordar el problema es bastante general y admite un tratamiento perturbativo. Estudiaremos los propagadores desde la Mecánica Cuántica, aunque el concepto es bastante importante en Teoría Cuántica de Campos.

1. Introducción

El propagador $K(\vec{x}_2, t_2, \vec{x}_1, t_1)$ es un operador integral que actúa sobre la función de onda inicial y la transforma en la final

$$\psi(\vec{x}_2, t_2) = \int d^3 \vec{x}_1 K(\vec{x}_2, t_2, \vec{x}_1, t_1) \psi(\vec{x}_1, t_1) \quad (1)$$

Veamos que significa esto realmente con un ejemplo. Supongamos una partícula perfectamente localizada inicialmente (para $t = t_1$) en \vec{x}_i . Su función de onda será

$$\psi(\vec{x}_1, t_1) = \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_i)$$

Según la definición que hemos dado de propagador (1), para un tiempo t_2 la función de onda será

$$\psi(\vec{x}_2, t_2) = \int d^3 \vec{x}_1 K(\vec{x}_2, t_2, \vec{x}_1, t_1) \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_i) = K(\vec{x}_2, t_2, \vec{x}_i, t_1)$$

Por lo tanto, el propagador nos proporciona la amplitud de probabilidad de encontrar la partícula en \vec{x}_2 para $t = t_2$ si la partícula estaba en \vec{x}_1 para $t = t_1$. Esto es la amplitud de probabilidad para la 'propagación' entre los dos puntos en un intervalo de tiempo.

La interpretación del propagador como una amplitud de probabilidad nos permite tener una imagen de su significado, sin embargo, en las próximas secciones haremos un estudio mucho más general y proporcionaremos algunas de sus aplicaciones en modelos de la teoría cuántica de campos.

2. Propagadores en mecánica de ondas

La evolución temporal de una función de onda en un instante t , dada la función de onda en el instante t_0 , viene dada por el operador evolución, de manera que:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = \exp \left[\frac{-i \hat{H}(t - t_0)}{\hbar} \right] |\psi(t_0)\rangle \quad (2)$$

Ahora podemos introducir la relación de cierre de manera que:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) \sum_m |\varphi_m\rangle \langle \varphi_m | \psi(t_0)\rangle = \exp \left[\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar} \right] \sum_m |\varphi_m\rangle \langle \varphi_m | \psi(t_0)\rangle \quad (3)$$

como

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \quad (4)$$

$$\langle \varphi_i | \psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n \langle \varphi_i | \varphi_n\rangle = c_n \delta_{n,i} \quad (5)$$

nuestro Hamiltoniano es diagonal en la base $|\varphi_n\rangle$ con autovalores E_n , entonces la ecuación (3) se puede desarrollar como:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m c_m \exp \left[\frac{-iE_m(t-t_0)}{\hbar} \right] |\varphi_m\rangle \quad (6)$$

Ahora proyectando ambos miembros sobre el bra $\langle \vec{r} |$ nos quedará:

$$\langle \vec{r} | \psi(t)\rangle = \sum_m c_m \exp \left[\frac{-iE_m(t-t_0)}{\hbar} \right] \langle \vec{r} | \varphi_m\rangle \quad (7)$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_m c_m \exp \left[\frac{-iE_m(t-t_0)}{\hbar} \right] \varphi_m(\vec{r}) \quad (8)$$

Dado que

$$c_m = \langle \varphi_m | \psi(t_0)\rangle = \int \langle \varphi_m | \vec{r}_0\rangle \langle \vec{r}_0 | \psi(t_0)\rangle d\vec{r}_0 \quad (9)$$

Obtenemos finalmente

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}_0 \underbrace{\sum_m \varphi_m^*(\vec{r}_0) \varphi_m(\vec{r}) \exp \left[\frac{-iE_m(t-t_0)}{\hbar} \right]}_{K(\vec{r}, t, \vec{r}_0, t_0)} \psi(\vec{r}_0, t_0) \quad (10)$$

Aquí podemos ver que podemos tratar la evolución temporal de la función de onda como un operador integral cuyo núcleo será el propagador

$$K(\vec{r}, t, \vec{r}_0, t_0) = \sum_m \varphi_m^*(\vec{r}_0) \varphi_m(\vec{r}) \exp \left[\frac{-iE_m(t-t_0)}{\hbar} \right] \quad (11)$$

Ahora veamos dos propiedades importantes de nuestro operador integral: la primera será que nuestro operador evoluciona en el tiempo siguiendo la ecuación de Schrödinger, dependiendo de las coordenadas \vec{r}, t , ya que \vec{r}_0, t_0 son valores fijos. La segunda propiedad importante de nuestro operador propagación es la siguiente:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} K(\vec{r}, t, \vec{r}_0, t_0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (12)$$

Este resultado es claro partiendo del apartado 'reducción del paquete de ondas' en la teoría de la asignatura, donde suponiendo que nuestro estado inicial viene dado tras realizar una medida del sistema $|\psi(\vec{r}_0, t_0)\rangle$, que se explica como que el sistema $|\psi(\vec{r}, t)\rangle$ ha colapsado sobre el estado $|\psi(\vec{r}_0, t_0)\rangle$. Ahora, si volvemos a medir el sistema de manera que no le hemos dejado tiempo suficiente para evolucionar, tendremos la certeza de que volveremos a obtener el mismo resultado¹.

¹ Básicamente estamos diciendo que el sistema no ha evolucionado todavía, véase 'Efecto Zenón cuántico' [1]

Una vez conocidas estas propiedades, podemos reescribir el operador propagación como la función de onda dependiente de \vec{r} , t de una partícula que estaba localizada en \vec{r}_0 en el instante t_0 .

$$K(\vec{r}, t, \vec{r}_0, t_0) = \langle \vec{r} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{r}_0 \rangle = \langle \vec{r} | \exp \left[\frac{-i\hat{H}(t - t_0)}{\hbar} \right] | \vec{r}_0 \rangle \quad (13)$$

Por lo tanto, si introducimos nuestro operador a la ecuación de Schrödinger, nos quedará:

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla^2 + V(\vec{r}) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] K(\vec{r}, t, \vec{r}_0, t_0) = -i\hbar \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(t - t_0) \quad (14)$$

El propagador, obtenido así, no es más que la función de Green del operador diferencial

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla^2 + V(\vec{r}) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \quad (15)$$

el cual aparece en innumerables ocasiones en mecánica de ondas.

Esta ecuación es válida solo para t mayores que t_0 ya que por como hemos definido el propagador, estamos buscando la evolución de la función de onda pasado un tiempo t . Esto se debe a que, obteniendo la función de Green, nos hemos quedado con el propagador retardado. En efecto, este es el único que tiene realidad física, ya que por el contrario estaríamos violando el principio de causalidad.

Tras este desarrollo podemos realizar una observación sobre la naturaleza determinística o probabilística de la mecánica cuántica. Por un lado, sabemos que el estado de un sistema físico en un instante de tiempo t_0 se encuentra completamente determinado (salvo un desfase) por un ket $|\psi(t_0)\rangle$ perteneciente a un espacio de estados. Además, sabemos que si no se perturba, este evoluciona obedeciendo la ecuación de Schrödinger, la cuál es completamente determinista. Ambos son postulados de la mecánica cuántica. Por lo tanto, vemos como la evolución de nuestro sistema es determinista, esto es, conociendo nuestro sistema en un instante de tiempo t_0 podemos conocer cuál será su estado en cualquier instante de tiempo posterior. Esto se puede hacer por diversos métodos (ej. propagador), los cuales consisten en resolver la ecuación de ondas dada por la ecuación de Schrödinger. La naturaleza probabilística de la mecánica cuántica surge cuando perturbamos el sistema, por ejemplo realizando una medida. Este hecho es probabilístico porque aunque conozcamos la función de onda, esta tan sólo nos da unas probabilidades de encontrar el sistema en cada uno de los estados posibles. Este hecho, sin analogía clásica, ha sido un tema bastante controvertido en los orígenes de la mecánica cuántica. La explicación aquí mostrada se conoce como la interpretación de Copenhague.

3. Aplicación a la integral de camino de Feynman

Volviendo a la forma del propagador dada por la ecuación (13), en la que los bra y ket posición vienen dados en la imagen de Schrödinger, podemos expresarlos en la imagen de Heisenberg, y por conveniencia podemos nombrar \vec{r} y t finales como \vec{r}_1 y t_1 , quedándonos tal ecuación de la forma siguiente:

$$K(\vec{r}_1, t_1, \vec{r}_0, t_0) = \langle \vec{r}_1, t_1 | \vec{r}_0, t_0 \rangle \quad (16)$$

Es conveniente recordar la forma de la relación de cierre

$$1 = \int d\vec{r}_1 |\vec{r}_1, t_1\rangle \langle \vec{r}_1, t_1| \quad (17)$$

Con lo que ahora podemos definir la evolución de un sistema entre \vec{r}_0, t_0 a \vec{r}_2, t_2 pasando por \vec{r}_1, t_1 a través del siguiente propagador:

$$K(\vec{r}_2, t_2, \vec{r}_0, t_0) = \langle \vec{r}_2, t_2 | \vec{r}_0, t_0 \rangle = \int d\vec{r}_1 \langle \vec{r}_2, t_2 | \vec{r}_1, t_1 \rangle \langle \vec{r}_1, t_1 | \vec{r}_0, t_0 \rangle \quad (18)$$

Donde es esencial que $t_2 > t_1 > t_0$. Esto es conocido como la propiedad de composición del propagador de la ecuación de Schrödinger, de esta manera podemos ver que podemos definir un operador integral de dimension infinita tal que conociendo la evolución de la ecuación de onda en un intervalo de tiempo infinitesimal, tomando el propagador como una amplitud de probabilidad. Así el operador $K(\vec{r}_N, t_N, \vec{r}_0, t_0)$ nos quedará de forma compacta como:

$$K(\vec{r}_N, t_N, \vec{r}, t) = \prod_{n=0}^{N-1} \int d\vec{r}_n \langle \vec{r}_{n+1}, t_{n+1} | \vec{r}_n, t_n \rangle \quad (19)$$

Viendo esta forma de expresar la evolución de un sistema y el siguiente comentario en el libro de Dirac, que es como sigue:

$$\exp \left[i \int_{t_1}^{t_2} \frac{dt L_{clásico}(\vec{r}, \dot{\vec{r}})}{\hbar} \right] \quad \text{se corresponde con} \quad \langle \vec{r}_2, t_2 | \vec{r}_1, t_1 \rangle \quad (20)$$

Feynman al ver esta expresión reaccionó preguntándose qué implica la 'correspondencia', si era una igualdad, o si era proporcional. Esto le llevó a reformular la mecánica cuántica en su aproximación a través de lo que se conoce como la integral camino de Feynman. Para simplificar, de aquí en adelante notaremos la integral de acción como:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} dt L_{clásico}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) \equiv S(n+1, n) \quad (21)$$

Si ahora sustituimos la expresión (33) en (32) nos quedará lo siguiente:

$$K(\vec{r}_N, t_N, \vec{r}, t) = \prod_{n=0}^{N-1} \int d\vec{r}_n \exp \left[\frac{iS(n+1, n)}{\hbar} \right] \approx \sum_l \exp \left[\frac{iS(N, 0)}{\hbar} \right] \quad (22)$$

Donde \sum_l es la suma sobre todos los "caminos" posibles que puede tomar nuestro sistema, entendiendo camino como estados por los que pasa nuestro sistema. Esta nueva formulación de la mecánica cuántica es muy parecida a la mecánica de Hamilton como se puede apreciar con analogías al principio de mínima acción. Por lo que es una formulación que resulta mucho más intuitiva. Si llevamos esta interpretación a los planos de la mecánica clásica, vemos que cuando \hbar tiende a 0 la mayoría de caminos no contribuirán a la acción debido a los bruscos cambios en la fase. Y solo contribuirán los que hagan $\delta S = 0$, esto constituye el principio de mínima acción de Hamilton. Entendiendo la expresión anterior como una expresión que nos explica la idea que tenía Feynman de manera poco rigurosa matematicamente hablando, vamos ahora a continuar de manera analítica.

$$K(\vec{r}_{n+1}, t_{n+1}, \vec{r}_n, t_n) = \langle \vec{r}_{n+1}, t_{n+1} | \vec{r}_n, t_n \rangle = \left[\frac{1}{\omega(\Delta t)} \right] \exp \left[\frac{iS(n+1, n)}{\hbar} \right] \quad (23)$$

donde se ha introducido un factor $\omega(\Delta t)$ que solo dependerá del intervalo Δt . Ahora realizando infinitos procesos como estos con intervalos de tiempo infinitesimales nos quedará que

$$K(\vec{r}_N, t_N, \vec{r}_0, t_0) = \underbrace{\lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\omega(\Delta t)} \right]^{N-1} \int d\vec{r}_{N-1} \int d\vec{r}_{N-2} \dots \int d\vec{r}_1}_{\text{integral de caminos}} \prod_{n=0}^{N-1} \exp \left[\frac{iS(n+1, n)}{\hbar} \right] \quad (24)$$

donde lo que está subrayado por la llave será un operador integral de dimensión infinita que notaremos de la siguiente manera.

$$\int_0^N D[x(t)] \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\omega(\Delta t)} \right]^{N-1} \int d\vec{r}_{N-1} \int d\vec{r}_{N-2} \dots \int d\vec{r}_1 \quad (25)$$

Así nos quedará la conocida como integral de camino de Feynman

$$\int_0^N D[x(t)] \exp \left[i \int_{t_0}^{t_N} dt \frac{L(\vec{r}, \dot{\vec{r}})}{\hbar} \right] = \langle \vec{r}_N, t_N | \vec{r}_0, t_0 \rangle = K(\vec{r}_N, t_N, \vec{r}_0, t_0) \quad (26)$$

Así hemos llegado a que la expresión desarrollada por Feynman será una nueva expresión del propagador de la ecuación de Schrödinger, es decir que cumple la misma función. Sin embargo la filosofía tras esta formulación del operador es radicalmente distinta.

4. Propagadores en teoría cuántica de la dispersión

La teoría cuántica de la dispersión se desarrolla de forma análoga a la clásica, reemplazando las trayectorias en el espacio de configuraciones de nuestro sistema clásico por un ket $|\psi(t)\rangle$ que contiene toda la información física de nuestro sistema y que evoluciona según la ecuación de Schrödinger. Así, las colisiones se pueden estudiar como la interacción de nuestro sistema con un potencial, que cumple determinadas propiedades, y que influye en nuestro sistema a través del Hamiltoniano. Fuera de ese potencial, podemos considerar que nuestro sistema evoluciona libremente. Resumiendo

$$|\psi_{in}(t)\rangle \xleftarrow{t \rightarrow -\infty} |\psi(t)\rangle \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} |\psi_{out}(t)\rangle \quad (27)$$

Y la evolución de los sistemas

$$|\psi_{in}(t)\rangle = U_0(t) |\psi_{in}\rangle \quad (28)$$

$$|\psi_{out}(t)\rangle = U_0(t) |\psi_{out}\rangle \quad (29)$$

Si de alguna manera logramos encontrar una ecuación que relacione nuestro estado inicial, $|\psi_{in}(t)\rangle$, con nuestro estado final, $|\psi_{out}(t)\rangle$, habremos resuelto nuestro problema. Esto nos debe sonar, ya que lo que buscamos no es más que un propagador tal como los que hemos descrito anteriormente.

La forma de relacionarlos es a través de la función de ondas de nuestro sistema dentro de la zona donde influye el potencial.

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} [|\psi(t)\rangle - |\psi_{out}(t)\rangle] = \lim_{t \rightarrow +\infty} [U(t) |\psi\rangle - U_0(t) |\psi_{out}\rangle] = 0 \quad (30)$$

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} [|\psi(t)\rangle - |\psi_{in}(t)\rangle] = \lim_{t \rightarrow -\infty} [U(t) |\psi\rangle - U_0(t) |\psi_{in}\rangle] = 0 \quad (31)$$

Si definimos $\Omega_{\pm} \equiv \lim_{t \rightarrow \mp \infty} U^{\dagger}(t) U_0(t)$, vemos que

$$|\psi(t)\rangle = \Omega_{+} |\psi_{in}\rangle = \Omega_{-} |\psi_{out}\rangle \quad (32)$$

Finalmente

$$|\psi_{out}\rangle = \Omega_{-}^{\dagger} |\psi\rangle = \Omega_{-}^{\dagger} \Omega_{+} |\psi_{in}\rangle = S |\psi_{in}\rangle \quad (33)$$

siendo $S = \Omega_{-}^{\dagger} \Omega_{+}$, la denominada matriz de dispersión. El problema se reduce entonces a encontrar dicha matriz.

Se puede ver que se trata de un propagador más fácilmente si lo proyectamos sobre el espacio de momentos

$$\begin{aligned}\psi_{out}(\vec{p}_f) &= \langle \vec{p}_f | \psi_{out} \rangle = \langle \vec{p}_f | S | \psi_{in} \rangle = \int d\vec{p}_i \langle \vec{p}_f | S | \vec{p}_i \rangle \langle \vec{p}_i | \psi_{in} \rangle \\ &= \int d\vec{p}_i \underbrace{\langle \vec{p}_f | S | \vec{p}_i \rangle}_{K(\vec{p}_f, t \rightarrow +\infty, \vec{p}_i, t \rightarrow -\infty)} \psi_{in}(\vec{p}_i)\end{aligned}$$

Así, $\langle \vec{p}_f | S | \vec{p}_i \rangle$, es el propagador en el espacio de momentos entre los instantes de tiempo $t \rightarrow \pm\infty$.

5. Propagadores en teoría cuántica de campos

Los propagadores, tal y como hemos visto, están relacionados con la teoría cuántica de la dispersión y esto hace que sean bastante importantes en la parte teórica de las colisiones entre partículas. Dado que el mejor modelo teórico, hasta la fecha, para describir las interacciones fundamentales entre partículas es la Teoría Cuántica de Campos y el Modelo Estándar, es lógico pensar que los propagadores son un punto central de estas. Siendo rigurosos, en realidad los propagadores tan sólo nos interesan en la medida en que se relacionan con la sección eficaz de dispersión, siendo esta la que podemos medir en laboratorios. Sin embargo, estos son necesarios para realizar los cálculos². Esta sección tiene como objetivo generalizar el concepto de propagador de la ecuación de Schrödinger a teorías más complejas donde esta ya no es válida. En efecto, la generalización de la ecuación de Schrödinger incluyendo la energía relativista viene dada por la ecuación de Klein-Gordon

$$(\square + m^2)\psi = 0 \quad (34)$$

siendo \square el operador D'Alembertiano.

Dado que lo haremos de una forma superficial, lo que tendremos es una forma de calcular cosas sencillas a través de un método complejo.

La principal diferencia entre Teoría Cuántica de Campos y la Mecánica Cuántica es la inclusión de la relatividad especial, así el número de partículas en una colisión no tiene por qué conservarse. La forma de operar es a través de los denominados campos cuánticos, que no son más que operadores formados por una combinación de los operadores escalera. Por ejemplo, si no tenemos interacción

$$\phi_0(\vec{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2\omega_p}} \left(a_p e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} + a_p^\dagger e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} \right) \quad (35)$$

de forma que si este actúa sobre el vacío $|0\rangle$, proyectándolo en la representación de momentos

$$\langle \vec{p}' | \phi_0(\vec{x}) | 0 \rangle = e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} \quad (36)$$

esto es, estamos creando una partícula libre en el punto \vec{x} .

Sabemos que la sección eficaz está relacionada con el elemento de matriz $\langle f | S | i \rangle$, término que asociamos anteriormente a un propagador en la representación de momentos. Pues bien, conocemos por la relación de Lehmann-Symanzik-Zimmermann que este será proporcional a

$$\langle f | S | i \rangle \propto \langle \Omega | T \{ \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \} | \Omega \rangle \quad (37)$$

²Dado que no es el objetivo del trabajo, omitimos la relación entre ambos

siendo $|\Omega\rangle$ el estado fundamental/vacío cuando existe interacción y n el número total de partículas. El operador $T\{\phi(x_1)\dots\phi(x_n)\}$, se denomina producto cronológicamente ordenado, y es necesario para incluir el límite de la velocidad de propagación de la luz y que no se viole el principio de causalidad.

El punto clave de nuestro desarrollo viene ahora, y es que, utilizando teoría de perturbaciones, podemos expresar ese producto ordenado mediante integrales sobre propagadores de Feynman

$$D_F(x, y) \equiv \langle 0|T\{\phi_0(x)\phi_0(y)\}|0\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{i}{k^2 - m^2 + i\epsilon} e^{ik(x-y)} \quad (38)$$

para los cuales existen representaciones pictoriales a través de los diagramas de Feynman. Estos se pueden calcular siguiendo unas 'sencillas' reglas, conocidas como las reglas de Feynman.

El término $+i\epsilon$ es tan sólo un truco para resolver las integrales de contorno que aparecen, por lo que siempre tomaremos su límite cuando tiende a cero. Así, vemos que si hacemos $\epsilon = 0$, lo único que tenemos en la función de Green para la ecuación de Klein-Gordon

$$(\square + m^2)D_F(x, y) = -i\delta^4(x) \quad (39)$$

6. Conclusión

Finalmente como conclusión, vemos que en el contexto de la relatividad especial, el propagador de la ecuación de Schrödinger se convierte en el propagador de Feynman, el cual no es más que el propagador de la ecuación de Klein-Gordon. Esto se debe a que el concepto de operador es una simple herramienta matemática que nos permite resolver ecuaciones diferenciales a través de encontrar su función de Green. Hablar de propagadores es, por tanto, hablar de funciones de Green.

7. Bibliografía

- [1] J.I. Fernández Palop, *Apuntes de clase*
- [2] J.J. Sakurai, Jim Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, 2017
- [3] Matthew D. Schwartz, *Quantum Field Theory and the Standard Model*, Cambridge University Press, 2014