PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE
FACULTAD DE FÍSICA
INSTITUTO DE FÍSICA
Primer Semestre de 2014

FIM 8440 ⋆ Mecánica Cuántica Avanzada

Tarea N º 4 (b)

NOMBRE : Sebastián Urrutia Quiroga
FECHA : 19 de mayo de 2014

Resolución de Problemas

1. Cálculo de la integral asociada a K_0

Se desea demostrar la siguiente fórmula:

$$\mathbb{I}(n) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots dx_n \ \exp\left(i\lambda \sum_{l=0}^{n} \Big(x_{l+1} - x_l \Big)^2 \right) = \left(\frac{i^n \pi^n}{(n+1)\lambda^n} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i\lambda}{n+1} \Big(x_f - x_i \Big)^2 \right) \quad (1)$$

donde $x_i = x_0$ y $x_f = x_{n+1}$. Siguiendo la indicación del texto de Ryder, se procede a probar mediante inducción matemática.

1.1. Verificación para $n = 1$

En este caso, $x_2 = x_f$ y $x_0 = x_i$. Ahora,

$$\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ \exp\left(i\lambda \sum_{l=0}^{1} \Big(x_{l+1} - x_l \Big)^2 \right) && (2)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ \exp\Big(i\lambda \Big[(x_1 - x_i)^2 + (x_f - x_1)^2 \Big] \Big) && (3)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ \exp\Big(i\lambda \Big[{x_i}^2 + {x_f}^2 \Big] \Big) \exp\Big(i\lambda \Big[2{x_1}^2 - 2x_1(x_i + x_f) \Big] \Big) && (4)
\end{aligned}$$

Sean $a = 2i\lambda$ y $b = i\lambda(x_i + x_f)$. Así,

$$= \exp\Big(i\lambda \Big[{x_i}^2 + {x_f}^2 \Big] \Big) \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ \exp\Big(a{x_1}^2 - 2bx_1 \Big) \quad (5)$$

Entonces, por la fórmula 26 del Anexo,

$$\begin{aligned}
&= \exp\Big(i\lambda \Big[{x_i}^2 + {x_f}^2 \Big] \Big) \exp\left(\frac{\lambda^2 (x_i + x_f)^2}{2i\lambda} \right) \left(\frac{\pi}{-2i\lambda} \right)^{1/2} && (6)\\
&= \left(\frac{i\pi}{2\lambda} \right)^{1/2} \exp\left(i\lambda({x_i}^2 + {x_f}^2) - i\lambda \frac{(x_i + x_f)^2}{2} \right) && (7)\\
&= \left(\frac{i\pi}{2\lambda} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i\lambda}{2} \Big(2{x_1}^2 + 2{x_f}^2 - {x_i}^2 - {x_f}^2 - 2x_i x_f \Big) \right) && (8)\\
&= \left(\frac{i\pi}{2\lambda} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i\lambda}{2} \Big(x_f - x_i \Big)^2 \right) && (9)\\
&= \mathbb{I}(1) && (10)
\end{aligned}$$

Por tanto, se verifica para $n = 1$.

1.2. Establecimiento de la hipótesis de inducción

Se asume cierto que:

$$\mathbb{I}(n) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots dx_n \; \exp\left(i\lambda \sum_{l=0}^{n} \Big(x_{l+1} - x_l \Big)^2 \right) = \left(\frac{i^n \pi^n}{(n+1)\lambda^n} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i\lambda}{n+1} \Big(x_f - x_i \Big)^2 \right)$$

1.3. Prueba para $\mathbb{I}(n+1)$

Se desea calcular:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ldots dx_n \, dx_{n+1} \; \exp\left(i\lambda \sum_{l=0}^{n+1} \Big(x_{l+1} - x_l \Big)^2 \right)$$

donde ahora $x_{n+2} = x_f$. Notemos que:

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{n+1} \Big(x_{l+1} - x_l \Big)^2 &= (x_1 - x_i)^2 + \ldots + (x_{n+1} - x_n)^2 + (x_f - x_{n+1})^2 && (11) \\ &= \sum_{l=0}^{n} \Big(x_{l+1} - x_l \Big)^2 + (x_f - x_{n+1})^2 && (12) \end{aligned}$$

Con ello,

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n+1} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots dx_n \; \exp\left(i\lambda \sum_{l=0}^{n} \Big(x_{l+1} - x_l \Big)^2 \right) \right\} \exp\left(i\lambda \Big(x_f - x_{n+1} \Big)^2 \right) \qquad (13)$$

La integral entre corchetes corresponde a $\mathbb{I}(n)$. Reemplazamos,

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{i^n \pi^n}{(n+1)\lambda^n} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n+1} \; \exp\left(\frac{i\lambda}{n+1} \Big(x_{n+1} - x_i \Big)^2 \right) \exp\left(i\lambda \Big(x_f - x_{n+1} \Big)^2 \right) && (14) \\ &= \left(\frac{i^n \pi^n}{(n+1)\lambda^n} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n+1} \; \exp\left(\frac{i\lambda}{n+1} \Big({x_{n+1}}^2 - 2x_i x_{n+1} + {x_i}^2 \Big) \right. \\ &\quad \left. + \, i\lambda \Big({x_f}^2 - 2x_f x_{n+1} + {x_{n+1}}^2 \Big) \right) && (15) \\ &= \left(\frac{i^n \pi^n}{(n+1)\lambda^n} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i\lambda}{n+1} \Big({x_i}^2 + (n+1){x_f}^2 \Big) \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n+1} \; \exp\left(\left(\frac{i\lambda(n+2)}{n+1} \right) {x_{n+1}}^2 \right. \\ &\quad \left. - \, 2 \left(\frac{i\lambda}{n+1} x_i + i\lambda x_f \right) x_{n+1} \right) && (16) \end{aligned}$$

Haciendo $a = \dfrac{i\lambda(n+2)}{n+1}$ y $b = i\lambda \left(\dfrac{x_i}{n+1} + x_f \right)$, podemos emplear la fórmula 26 del Anexo y obtener:

$$
\begin{aligned}
&= \left(\frac{i^n\pi^n}{(n+1)\lambda^n}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i\lambda}{n+1}\Big({x_i}^2+(n+1){x_f}^2\Big)\right)\left(\frac{\pi(n+1)}{-i\lambda(n+2)}\right)^{1/2} \\
&\quad \exp\left(\left(\frac{x_i}{n+1}+x_f\right)^2\frac{\lambda(n+1)}{i(n+2)}\right)
\end{aligned}
\tag{17}
$$

Trabajemos sobre los términos en azul:

$$
\begin{aligned}
A &= \frac{i\lambda}{n+1}{x_i}^2+i\lambda{x_f}^2+\frac{\lambda(n+1)}{i(n+2)}\left(\frac{x_i}{n+1}+x_f\right)^2 \\
&= \frac{i\lambda}{n+1}{x_i}^2+i\lambda{x_f}^2+\frac{\lambda(n+1)}{i(n+2)}\left(\frac{{x_i}^2}{(n+1)^2}+\frac{2x_ix_f}{n+1}+{x_f}^2\right) \\
&= {x_i}^2\left(\frac{i\lambda}{n+1}+\frac{\lambda}{i(n+1)(n+2)}\right)+\frac{2\lambda}{i(n+2)}x_ix_f+{x_f}^2\left(\frac{\lambda(n+1)}{i(n+2)}+i\lambda\right) \\
&= {x_i}^2\left(\frac{i\lambda}{n+2}\right)-\left(\frac{i\lambda}{n+2}\right)2x_ix_f+{x_f}^2\left(\frac{i\lambda}{n+2}\right) \\
&= \left(\frac{i\lambda}{n+2}\right)\Big({x_f}^2-2x_ix_f+{x_i}^2\Big)^2 \\
&= \left(\frac{i\lambda}{n+2}\right)\Big(x_f-x_i\Big)^2
\end{aligned}
$$

Reemplazando A en la ecuación (17):

$$
I = \left(\frac{i^{n+1}\pi^{n+1}}{(n+2)\lambda^{n+1}}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{i\lambda}{n+2}\Big(x_f-x_i\Big)^2\right) \tag{18}
$$

$$
= \mathbb{I}(n+1) \tag{19}
$$

Por tanto, se demuestra lo pedido vía inducción. ■

2. Cálculo de K_2

Se desea calcular:

$$K_2 = \mathcal{N} \int \mathcal{D}x \;\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\; \frac{1}{2}m\dot{x}^2\right)\frac{1}{2!}\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\; V(x,t)\right\}^2 \tag{20}$$

Regresando al caso discreto, y definiendo $N = \dfrac{m}{i\hbar\Delta t}$,

$$K_2 \;=\; -\frac{N^{(n+1)/2}}{2\hbar^2}\int\prod_{k=1}^{n} dx_k\;\exp\left(\frac{im}{2\hbar\Delta t}\sum_{j=0}^{n}\Big(x_{j+1}-x_j\Big)^2\right)\sum_{\alpha,\beta}\Delta t^2\; V(x_\alpha,t_\alpha)\,V(x_\beta,t_\beta) \tag{21}$$

Para emplear el argumento visto en clases (de separar el intervalo de sumación $i,\ldots,n$) se requiere que $\alpha<\beta$ o $\beta<\alpha$. Dado que las últimas dos sumatorias son simétricas respecto a permutación de índices, se calculará explícitamente el caso en que $\beta>\alpha$ y se multiplicará por 2, correspondiente al factor de permutaciones posibles. Así,

$$\begin{aligned} K_2 \;=\; & -\frac{1}{\hbar^2}\sum_{\substack{\alpha,\beta\\ \beta>\alpha}}\Delta t^2\int dx_\alpha\, dx_\beta\left\{N^{(n-\beta+1)/2}\int dx_{\beta+1}\cdots dx_n\exp\left(\frac{im}{2\hbar\Delta t}\sum_{j=\beta}^{n}\Big(x_{j+1}-x_j\Big)^2\right)\right\}V(x_\beta,t_\beta)\\ & \left\{N^{(\beta-\alpha)/2}\int dx_{\alpha+1}\cdots dx_{\beta-1}\exp\left(\frac{im}{2\hbar\Delta t}\sum_{j=\alpha}^{\beta-1}\Big(x_{j+1}-x_j\Big)^2\right)\right\}V(x_\alpha,t_\alpha)\\ & \left\{N^{\alpha/2}\int dx_1\cdots dx_{\alpha-1}\exp\left(\frac{im}{2\hbar\Delta t}\sum_{j=0}^{\alpha-1}\Big(x_{j+1}-x_j\Big)^2\right)\right\} \end{aligned} \tag{22}$$

Reemplazando las definiciones de los propagadores,

$$\begin{aligned} =\; & -\frac{1}{\hbar^2}\sum_{\alpha}\Delta t\sum_{\beta}\Delta t\int dx_\alpha\, dx_\beta\,\Big(K_0(x_f\,t_f;x_\beta\,t_\beta)V(x_\beta,t_\beta)K_0(x_\beta\,t_\beta;x_\alpha\,t_\alpha)\\ & \qquad V(x_\alpha,t_\alpha)K_0(x_\alpha\,t_\alpha;x_i\,t_i)\Big) \end{aligned} \tag{23}$$

En el límite al continuo,

$$\begin{aligned} =\; & -\frac{1}{\hbar^2}\int_{t_i}^{t_f} dt_1\int_{t_i}^{t_f} dt_2\int_{-\infty}^{\infty} dx_1\, dx_2\,\Big(K_0(x_f\,t_f;x_2\,t_2)V(x_2,t_2)K_0(x_2\,t_2;x_1\,t_1)\\ & \qquad V(x_1,t_1)K_0(x_1\,t_1;x_i\,t_i)\Big) \end{aligned} \tag{24}$$

Finalmente, aprovechando que el propagador está ponderado por una función *Theta de Heaviside*, podemos ampliar el intervalo de integración del tiempo, $t_i, t_f \to \pm\infty$, y obtener:

$$K_2 = -\frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1\, dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 d\, x_2 \;\; K_0(x_f\, t_f; x_2\, t_2) V(x_2, t_2) K_0(x_2\, t_2; x_1\, t_1) V(x_1, t_1) K_0(x_1\, t_1; x_i\, t_i) \tag{25}$$

que es la fórmula que se pedía demostrar. ■

Anexo: Integral Gaussiana

Se desea calcular:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\Big(ax^2 - 2bx\Big)$$

con $a, b \in \mathbb{C}$. Notemos que, mediante completación de cuadrados,

$$ax^2 - 2bx = a\left(x - \frac{b}{a}\right)^2 - \frac{b^2}{a}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\Big(ax`2 - 2bx\Big) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(a\Big(x - b/a\Big)^2 - b^2/a\right) \\
&= \exp\left(-\frac{b^2}{a}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(a\Big(x - b/a\Big)^2\right)
\end{aligned}$$

Haciendo $x \mapsto x + b/a$, aprovechamos la invariancia traslacional de la integral anterior:

$$\begin{aligned}
&= \exp\left(-\frac{b^2}{a}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\Big(ax^2\Big) \\
&= \left(\frac{\pi}{-a}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{b^2}{a}\right)
\end{aligned}$$

Finalmente,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\Big(ax^2 - 2bx\Big) = \left(\frac{\pi}{-a}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{b^2}{a}\right) \tag{26}$$