



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Relación entre una partícula libre y una en un campo
uniforme

TESIS

PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

Licenciatura en Física

PRESENTA:

Alvaro Santiago de la Paz Cota

DIRECTOR:

Gerardo Francisco Torres del Castillo

Puebla, Pue., México

Septiembre, 2025

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Relación entre una partícula libre y una en un campo
uniforme

TESIS

PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

Licenciatura en Física

PRESENTA:

Alvaro Santiago de la Paz Cota

DIRECTOR:

Gerardo Francisco Torres del Castillo

Puebla, Pue., México

Septiembre, 2025

Título: Relación entre una partícula libre y una en un campo uniforme.

Autor: Alvaro Santiago de la Paz Cota.

COMITÉ

Gilberto Silva Ortigoza
Presidente

José de Jesús Toscano Chávez
Secretario

Héctor Novales Sánchez
Vocal

Iraís Rubalcava García
Suplente

Gerardo Francisco Torres del Castillo
Asesor

Resumen

Se muestra que mediante una transformación de coordenadas en el espacio de configuración extendido, el problema de una partícula libre se puede relacionar con el de una partícula en un campo uniforme en el marco de la Mecánica Clásica y la Mecánica Cuántica. También, dentro del marco de la Mecánica Cuántica, se muestra cómo construir una solución a la ecuación de Schrödinger de una partícula libre en términos de la función de Airy Ai .

Palabras clave: partícula libre, campo uniforme, ecuación de Hamilton-Jacobi, ecuación de Schrödinger, funciones de Airy, formulación de Wigner-Weyl.

Índice general

Introducción	1
1. Relación en el marco de la Mecánica Clásica	3
1.1. Aplicaciones del formalismo Lagrangiano	3
1.1.1. Principio de Hamilton	3
1.1.2. Transformación de coordenadas para relacionar a una partícula libre con una en un campo uniforme	4
1.1.3. Relación en el formalismo Lagrangiano	5
1.2. Aplicaciones del formalismo Hamiltoniano	5
1.2.1. La ecuación de Hamilton-Jacobi	6
1.2.2. Relación en el formalismo de Hamilton-Jacobi	6
2. Relación en el marco de la Mecánica Cuántica	8
2.1. La ecuación de Schrödinger	8
2.1.1. Solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre	9
2.1.2. Solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula en un campo uniforme	10
2.1.3. Relación entre ecuaciones de Schrödinger	13
2.1.4. Relación entre funciones de onda	14
2.2. Propagadores	15
2.2.1. El propagador de una partícula libre	16
2.2.2. El propagador de una partícula en un campo uniforme	16
2.2.3. Relación entre propagadores	19
2.3. El formalismo de Wigner-Weyl	19
2.3.1. La transformada de Weyl	19
2.3.2. La función de Wigner	19
2.3.3. Relación en el formalismo de Wigner-Weyl	21
Conclusiones	22
Bibliografía	23

Introducción

Del formalismo Newtoniano, sabemos que el potencial para una partícula de masa m en un campo uniforme está dado por

$$V(q) = maq,$$

donde q es una coordenada que representa la posición de la partícula y a es una constante que corresponde a la aceleración producida por el campo. Este problema es uno de los más comunes en los libros de texto básicos de Mecánica Clásica, pero muy poco común en los de Mecánica Cuántica, ya que para analizarlo con detalle nos vemos en la necesidad de hacer uso de las funciones de Airy, funciones que no suelen abordarse en cursos básicos sobre métodos matemáticos para la física. En este trabajo, basado en la Ref. [1], se presenta una manera alternativa para resolver el problema de la partícula en un campo uniforme dentro del formalismo clásico y cuántico, simplificando los cálculos por medio de la relación con el problema de la partícula libre ($V(q) = 0$) a través de una transformación de coordenadas sobre el espacio de configuración extendido.

Se supone que el lector tiene conocimientos básicos de Mecánica Clásica (el formalismo Lagrangiano y la ecuación de Hamilton-Jacobi) y de Mecánica Cuántica (la ecuación de Schrödinger, el propagador y, quizás, el formalismo de Wigner-Weyl) como se tratan en las Refs. [2–11], por lo que al inicio de cada sección se dará sólo un breve resumen de estos.

En la Sec. 1.1.2 se da a conocer la transformación de coordenadas sobre el espacio de configuración extendido con la que se relacionará el problema de la partícula libre con el de la partícula en un campo uniforme, la cual será utilizada en las Secs. 1.1.3 y 1.2.2 para analizar la relación entre sus Lagrangianas y sus ecuaciones de Hamilton-Jacobi, respectivamente.

En las Secs. 2.1.1 y 2.1.2 se dan a conocer las soluciones de los problemas que buscamos relacionar, mostrando con ellas algunos tropiezos que uno pudiera tener al tratar de resolver sus respectivas ecuaciones de Schrödinger. En la Sec. 2.1.3 se construirá una solución a la partícula libre en términos de la función de Airy Ai , y a partir de ella se llegará a la función de onda de la partícula en un campo uniforme usando la transformación de coordenadas vista en la Sec. 1.1.2. Con esta misma, en las Secs. 2.2.3 y 2.3.3 se relacionarán los propagadores y las funciones de Wigner, respectivamente.

Capítulo 1

Relación en el marco de la Mecánica Clásica

Dentro del marco de la Mecánica Clásica, existen formulaciones elementales, las cuales pueden describir sistemas mecánicos. Basados en las Refs. [2–4], realizaremos un breve repaso de algunas formulaciones elementales del marco clásico.

En la Sec. 1.1, de las aplicaciones del formalismo Lagrangiano, veremos que dada una transformación de coordenadas sobre el espacio de configuración extendido, la forma de las ecuaciones de Lagrange se muestra invariante, por lo que, en la Sec. 1.1.2, veremos una transformación de coordenadas adecuada para relacionar la solución de las ecuaciones del problema de la partícula libre con el de la partícula en el campo uniforme, así como la forma que toma el momento lineal dada esta relación.

En la Sec. 1.2, abordaremos la ecuación de Hamilton-Jacobi (HJ), la cual describe a los sistemas mecánicos con una sola ecuación diferencial parcial (EDP). Veremos que cualquier solución de $2n + 1$ variables a esta EDP, que cumpla con la condición (1.19), es llamada una solución completa, por lo que realizar una transformación de coordenadas para establecer una relación entre el problema de la partícula libre con la del campo uniforme nos lleva a encontrar una solución completa a la ecuación de HJ correspondiente a la partícula en el campo.

Veremos también la relación entre las soluciones de ambos problemas. En la Secs. 1.1.3 y 1.2.2 se abordarán las relaciones entre sus Lagrangianas y ecuaciones de Hamilton-Jacobi, respectivamente. En esta última veremos que la nueva función principal de Hamilton, la de la partícula en el campo uniforme, está relacionada con la de una partícula libre por medio de la misma función F vista en la relación entre sus lagrangianas.

1.1. Aplicaciones del formalismo Lagrangiano

Para un sistema mecánico con constricciones holónomas, cada conjunto de coordenadas generalizadas, (q_1, q_2, \dots, q_n) , corresponde a un sistema de coordenadas sobre el espacio de configuración del sistema mecánico. Al agregar el tiempo, t , al conjunto de coordenadas (q_1, q_2, \dots, q_n) , obtenemos el sistema de coordenadas $(q_1, q_2, \dots, q_n, t)$ del *espacio de configuración extendido*. En particular, la solución a las ecuaciones de movimiento está dada por una curva en el espacio de configuración extendido.

1.1.1. Principio de Hamilton

El principio de Hamilton establece que las curvas descritas por un sistema mecánico en el espacio de configuración extendido se distinguen por el hecho de que la integral

$$\int_{t_0}^{t_1} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt$$

tiene un mínimo valor en la curva descrita por el sistema, comparada con las curvas en el espacio de configuración extendido acotadas con los mismos puntos extremos.

Al ser $L(q_i, \dot{q}_i, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, una función de valores reales de $2n + 1$ variables, y definiendo una curva C dada por $C(t) = (q_i(t), t)$, donde las q_i son funciones de valores reales de t , definidas en algún intervalo $[t_0, t_1]$, podemos definir una segunda curva,

$$\bar{C}(t) \equiv (q_i(t), dq_i(t)/dt, t).$$

Si t se expresa como una función de algún parámetro τ , $t = t(\tau)$, entonces la integral de línea $I(C)$, que es un número real que depende de L y de la curva C , está dada por

$$I(C) \equiv \int_{\bar{C}} L dt = \int_{\tau_0}^{\tau_1} L \left(q_i(\tau), \frac{dq_i(\tau)/d\tau}{dt(\tau)/d\tau}, t(\tau) \right) \frac{dt(\tau)}{d\tau} d\tau, \quad (1.1)$$

donde τ_0 y τ_1 están definidas por $t_0 = t(\tau_0)$ y $t_1 = t(\tau_1)$.

Covariancia de las ecuaciones de Lagrange bajo transformaciones de coordenadas sobre el espacio de configuración extendido

Pensemos en una transformación de coordenadas arbitraria en el espacio de configuración extendido, $q'_i = q'_i(q_j, t)$, $t' = t'(q_j, t)$. Bajo este cambio de coordenadas, la integral $I(C)$ toma la forma

$$I(C) = \int_{t'_0}^{t'_1} L \left(q_i(q'_j, t'), \frac{dq_i(q'_j, t')/dt'}{dt(q'_j, t')/dt'}, t(q'_j, t') \right) \frac{dt}{dt'} dt', \quad (1.2)$$

donde

$$\frac{dq_i}{dt'} \equiv \frac{\partial q_i}{\partial t'} + \frac{\partial q_i}{\partial q'_j} \frac{dq'_j}{dt'}, \quad \frac{dt}{dt'} \equiv \frac{\partial t}{\partial t'} + \frac{\partial t}{\partial q'_j} \frac{dq'_j}{dt'}. \quad (1.3)$$

Es fácil apreciar que el resultado de la integral $I(C)$ expresado por (1.2) conserva la misma forma que la dada en (1.1), gracias a esto, las ecuaciones de Euler-Lagrange,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad (1.4)$$

son equivalentes a

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}'_i} \left(L \frac{dt}{dt'} \right) - \frac{\partial}{\partial q'_i} \left(L \frac{dt}{dt'} \right) = 0, \quad (1.5)$$

donde la Lagrangiana, L , depende de las coordenadas q'_i, \dot{q}'_i, t , como en la Ec. (1.2). En el caso en el que $t = t'$, la ecuación anterior se vuelve exactamente la Ec. (1.4). Así, probamos que dada una transformación de coordenadas en el espacio extendido arbitraria, $q' = q'_i(q_j, t)$, $t' = t'(q_j, t)$, la forma de las ecuaciones de Lagrange es invariante. [2]

1.1.2. Transformación de coordenadas para relacionar a una partícula libre con una en un campo uniforme

Para encontrar las ecuaciones correspondientes a una partícula en un campo de fuerza uniforme a partir de las ecuaciones de una partícula libre conviene tomar la siguiente transformación de coordenadas sobre el espacio de configuración extendido:

$$q = q' + \frac{1}{2}at'^2, \quad t = t', \quad (1.6)$$

donde a es una constante. Vemos que el tiempo conserva su forma dada esta transformación. De manera muy sencilla se puede ver que esta transformación de coordenadas relaciona las ecuaciones de movimiento de los dos sistemas mecánicos. La posición de una partícula libre en función del tiempo está dada por

$$q = At + B, \quad (1.7)$$

donde A y B son constantes. Sustituyendo (1.6) en (1.7) y despejando q' obtenemos

$$q' = -\frac{1}{2}at'^2 + At' + B, \quad (1.8)$$

la cual puede reconocerse como la solución general de las ecuaciones de movimiento para una partícula en un campo de fuerza uniforme con aceleración a .

El momento lineal de una partícula está dado por

$$p = m\dot{q}, \quad (1.9)$$

donde $\dot{q} = dq/dt$. Derivando la ecuación izquierda de (1.6) con respecto al tiempo y sustituyéndola en (1.9) tenemos que

$$p = p' + mat'. \quad (1.10)$$

De esta manera vemos cómo se transforma el momento dada la relación (1.6).

1.1.3. Relación en el formalismo Lagrangiano

Para obtener la Lagrangiana para una partícula en un campo uniforme fijémosnos primero en la Lagrangiana estándar L de una partícula libre,

$$L = \frac{m}{2}\dot{q}^2. \quad (1.11)$$

Gracias a que tenemos sólo transformaciones en el espacio, basta con sustituir (1.6) en (1.11) para obtener la nueva Lagrangiana L' (vea la Sec. 1.1). En este caso tendríamos

$$\begin{aligned} L' &= L(q', t') \\ &= \frac{m}{2} \left[\frac{d(q' + \frac{1}{2}at'^2)}{dt'} \right]^2 \\ &= \frac{m}{2} \left[\frac{dq'}{dt'} + at' \right]^2 \\ &= \frac{m}{2} \left(\frac{dq'}{dt'} \right)^2 + mat' \frac{dq'}{dt'} + \frac{1}{2}ma^2t'^2 \\ &= \frac{m}{2} \left(\frac{dq'}{dt'} \right)^2 - maq' + \frac{d}{dt'}(maq't') + \frac{1}{2}ma^2t'^2 \\ &= \frac{m}{2}\dot{q}'^2 - maq' + \frac{dF}{dt'}, \end{aligned} \quad (1.12)$$

donde $F = maq't' + \frac{1}{6}ma^2t'^3$. La Lagrangiana de una partícula de masa m en un campo uniforme está dada por

$$L' = \frac{m}{2}\dot{q}'^2 - maq'. \quad (1.13)$$

Vemos que (1.12) coincide esencialmente con (1.13), a diferencia del término dF/dt , el cual al sustituir $L = L(q', t')$ en (1.5) no contribuye a la forma de las ecuaciones de Lagrange, es decir, su forma se muestra invariante bajo estas transformaciones de coordenadas (vea la Sec. 1.1.1).

1.2. Aplicaciones del formalismo Hamiltoniano

Del formalismo Lagrangiano, se puede apreciar que varios sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) de segundo orden que describen sistemas mecánicos, especialmente las ecuaciones de movimiento de sistemas mecánicos holónomos conservativos, pueden ser expresadas en la forma de las ecuaciones de Lagrange para alguna Lagrangiana.

Por otro lado, cualquier sistema de n EDOs de segundo orden se puede transformar en un sistema de $2n$ EDOs de primer orden, de una infinidad de maneras diferentes, introduciendo n variables auxiliares. [3]

1.2.1. La ecuación de Hamilton-Jacobi

Como se menciona anteriormente, los sistemas mecánicos se pueden expresar en formas convenientes de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias. Sin embargo, esos sistemas de ecuaciones pueden ser escritos en una sola ecuación diferencial parcial (EDP), conocida como la Ecuación de Hamilton-Jacobi, la cual se construye a partir de la Hamiltoniana.

Las ecuaciones de Hamilton

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (1.14)$$

para una Hamiltoniana arbitraria H , son equivalentes a

$$\dot{q}'_i = \frac{\partial K}{\partial p'_i}, \quad \dot{p}'_i = -\frac{\partial K}{\partial q'_i}, \quad (1.15)$$

donde $q'_i = q'_i(q_j, p_j, t)$, $p'_i = p'_i(q_j, p_j, t)$, son una transformación canónica de coordenadas dadas implícitamente por

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \quad q'_i = \frac{\partial F_2}{\partial p'_i}, \quad (1.16)$$

con F_2 como una función de valores reales de $2n + 1$ variables, y

$$K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}. \quad (1.17)$$

Si buscamos una función generadora F_2 de tal forma que la nueva Hamiltoniana sea cero, entonces las ecuaciones de movimiento (1.15) son triviales, teniendo $q'_i = cte.$, $p'_i = cte.$ En este caso, combinando (1.17) con la primera ecuación de (1.16), y denotando a la función generadora F_2 como S , obtenemos

$$H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0, \quad (1.18)$$

la cual, es una EDP de primer orden para $S(q_i, p'_i, t)$, conocida como la ecuación de Hamilton-Jacobi (HJ), a la función S la llamaremos la función principal de Hamilton. S es una función de $2n + 1$ variables, que debe cumplir la condición

$$\det\left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial p'_j}\right) \neq 0, \quad (1.19)$$

sin embargo, es de notar que (1.18) no contiene de manera explícita las variables p'_i , por lo que, para satisfacer la condición (1.19) la función S debe contener n variables p'_i como parámetros. Cualquier solución de la ecuación de HJ que satisfaga (1.19) es llamada una solución completa. [4]

1.2.2. Relación en el formalismo de Hamilton-Jacobi

La ecuación de HJ correspondiente al Hamiltoniano estándar de una partícula libre está dada por:

$$0 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2 + \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (1.20)$$

Para obtener la ecuación de HJ de una partícula en un campo uniforme, primero, apliquemos la regla de la cadena y las Ecs. (1.6) de modo que,

$$\frac{\partial}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial q'}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t'} - at' \frac{\partial}{\partial q'}. \quad (1.21)$$

Sustituyendo (1.21) en (1.20)

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q'} \right)^2 + \frac{\partial S}{\partial t'} - at' \frac{\partial S}{\partial q'} \\
&= \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q'} - mat' \right)^2 + \frac{\partial S}{\partial t'} - \frac{1}{2} ma^2 t'^2 \\
&= \frac{1}{2m} \left[\frac{\partial}{\partial q'} (S - maq't') \right]^2 + \frac{\partial}{\partial t'} (S - maq't') - \frac{1}{2} ma^2 t'^2 + maq' \\
&= \frac{1}{2m} \left[\frac{\partial}{\partial q'} \left(S - maq't' - \frac{1}{6} ma^2 t'^3 \right) \right]^2 + \frac{\partial}{\partial t'} \left(S - maq't' - \frac{1}{6} ma^2 t'^3 \right) + maq'
\end{aligned}$$

lo cual muestra que S satisface la ecuación de HJ correspondiente a la Hamiltoniana de una partícula libre si y sólo si

$$S' \equiv S - maq't' - \frac{1}{6} ma^2 t'^3 \quad (1.22)$$

satisface la ecuación de HJ para una partícula en un campo uniforme,

$$0 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S'}{\partial q'} \right)^2 + \frac{\partial S'}{\partial t'} + maq' \quad (1.23)$$

[Ref. 4, Ec. (6.13)]. Vemos que el término que diferencia a la función principal de Hamilton de la partícula libre con la del campo uniforme coincide con la F definida en la Sec. 1.1.3, por lo que podemos reescribir a (1.22) como

$$S' = S - F. \quad (1.24)$$

Capítulo 2

Relación en el marco de la Mecánica Cuántica

Ahora, en este capítulo, basados en las Refs. [5–11], trataremos algunas formulaciones importantes del marco de la Mecánica Cuántica.

En la Secs. 2.1.1 y 2.1.2, abordaremos la resolución de la ecuación estacionaria de Schrödinger de una partícula libre y de una partícula en un campo uniforme, respectivamente, pareciendo que en estas soluciones surge el problema de que las eigenfunciones de un operador con espectro continuo no son normalizables. Para finalizar esta sección, se construirá una solución a la partícula libre en términos de la función de Airy Ai , y, con ayuda de la transformación de coordenadas vista en la Sec. 1.1.2, se llegará a la función de onda de una partícula en un campo uniforme.

En la Sec. 2.2, abordaremos el cálculo del propagador reescribiendo la ecuación de Schrödinger como una ecuación integral con ayuda del operador de traslaciones en el tiempo, siendo el Hamiltoniano del sistema el generador infinitesimal de este. Se hallará el propagador de la partícula libre y el de la partícula en un campo uniforme, y finalmente se mostrará la relación entre ambos propagadores.

Por último, en la Sec. 2.3, mostraremos la transformada de Weyl y la función de Wigner, una formulación no tan popular como la ecuación de Schrödinger, y al igual que en las secciones anteriores, al final se relacionarán las funciones de Wigner de los problemas ya mencionados.

2.1. La ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger, es una ecuación diferencial lineal de la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q^2} + V(q, t) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (2.1)$$

donde \hbar es la constante de Planck reducida, la función $\Psi = \Psi(q, t)$ es llamada *función de onda* y $V(q, t)$ es el potencial clásico del sistema mecánico, el cual, comúnmente depende sólo de la coordenada q , por lo que suele escribirse sólo como $V(q)$.

En la Mecánica Cuántica la función de onda Ψ tiene una interpretación estadística, podemos decir que $|\Psi(q, t)|^2$ es la *densidad de probabilidad* de encontrar a la partícula alrededor de un punto q a un tiempo t . Por lo que, si integramos $|\Psi(q, t)|^2$ sobre todo el espacio, $(-\infty, \infty)$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(q, t)|^2 dq = 1. \quad (2.2)$$

Al resultado dado por (2.2) se le conoce como *condición de normalización*.

Proponiendo una solución separable $\Psi(q, t) = \psi(q)T(t)$, sustituyéndola en (2.1) y multiplicando a ambos lados de la ecuación por $1/\psi T$, obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dq^2} + V(q) = i\hbar \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} \equiv E, \quad (2.3)$$

donde E es una constante de separación identificable como la *energía del sistema*. Fijándonos primero sólo en la parte temporal, podemos hallar la solución para esta, siendo

$$T(t) = e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.4)$$

En algunos textos se suele llamar a (2.4) la *solución estándar* para la parte temporal.

Ahora, fijándonos sólo en la parte espacial y multiplicando a ambos lados de la ecuación por ψ , obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dq^2} + V(q)\psi = E\psi, \quad (2.5)$$

la cual corresponde a la *ecuación de Schrödinger estacionaria* o *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*, siendo la función $\psi = \psi(q)$ su solución, la cual depende sólo de la coordenada q y corresponde a algún *estado estacionario* del sistema.

2.1.1. Solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre

El potencial clásico para una partícula libre es $V(q) = 0$, por lo que la ecuación de Schrödinger para una partícula libre es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Psi}{\partial q^2} = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad (2.6)$$

donde q es la posición de la partícula. Tomando la solución separable estándar para la parte temporal, tenemos que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dq^2} = E\psi. \quad (2.7)$$

Definiendo $k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, podemos escoger como solución a (2.7) a una combinación lineal de funciones exponenciales imaginarias que se puede reducir a

$$\psi(q) = Ae^{ikq}, \quad (2.8)$$

donde A es una constante. Tomando la solución estándar de la dependencia temporal,

$$\Psi_k(q, t) = Ae^{i\left(kq - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}. \quad (2.9)$$

Es de interés mencionar que cuando $k > 0$ tenemos el caso de ondas viajando hacia la derecha, mientras que si $k < 0$ tenemos ondas viajando a la izquierda. Esta función de onda es *no-normalizable*:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_k|^2 dq = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \Psi_k dq = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq = |A|^2(\infty). \quad (2.10)$$

En el caso de la partícula libre, esta solución, obtenida a partir de la separación de variables, no representa un estado físicamente realizable. No existe un estado estacionario para una partícula libre.

Una solución para (2.6) es una combinación lineal de soluciones separables, en este caso, tenemos una integral sobre la variable continua k ,

$$\Psi(q, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{i\left(kq - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk. \quad (2.11)$$

Esta expresión, conocida como un *paquete de ondas*, ahora puede ser normalizable para una $\phi(k)$ apropiada. Para $t = 0$:

$$\Psi(q, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikq} dk. \quad (2.12)$$

Vemos que en esta última relación tenemos escrita a $\Psi(q, 0)$ en términos de la transformada de Fourier $\phi(k)$. Para que $\Psi(q, 0)$ sea normalizable es necesario escoger alguna $\phi(k)$ normalizable. [5]

2.1.2. Solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula en un campo uniforme

La ecuación de Schrödinger para una partícula en un campo uniforme es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q^2} + maq\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (2.13)$$

Al igual que en la sección anterior, al tomar la solución estándar para la parte temporal, tenemos que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dq^2} + maq\psi = E\psi. \quad (2.14)$$

Definiendo $x \equiv \left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(q - \frac{E}{ma}\right)$, aplicando la regla de la cadena y multiplicando por $-\left(\frac{2}{ma^2 \hbar^2}\right)^{1/3}$, podemos reescribir (2.14) como

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} - x\psi = 0, \quad (2.15)$$

la cual es la *ecuación de Airy* [Ref. 6, Ec. (2.1)]. Debido a esto, la solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula en presencia de un campo uniforme es

$$\psi(x) = DAi(x) + GBi(x), \quad (2.16)$$

donde Ai y Bi son las *funciones de Airy*, dadas por

$$Ai(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{s^3}{3} + xs\right) ds, \quad (2.17)$$

$$Bi(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{s^3}{3} + xs\right) + \text{sen}\left(\frac{s^3}{3} + xs\right) \right] ds \quad (2.18)$$

[vea Ref. 6, Ecs. (2.20) y (2.31)].

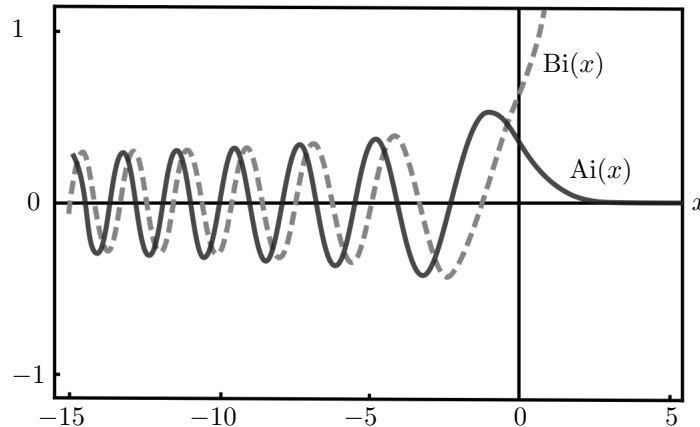


Figura 2.1: La línea continua corresponde a la función $Ai(x)$, mientras que la línea punteada corresponde a la función $Bi(x)$.

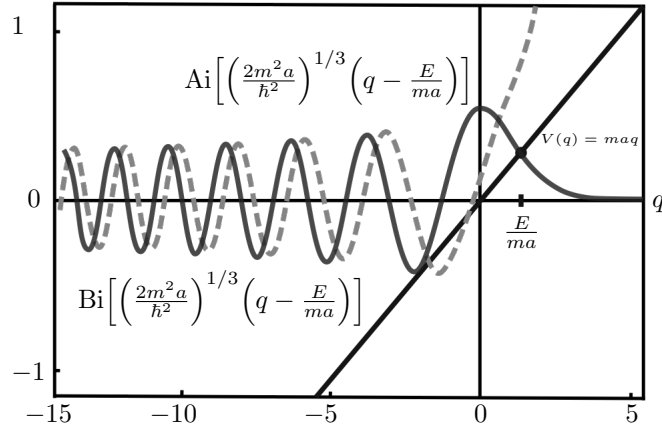


Figura 2.2: Soluciones separables para la partícula en un campo uniforme y su potencial.

Si comparamos las gráficas de las funciones de Airy con la del potencial $V = maq$ (vea la fig. 2.2) es fácil notar que el punto donde el potencial es igual a la energía total de este estado estacionario ($V = E$) es $q = E/ma$, mismo punto que hace que el argumento de las funciones de Airy sea cero. Cuando, $q < E/ma$, $V < E$, tenemos la región clásicamente permitida, mientras que cuando $q > E/ma$, $V > E$, tenemos la región clásicamente prohibida, en la cual se pueden estudiar fenómenos cuánticos como, por ejemplo, el efecto tunel. Tomando esto en cuenta podemos descartar inmediatamente a las funciones Bi, de las cuales podemos ver que tanto ella como su módulo al cuadrado divergen cuando $q > 0$, teniendo con esto una densidad de probabilidad que indica que cuanto más grande sea q existe mayor probabilidad de encontrar a la partícula, incluso si pasamos la región clásicamente permitida, contrario a lo que pasa con la función Ai, por lo que podemos quedarnos sólo con la solución:

$$\Psi^{(E)}(q, t) = D \text{Ai} \left[\left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(q - \frac{E}{ma} \right) \right] e^{-\frac{i}{\hbar} E t}. \quad (2.19)$$

A pesar de que la función de Airy Ai converge en $q > 0$, esta no es del tipo cuadrado integrable, por lo que la solución dada por (2.19) no es normalizable, pero en forma similar al caso de la partícula libre uno puede olvidarse de la física por un momento y quedarse sólo con las matemáticas. Con ayuda de la transformada de Fourier, podemos tomar una superposición de funciones de Airy integrándolas sobre el parámetro continuo E , cuya amplitud sea modulada por alguna función de E que sí sea del tipo cuadrado integrable para obtener alguna solución a la ec. (2.13) que sí tenga sentido físico.

Una manera alternativa para encontrar alguna solución estacionaria a la ec. (2.13) en la que se descartan automáticamente las funciones Bi es tomar a la ecuación estacionaria de Schrödinger (2.14) y reescribirla en el espacio de momentos, teniendo con ello la ecuación

$$\frac{d\varphi(p)}{dp} = i \left(\frac{p^2}{2m^2 a \hbar} - \frac{E}{ma \hbar} \right) \varphi(p), \quad (2.20)$$

donde $\varphi(p)$ es su solución en términos del momento lineal y está dada por

$$\varphi(p) = C_E e^{i \left(\frac{p^3}{6m^2 a \hbar} - \frac{E}{ma \hbar} p \right)}. \quad (2.21)$$

De la condición de ortonormalidad para estados continuos (vea la Ref. 7) tenemos que para

(2.21),

$$\begin{aligned}
\delta(E' - E) &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{E'}^*(p) \varphi_E(p) dp \\
&= C_{E'}^* C_E \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left(\frac{1}{ma\hbar}(E'-E)\right)p} dp \\
&= C_{E'}^* C_E 2\pi \delta\left(\frac{1}{ma\hbar}(E' - E)\right) \\
&= C_{E'}^* C_E 2\pi(ma\hbar)\delta(E' - E), \tag{2.22}
\end{aligned}$$

lo que nos lleva a que

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar ma}} e^{i\left(\frac{p^3}{6m^2 a\hbar} - \frac{E}{ma\hbar}p\right)}. \tag{2.23}$$

Haciendo uso de la transformada de Fourier para encontrar la solución a la ecuación de Schrödinger en términos de la posición,

$$\begin{aligned}
\psi(q) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) e^{\frac{i}{\hbar}pq} dp \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar(ma)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left(\frac{p^3}{6m^2 a\hbar} - \frac{E}{ma\hbar}p\right)} e^{\frac{i}{\hbar}pq} dp \\
&= \frac{(2m^2 a\hbar)^{1/3}}{\hbar(ma)^{1/2}} \frac{1}{2\pi(2m^2 a\hbar)^{1/3}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left(\frac{p^3}{6m^2 a\hbar} + \frac{1}{\hbar}\left(q - \frac{E}{ma}\right)p\right)} dp. \tag{2.24}
\end{aligned}$$

Las funciones de Airy pueden escribirse en múltiples formas integrales, especialmente la función Ai que puede escribirse sin necesidad de recurrir a alguna otra función especial (a comparación de las funciones Bi, cuyas otras formas integrales dependen de Ai o de alguna otra función especial, y cuyo tratamiento puede ser más largo que el de las Ai como se puede ver en la Ref. 6). Una forma integral común y conveniente de escribirla es

$$\text{Ai}(\alpha x) = \frac{1}{2\pi\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left(\frac{k^3}{3\alpha^3} + kx\right)} dk, \tag{2.25}$$

donde α es una constante real arbitraria [Ref. 6, Ec. (2.25)]. Tomando esta formulación en cuenta tenemos que la solución a la ecuación estacionaria de Schrödinger en términos de la posición es

$$\psi(q) = \frac{1}{\sqrt{ma}} \left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2}\right)^{1/3} \text{Ai}\left[\left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(q - \frac{E}{ma}\right)\right] \tag{2.26}$$

[Ref. 8, Ec. (8.3)]. Comparando (2.26) con (2.19) podemos darnos cuenta de que para este estado estacionario $D = \frac{1}{\sqrt{ma}} \left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2}\right)^{1/3}$, por lo que

$$\Psi^{(E)}(q, t) = \frac{1}{\sqrt{ma}} \left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2}\right)^{1/3} \text{Ai}\left[\left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(q - \frac{E}{ma}\right)\right] e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \tag{2.27}$$

De manera que si tomamos como solución a (2.13) a una superposición de soluciones de la forma (2.27), tenemos la expresión

$$\Psi(q, t) = \frac{1}{ma} \left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2}\right)^{1/3} \int_{-\infty}^{\infty} \chi\left(\frac{E}{ma}\right) \text{Ai}\left[\left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(q - \frac{E}{ma}\right)\right] e^{-\frac{i}{\hbar}Et} dE, \tag{2.28}$$

donde, de acuerdo con los postulados estándar de la mecánica cuántica, $|\chi(E/ma)|^2$ es la densidad de probabilidad de medir la energía E si la partícula se encuentra en el estado (2.28).

Las funciones de Airy Ai y Bi también pueden ser escritas en términos de las funciones de Bessel I y J de orden $\pm 1/3$. Para argumentos positivos las relaciones están dadas por

$$\begin{aligned}\text{Ai}(x) &= \frac{\sqrt{x}}{3} \left[\text{I}_{-1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) - \text{I}_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \right] \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\sqrt{x}}{3} \text{K}_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right),\end{aligned}\quad (2.29)$$

$$\begin{aligned}\text{Bi}(x) &= \frac{\sqrt{x}}{3} \left[\text{I}_{-1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) + \text{I}_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \right] \\ &= \frac{\sqrt{x}}{3} \Re \left[e^{i\frac{\pi}{6}} \text{H}_{1/3}^{(1)}\left(-i\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \right],\end{aligned}\quad (2.30)$$

mientras que para argumentos negativos, las relaciones están dadas por

$$\begin{aligned}\text{Ai}(-x) &= \frac{\sqrt{x}}{3} \left[\text{J}_{-1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) + \text{J}_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \right] \\ &= \frac{\sqrt{x}}{3} \Re \left[e^{i\frac{\pi}{6}} \text{H}_{1/3}^{(1)}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \right],\end{aligned}\quad (2.31)$$

$$\begin{aligned}\text{Bi}(-x) &= \frac{\sqrt{x}}{3} \left[\text{J}_{-1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) - \text{J}_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \right] \\ &= \frac{\sqrt{x}}{3} \Im \left[e^{i\frac{\pi}{6}} \text{H}_{1/3}^{(1)}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \right],\end{aligned}\quad (2.32)$$

donde K_ν son las funciones modificadas de Bessel y $\text{H}_\nu^{(1)}$ son las funciones de Hankel [Ref. 6, Sec. 2.2.4].

Debido a que las funciones de Airy son funciones especiales que no suelen enseñarse en cursos básicos de Métodos Matemáticos aplicados a la Física, el problema de la partícula en un campo uniforme es un ejemplo que prácticamente no se ve en los cursos elementales de Mecánica Cuántica.

2.1.3. Relación entre ecuaciones de Schrödinger

Para encontrar la ecuación de Schrödinger de una partícula en un campo uniforme a partir de la ecuación de una partícula libre, aplicamos las derivadas obtenidas el capítulo anterior, (1.21), en (2.6), obteniendo con esto la ecuación de Schrödinger para la partícula libre en términos de las variables primadas q' , t' ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q'^2} + i\hbar a t' \frac{\partial \Psi}{\partial q'} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t'}.\quad (2.33)$$

Proponemos como solución a (2.33),

$$\Psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar} F\right) \Psi',\quad (2.34)$$

donde F es una función de q' y t' (o su equivalente en las coordenadas q , t). Debido a que Ψ y Ψ' difieren solo de un factor de fase y a que (para algún valor fijo de t) $dq = dq'$,

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dq = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi'|^2 dq',\quad (2.35)$$

es decir, Ψ' está normalizada si y sólo si Ψ está normalizada. Basta con sustituir (2.34) en (2.33) para conocer qué debe ser F para obtener a la ecuación de Schrödinger de una partícula en un campo uniforme. Para que, después de hacer esta sustitución, desaparezcan los términos con primeras derivadas, se debe cumplir que

$$\frac{\partial F}{\partial q'} - m a t' = 0.\quad (2.36)$$

Es decir,

$$F = mat'q' + f(t'), \quad (2.37)$$

donde f es una función que solo depende del tiempo. Con esto, la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q'^2} + \left(maq' - \frac{1}{2} ma^2 t'^2 + \frac{df}{dt'} \right) \Psi' = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t'}. \quad (2.38)$$

El potencial $V' = maq' - \frac{1}{2} ma^2 t'^2 + \frac{df}{dt'}$ clásicamente representa una fuerza constante $-\partial V'/\partial q' = -ma$. Con la motivación de simplificar esta expresión al ya conocido potencial $V' = maq'$ podemos escoger

$$f(t') = \frac{1}{6} ma^2 t'^3, \quad (2.39)$$

obteniendo así a la ecuación de Schrödinger para una partícula en un campo uniforme,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi'}{\partial q'^2} + maq' \Psi' = i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t'}, \quad (2.40)$$

y a la relación entre funciones de onda,

$$\Psi = \exp \left[\frac{i}{\hbar} (maq't' + \frac{1}{6} ma^2 t'^3) \right] \Psi', \quad (2.41)$$

donde Ψ es una función de onda para una partícula libre, mientras que Ψ' es una función de onda para una partícula en un campo uniforme.

2.1.4. Relación entre funciones de onda

Una ventaja de trabajar solo con la función Ai, a diferencia de las Bi, es que existen múltiples formas integrales de esta que no dependen de alguna otra función especial. Esta es una herramienta bastante útil para lo siguiente, ya que si queremos encontrar la función de onda para una partícula en un campo uniforme, la cual está escrita en términos de las funciones de Airy Ai, a partir de alguna función de onda para la partícula libre, conviene que esta esté escrita en términos de las funciones de Airy.

De la definición de la función Ai,

$$\text{Ai}(c_2 - c_1^2) e^{ic_1 \left(\frac{2c_1^2}{3} - c_2 \right)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i \left(\frac{z^3}{3} + c_1 z^2 + c_2 z \right)} dz \quad (2.42)$$

donde c_1 y c_2 son constantes reales arbitrarias [Ref. 6, Ec. (2.26)], es fácil ver que si tomamos como solución a la ecuación de Schrödinger para una partícula libre a un paquete de ondas planas,

$$\Psi(q, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{i \left(kq - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right)} dk,$$

donde

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\hbar^2}{2m^2 a} \right)^{1/3} e^{i \frac{k^3 \hbar^2}{6m^2 a}}, \quad (2.43)$$

podemos escribir

$$\Psi(q, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i \left(kq - \frac{\hbar k^2}{2m} t + \frac{k^3 \hbar^2}{6m^2 a} \right)} \left(\frac{\hbar^2}{2m^2 a} \right)^{1/3} dk, \quad (2.44)$$

o bien,

$$\Psi(q, t) = \text{Ai} \left[\left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(q - \frac{1}{2} at^2 \right) \right] e^{i \frac{mat}{\hbar} \left(q - \frac{1}{3} at^2 \right)}, \quad (2.45)$$

como solución a la ecuación de Schrödinger de una partícula libre. Esta función de onda fue propuesta por primera vez en 1979 por Berry y Balazs (vea Ref. 12), donde buscan darle un sentido físico a esta superposición de ondas planas, sin embargo, nosotros nos quedaremos

sólo con el hecho de que es solución a la ecuación diferencial (2.6), ya que, recordemos, las funciones de Airy no son del tipo cuadrado integrable, por lo que darle sentido físico resulta innecesario por el momento. Note que a un tiempo $t = 0$,

$$\Psi(q, 0) = \text{Ai} \left[\left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2} \right)^{1/3} q \right]. \quad (2.46)$$

El punto donde el argumento de esta función de Airy se hace cero es $q = 0$, a diferencia de la solución a la partícula en un campo uniforme, donde, para todo t , el argumento de su función de Airy se hacía cero en $q = E/ma$ [vea la ec. (2.27)], mismo punto que delimitaba el límite clásico para el potencial de una partícula en un campo uniforme, por lo que, con la intención de recuperar este límite clásico apliquemos a (2.45) una traslación en el espacio $q \rightarrow q - E'/ma$, de modo que

$$\Psi^{(E')}(q, t) = \text{Ai} \left[\left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(q - \frac{E'}{ma} - \frac{1}{2} at^2 \right) \right] e^{i \frac{m a t}{\hbar} \left(\left(q - \frac{E'}{ma} \right) - \frac{1}{3} at^2 \right)}. \quad (2.47)$$

Aplicando la transformación de coordenadas (1.6) a (2.47) y haciendo uso de la relación (2.41), tenemos que la solución a la ecuación de Schrödinger para una partícula en un campo uniforme es

$$\Psi^{(E')}(q', t') = \text{Ai} \left[\left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(q' - \frac{E'}{ma} \right) \right] e^{-\frac{i}{\hbar} E' t'}, \quad (2.48)$$

la cual, a excepción del factor constante, coincide con la ec. (2.27) vista en la Sec. 2.1.2. Recordemos que esta solución no posee sentido físico ya que no es del tipo cuadrado integrable, pero como vimos en la Sec. 2.1.2 uno puede tomar una superposición de soluciones de esta forma, cuya amplitud sea modulada por alguna función que sí sea del tipo cuadrado integrable, donde E' corresponde a la energía del estado estacionario representado por esta superposición.

Con esto vemos que efectivamente uno puede llegar a la función de onda de la partícula en un campo uniforme a partir de la función de onda de una partícula libre por medio de una transformación de coordenadas y un factor de fase.

2.2. Propagadores

La ecuación de Schrödinger como cualquier ecuación diferencial lineal, se puede escribir como una ecuación integral que establece las condiciones de frontera. Para la ecuación dependiente del tiempo, el kernel de la ecuación integral es llamado el propagador [9]. Al ser una ecuación diferencial de primer orden en el tiempo, es necesario contar con alguna condición inicial para obtener una solución para tiempos posteriores. Sin embargo, esta condición inicial puede aparecer de manera natural si reescribimos esta ecuación diferencial como una ecuación integral.

Tomemos

$$[\hat{U}(t)\Psi](q, t_i) \equiv \Psi(q, t_i + t), \quad (2.49)$$

con $\hat{U}(t)$ como el operador de traslaciones en el tiempo. Expandiendo $\Psi(q, t_i + t)$ en una serie de Taylor podemos escribir

$$\begin{aligned} \Psi(q, t_i + t) &= \Psi(q, t_i) + t \frac{\partial \Psi}{\partial t}(q, t_i) + \frac{t^2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}(q, t_i) + \dots \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \frac{\partial^k}{\partial t^k} \Psi(q, t_i). \end{aligned} \quad (2.50)$$

Por lo tanto

$$\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{t\hat{H}}{i\hbar}\right), \quad (2.51)$$

donde \hat{H} es el generador infinitesimal de las traslaciones en el tiempo.

Podemos tomar como solución a la ecuación de Schrödinger a una combinación lineal de soluciones separables. Tomando la solución estándar de la parte temporal, $e^{-iEt/\hbar}$, tenemos que

$$\Psi(q, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(q) e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.52)$$

En un tiempo $t = t_i$,

$$\Psi(q, t_i) = \sum_{n=0}^{\infty} (c_n e^{-iEt_i/\hbar}) \psi_n(q), \quad (2.53)$$

con $c_m = e^{iEt_i/\hbar} \langle \psi_m | \Psi(q, t_i) \rangle$ (note el uso de la notación de Dirac). Fijándonos en algún tiempo posterior, $t = t_f$, donde $q = q_f$, la función de onda estaría dada por

$$\begin{aligned} \Psi(q_f, t_f) &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle \psi_n | \Psi(q_f, t_i) \rangle \psi_n(q_f) e^{-iE(t_f-t_i)/\hbar} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*(q_i) \psi_n(q_f) e^{-iE(t_f-t_i)/\hbar} \right) \Psi(q_i, t_i) dq_i, \\ &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} K(q_f, t_f; q_i, t_i) \Psi(q_i, t_i) dq_i, \end{aligned} \quad (2.54)$$

donde $K(q_f, t_f; q_i, t_i)$ es conocido como el propagador. Podemos decir que el propagador nos da la evolución de la función de onda instantes de tiempo después al dado por las condiciones iniciales [10].

2.2.1. El propagador de una partícula libre

Es de notar que para el caso discreto, el propagador tiene la forma

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*(q_i) \psi_n(q_f) e^{-iE(t_f-t_i)/\hbar}. \quad (2.55)$$

Para el caso continuo podemos reescribir al propagador como

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^*(q_i) \psi_k(q_f) e^{-iE(t_f-t_i)/\hbar} dk, \quad (2.56)$$

de tal forma que podemos escoger a (2.8) con $A = 1/\sqrt{2\pi}$ como solución a (2.7) para reescribir (2.56) como

$$\begin{aligned} K(q_f, t_f; q_i, t_i) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikq_i} e^{ikq_f} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}(t_f-t_i)} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}(t_f-t_i) + ik(q_f-q_i)} dk \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_f-t_i)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m(q_f-q_i)^2}{2(t_f-t_i)}\right), \end{aligned} \quad (2.57)$$

y así obtener el propagador para una partícula libre [Ref. 9, Ec. (433)].

2.2.2. El propagador de una partícula en un campo uniforme

De acuerdo con Feynman en la Ref. 13, es posible integrar sobre todas las posibles trayectorias que pudiera tomar una partícula dividiendo el intervalo $[t_i, t_f]$ en N elementos de tiempo cortos, por lo que en términos de la integral de camino de Feynman el propagador

de una partícula en un campo uniforme puede escribirse como

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{N/2} \int \cdots \int dq_1 \dots dq_{N-1} \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m (q_{k+1} - q_k)^2}{2\tau} - maq_{k+1}\tau \right\}, \quad (2.58)$$

con $\tau = \frac{t_f - t_i}{N}$, en donde integramos sobre todos los posibles caminos que pudiera tomar la partícula, que van desde (q_i, t_i) hasta (q_f, t_f) . Proponiendo $x_k = q_k - q(t_i + k\tau)$, podemos escribir

$$\begin{aligned} K &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{N/2} \int \cdots \int dx_1 \dots dx_{N-1} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m (x_{k+1} - x_k)^2}{2\tau} \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m [q(t_i + (k+1)\tau) - q(t_i + k\tau)]^2}{2\tau} - maq(t_i + (k+1)\tau)\tau \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m (x_{k+1} - x_k) [q(t_i + (k+1)\tau) - q(t_i + k\tau)]}{\tau} - max_{k+1}\tau \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{N/2} \int \cdots \int dx_1 \dots dx_{N-1} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m (x_{k+1} - x_k)^2}{2\tau} \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m [q(t_i + (k+1)\tau) - q(t_i + k\tau)]^2}{2\tau} - maq(t_i + (k+1)\tau)\tau \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{mx_{k+1} [q(t_i + (k+1)\tau) - q(t_i + k\tau)]}{\tau} \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{-mx_k [q(t_i + (k+1)\tau) - q(t_i + k\tau)]}{\tau} \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} max_{k+1}\tau \right\}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Note que podemos escribir

$$\sum_{k=0}^{N-1} \frac{m (x_{k+1} - x_k)^2}{2\tau} = \frac{m}{2\tau} \vec{x}^T \Lambda \vec{x}, \quad (2.60)$$

donde

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \end{pmatrix}, \quad \Lambda = \begin{pmatrix} 2 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & 2 & \cdots & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & \cdots & 2 \end{pmatrix}. \quad (2.61)$$

Existe una matriz M ortogonal tal que

$$\Lambda = M^{-1}DM, \quad (2.62)$$

donde $D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N-1})$, de modo que podemos diagonalizar a la matriz Λ . Es decir,

$$\begin{aligned} \frac{m}{2\tau} \vec{x}^T \Lambda \vec{x} &= \frac{m}{2\tau} \vec{x}^T M^T D M \vec{x} \\ &\equiv \frac{m}{2\tau} \vec{y}^T D \vec{y}, \end{aligned} \quad (2.63)$$

donde $\vec{y} = M\vec{x}$. Ya que $x_0 = x_N = 0$, vea que ahora podemos escribir (2.59) como

$$\begin{aligned}
K &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{N/2} \int \cdots \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\tau} \vec{y}^T D \vec{y} \right\} \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m}{2} \frac{[q(t_i + (k+1)\tau) - q(t_i + k\tau)]^2}{\tau} - maq(t_i + (k+1)\tau)\tau \right\} \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m x_{k+1} [q(t_i + (k+1)\tau) - q(t_i + k\tau)]}{\tau} \right\} \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{-m x_{k+1} [q(t_i + (k+2)\tau) - q(t_i + (k+1)\tau)]}{\tau} \right\} \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} m a x_{k+1} \tau \right\}. \tag{2.64}
\end{aligned}$$

Tomando el límite de cuando $N \rightarrow \infty$ de la segunda exponencial en adelante tenemos

$$K = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L dt \right\} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{N/2} \int \cdots \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\tau} \vec{y}^T D \vec{y} \right\} \tag{2.65}$$

y como

$$\vec{y}^T D \vec{y} = \lambda_1 y_1^2 + \lambda_2 y_2^2 + \cdots + \lambda_{N-1} y_{N-1}^2 \tag{2.66}$$

la integral es separable, entonces

$$\begin{aligned}
K &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L dt \right\} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{N/2} \left(\frac{2\pi i \hbar \tau}{m} \right)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_{N-1}}} \\
&= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L dt \right\} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar N \tau} \right)^{1/2} \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_f - t_i)} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L dt \right\}. \tag{2.67}
\end{aligned}$$

La Lagrangiana de una partícula en un campo uniforme es

$$L = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - maq, \tag{2.68}$$

con ayuda de las ecuaciones de Euler-Lagrange podemos ver que la trayectoria clásica de la partícula está dada por

$$q(t) = -\frac{1}{2} a (t - t_i)^2 + v_0 (t - t_i) + q_0, \tag{2.69}$$

donde q_0 y v_0 son constantes, por lo que el propagador de una partícula en un campo uniforme es

$$\begin{aligned}
K(q_f, t_f; q_i, t_i) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_f - t_i)}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \left[\frac{(q_f - q_i)^2}{t_f - t_i} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - a(t_f - t_i)(q_i + q_f) - \frac{1}{12} a^2 (t_f - t_i)^3 \right] \right\}. \tag{2.70}
\end{aligned}$$

Este es el método más elemental para el cálculo del propagador de una partícula en un campo uniforme, existen algunos otros métodos, como el propuesto por Holstein en 1997 (vea Ref. 14, Sec. II), que suelen ser más cortos, sin embargo veremos a continuación cómo por medio de una transformación de coordenadas el cálculo del propagador de una partícula en un campo uniforme resulta más sencillo.

2.2.3. Relación entre propagadores

Ahora veremos cómo llegar al propagador de una partícula en un campo uniforme a partir de la relación que existe de este con el de una partícula libre.

Aplicando (2.41) a (2.54) tenemos que

$$\begin{aligned}\Psi'(q'_f, t'_f) &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(maq'_f t'_f + \frac{1}{6}ma^2 t'^3_f\right)\right] \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} K(q_f, t_f; q_i, t_i) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(maq'_i t'_i + \frac{1}{6}ma^2 t'^3_i\right)\right] \Psi'(q'_i, t'_i) dq'_i \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} K(q_f, t_f; q_i, t_i) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(ma(q'_i t'_i - q'_f t'_f) + \frac{1}{6}ma^2(t'^3_i - t'^3_f)\right)\right] \Psi'(q'_i, t'_i) dq'_i.\end{aligned}$$

Comparando con (2.54) podemos deducir que la expresión del propagador para una partícula en un campo uniforme en términos del propagador de una partícula libre está dada por

$$K'(q'_f, t'_f; q'_i, t'_i) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(ma(q'_i t'_i - q'_f t'_f) + \frac{1}{6}ma^2(t'^3_i - t'^3_f)\right)\right] K(q_f, t_f; q_i, t_i). \quad (2.71)$$

Sustituyendo (2.57) y (1.6) en (2.71) tenemos

$$\begin{aligned}K'(q'_f, t'_f; q'_i, t'_i) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t'_f - t'_i)}} \exp\left\{\frac{im}{2\hbar} \left[\frac{(q'_f - q'_i)^2}{t'_f - t'_i} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - a(t'_f - t'_i)(q'_i + q'_f) - \frac{1}{12}a^2(t'_f - t'_i)^3\right]\right\}. \quad (2.72)\end{aligned}$$

Note que de esta manera se llega al propagador de una partícula en un campo uniforme más rápido que si se aborda el problema por el método tradicional [vea la Sec. 2.2.2].

2.3. El formalismo de Wigner-Weyl

La formulación de Wigner-Weyl es una manera alternativa de formular la mecánica cuántica, siendo esta no tan conocida como la formulación de Schrödinger o la formulación matricial de Heisenberg, sin embargo, gracias a ciertas características que veremos a continuación, resulta ser un tema interesante para abordar en la relación de los fenómenos de la partícula libre y la partícula en un campo uniforme.

2.3.1. La transformada de Weyl

Haciendo uso de la notación de Dirac, la transformada de Weyl \tilde{Q} de un operador \hat{Q} está definida por

$$\tilde{Q}(q, p) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy/\hbar} \langle q + y/2 | \hat{Q} | q - y/2 \rangle dy. \quad (2.73)$$

La transformada de Weyl convierte un operador en una función de q y p . También, podemos escribir esta transformada en términos de los elementos de matriz del operador en la base del momento,

$$\tilde{Q}(q, p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iqu/\hbar} \langle p + u/2 | \hat{Q} | p - u/2 \rangle du. \quad (2.74)$$

2.3.2. La función de Wigner

Para un estado cuántico puro, $|\psi\rangle$, definimos el operador densidad

$$\hat{\rho} \equiv |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (2.75)$$

Expresado en términos de la base de la posición, tenemos que

$$\langle q + y/2 | \hat{\rho} | q - y/2 \rangle = \psi(q + y/2) \psi^*(q - y/2). \quad (2.76)$$

Definimos a la función de Wigner como

$$W(q, p) \equiv \frac{\tilde{\rho}}{2\pi\hbar} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy/\hbar} \psi(q + y/2) \psi^*(q - y/2) dy, \quad (2.77)$$

para estados representados por la función de onda $\psi(q)$. Fijámonos en

$$\text{Tr}[\hat{\rho}\hat{Q}] = \text{Tr}[|\psi\rangle\langle\psi|\hat{Q}] = \langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle = \langle\hat{Q}\rangle \quad (2.78)$$

y haciendo uso de la transformada de Weyl, podemos ver que el valor esperado de \hat{Q} está dado por

$$\langle\hat{Q}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W(q, p) \tilde{Q}(q, p) dq dp, \quad (2.79)$$

el cual, podemos asociar como el valor promedio de la observable representada por $\tilde{Q}(q, p)$ sobre el espacio fase con una densidad de probabilidad $W(q, p)$ característica del estado.

Ahora, supongamos que el operador \hat{Q} es una observable física representada por una función del operador \hat{q} , $\hat{Q} = Q(\hat{q})$. La transformada de Weyl para este caso particular es

$$\begin{aligned} \tilde{Q}(q, p) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy/\hbar} \langle q + y/2 | \hat{Q}(\hat{q}) | q - y/2 \rangle dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy/\hbar} Q(q - y/2) \delta(y) dy = Q(q). \end{aligned} \quad (2.80)$$

Como podemos apreciar, si el operador \hat{Q} es solamente una función de \hat{q} , entonces, su transformada de Weyl es sólo la función original de \hat{q} , donde \hat{q} es remplazado por q . De igual manera, si tenemos un operador \hat{Q}' que depende sólo del operador momento \hat{p} , la transformada de Weyl correspondiente es sólo la función original de \hat{p} , donde \hat{p} es remplazado por p . Podemos extender este argumento a sumas de operadores donde cada término esté solo en función de \hat{q} o \hat{p} . Por ejemplo, el operador Hamiltoniano $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}) = \hat{T}(\hat{p}) + \hat{V}(\hat{q})$ lo podemos escribir como $H(q, p) = T(p) + V(q)$, donde T y V son las energías cinética y potencial, y su valor esperado esta dado por

$$\begin{aligned} \langle\hat{H}\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W(q, p) H(q, p) dq dp \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W(q, p) \left(T(p) + V(q) \right) dq dp \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W(q, p) T(p) dq dp + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W(q, p) V(q) dq dp \\ &= \langle\hat{T}\rangle + \langle\hat{V}\rangle. \end{aligned} \quad (2.81)$$

En la mecánica cuántica, el formalismo de Wigner-Weyl presenta algo completamente equivalente al formalismo basado en la ecuación de Schrödinger, función de onda y operadores. Una de las ventajas de este formalismo para el caso de la partícula libre, por ejemplo, es que la evolución temporal del sistema es simple, y es idéntica a la presentada en el sistema clásico. Esto es despreciado en la formulación estándar de Schrödinger [11].

Transformación de la función de Wigner bajo transformaciones de coordenadas

Consideremos una transformación dada por un operador unitario \hat{U} , definido por las condiciones

$$\hat{U}\hat{q}\hat{U}^{-1} = \hat{q}'(\hat{q}, t), \quad (2.82)$$

donde \hat{q} representa el operador de posición, mientras que \hat{q}' es un operador que depende de \hat{q} y t . La transformación de un estado ψ bajo la acción de operadores unitarios es

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle. \quad (2.83)$$

$\hat{U}^{-1}|q\rangle$ es un eigenestado del operador \hat{q} con eigenvalor $q'(q, t)$, de tal forma que

$$\hat{U}^{-1}|q\rangle = e^{i\beta(q, t)/\hbar} |q'(q, t)\rangle, \quad (2.84)$$

donde, en general, $\beta(q, t)$ corresponde a un parámetro real que depende de q y t . De acuerdo con (2.83), podemos escribir la función de onda transformada como

$$\begin{aligned}\psi'(q) &= \langle q | \hat{U} | \psi \rangle \\ &= e^{i\beta(q,t)/\hbar} \langle q'(q, t) | \psi \rangle \\ &= e^{i\beta(q,t)/\hbar} \psi(q'(q, t)).\end{aligned}\tag{2.85}$$

Podemos escribir la función de Wigner asociada al operador de densidad $\hat{\rho}' = |\psi'\rangle\langle\psi'|$ para el estado ψ' como

$$\begin{aligned}W'(q, p) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy/\hbar} \langle q - y/2 | \psi' \rangle \langle \psi' | q + y/2 \rangle dy \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy/\hbar} \langle q - y/2 | \hat{U} | \psi' \rangle \langle \psi' | \hat{U}^{-1} | q + y/2 \rangle dy \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i[\beta(q-y/2,t) - \beta(q+y/2,t) - py]/\hbar} \\ &\quad \times \psi^*(q'(q+y/2, t)) \psi(q'(q-y/2, t)) dy.\end{aligned}\tag{2.86}$$

Es esencial incluir el parámetro β para expresar la transformación de la función de Wigner únicamente en términos de las nuevas coordenadas. [15]

2.3.3. Relación en el formalismo de Wigner-Weyl

Tomando la función de Wigner

$$W(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy/\hbar} \Psi(q + y/2, t) \Psi^*(q - y/2, t) dy\tag{2.87}$$

para algún estado de la partícula libre Ψ , aplicando sobre esta la transformación de coordenadas (1.6) y (1.10), y la relación entre funciones de onda (2.41), podemos llegar a la función de Wigner

$$W(q', p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip'y/\hbar} \Psi'(q' + y/2, t) \Psi'^*(q' - y/2, t) dy,\tag{2.88}$$

para algún estado de la partícula en un campo uniforme Ψ' , es decir,

$$W(q, p) = W'(q', p').\tag{2.89}$$

El que esta relación no incluya un factor de fase no es de extrañar, si uno integra la función de Wigner con respecto al momento uno obtiene el módulo al cuadrado de la función de onda en el espacio de la posición, o bien, si integramos con respecto a la posición obtenemos el módulo al cuadrado de la función de onda en términos del momento.

Conclusiones

Vemos que a partir de un simple cambio de coordenadas podemos transformar las ecuaciones que describen a una partícula libre en las ecuaciones que describen a una partícula en un campo uniforme en el marco de la Mecánica Clásica y la Mecánica Cuántica.

Cabe recalcar que nos estamos fijando en transformaciones de coordenadas en las que el tiempo no cambia su forma, sin embargo, existen algunos otros ejemplos en los que se combinan espacio y tiempo (vea, por ejemplo las Refs. 1 y 16), por lo que resulta interesante que podamos mimetizar problemas de dificultad mayor con el problema de la partícula libre en el marco clásico y cuántico.

Bibliografía

- [1] G. F. Torres del Castillo, “Relating the free particle with the harmonic oscillator”, *Revista Mexicana de Física*, **71** (2025) 030701. <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.71.030701>
- [2] G. F. Torres del Castillo, *An Introduction to Hamiltonian Mechanics* (Springer, Cham, 2018). Sec. 2.4. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-95225-3>
- [3] G. F. Torres del Castillo, *op. cit.* Sec. 4.1.
- [4] G. F. Torres del Castillo, *op. cit.* Sec. 6.1.
- [5] D. J. Griffiths and D. F. Schroeter, *Introduction to Quantum Mechanics*, 3rd ed. (Cambridge University Press, 2018). Sec. 2.4. <https://doi.org/10.1017/9781316995433>.
- [6] O. Vallée and M. Soares, *Airy Functions and Applications to Physics*, 2nd ed. (Imperial College Press, 2010). Sec. 2.1 and 2.2. <https://doi.org/10.1142/p709>
- [7] K. Gottfried and T.-M. Yan, *Quantum Mechanics: Fundamentals*, 2nd ed. (Springer-Verlag, New York, 2003). Sec. 4.4. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-21623-2>
- [8] O. Vallée and M. Soares, *op. cit.* Sec. 8.1.
- [9] K. Gottfried and T.-M. Yan, *op. cit.* Sec. 2.6.
- [10] D. J. Griffiths and D. F. Schroeter, *op. cit.*, Sec. 6.8.
- [11] W. B. Case, “Wigner functions and Weyl transforms for pedestrians”, *American Journal of Physics*, **76** (2008) 937-946. <https://doi.org/10.1119/1.2957889>
- [12] M. V. Berry and N.L. Balazs, “Nonspreading wave packets”, *American Journal of Physics*, **47** (1979) 264-267. <https://doi.org/10.1119/1.11855>
- [13] R. P. Feynman, A. R. Hibbs and D. F. Styer, “Quantum mechanics and path integrals”, Emended ed., (McGraw-Hill, New York, 2005) Cap. 2 and Cap. 3.
- [14] B. R. Holstein, “The linear potential propagator”, *American Journal of Physics*, **65**, (1997) 414. <http://dx.doi.org/10.1119/1.18550>
- [15] J. Berra Montiel and G. F. Torres del Castillo, “Wigner function under changes of reference frames”, *Revista Mexicana de Física*, **71** (2025) 030702. <https://doi.org/10.31349/RevMexFisE.71.030702>
- [16] G.F. Torres del Castillo, “Relating problems in two dimensions. A particle in a uniform magnetic field and a free particle”, *Revista Mexicana de Física*. (Por publicarse)