

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA IZTAPALAPA
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Teoría cuántica de campos polimérica en el esquema
perturbativo y el propagador del campo escalar
en el régimen de altas energías

Tesis que presenta:
M. en C. Ernesto Flores González.

Para obtener el grado de
Doctor en Ciencias (Física)



Casa abierta al tiempo



Asesor:

Dr. Hugo Aurelio Morales Técotl.

Jurado Calificador:

Presidente: Dr. Alejandro Corichi Rodríguez-Gil

Secretario: Dr. Abel Camacho Quintana

Vocal: Dr. Jerónimo Alonso Cortez Quezada

Vocal: Dr. Hugo Aurelio Morales Técotl

Vocal: Dr. Norberto Aquino Aquino

Ciudad de México, 29 de enero de 2020.

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA IZTAPALAPA
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

"Teoría cuántica de campos polimérica en el esquema
perturbativo y el propagador del campo escalar
en el régimen de altas energías"

Tesis que presenta:
M. en C. Ernesto Flores González.

Para obtener el grado de
Doctor en Ciencias (Física)



Casa abierta al tiempo

Asesor:

Dr. Hugo Aurelio Morales Técotl.

Jurado Calificador:

Presidente: Dr. Alejandro Corichi Rodríguez-Gil

Secretario: Dr. Abel Camacho Quintana

Vocal: Dr. Jerónimo Alonso Cortez Quezada

Vocal: Dr. Hugo Aurelio Morales Técotl

Vocal: Dr. Norberto Aquino Aquino

Ciudad de México, 29 de enero de 2020.

*“El ejecutor de una empresa atroz debe imaginar que ya la ha cumplido,
debe imponerse un porvenir que sea irrevocable como el pasado”*
Jorge Luis Borges

Agradecimientos

Quiero agradecer a la Universidad Autónoma Metropolitana por la beca otorgada para realizar este trabajo de doctorado.

Asimismo, al CONACYT por la beca otorgada a través del proyecto con título “Implicaciones Físicas de la Estructura del Espacio Tiempo” y clave 237351.

Por último, deseo expresar mi agradecimiento a mi padre Ernesto, a mi hermano Héctor y a mis hermanas Monserrat y Andrea por su amor y apoyo incondicional.

Resumen

La mecánica cuántica polimérica está basada en algunas técnicas usadas en gravedad cuántica por lazos y las cuales son adaptadas a sistemas que poseen un número finito de grados de libertad. Ésta ha sido aplicada a los infinitos modos mecánicos de un campo escalar y un campo de Dirac para calcular sus propagadores. En este trabajo empleamos la teoría de perturbaciones en la representación polimérica de un campo escalar libre definido en un espacio-tiempo de Minkowski, y calculamos el propagador a altas energías del campo. De esta forma, revisamos el modelo propuesto por Hossain, Husain y Seahra (HHS), en el cual los grados de libertad mecánicos del campo son considerados como osciladores armónicos poliméricos. En el espacio de momentos la dinámica del oscilador armónico polimérico corresponde a la de un péndulo cuántico, por lo que el hamiltoniano está formado por un término cinético, que se puede asociar con un rotor plano, y un potencial trigonométrico, el cual contiene la escala polimérica discreta. Si consideramos que la escala de energía del oscilador armónico simple tiene valores mayores a cierta energía característica polimérica, el potencial trigonométrico puede ser considerado como una perturbación, así los valores propios y estados propios del oscilador armónico polimérico son calculados como correcciones perturbativas a partir del problema del rotor. Con base en el formalismo hamiltoniano y los resultados perturbativos obtenidos, recobramos el propagador del campo escalar calculado por HHS.

Asimismo, implementamos la integral de trayectoria en la representación polimérica para calcular el propagador a altas energías del campo escalar. Para esto, escribimos el propagador en términos de las funciones de un punto y de dos puntos del oscilador armónico polimérico. Las funciones de un punto y de dos puntos pueden ser calculadas sistemáticamente a cualquier orden mediante la amplitud de transición del rotor y empleando teoría de perturbaciones. Así, recobramos la expresión del propagador del campo, donde el primer término no trivial se da a segundo orden. De esta forma, con la implementación de la teoría de perturbaciones, obtenemos una interpretación diferente del modelo de HHS, el cual está basado en el conocimiento previo de las funciones Mathieu, mientras que nuestra propuesta puede ser extendida a otros problemas, como el caso de campos cuánticos interaccionando. Nuestros resultados han sido reportados en el artículo [1].

Índice general

1. Introducción	8
2. Teoría cuántica del campo escalar real	12
2.1. Teoría cuántica canónica	12
2.2. Descripción mediante osciladores armónicos en la representación de Schrödinger	14
2.3. Propagador mediante la función de dos puntos del oscilador armónico: enfoque hamiltoniano	16
2.4. Propagador mediante la integral de trayectoria del oscilador armónico	19
2.4.1. Integral de trayectoria en mecánica cuántica	19
2.4.2. Amplitud de transición	21
2.4.3. Propagador	22
3. Oscilador armónico polimérico mediante teoría de perturbaciones	31
3.1. Teoría polimérica y el oscilador armónico simple	31
3.1.1. Teoría polimérica	31
3.1.2. Oscilador armónico simple en la representación polimérica	34
3.2. Oscilador armónico polimérico mediante teoría de perturbaciones	35
3.2.1. Rotor plano	35
3.2.2. Teoría de perturbaciones (caso sin degeneración)	37
3.2.3. Teoría de perturbaciones (caso degenerado)	40
3.3. Simetría de paridad y correcciones a primer orden	51
3.4. Función de un punto y de dos puntos en el régimen de rotor: esquema hamiltoniano	52
3.4.1. Función de un punto	53
3.4.2. Función de dos puntos	54
3.5. Propagador del campo escalar polimérico a altas energías: Esquema hamiltoniano	58
4. Oscilador armónico polimérico mediante integral de trayectoria	60
4.1. Amplitud de transición a través de la integral de trayectoria	60
4.2. Amplitud de transición en el régimen del rotor	62
4.3. Amplitud de transición mediante teoría de perturbaciones	64
4.3.1. Corrección a primer orden	64
4.3.2. Corrección a segundo orden	66

4.4. Cálculo explícito de la corrección a primer orden	68
4.5. Cálculo explícito de la corrección a segundo orden	72
5. Campo escalar polimérico e integral de trayectoria	87
5.1. Elementos de matriz de un operador de posición y un producto de dos operadores de posición: planteamiento	87
5.2. Orden cero de los elementos de matriz de un operador de posición y del producto de dos operadores de posición	92
5.3. Primer y segundo orden de los elementos de matriz del operador de posición	93
5.3.1. Corrección a primer orden	93
5.3.2. Corrección a segundo orden	97
5.4. Primer y segundo orden de los elementos de matriz del producto de dos operadores de posición	104
5.4.1. Corrección a primer orden	104
5.4.2. Corrección a segundo orden	107
5.5. Función de un punto y función de dos puntos del oscilador armónico polimérico en el régimen de rotor	115
5.5.1. Función de un punto	116
5.5.2. Función de dos puntos a segundo orden	117
5.6. Propagador del campo escalar polimérico a altas energías: Integral de trayectoria	122
6. Conclusiones y perspectivas	124
6.1. Discusión y conclusiones	124
6.2. Perspectivas	126
A. Función de Wightman del campo escalar en modos de Fourier	127
A.1. Formalismo hamiltoniano	127
A.2. Formalismo de integral de trayectoria	129
B. Teoría de perturbaciones	132
B.1. Teoría de perturbaciones: preliminares.	132
B.2. Caso no degenerado	133
B.3. Caso degenerado apropiado para oscilador armónico polimérico	135
B.3.1. Degeneración removida a primer orden	136
B.3.2. Degeneración removida a segundo orden	138
C. Integrales que contienen $k^{(0)}\varphi$ y $k^{(1)}\varphi$	142
C.1. Caso $k^{(0)}$ y $\varphi = e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \sin(nu_1 - mu_0)$	142
C.2. Caso $k^{(0)}$ y $\varphi = e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \cos(nu_1 - mu_0)$	143
C.3. Caso $k^{(1)}$ y $\varphi = e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \sin(nu_1 - mu_0)$	143
C.4. Caso $k^{(1)}$ y $\varphi = e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \cos(nu_1 - mu_0)$	146
Bibliografía	148

Capítulo 1

Introducción

Uno de los problemas abiertos de la física teórica contemporánea es contar con una descripción cuántica de la gravedad, pues se espera que los aspectos cuánticos de la gravitación permitan resolver dificultades conceptuales y técnicas en los dos hitos de la física del siglo XX: la relatividad general (RG) y la teoría cuántica de campos (TCC).

La dinámica clásica de la gravedad es bien entendida mediante la RG, sin embargo, hay situaciones extremas, llamadas singularidades de la RG, que son singularidades del espacio-tiempo mismo, donde la teoría es incapaz de ofrecer una explicación, como sucede en el universo temprano, llamado “Big Bang”, o en los agujeros negros [2]. Simultáneamente, se encuentra el problema de las divergencias ultravioletas e infrarrojas de la TCC. En particular, las divergencias ultravioletas requieren un esquema de renormalización para determinar cantidades físicas con un valor finito. Notemos que estas divergencias están relacionadas con el carácter continuo del espacio-tiempo [3], el cual además es un espacio-tiempo preestablecido. Es interesante que también en las singularidades de la RG se ha supuesto que el espacio-tiempo es continuo.

Entre las propuestas más desarrolladas de teorías cuánticas de la gravedad destacan la teorías de cuerdas y branas [4], así como la gravedad cuántica por lazos (GCL) [5, 6]. Mientras que en las primeras las excitaciones de las cuerdas y branas, en diferentes dimensiones, están en correspondencia con las partículas conocidas y muchas otras, la segunda se caracteriza por formularse en un esquema que no parte de un espacio-tiempo preestablecido, y que tiene como consecuencia un carácter discreto en el espectro de operadores geométricos como longitud, área o volumen. Estas propiedades de la GCL resultan de la definición de los estados cuánticos de la gravedad, los cuales son etiquetados por gráficos abstractos y aristas interconectadas por vértices. A tales estados cuánticos se les ha denominado redes de espín. Entre los avances más importantes de la gravedad cuántica por lazos destacan el cálculo de la entropía de agujeros negros [7, 8], la resolución de la singularidad o “Big Bang” de modelos cosmológicos [9, 10], así como la de un agujero negro [11].

Por otra parte, debido a la complejidad que presenta construir la GCL, resulta conveniente explorar modelos más sencillos que la gravedad, por ejemplo modelos con un número finito de grados de libertad, donde se implemente parte del marco teórico de la GCL, con el fin de vislumbrar soluciones a problemas más complicados. Es notable que el modelo de Friedmann-Lemaître-Robertson-Walker tenga grados de libertad de este tipo,

aunque su dinámica está gobernada por la gravedad. De esta forma surge la cosmología cuántica por lazos realizando la cuantización a la lazos de este modelo cósmico [12]. Asimismo, se ha empleado la cuantización polimérica en ámbitos que incluyen campos cuánticos [13, 14, 15, 16, 17, 18] y modelos mecánicos [19, 20, 21, 22, 23, 24, 25].

En los sistemas mecánicos, de particular interés ha sido establecer las diferencias así como la relación que guardan este tipo de cuantización y la de Schrödinger [19]. La representación polimérica, como consecuencia de su construcción, cuenta de forma natural con un parámetro libre, el cual puede interpretarse que está relacionado con la longitud de Planck y con una posible naturaleza discreta del espacio-tiempo. De esta forma, al asociar este parámetro con la longitud de Planck y compararlo con algún parámetro característico del sistema, nos permite establecer el límite de bajas energías de la representación polimérica, y por medio del cual, podemos relacionar esta representación con la de Schrödinger [19, 25]. Por otro lado, también se ha propuesto implementar un esquema de renormalización para relacionar estas dos representaciones, siendo el parámetro libre ahora interpretado como parámetro de renormalización [26, 23]. En esta propuesta el esquema de renormalización posibilita definir el límite continuo de la representación polimérica, que resulta ser la representación de Schrödinger. También se ha visto que es posible recuperar la covarianza Galileana de la teoría de Schrödinger con un apropiado límite de bajas energías en la representación polimérica [20]. Asimismo, inspirados por la resolución de la singularidad en los modelos cósmicos cuánticos por lazos, algunos autores han estudiado el comportamiento de potenciales singulares tales como $\frac{1}{r}$ y $\frac{1}{r^2}$ [21, 22].

Además, se ha desarrollado un tratamiento semejante al introducido por Feynman cuando definió la integral de trayectoria [27], con la finalidad de estudiar la amplitud de transición de algunos modelos cósmicos poliméricos [28, 29, 30]. En este tratamiento se combinan dos elementos primordiales de estos modelos: la invariancia por reparametrizaciones temporales, consecuencia del carácter relativista, y la cuantización polimérica. Para atender el primero se incorpora la llamada técnica de promedio en el grupo, como un mecanismo para extraer funciones de correlación que son invariantes bajo el grupo de reparametrizaciones temporales. El segundo elemento, el polimérico, se incorpora en la implementación de la integral de trayectoria del propagador. Asimismo, la integral de trayectoria polimérica ha sido aplicada a la teoría de un campo escalar [31], para obtener la fórmula de Feynman, es decir, para expresar la amplitud de transición en términos de una acción, la cual no es la estándar. Cabe mencionar que esa línea de trabajo presenta diferencias esenciales con el nuestro: Primero, los modos mecánicos del campo en los que se realiza la integral de trayectoria polimérica son distintos. Segundo, En el trabajo [31] sólo se formula la amplitud de transición en términos de la acción, en nuestro trabajo calculamos de forma explícita el propagador. Por otra parte, también se han estudiado sistemas mecánicos en la integral de trayectoria polimérica, como lo son el oscilador armónico polimérico (OAP) [32, 33], una partícula libre relativista [34], así como el caso del potencial $\frac{1}{r^2}$ [35].

En el contexto de la TCC, algunos de los modelos que se han explorado ha sido a través de un esquema hamiltoniano y parten de un espacio-tiempo clásico preestablecido, así el análisis se ha centrado en las consecuencias que resultan de emplear la teoría polimérica exclusivamente en los grados de libertad de materia. Parte de la motivación

de trabajar con estos modelos es tratar de estudiar el posible comportamiento de los campos a altas energías con modelos sencillos. Entre los aspectos que se han analizado con un campo escalar polimérico están la propagación de ondas sobre un espacio-tiempo de Minkowski [13], así como la cuantización de un campo escalar en un espacio-tiempo clásico homogéneo e isótropo, permitiendo definir una ecuación semiclásica de Friedmann con un universo que no es singular ni rebotante; lo anterior sin cuantizar la gravedad [14]. También se ha introducido un campo escalar polimérico en modelos de colapso gravitacional, donde se hallaron propiedades como evaporación del horizonte y la evasión de la singularidad, nuevamente sin un espacio-tiempo cuántico [16]. Además se estudió la generación de fluctuaciones primordiales en un universo inflacionario de de Sitter, aquí la dinámica del campo escalar es gobernada por la cuantización polimérica a través de los modos de Fourier del campo. Para elecciones razonables del parámetro polimérico se encuentra que los efectos poliméricos no son detectables en el espectro angular de potencias del Fondo de Radiación Cósmica (CMB) [17].

De particular interés ha sido el trabajo de Hossain *et al* [15], donde se incluye un aspecto intuitivo para el cálculo del propagador del campo escalar. Esto consiste en utilizar un desarrollo en modos de Fourier del campo escalar, que satisface condiciones de frontera periódicas, además se introducen variables adecuadas para aplicar la teoría polimérica a los grados de libertad mecánicos que el campo presenta en cada punto. Por consiguiente, resulta que el campo está formado por una torre de osciladores poliméricos (péndulos cuánticos), de esta forma se puede evaluar el propagador polimérico mediante los valores propios y estados propios del hamiltoniano del OAP. Este propagador es una serie que presenta dos formas asintóticas comúnmente llamadas la aproximación en el régimen de rotor y la aproximación en el régimen de oscilador; estas aproximaciones presentan comportamientos diferentes al propagador estándar del campo escalar en los límites infrarrojo y ultravioleta, aunque el régimen de oscilador se puede relacionar con el propagador estándar del campo escalar. Asimismo, la covarianza de Lorentz del propagador polimérico no se tiene aún entendida cuando el parámetro polimérico es diferente de cero. De esta forma, inspirados en el propagador del campo escalar polimérico [15], se inició el estudio del papel que juega la causalidad en la teoría polimérica del campo escalar [36]. El análisis no fue conclusivo. También, se ha mostrado que este modelo polimérico del campo escalar predice que el efecto Unruh a altas energías desaparece [37] y que un observador inercial puede detectar radiación [38]. Igualmente, utilizando la descomposición del campo en modos mecánicos se ha calculado el propagador del campo de Dirac polimérico [18].

Sin embargo, un aspecto a subrayar en el análisis hecho en [15], es que está basado en el conocimiento previo de los valores propios y estados propios del OAP, que resultan ser los valores característicos de las ecuación de Mathieu y las funciones senos y cosenos elípticos, respectivamente [19], y que además son la causa de que el propagador polimérico presente dos formas asintóticas, como hemos mencionado anteriormente. De esta forma, un par de características de este análisis son: que está ligado a la teoría de un campo escalar libre y que la metodología subyacente a las dos formas asintóticas de la expresión del propagador polimérico requiere mayor estudio. Estas propiedades del modelo de [15], no permiten su inmediata extensión a otras teorías de campo, ni a otros aspectos de a TCC, como la simetría de Lorentz o el esquema de renormalización.

En el presente trabajo [1] hacemos un análisis complementario del propagador de un campo escalar polimérico a altas energías [15]. Específicamente, implementamos la teoría de perturbaciones en el formalismo hamiltoniano y de integral de trayectoria para la obtención del propagador. Nuestra propuesta es emplear el método perturbativo en la teoría del campo escalar polimérico, el cual se podría utilizar para dilucidar la invariancia de Lorentz de la teoría, o estudiar el esquema de renormalización en la teoría de un campo escalar con una autointeracción de la forma $\lambda\phi^4$. Es importante enfatizar que la expresión analítica del propagador permite estudiar estos aspectos en la TCC usual. Por esta razón, remarcamos que es importante investigar si hay una metodología que podamos incorporar en la evaluación del propagador polimérico, ya que un esquema sistemático se podría extender en el estudio de otros aspectos de la TCC.

Por otra parte, es bien conocido que en la TCC estándar, la integral de trayectoria ofrece ventajas respecto al esquema hamiltoniano, por ejemplo, ser un esquema explícitamente covariante, o facilitar el cálculo de propagadores. Por este motivo, es válido plantearse el análisis del campo escalar mediante la integral de trayectoria polimérica. Además, si consideramos que hasta ahora, dentro de integral de trayectoria polimérica, lo que se ha estudiado en los modelos cósmicos, en los sistemas mecánicos y en el mismo campo escalar, es únicamente la amplitud de transición, entonces resulta interesante plantear el cálculo de otras cantidades, como valores de expectación, donde el camino a seguir no es del todo claro. Por tanto, estudiar el propagador del campo escalar en este formalismo tiene su propia justificación, nuestro trabajo es la primera propuesta en esta dirección [1].

La estructura de la tesis es como sigue. En el capítulo 2 discutimos el propagador del campo escalar real en el formalismo hamiltoniano y de integral de trayectoria. El campo escalar presenta la particularidad de estar expresado en los modos de Fourier convenientes para introducir posteriormente la representación polimérica. En seguida, en el capítulo 3, resolvemos el OAP en el régimen de rotor mediante teoría de perturbaciones, y a partir de estas soluciones calculamos el propagador del campo escalar polimérico en esta aproximación. En el capítulo 4 formulamos la amplitud de transición del OAP como una serie donde los términos dependen de la amplitud de transición del rotor, esto es resultado de implementar la integral de trayectoria y teoría de perturbaciones en el régimen de rotor del OAP. Además, calculamos explícitamente hasta segundo orden esta amplitud de transición. En el capítulo 5 planteamos la función de un punto y la de dos puntos del OAP como series, que son obtenidas a través del desarrollo perturbativo de la amplitud de transición del OAP y la integral de trayectoria. Calculamos hasta segundo orden la función de un punto y de dos puntos del OAP y volvemos a establecer el propagador del campo escalar polimérico en el régimen de rotor. Por último, en capítulo 6 hacemos una discusión del trabajo y los resultados obtenidos, incluimos nuestras conclusiones y las limitaciones sobre estos resultados, así como posibles perspectivas.

Capítulo 2

Teoría cuántica del campo escalar real

En este capítulo presentamos algunos aspectos de la teoría cuántica estándar de un campo escalar real, esto con la finalidad de introducir los elementos que nos permiten definir el modelo de un campo escalar polimérico así como notar las diferencias entre la teoría canónica y el modelo polimérico. En primer lugar discutimos la teoría cuántica canónica del campo escalar. Después estudiamos la descripción en modos de Fourier del campo, donde los modos son elegidos de tal forma que el hamiltoniano del campo escalar resulta ser la suma de osciladores armónicos simples descritos en variables reales. Por último, basados en esta descripción en modos de Fourier del campo, calculamos su propagador en el formalismo hamiltoniano y de integral de trayectoria.

2.1. Teoría cuántica canónica

En el espíritu de este trabajo, presentamos de forma sucinta la cuantización canónica del campo escalar real, con el propósito de notar las diferencias con la propuesta que seguiremos en esta tesis [15, 18, 39]. En esta sección mencionaremos algunas nociones de la teoría clásica de un campo escalar real y después formularemos la teoría cuántica del campo. Para esto nos basaremos en [40]. Sabemos que la acción del campo escalar está dado por

$$S = \frac{1}{2} \int d^4x (\eta^{\mu\nu} \partial_\mu \phi \partial_\nu \phi - M^2 \phi^2), \quad (2.1)$$

donde se ha hecho $c = \hbar = 1$, y se considera que $\eta_{\mu\nu}$ sea la métrica de Minkowski: $\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(+1, -1, -1, -1)$. La densidad lagrangiana está dada por

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[\dot{\phi}(x)^2 - (\nabla \phi(x))^2 - M^2 \phi(x)^2 \right]. \quad (2.2)$$

Con lo que, si consideramos la definición usual del momento conjugado del campo, éste queda como

$$\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = \dot{\phi}(x). \quad (2.3)$$

Con estos aspectos de la teoría lagrangiana del campo escalar podemos estudiar la teoría hamiltoniana. Podemos obtener la densidad hamiltoniana mediante una transformación de Legendre de la densidad lagrangiana (2.2) y considerando su momento

conjugado (2.3):

$$\mathcal{H}(x) = \pi(x)\dot{\phi}(x) - \mathcal{L}(x) = \frac{1}{2} [\pi(x)^2 + (\nabla\phi(x))^2 + M^2\phi(x)^2]. \quad (2.4)$$

Además, los corchetes de Poisson para el campo escalar resultan ser

$$\{\phi(t, \mathbf{x}), \pi(t, \mathbf{y})\} = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \{\phi(t, \mathbf{x}), \phi(t, \mathbf{y})\} = \{\pi(t, \mathbf{x}), \pi(t, \mathbf{y})\} = 0. \quad (2.5)$$

Con esta información de la teoría clásica del campo escalar podemos referirnos a su teoría cuántica. La idea es promover el campo escalar y su momento conjugado, $\phi(x)$ y $\pi(x)$, a operadores: $\hat{\phi}(x)$ y $\hat{\pi}(x)$, así como los corchetes de Poisson (2.5) a conmutadores

$$[\hat{\phi}(t, \mathbf{x}), \hat{\pi}(t, \mathbf{y})] = i\delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad [\hat{\phi}(t, \mathbf{x}), \hat{\phi}(t, \mathbf{y})] = [\hat{\pi}(t, \mathbf{x}), \hat{\pi}(t, \mathbf{y})] = 0. \quad (2.6)$$

Si evaluamos el conmutador del campo $\hat{\phi}(x)$, así como del momento $\hat{\pi}(x)$, con el hamiltoniano \hat{H} , el cual es la integral de volumen en el espacio de la densidad hamiltoniana (2.4), veremos que el campo $\hat{\phi}(x)$ obedece la ecuación de Klein-Gordon

$$\ddot{\hat{\phi}}(t, \mathbf{x}) = (\nabla^2 - M^2)\hat{\phi}(t, \mathbf{x}). \quad (2.7)$$

De esta forma, se propone una solución que es un desarrollo de ondas planas

$$\hat{\phi}(t, \mathbf{x}) = \int d^3p N_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \hat{a}_{\mathbf{p}}(t). \quad (2.8)$$

Sustituyendo las soluciones de ondas planas (2.8) en la ecuación de Klein-Gordon (2.7), podemos deducir una ecuación diferencial para $\hat{a}_{\mathbf{p}}(t)$, que es la ecuación de un oscilador armónico simple (OAS), cuya solución es

$$\hat{a}_{\mathbf{p}}(t) = \hat{a}_{\mathbf{p}}^{(1)} e^{-i\omega_{\mathbf{p}}t} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^{(2)} e^{i\omega_{\mathbf{p}}t}, \quad (2.9)$$

con $\omega_{\mathbf{p}} = \sqrt{\mathbf{p}^2 + M^2}$, la frecuencia del OAS. Si tomamos en cuenta que el campo escalar es real, deducimos que $(\hat{a}_{\mathbf{p}}^{(1)})^\dagger = \hat{a}_{-\mathbf{p}}^{(2)}$, además, si hacemos $N_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega_{\mathbf{p}}}}$, podemos mostrar que los operadores $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ cumplen el álgebra de los operadores escalera

$$[\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}'}^\dagger] = \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad [\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}'}] = [\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{p}'}^\dagger] = 0. \quad (2.10)$$

Por consiguiente, los operadores del campo y su momento pueden escribirse en términos de los operadores escalera mediante las soluciones de onda planas

$$\hat{\phi}(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{p}}}} (\hat{a}_{\mathbf{p}} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{p}}t)} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{p}}t)}), \quad (2.11)$$

$$\hat{\pi}(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} (-i) \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{p}}}{2}} (\hat{a}_{\mathbf{p}} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{p}}t)} - \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{p}}t)}). \quad (2.12)$$

La ecuación (2.11) es la razón por la que el campo escalar puede ser interpretado como un conjunto de osciladores armónicos, pues, como se dijo, los operadores $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ y $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger$ satisfacen el álgebra de los operadores de creación y aniquilación (2.10). Esta visualización del campo como un conjunto de osciladores armónicos la analizaremos en una forma diferente en la siguiente sección, la idea será cuantizar cada OAS en la representación de Schrödinger.

2.2. Descripción mediante osciladores armónicos en la representación de Schrödinger

En el presente trabajo hacemos énfasis en la idea de un campo escalar real conformado por un conjunto de osciladores armónicos simples. En esta sección estudiamos un esquema que pudiéramos seguir para cuantizar a cada oscilador del campo en la representación de Schrödinger; a diferencia de lo que es más común en la literatura [40, 41, 3], donde los osciladores del campo son cuantizados en la representación de Fock, como vimos en la sección 2.1. La finalidad es estudiar una propuesta que nos permita implementar la cuantización polimérica en la teoría de campos. La cuantización polimérica se lleva a cabo siguiendo más el espíritu de la cuantización a la Schrödinger, que de la cuantización a la Fock, es decir, el álgebra básica de operadores está formada por operadores de posición y de traslaciones¹, y no a través de operadores escalera \hat{a} y \hat{a}^\dagger . Por tanto, es adecuado describir el campo escalar clásico como un cúmulo de osciladores armónico en variables canónicas.

Definimos el campo dentro de una caja de volumen $V = L^3$ con condiciones de frontera periódicas, de esta forma, el campo y su momento conjugado puede escribirse como desarrollos de Fourier:

$$\phi(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} \phi_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}}, \quad \pi(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} \pi_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}}, \quad (2.13)$$

donde $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$ con $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$. Se debe cumplir que el campo ϕ sea real, de lo que obtenemos las condiciones de realidad:

$$\phi_{\mathbf{k}}^* = \phi_{-\mathbf{k}}, \quad \text{y} \quad \pi_{\mathbf{k}}^* = \pi_{-\mathbf{k}}. \quad (2.14)$$

Si tomamos en cuenta el desarrollo de Fourier del campo y su momento conjugado (2.13), en el hamiltoniano del campo escalar, que es la integral de volumen de la densidad hamiltoniana (2.4), obtenemos un hamiltoniano expresado en modos de Fourier:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} [\pi_{\mathbf{k}} \pi_{\mathbf{k}}^* + \omega_{\mathbf{k}}^2 \phi_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^*], \quad \text{donde} \quad \omega_{\mathbf{k}}^2 = \mathbf{k}^2 + M^2, \quad (2.15)$$

siendo $\omega_{\mathbf{k}}$ la frecuencia de cada modo. Además, podemos evaluar los corchetes de Poisson (2.5) en términos de los modos de Fourier $\phi_{\mathbf{k}}$ y $\pi_{\mathbf{k}}$. Para esto, debemos invertir los desarrollos de Fourier (2.13) usando

$$\int_V d^3 \mathbf{x} e^{i\mathbf{x} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}')} = V \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \quad (2.16)$$

y evaluar los corchetes de Poisson, así obtenemos

$$\{\phi_{\mathbf{k}}, \pi_{\mathbf{k}'}\} = \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'}, \quad \{\phi_{\mathbf{k}}, \phi_{\mathbf{k}'}\} = \{\pi_{\mathbf{k}}, \pi_{\mathbf{k}'}\} = 0. \quad (2.17)$$

Lo que seguiría sería cuantizar los modos $\phi_{\mathbf{k}}$ y $\pi_{\mathbf{k}}$ en la representación de Fock; pero si en lugar de esto, quisiéramos cuantizar los modos de Fourier en la representación

¹Vea el capítulo 3

de Schrödinger, habría un par de inconvenientes: Primero, los modos $\phi_{\mathbf{k}}$ y $\pi_{\mathbf{k}}$ son complejos. Si queremos proceder tal que los modos $\phi_{\mathbf{k}}$ y $\pi_{\mathbf{k}}$ actúen como operadores de posición y momento, respectivamente; necesitamos variables reales. Segundo, en el primer corchete de Poisson en la ecuación (2.17), vemos que el modo $\phi_{\mathbf{k}}$ está acoplado con el momento $\pi_{-\mathbf{k}}$, esto significa que los modos no son independientes, mientras que nosotros quisiéramos cuantizar osciladores armónicos desacoplados. Por consiguiente, en este punto nos separamos de la cuantización usual de los modos de Fourier $\phi_{\mathbf{k}}$ y $\pi_{\mathbf{k}}$, y seguiremos una ruta alterna para introducir la representación de Schrödinger.

De esta forma, para obtener una teoría en variables reales y con osciladores desacoplados, haremos una transformación de los modos de Fourier [42], pero antes necesitamos señalar que el espacio de momentos, el \mathbf{k} -espacio, al ser una red regular tridimensional, la cual nombramos \mathcal{L} , puede ser dividido en tres subconjuntos disjuntos:

$$\mathcal{L}^+ = \{\mathbf{k} : k_3 > 0\} \cup \{\mathbf{k} : k_3 = 0, k_2 > 0\} \cup \{\mathbf{k} : k_3 = 0, k_2 = 0, k_1 > 0\}, \quad (2.18)$$

$$\mathcal{L}^- = \{\mathbf{k} : -\mathbf{k}, \mathbf{k} \in \mathcal{L}^+\}, \quad (2.19)$$

$$\{\mathbf{0}\}. \quad (2.20)$$

Aquí es claro que $\mathcal{L} = \mathcal{L}^+ \cup \mathcal{L}^- \cup \{\mathbf{0}\}$. Así, introducimos la ya mencionada transformación en los modos de Fourier

$$\phi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_{\mathbf{k}} + iq_{-\mathbf{k}}), \quad \pi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_{\mathbf{k}} + ip_{-\mathbf{k}}), \quad \text{con } \mathbf{k} \in \mathcal{L}^+, \quad \phi_{\mathbf{0}} = q_{\mathbf{0}}, \quad \pi_{\mathbf{0}} = p_{\mathbf{0}}. \quad (2.21)$$

Entonces, si evaluamos la ecuación (2.21) en la ecuación (2.15) obtenemos un hamiltoniano compuesto de osciladores armónicos desacoplados:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} [p_{\mathbf{k}}^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2 q_{\mathbf{k}}^2]. \quad (2.22)$$

Asimismo, los corchetes de Poisson son

$$\{q_{\mathbf{k}}, p_{\mathbf{k}'}\} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \quad \{q_{\mathbf{k}}, q_{\mathbf{k}'}\} = \{p_{\mathbf{k}}, p_{\mathbf{k}'}\} = 0. \quad (2.23)$$

Así, el hamiltoniano (2.22) y el corchete de Poisson (2.23) corresponden a un cúmulo de osciladores desacoplados, que era lo que buscábamos.

Por último, mencionaremos de forma muy breve algunos aspectos de la teoría cuántica. Definiremos la teoría cuántica a partir de los modos independientes $q_{\mathbf{k}}$ y $p_{\mathbf{k}}$. De las ecuaciones del hamiltoniano (2.22) y el corchete de Poisson (2.23) vemos que podemos definir la teoría cuántica del campo escalar mediante la teoría cuántica de un oscilador armónico simple. El espacio de Hilbert de la teoría de campo sería el producto tensorial del espacio de Hilbert asociado a cada modo:

$$\mathcal{H}_{\phi} = \bigotimes_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} L^2(q_{\mathbf{k}}, dq_{\mathbf{k}}),$$

donde $L^2(q_{\mathbf{k}}, dq_{\mathbf{k}})$ representa el espacio de funciones cuadrado integrables, $-\infty < q_{\mathbf{k}} < \infty$, en la medida de Lebesgue, $dq_{\mathbf{k}}$. A su vez, los operadores $\hat{q}_{\mathbf{k}}$ y $\hat{p}_{\mathbf{k}}$ pueden ser representados en $L^2(q_{\mathbf{k}}, dq_{\mathbf{k}})$, tal que uno actúa en forma diagonal y el otro como derivada:

$$\hat{q}_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}}(q_{\mathbf{k}}) = q_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}}(q_{\mathbf{k}}), \quad \hat{p}_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}}(q_{\mathbf{k}}) = -i\partial_{q_{\mathbf{k}}}\psi_{\mathbf{k}}(q_{\mathbf{k}}). \quad (2.24)$$

Estos serían algunos elementos para una descripción cinemática del campo escalar en esta representación de Schrödinger. La dinámica, la parte donde resolvemos la ecuación de valores propios del hamiltoniano, corresponde a la del OAS en la representación de Schrödinger [43].

Debemos notar que al no trabajar con los modos originales $\phi_{\mathbf{k}}$ y $\pi_{\mathbf{k}}$, la teoría cuántica en los modos independientes $q_{\mathbf{k}}$ y $p_{\mathbf{k}}$, en principio, es diferente a la teoría cuántica estándar de Fock y de Schrödinger del campo escalar. Nosotros no hemos hecho un análisis sobre la relación de estas teorías cuánticas, pero existe literatura que podría esclarecer esta relación en el futuro [40, 44, 45]. Por otra parte, como veremos en las próximas secciones, es posible obtener el propagador estándar del campo escalar en esta descripción en modos independientes, tanto en el formalismo hamiltoniano como en el de integral de trayectoria. Esto nos indica que la teoría cuántica que estamos definiendo en los modos $q_{\mathbf{k}}$ y $p_{\mathbf{k}}$, podría ser equivalente a la teoría cuántica usual del campo escalar en la representación de Fock o de Schrödinger.

2.3. Propagador mediante la función de dos puntos del oscilador armónico: enfoque hamiltoniano

En esta sección calcularemos el propagador del campo escalar real, el cual es la función de Green de la ecuación de Klein-Gordon (2.7), pero lo haremos utilizando los modos $q_{\mathbf{k}}$, nuestro análisis complementa los hechos en [15, 18]. El propagador se define como el valor de expectación en el estado de vacío del producto de dos campos evaluados en diferentes puntos del espacio-tiempo [40, 41]:

$$\Delta_{\text{F}} = \left\langle \Omega \left| \hat{T} \left[\hat{\phi}(t, \mathbf{x}) \hat{\phi}(t', \mathbf{x}') \right] \right| \Omega \right\rangle, \quad (2.25)$$

en la expresión anterior $|\Omega\rangle$ es el estado de vacío del campo y \hat{T} es el operador de ordenamiento temporal.

Para evaluar la anterior expresión usando los modos de Fourier $q_{\mathbf{k}}$, recordemos que el estado de vacío del campo lo definimos como el producto tensorial de los estados base de los modos $q_{\mathbf{k}}$: $|\Omega\rangle = \bigotimes_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} |0_{\mathbf{k}}\rangle$, donde $|0_{\mathbf{k}}\rangle$ representa el estado base asociado al modo $q_{\mathbf{k}}$. En la representación de Schrödinger el estado base $|0_{\mathbf{k}}\rangle$ tiene la forma [43, 46]

$$|0_{\mathbf{k}}\rangle = \int dq_{\mathbf{k}} \Psi_{0\mathbf{k}}(q_{\mathbf{k}}) |q_{\mathbf{k}}\rangle, \quad \text{con} \quad \Psi_{0\mathbf{k}}(q_{\mathbf{k}}) = \left(\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}} q_{\mathbf{k}}^2}{2}}. \quad (2.26)$$

Además, si consideramos el ordenamiento temporal $t > t'$, el propagador del campo (2.25) es la función Wightman de frecuencias positivas, que de acuerdo a el Apéndice A.1 se puede escribir como

$$\langle \Omega | \hat{\phi}(t, \mathbf{x}) \hat{\phi}(t', \mathbf{x}') | \Omega \rangle = \frac{1}{V} \left\{ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^+ \cup \{0\}} M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} D_{\mathbf{k}}(t) D_{\mathbf{k}'}(t') + \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} D_{\mathbf{k}}(t, t') \right\}, \quad (2.27)$$

con

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} M_{\mathbf{k}\mathbf{k}} = -2 \sin((\mathbf{x} + \mathbf{x}') \cdot \mathbf{k}), \mathbf{k} \in \mathcal{L}^+ \cup \{0\}, \\ M_{\mathbf{k}0} = \sqrt{2} (\cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}) - \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k})), \mathbf{k} \in \mathcal{L}^+, \\ M_{0\mathbf{k}'} = \sqrt{2} (\cos(\mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}') - \sin(\mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}')), \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^+, \\ M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 2 (\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}') - \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}')), \mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^+, \mathbf{k} \neq \mathbf{k}', \end{cases}$$

y

$$D_{\mathbf{k}}(t) = \langle 0_{\mathbf{k}} | q_{\mathbf{k}}(t) | 0_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.28)$$

$$D_{\mathbf{k}}(t, t') = \langle 0_{\mathbf{k}} | \hat{q}_{\mathbf{k}}(t) \hat{q}_{\mathbf{k}}(t') | 0_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (2.29)$$

La expresión (2.27) corresponde a la función Wightman de frecuencias positivas en términos de la función de un punto y de dos puntos, $D_{\mathbf{k}}(t)$ y $D_{\mathbf{k}}(t, t')$, respectivamente, de los modos $q_{\mathbf{k}}$.

Para evaluar la función Wightman (2.27), recordemos que estamos considerando el modo $q_{\mathbf{k}}$ como operador de posición (2.24), por consiguiente, la representación del campo escalar que estamos haciendo es compatible con las propiedades de paridad del OAS [43, 46] en los modos $q_{\mathbf{k}}$. Así, el operador $q_{\mathbf{k}}$ es un operador impar mientras que el hamiltoniano correspondiente en (2.22) es par. Entonces, el operador $q_{\mathbf{k}}(t)$, impar, y los vectores propios del hamiltoniano tienen paridad definida. De esta forma, los valores de expectación del operador $q_{\mathbf{k}}(t)$ en los vectores propios del hamiltoniano serán nulos, en particular, la función de un punto, ecuación (2.28), será

$$D_{\mathbf{k}}(t) = 0.$$

Lo que permite reducir la función Wightman de frecuencias positivas, ecuación (2.27), a

$$\langle \Omega | \hat{\phi}(t, \mathbf{x}) \hat{\phi}(t', \mathbf{x}') | \Omega \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} D_{\mathbf{k}}(t, t'), \quad (2.30)$$

donde $D_{\mathbf{k}}(t, t')$ representa la función de dos puntos del OAP, ecuación (2.29), con $t > t'$. Este resultado nos permite calcular la función de Wightman mediante la función de dos puntos del OAS.

Entonces, para calcular la función de Wightman, ecuación (2.30), nos enfocaremos en la función de dos puntos del OAS (2.29). Si evaluamos en dos ocasiones la relación

de cerradura de los vectores propios del hamiltoniano del OAS hallamos para (2.29)

$$\begin{aligned}
 D_{\mathbf{k}}(t, t') &= \sum_{n_{\mathbf{k}}, m_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} \langle 0_{\mathbf{k}} | e^{it\hat{H}_{\mathbf{k}}}\hat{q}_{\mathbf{k}}e^{-i(t-t')\hat{H}_{\mathbf{k}}}\hat{q}_{\mathbf{k}}e^{-it'\hat{H}_{\mathbf{k}}} | 0_{\mathbf{k}} \rangle \\
 &= \sum_{n_{\mathbf{k}}, m_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} e^{iE_{0\mathbf{k}}(t-t')} \langle 0_{\mathbf{k}} | \hat{q}_{\mathbf{k}} | n_{\mathbf{k}} \rangle \langle n_{\mathbf{k}} | e^{-i(t-t')\hat{H}_{\mathbf{k}}} | m_{\mathbf{k}} \rangle \langle m_{\mathbf{k}} | \hat{q}_{\mathbf{k}} | 0_{\mathbf{k}} \rangle \\
 &= \sum_{m_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} e^{-i(E_{m_{\mathbf{k}}}-E_{0\mathbf{k}})(t-t')} | \langle m_{\mathbf{k}} | \hat{q}_{\mathbf{k}} | 0_{\mathbf{k}} \rangle |^2 .
 \end{aligned}$$

Para el OAS se tienen las siguiente identidades [43]: $\hat{q}_{\mathbf{k}} | 0_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} | 1_{\mathbf{k}} \rangle$, además de $E_{1\mathbf{k}} - E_{0\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{k}}$, así la función de dos puntos del OAS llega a ser

$$\begin{aligned}
 D_{\mathbf{k}}(t, t') &= \sum_{m_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} e^{-i(E_{m_{\mathbf{k}}}-E_{0\mathbf{k}})(t-t')} | \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \langle m_{\mathbf{k}} | 1_{\mathbf{k}} \rangle |^2 \\
 &= \sum_{m_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} e^{-i(E_{m_{\mathbf{k}}}-E_{0\mathbf{k}})(t-t')} | \delta_{m_{\mathbf{k}}, 1_{\mathbf{k}}} |^2 \\
 &= \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')} .
 \end{aligned} \tag{2.31}$$

La función de Wightman de frecuencias positivas (2.30) llega a ser

$$\langle \Omega | \hat{\phi}(t, \mathbf{x})\hat{\phi}(t', \mathbf{x}') | \Omega \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} \frac{e^{-i[\omega_{\mathbf{k}}(t-t')-\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')]}}{2\omega_{\mathbf{k}}} . \tag{2.32}$$

La función Wightman (2.32) se relaciona con el propagador de Feynman escribiendo la exponencial $e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')}$ de la siguiente forma

$$e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')} = \frac{1}{2\pi} \int_C d\chi \frac{2i\omega_{\mathbf{k}}e^{-i\chi(t-t')}}{\omega_{\mathbf{k}}^2 - \chi^2 - i\epsilon} , \tag{2.33}$$

donde el signo de $i\epsilon$ corresponde al propagador de Feynman en espacio de momentos [3]. Si realizamos la integral considerando el contorno C definido en la mitad inferior del plano complejo, que encierra el polo $\chi = \omega_{\mathbf{k}} - i\delta$ (vea la figura 2.1), recuperamos la función $e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')}$. Existe otra contribución que se obtiene al considerar el contorno C' definido en la mitad superior del plano complejo en (2.33), que encierra el polo $\chi = -\omega_{\mathbf{k}} + i\delta$ (vea la figura 2.1), esta contribución es $e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t'-t)}$, siendo $t' > t$, la cual es parte de la función de Wightman de frecuencias negativas.

De esta forma, combinando (2.31) y (2.33) el propagador de Feynman será

$$\begin{aligned}
 D_{\mathbf{k}}(t, t') &= \frac{1}{2\pi} \int_C d\chi D_p e^{-i\chi(t-t')} \\
 \Rightarrow D_p &= \frac{-i}{p^2 - M^2 + i\epsilon} ,
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

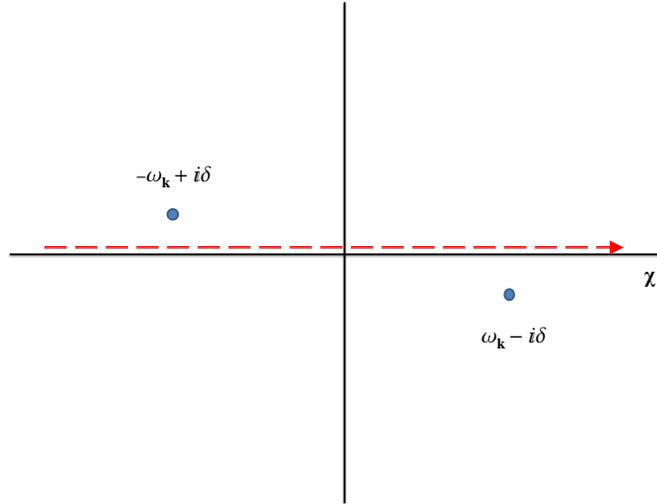


Figura 2.1: Contorno de integración del propagador de Feynman

donde consideramos $p = (\chi, \mathbf{k})$, $p^2 = \chi^2 - |\mathbf{k}|^2$ y $\omega_{\mathbf{k}}^2 = \mathbf{k}^2 + M^2$.

En la próxima sección volveremos a obtener la expresión del propagador del campo escalar (2.34), pero esta vez emplearemos la integral de trayectoria en los modos de Fourier $q_{\mathbf{k}}$.

2.4. Propagador mediante la integral de trayectoria del oscilador armónico

En esta sección calcularemos el propagador del campo escalar mediante la integral de trayectoria de los modos de Fourier $q_{\mathbf{k}}$. Antes de calcular el propagador del campo escalar, mencionaremos la integral de trayectoria para sistemas mecánicos. Después, discutiremos como implementaremos la integral de trayectoria en la descripción en modos $q_{\mathbf{k}}$ del campo. Por último, calcularemos el propagador del campo escalar, para esto utilizaremos la propuesta de Creutz et al [47, 48], la cual tiene como ingredientes la traza del producto de dos operadores de campo y el uso de la transformación de Fourier finita.

2.4.1. Integral de trayectoria en mecánica cuántica

En esta subsección obtenemos la fórmula de Feynman, la cual relaciona la amplitud de transición con la acción del sistema, esto lo haremos para sistemas con un número finito de grados de libertad. La siguiente discusión está basada en [40]. El punto de partida del método de la integral de trayectoria es la amplitud de transición

$$\langle x, t | x', t' \rangle. \quad (2.35)$$

La idea es evaluar la amplitud de transición (2.35) mediante una partición en el tiempo y utilizando las relaciones de cerradura de los vectores propios de posición y momento.

Entonces, el intervalo de tiempo (t, t') es dividido en N segmentos de longitud ϵ

$$t_n = t' + n\epsilon, \quad \text{con } n = 1, \dots, N-1; \quad \text{y } t - t' = N\epsilon. \quad (2.36)$$

Esta partición temporal y la propiedad de composición del operador de evolución nos permite partir este operador en N partes:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(t_b-t_a)\hat{H}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}} \dots e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}}. \quad (2.37)$$

Además, insertamos una relación de cerradura de los vectores propios de posición $|x_n\rangle$ entre cada operador de evolución de (2.37), y consideramos el esquema de Heisenberg para los estados correspondientes a los puntos inicial y final: $|x', t'\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'} |x'\rangle$ y $|x, t\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |x\rangle$. De esta forma, la amplitud de transición (2.35) llega a ser

$$\langle x, t | x', t' \rangle = \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int dx_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}} | x_{n-1} \rangle \right). \quad (2.38)$$

En el miembro derecho de esta ecuación se consideró $x = x_N, x' = x_0; t = t_N, t' = t_0$.

En particular, la amplitud de transición enésima se puede calcular de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}} | x_{n-1} \rangle &= \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}} | x_{n-1} \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}} | p_n \rangle \langle p_n | x_{n-1} \rangle \\ &\approx \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n \langle x_n | 1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H} | p_n \rangle \langle p_n | x_{n-1} \rangle + 0(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\approx \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n \langle x_n | p_n \rangle \langle p_n | x_{n-1} \rangle \left[1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon H(\bar{x}_n, p_n) \right] \quad (2.40)$$

$$\approx \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon [p_n \frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} - H(\bar{x}_n, p_n)]}. \quad (2.41)$$

Entre las ecuaciones (2.39), (2.40) y (2.41) hemos hecho dos suposiciones: Primero, consideramos que $\epsilon \ll 1$. Segundo, que el hamiltoniano presenta ordenamiento de Weyl [40], lo que implica que la versión discreta del hamiltoniano pueda ser una función simétrica de las coordenadas: $\bar{x}_n = \frac{x_{n+1} + x_n}{2}$.

De esta forma, la amplitud de transición (2.38) mediante (2.41) es

$$\langle x, t | x', t' \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int dx_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \epsilon [p_n \frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} - H(\bar{x}_n, p_n)]}. \quad (2.42)$$

El último paso (matemáticamente no trivial) en la integral de trayectoria es tomar el límite $N \rightarrow \infty$, o $\epsilon \rightarrow 0$. En este límite generalmente se hacen las sustituciones

$$\sum_{n=1}^N \epsilon \rightarrow \int_t^{t'} dt, \quad \frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \rightarrow \frac{dx}{dt}, \quad \prod_{n=1}^{N-1} \int dx_n \rightarrow D'x, \quad \prod_{n=1}^N \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \rightarrow Dp, \quad (2.43)$$

donde D' denota que hay una integral menos. Así obtenemos

$$\langle x, t | x', t' \rangle = \int D'x \int Dp e^{\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} dt (p\dot{x} - H(x, p))}. \quad (2.44)$$

Esta expresión es conocida como fórmula de Feynman y nos relaciona la amplitud de transición con la acción del sistema. En el siguiente apartado utilizaremos esta fórmula de Feynman para obtener una ecuación para la amplitud del transición del campo escalar.

2.4.2. Amplitud de transición

A diferencia de lo que es común en los libros de texto [40, 41], donde para calcular la amplitud de transición del campo escalar, mediante la integral de trayectoria, se introduce una red regular en un volumen de espacio-tiempo con el campo cumpliendo condiciones de frontera periódicas; nosotros sólo impondremos las condiciones de frontera periódicas sobre el campo, lo cual nos permite expresar la amplitud de transición en términos de la fórmula de Feynman de cada modo $q_{\mathbf{k}}$. Sin embargo, con la finalidad de esclarecer las diferencias entre el modelo que estaremos trabajando y la forma usual de implementar la integral de trayectoria en la teoría de campo, recordaremos algunos aspectos de la construcción estándar.

En analogía con el caso mecánico, la amplitud de transición se define como [40]

$$\langle \phi, t | \phi', t' \rangle = \langle \phi | e^{-i\hat{H}(t'-t)} | \phi' \rangle, \quad \text{donde} \quad \widehat{\phi}(\vec{x}, t) | \phi, t \rangle = \phi(\vec{x}) | \phi, t \rangle. \quad (2.45)$$

La ecuación (2.45) representa la amplitud de probabilidad de pasar de la configuración del campo $\phi'(\vec{x})$ al tiempo t' , a la configuración del campo $\phi(\vec{x})$ al tiempo t . Para evaluar la amplitud de transición a través de la integral de trayectoria en el espacio de coordenadas, \vec{x} , éste es restringido a un cubo de volumen $V = L^3$, y es dividido en M^3 celdas iguales, de volumen a^3 , donde $M = \frac{L}{a}$. Cada celda está caracterizada por el vector de posición

$$\vec{x}_l = a(l_x, l_y, l_z), \quad \text{con} \quad l_x, l_y, l_z = 0 \dots M - 1. \quad (2.46)$$

De esta forma, en vez de tener un continuo de grados de libertad, $\phi(\vec{x}, t)$, tenemos un número finito: $\{\phi(\vec{x}_l, t) := \phi_{\vec{x}_l}(t), \text{ con } l = 1 \dots M^3\}$. Así, se propone que el vector propio del campo se escriba $|\phi, t\rangle = \bigotimes_{\vec{x}_l} |\phi_{\vec{x}_l}, t\rangle$, con lo que la amplitud de transición (2.45) queda como

$$\begin{aligned} \langle \phi, t | \phi', t' \rangle &\sim \langle \phi'_{\vec{x}_1}, \dots, \phi'_{\vec{x}_{M^3}}, t' | \phi_{\vec{x}_1}, \dots, \phi_{\vec{x}_{M^3}}, t \rangle \\ &\sim \prod_{\vec{x}_l} \langle \phi'_{\vec{x}_l}, t' | \phi_{\vec{x}_l}, t \rangle, \end{aligned} \quad (2.47)$$

Por lo que la integral de trayectoria que se lleva a cabo es la de un sistema con un número finito de grados de libertad. Aquí es donde nos separamos de la implementación estándar de la integral de trayectoria, en lugar de usar los modos mecánicos $\phi_{\vec{x}_n}$ utilizaremos los modos $q_{\mathbf{k}}$. Para esto consideramos que el campo escalar está definido en un volumen V y cumple condiciones de frontera periódicas: $\phi(\vec{x} + V) = \phi(\vec{x})$. Así, el campo puede ser escrito en un desarrollo de Fourier de la forma (2.13), el cual cambiamos a los modos $q_{\mathbf{k}}$ (2.21).

Por consiguiente, proponemos la amplitud de transición del campo escalar en términos de los coeficientes de Fourier $q_{\mathbf{k}}$

$$\langle \phi, t | \phi', t' \rangle = \bigotimes_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L}} \langle q_{\mathbf{k}}, t | q'_{\mathbf{k}'}, t' \rangle = \bigotimes_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathbb{Z}} \langle q_{\mathbf{k}} | e^{-i\hat{H}(t-t')} | q'_{\mathbf{k}'} \rangle \quad (2.48)$$

$$= \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} \langle q_{\mathbf{k}} | e^{-i\hat{H}_{\mathbf{k}}(t'-t)} | q'_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (2.49)$$

donde $H_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}p_{\mathbf{k}}^2 + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2}q_{\mathbf{k}}^2$. Vemos que la integral de trayectoria del campo escalar real puede ser propuesta como la integral de trayectoria de un número infinito de osciladores armónicos desacoplados. Luego, nos podemos concentrar en la integral de trayectoria del modo de Fourier

enésimo. Entonces, si realizamos el procedimiento de la sección anterior obtendremos para el modo enésimo

$$\begin{aligned}
 & \langle q_{\mathbf{k}} | e^{-i\hat{H}_{\mathbf{k}}(t-t')} | q'_{\mathbf{k}} \rangle \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{s=1}^{N-1} \int dq_{\mathbf{k}s} \right) \left(\prod_{s=1}^N \int \frac{dp_{\mathbf{k}s}}{2\pi} \right) e^{i\epsilon \sum_{s=1}^N \left\{ p_{\mathbf{k}s} \frac{q_{\mathbf{k}s} - q_{\mathbf{k}s-1}}{\epsilon} - \left[\frac{1}{2} p_{\mathbf{k}s}^2 + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} \left(\frac{q_{\mathbf{k}s} + q_{\mathbf{k}s-1}}{2} \right)^2 \right] \right\}} + 0(\epsilon^2) \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{2\pi i \epsilon} \right]^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{s=1}^{N-1} \int dq_{\mathbf{k}s} \right) e^{i\epsilon \sum_{s=1}^N \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{q_{\mathbf{k}s} - q_{\mathbf{k}s-1}}{\epsilon} \right)^2 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} \left(\frac{q_{\mathbf{k}s} + q_{\mathbf{k}s-1}}{2} \right)^2 \right\}} + 0(\epsilon^2). \tag{2.50}
 \end{aligned}$$

Las cuales tienen como límite continuo

$$\langle q_{\mathbf{k}} | e^{-i\hat{H}_{\mathbf{k}}(t-t')} | q'_{\mathbf{k}} \rangle = \int D'q_{\mathbf{k}} \int Dp_{\mathbf{k}} e^{i \int_{t'}^t dt \left[p_{\mathbf{k}} \dot{q}_{\mathbf{k}} - \left(\frac{1}{2} p_{\mathbf{k}}^2 + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} q_{\mathbf{k}}^2 \right) \right]}, \tag{2.51}$$

$$= \int D'q_{\mathbf{k}} e^{i \int_{t'}^t dt \left[\frac{1}{2} \dot{q}_{\mathbf{k}}^2 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} q_{\mathbf{k}}^2 \right]}. \tag{2.52}$$

El símbolo $\int D'q_{\mathbf{k}}$ nos recuerda que hay una integral menos en las posiciones $q_{\mathbf{k}s}$, que en los momentos $p_{\mathbf{k}s}$, también debemos considerar que los modos $q_{\mathbf{k}}$ y $q'_{\mathbf{k}}$ son fijados mediante las configuraciones del campo $\phi(\vec{x})$ y $\phi'(\vec{x})$. Sustituyendo la amplitud de transición de un modo de Fourier $q_{\mathbf{k}}$, ecuación (2.51) o ecuación (2.52), en la amplitud de transición del campo (2.49), tenemos

$$\langle \phi, t | \phi', t' \rangle = \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} \int D'q_{\mathbf{k}} \int Dp_{\mathbf{k}} e^{i \int_{t'}^t dt \left[p_{\mathbf{k}} \dot{q}_{\mathbf{k}} - \left(\frac{1}{2} p_{\mathbf{k}}^2 + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} q_{\mathbf{k}}^2 \right) \right]} \tag{2.53}$$

$$= \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} \int D'q_{\mathbf{k}} e^{i \int_{t'}^t dt \left[\frac{1}{2} \dot{q}_{\mathbf{k}}^2 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} q_{\mathbf{k}}^2 \right]}. \tag{2.54}$$

En el siguiente apartado evaluaremos el propagador del campo escalar, para esto nos guiaremos en la ecuación de la amplitud de transición del campo (2.54), así como la versión discreta de la amplitud de transición del OAS (2.50).

2.4.3. Propagador

En este apartado calculamos el propagador del campo escalar utilizando la integral de trayectoria del OAS (2.50). Para esto nos apoyamos en los análisis propuestos en [41, 47].

El propagador del campo escalar se puede calcular a través de la siguiente expresión [48]

$$\langle \Omega | \hat{T} \left[\hat{\phi}(t, \mathbf{x}) \hat{\phi}(t', \mathbf{x}') \right] | \Omega \rangle = \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{\int d\phi_b \langle \phi_b, -i\tau_b | \hat{T} [\hat{\phi}(-i\tau, \mathbf{x}) \hat{\phi}(-i\tau', \mathbf{x}')] | \phi_a, -i\tau_a \rangle |_{\phi_b = \phi_a}}{\int d\phi_b \langle \phi_b, -i\tau_b | \phi_a, -i\tau_a \rangle |_{\phi_b = \phi_a}}, \tag{2.55}$$

donde ϕ_b y ϕ_a denotan la configuración final e inicial del campo, respectivamente. También se debe notar que ha sido requerida la traza de los elementos de matriz de ϕ^2 y de la amplitud de transición del campo, lo que significa igualar la configuración inicial y final del campo $\phi_a = \phi_b$, e integrar sobre todas las posibles configuraciones del campo: $\int d\phi_b$. Por último, la ecuación (2.55) es obtenida insertando la relación de cerradura de los vectores propios del

hamiltoniano en el numerador de (2.55), haciendo una rotación de Wick $\tau = it$, y tomando los límites $\tau_b \rightarrow \infty$ y $\tau_a \rightarrow -\infty$ [40, 41, 48].

De acuerdo al análisis hecho en el Apéndice A.2, la función de Wightman de frecuencias positivas se puede calcular mediante las funciones de un punto y de dos punto de los modos $q_{\mathbf{k}}$, a través de la ecuación (2.27), pero ahora con estas funciones definidas como

$$D_{\mathbf{k}}(-i\tau_r) = \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{\int dq_{b\mathbf{k}} \langle q_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{\mathbf{k}}(-i\tau_r) | q_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{q_{b\mathbf{k}}=q_{a\mathbf{k}}}}{\int dq_{b\mathbf{k}} \langle q_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{q_{b\mathbf{k}}=q_{a\mathbf{k}}}}, \quad (2.56)$$

$$D_{\mathbf{k}}(-i\tau_s, -i\tau_r) = \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{\int dq_{b\mathbf{k}} \langle q_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{\mathbf{k}}(-i\tau_s) q_{\mathbf{k}}(-i\tau_r) | q_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{q_{b\mathbf{k}}=q_{a\mathbf{k}}}}{\int dq_{b\mathbf{k}} \langle q_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{q_{b\mathbf{k}}=q_{a\mathbf{k}}}} \quad (2.57)$$

Para obtener la función de Wightman² se considera que los vectores propios del campo se pueden escribir como $|\phi, t\rangle = \bigotimes_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} |q_{\mathbf{k}}, t\rangle$, y se toma el ordenamiento temporal $\tau_a < \tau_r < \tau_s < \tau_b$. También se debe tener en cuenta que la traza de la amplitud de transición del campo implica que igualemos $q_{\mathbf{k}b} = q_{\mathbf{k}a}$, y que para integrar sobre todas las posibles configuraciones del campo, integramos sobre alguno de los puntos extremos de cada modo: $\int dq_{\mathbf{k}b}$.

Antes de empezar el cálculo, debemos aclarar que a diferencia de la sección 2.3, donde primero calculamos la función de Wightman (2.31) y después hicimos una transformación de Fourier al espacio de frecuencias para obtener el propagador (2.34), en este apartado obtendremos el propagador (2.34) sin calcular (2.32), esto es porque además de la integral de trayectoria emplearemos una transformación de Fourier finita al espacio de frecuencias discretas.

Entonces, para evaluar (2.56) y (2.57) emplearemos el esquema de integral de trayectoria. Empezaremos por la traza de la amplitud de transición del modo $q_{\mathbf{k}}$, el denominador de las ecuaciones (2.56) y (2.57). Así, consideramos la traza de (2.50) con $\epsilon_\tau = i\epsilon$, por lo que tenemos

$$\begin{aligned} & \int dq_{b\mathbf{k}} \langle q_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{q_{b\mathbf{k}}=q_{a\mathbf{k}}} \\ &= \lim_{\epsilon_\tau \rightarrow 0} \left[\frac{1}{2\pi\epsilon_\tau} \right]^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{l=0}^{N-1} \int dq_{\mathbf{k}l} \right) e^{-\epsilon_\tau \sum_{l=1}^N \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{q_{\mathbf{k}l} - q_{\mathbf{k}l-1}}{\epsilon_\tau} \right)^2 + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} \left(\frac{q_{\mathbf{k}l} + q_{\mathbf{k}l-1}}{2} \right)^2 \right\}} + \mathcal{O}(\epsilon_\tau^2) \end{aligned} \quad (2.58)$$

Debido a la traza de la amplitud de transición, notemos que en (2.58) hay una integral más que en (2.50): $\int dq_{\mathbf{k}0}$. Además, como hemos igualado $q_{\mathbf{k}N} = q_{\mathbf{k}0}$, las coordenadas $q_{\mathbf{k}l}$ en (2.58) son periódicas, por lo que se pueden expresar como una transformada de Fourier discreta [49]

$$q_{\mathbf{k}l} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} Q_{\mathbf{k}j} e^{-i\frac{2\pi j l}{N}}. \quad (2.59)$$

En la anterior ecuación hemos definido las frecuencias de la transformación de Fourier discreta como $\omega_{0j} := \frac{2\pi j}{N\epsilon_\tau}$, y se ha considerado $\tau_l = l\epsilon_\tau$, como su variable conjugada de Fourier³. De estas dos expresiones sigue que $\omega_{0j}\tau_l = \frac{2\pi j l}{N}$. Notemos que al ser ω_{0j} conjugada de τ_l , ésta debe ser euclidiana, por tanto $\omega_{0j} = -i\omega$, donde ω es variable conjugada de Fourier de t . También,

²Vea el Apéndice A.2

³La transformación de Fourier discreta tiene la característica de que ambas variables son numerables y finitas.

hay que mencionar que los coeficientes $Q_{\mathbf{k}j}$ son complejos por lo que se deben satisfacer la condición de realidad $Q_{\mathbf{k}j}^* = Q_{\mathbf{k}-j}$, además de ser periódicos $Q_{\mathbf{k}j} = Q_{\mathbf{k}j+N}$.

Si sustituimos la transformación de Fourier discreta (2.59) en el argumento de la exponencial de (2.58), hallamos

$$\sum_{l=1}^N (q_{kl} - q_{kl-1})^2 = 2 \sum_{j=0}^{N-1} Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \right], \quad \sum_{l=1}^N (q_{kl} + q_{kl-1})^2 = 2 \sum_{j=0}^{N-1} Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \right]. \quad (2.60)$$

De la condición de realidad $Q_{\mathbf{k}j+N} = Q_{\mathbf{k}j}$ y la periodicidad de los coeficientes $Q_{\mathbf{k}j+N} = Q_{\mathbf{k}j}$, tenemos las siguientes relaciones

$$Q_{\mathbf{k}N-j} = Q_{\mathbf{k}j}^*, \quad \text{que a su vez implica } Q_{\mathbf{k}0} \in \mathbb{R}, Q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} \in \mathbb{R}. \quad (2.61)$$

De esta forma, mediante las propiedades anteriores, el primer término de la ecuación (2.60) se reescribe como

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{N-1} Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \right] &= \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \right] + \sum_{j=\frac{N}{2}}^{N-1} Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \right] \\ &= Q_{\mathbf{k}0}^2 \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi 0}{N}\right) \right] + Q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}}^2 \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N}\right) \right] + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \right] \\ &\quad + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} Q_{\mathbf{k}N-j} Q_{\mathbf{k}-(N-j)} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi(N-j)}{N}\right) \right] \\ &= Q_{\mathbf{k}0}^2 \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi 0}{N}\right) \right] + Q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}}^2 \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N}\right) \right] + 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \right]. \end{aligned} \quad (2.62)$$

De igual manera, el segundo término de (2.60) nos queda

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{N-1} Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \right] \\ = Q_{\mathbf{k}0}^2 \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi 0}{N}\right) \right] + Q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}}^2 \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N}\right) \right] + 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \right]. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Así, la amplitud de transición del modo $q_{\mathbf{k}}$, ecuación (2.58), en función de las coordenadas $Q_{\mathbf{k}j}$ llega a ser

$$\begin{aligned} \int dq_{b\mathbf{k}} \langle q_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{q_{b\mathbf{k}}=q_{a\mathbf{k}}} \\ = \lim_{\epsilon_\tau \rightarrow 0} \left[\frac{1}{2\pi\epsilon_\tau} \right]^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \int dQ_{\mathbf{k}j} dQ_{\mathbf{k}-j} dQ_{\mathbf{k}0} dQ_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} \right) \end{aligned} \quad (2.64)$$

$$\begin{aligned} \times e^{-\epsilon_\tau \left\{ Q_{\mathbf{k}0}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi 0}{N}\right) \right] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi 0}{N}\right) \right] \right\} + Q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N}\right) \right] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N}\right) \right] \right\} \right\}} \\ \times e^{-\epsilon_\tau \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} 2Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \right] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \right] \right\}}. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Definimos la coordenadas $Q_{\mathbf{k}j}$ de la siguiente manera

$$Q_{\mathbf{k}j} = \frac{1}{2} \left[(1+i)q'_{\mathbf{k}j} + (1-i)q'_{\mathbf{k}-j} \right], \quad Q_{\mathbf{k}-j} = \frac{1}{2} \left[(1-i)q'_{\mathbf{k}j} + (1+i)q'_{\mathbf{k}-j} \right]. \quad (2.66)$$

Con lo que la amplitud de transición (2.58) ahora es

$$\int dq_{b\mathbf{k}} \langle q_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{q_{b\mathbf{k}}=q_{a\mathbf{k}}} = \lim_{\epsilon_\tau \rightarrow 0} \left[\frac{1}{2\pi\epsilon_\tau} \right]^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \int dq'_{\mathbf{k}j} dq'_{\mathbf{k}-j} dq'_{\mathbf{k}0} dq'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} \right) \quad (2.67)$$

$$\times e^{-\epsilon_\tau \left\{ q'_{\mathbf{k}0} \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi \cdot 0}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi \cdot 0}{N})] \right\} + q'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N})] \right\} \right\}} \\ \times e^{-\epsilon_\tau \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} (q'_{\mathbf{k}j} + q'_{\mathbf{k}-j}) \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi j}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi j}{N})] \right\}}. \quad (2.68)$$

La amplitud de transición expresada en las coordenadas $q'_{\mathbf{k}j}$ (2.68), está en términos de integrales gaussianas, por lo que obtendremos

$$\int dq_{b\mathbf{k}} \langle q_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{q_{b\mathbf{k}}=q_{a\mathbf{k}}} = \lim_{\epsilon_\tau \rightarrow 0} \prod_{j=-(\frac{N}{2}-1)}^{\frac{N}{2}} \left[\frac{\frac{1}{2\epsilon_\tau^2}}{\frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi j}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi j}{N})]} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.69)$$

Ahora analicemos la traza de los elementos de matriz de $q_{\mathbf{k}}(-i\tau_r)$, el numerador de $D_{\mathbf{k}}(-i\tau_r)$, ecuación (2.56). Para implementar la integral de trayectoria suponemos el ordenamiento temporal $t_b < t_r < t_a$, y que t_r pertenece a la partición en el tiempo: $P_t = \{t_a = t_0, t_1, \dots, t_r, \dots, t_N = t_b\}$. Además, consideramos que $q_{\mathbf{k}}(t_r)$ está definido en el esquema de Heisenberg. Así, siguiendo el procedimiento estándar de la integral de trayectoria, discutido en la subsección (2.4.1), para los elementos de matriz $\langle q_{b\mathbf{k}}, t_b | q_{\mathbf{k}}(t_r) | q_{a\mathbf{k}}, t_a \rangle$, encontramos

$$\int dq_{b\mathbf{k}} \langle q_{b\mathbf{k}}, t_b | q_{\mathbf{k}}(t_r) | q_{a\mathbf{k}}, t_a \rangle |_{q_{b\mathbf{k}}=q_{a\mathbf{k}}} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{2\pi i \epsilon} \right]^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{l=1}^N \int dq_{\mathbf{k}l} \right) q_{\mathbf{k}r} e^{i\epsilon \sum_{l=1}^N \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{q_{\mathbf{k}l} - q_{\mathbf{k}l-1}}{\epsilon} \right)^2 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} \left(\frac{q_{\mathbf{k}l} + q_{\mathbf{k}l-1}}{2} \right)^2 \right\}} \quad (2.70)$$

Recordemos que la traza implica que las coordenadas $q_{\mathbf{k}l}$ son periódicas, por lo que pueden ser expresadas como una transformada de Fourier discreta (2.59). En particular $q_{\mathbf{k}r}$ tiene la forma

$$q_{\mathbf{k}r} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} Q_{\mathbf{k}j} e^{-i\frac{2\pi jr}{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \left\{ Q_{\mathbf{k}0} + (-1)^r Q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \left[Q_{\mathbf{k}j} e^{-i\frac{2\pi jr}{N}} + Q_{\mathbf{k}-j} e^{i\frac{2\pi jr}{N}} \right] \right\}. \quad (2.71)$$

Así, la traza de los elementos de matriz de $q_{\mathbf{k}}$, ecuación (2.70), se puede expresar en función de las coordenadas $Q_{\mathbf{k}j}$, las cuales a su vez pueden ser sustituidas por las coordenadas $q'_{\mathbf{k}j}$, por medio de (2.66). De esta forma, hallamos:

$$\begin{aligned}
 & \int dq_{b\mathbf{k}} \langle q_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{\mathbf{k}}(-i\tau_r) | q_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{q_{b\mathbf{k}}=q_{a\mathbf{k}}} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\frac{1}{2\pi\epsilon_\tau} \right]^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \int dQ_{\mathbf{k}j} dQ_{\mathbf{k}-j} dQ_{\mathbf{k}0} dQ_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} \right) \\
 & \quad \times \left(Q_{\mathbf{k}0} + (-1)^r Q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \left[Q_{\mathbf{k}j} e^{-i\frac{2\pi jr}{N}} + Q_{\mathbf{k}-j} e^{i\frac{2\pi jr}{N}} \right] \right) \\
 & \quad \times e^{-\epsilon_\tau \left\{ Q_{\mathbf{k}0}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi 0}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi 0}{N})] \right\} + Q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N})] \right\} \right\}} \\
 & \quad \times e^{-\epsilon_\tau \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} 2Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi j}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi j}{N})] \right\}} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\frac{1}{2\pi\epsilon_\tau} \right]^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \int dq'_{\mathbf{k}j} dq'_{\mathbf{k}-j} dq'_{\mathbf{k}0} dq'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} \right) \\
 & \quad \times \left(q'_{\mathbf{k}0} + (-1)^r q'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} q'_{\mathbf{k}j} \left[\cos\left(\frac{2\pi jr}{N}\right) + \sin\left(\frac{2\pi jr}{N}\right) \right] + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} q'_{\mathbf{k}-j} \left[\cos\left(\frac{2\pi jr}{N}\right) - \sin\left(\frac{2\pi jr}{N}\right) \right] \right) \\
 & \quad \times e^{-\epsilon_\tau \left\{ q'_{\mathbf{k}0}{}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi 0}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi 0}{N})] \right\} + q'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}}{}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N})] \right\} \right\}} \\
 & \quad \times e^{-\epsilon_\tau \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} (q'_{\mathbf{k}j}{}^2 + q'_{\mathbf{k}-j}{}^2) \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi j}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi j}{N})] \right\}} \\
 &= 0, \tag{2.72}
 \end{aligned}$$

donde se utilizó $\epsilon_\tau = i\epsilon$ y en el último paso se evaluaron integrales de la forma $\int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-\alpha x^2} = 0$. Entonces, combinando las ecuaciones (2.56), (2.69) y (2.72), concluimos que la función de un punto es cero

$$D_{\mathbf{k}}(-i\tau_r) = 0. \tag{2.73}$$

Ahora calculemos la función de dos puntos $D_{\mathbf{k}}(-i\tau_s, -i\tau_r)$, ecuación (2.57). Semejante a la función de un punto, para realizar la integral de trayectoria en los elementos de matriz $\langle q_{b\mathbf{k}}, t_b | q_{\mathbf{k}}(t_s) q_{\mathbf{k}}(t_r) | q_{a\mathbf{k}}, t_a \rangle$, consideramos el ordenamiento temporal $t_a < t_r < t_s < t_b$, y que t_s y t_r están en la partición en tiempo $P_t = \{t_a = t_0, \dots, t_r, \dots, t_s, \dots, t_N = t_b\}$. Así, tenemos que la traza de los elementos de matriz de $q_{\mathbf{k}}(t_s) q_{\mathbf{k}}(t_r)$, el numerador de (2.57), llega a ser

$$\begin{aligned}
 & \int dq_{b\mathbf{k}} \langle q_{b\mathbf{k}}, t_b | q_{\mathbf{k}}(t_s) q_{\mathbf{k}}(t_r) | q_{a\mathbf{k}}, t_a \rangle |_{q_{b\mathbf{k}}=q_{a\mathbf{k}}} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{2\pi i \epsilon} \right]^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{l=1}^N \int dq_{\mathbf{k}l} \right) q_{\mathbf{k}s} q_{\mathbf{k}r} e^{i\epsilon \sum_{l=1}^N \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{q_{\mathbf{k}l} - q_{\mathbf{k}l-1}}{\epsilon} \right)^2 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} \left(\frac{q_{\mathbf{k}l} + q_{\mathbf{k}l-1}}{2} \right)^2 \right\}}
 \end{aligned}$$

Una vez más, utilizamos $\epsilon_\tau = i\epsilon$ y las coordenadas $Q_{\mathbf{k}j}$ (2.59), después empleamos las coordenadas $q'_{\mathbf{k}j}$, así encontramos

$$\begin{aligned}
 & \int dq_{\mathbf{b}\mathbf{k}} \langle q_{\mathbf{b}\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{\mathbf{k}}(-i\tau_s) q_{\mathbf{k}}(-i\tau_r) | q_{\mathbf{a}\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{q_{\mathbf{b}\mathbf{k}}=q_{\mathbf{a}\mathbf{k}}} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{N} \left[\frac{1}{2\pi\epsilon_\tau} \right]^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \int dQ_{\mathbf{k}j} dQ_{\mathbf{k}-j} dQ_{\mathbf{k}0} dQ_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} \right) \\
 & \quad \times \left(Q_{\mathbf{k}0} + (-1)^s Q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \left[Q_{\mathbf{k}j} e^{-i\frac{2\pi js}{N}} + Q_{\mathbf{k}-j} e^{i\frac{2\pi js}{N}} \right] \right) \\
 & \quad \times \left(Q_{\mathbf{k}0} + (-1)^r Q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \left[Q_{\mathbf{k}j} e^{-i\frac{2\pi jr}{N}} + Q_{\mathbf{k}-j} e^{i\frac{2\pi jr}{N}} \right] \right) \\
 & \quad \times e^{-\epsilon_\tau \left\{ Q_{\mathbf{k}0}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi 0}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi 0}{N})] \right\} + Q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N}\right) \right] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N})] \right\} \right\}} \\
 & \quad \times e^{-\epsilon_\tau \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} 2Q_{\mathbf{k}j} Q_{\mathbf{k}-j} \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi j}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi j}{N})] \right\}} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{N} \left[\frac{1}{2\pi\epsilon_\tau} \right]^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \int dq'_{\mathbf{k}j} dq'_{\mathbf{k}-j} dq'_{\mathbf{k}0} dq'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} \right) \\
 & \quad \times \left(q'_{\mathbf{k}0} + (-1)^s q'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} q'_{\mathbf{k}j} \left[\cos\left(\frac{2\pi js}{N}\right) + \sin\left(\frac{2\pi js}{N}\right) \right] + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} q'_{\mathbf{k}-j} \left[\cos\left(\frac{2\pi js}{N}\right) - \sin\left(\frac{2\pi js}{N}\right) \right] \right) \\
 & \quad \times \left(q'_{\mathbf{k}0} + (-1)^r q'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} q'_{\mathbf{k}j} \left[\cos\left(\frac{2\pi jr}{N}\right) + \sin\left(\frac{2\pi jr}{N}\right) \right] + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} q'_{\mathbf{k}-j} \left[\cos\left(\frac{2\pi jr}{N}\right) - \sin\left(\frac{2\pi jr}{N}\right) \right] \right) \\
 & \quad \times e^{-\epsilon_\tau \left\{ q'_{\mathbf{k}0}{}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi 0}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi 0}{N})] \right\} + q'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}}{}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N}\right) \right] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N})] \right\} \right\}} \\
 & \quad \times e^{-\epsilon_\tau \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} (q'_{\mathbf{k}j}{}^2 + q'_{\mathbf{k}-j}{}^2) \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi j}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi j}{N})] \right\}} \tag{2.74}
 \end{aligned}$$

Salvo por los coeficientes trigonométricos, las diferentes términos en la ecuación (2.74) tienen la siguiente forma

$$\begin{aligned}
 & \left(\prod_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \int dq'_{\mathbf{k}j} dq'_{\mathbf{k}-j} dq'_{\mathbf{k}0} dq'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} \right) q'_{\mathbf{k}i} q'_{\mathbf{k}k} e^{-\epsilon_\tau \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} (q'_{\mathbf{k}j}{}^2 + q'_{\mathbf{k}-j}{}^2) \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi j}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi j}{N})] \right\}} \\
 & \quad \times e^{-\epsilon_\tau \left\{ q'_{\mathbf{k}0}{}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi 0}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi 0}{N})] \right\} + q'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}}{}^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N}\right) \right] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N})] \right\} \right\}} \\
 &= \begin{cases} 0, & \text{si } i \neq k, \\ \frac{1}{\epsilon_\tau^2} \frac{1}{\frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi i}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi i}{N})]} \prod_{j=1}^{\frac{N}{2}} \left[\frac{\frac{\pi}{\epsilon_\tau}}{\frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi j}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi j}{N})]} \right]^{\frac{1}{2}}, & \text{si } i = k. \end{cases} \tag{2.75}
 \end{aligned}$$

Los valores anteriores resultan de tener integrales de la forma $\int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-\alpha x^2} = 0$ y $\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\alpha x^2} = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$, cuando $i \neq k$, $i = k$, respectivamente. De esta manera, la traza de los elementos de

matriz de $q_{\mathbf{k}}(-i\tau_s)q_{\mathbf{k}}(-i\tau_r)$, ecuación (2.74), teniendo en cuenta (2.75), resulta ser

$$\begin{aligned}
 & \int dq_{\mathbf{b}\mathbf{k}} \langle q_{\mathbf{b}\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{\mathbf{k}}(-i\tau_s)q_{\mathbf{k}}(-i\tau_r) | q_{\mathbf{a}\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{q_{\mathbf{b}\mathbf{k}}=q_{\mathbf{a}\mathbf{k}}} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{N} \left[\frac{1}{2\pi\epsilon_\tau} \right]^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \int dq'_{\mathbf{k}j} dq'_{\mathbf{k}-j} dq'_{\mathbf{k}0} dq'_{\mathbf{k}\frac{N}{2}} \right) \\
 & \times \left(q_{\mathbf{k}0}'^2 \cos\left(\frac{2\pi 0(s-r)}{N}\right) + q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}}'^2 \cos\left(\frac{2\pi \frac{N}{2}(s-r)}{N}\right) + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} (q_{\mathbf{k}j}'^2 + q_{\mathbf{k}-j}'^2) \cos\left(\frac{2\pi j(s-r)}{N}\right) \right. \\
 & \left. + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} (q_{\mathbf{k}j}'^2 - q_{\mathbf{k}-j}'^2) \sin\left(\frac{2\pi j(s+r)}{N}\right) \right) \\
 & \times e^{-\epsilon_\tau \left\{ q_{\mathbf{k}0}'^2 \left[\frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi 0}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi 0}{N})] \right] + q_{\mathbf{k}\frac{N}{2}}'^2 \left[\frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi(\frac{N}{2})}{N})] \right] \right\}} \\
 & e^{-\epsilon_\tau \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} (q_{\mathbf{k}j}'^2 + q_{\mathbf{k}-j}'^2) \left[\frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi j}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos(\frac{2\pi j}{N})] \right]} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{2\epsilon_\tau N} \right] \left[\sum_{j=-\frac{N}{2}-1}^{\frac{N}{2}} \frac{\cos\left(\frac{2\pi j(s-r)}{N}\right)}{\frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)]} \right] \\
 & \times \prod_{j=-\frac{N}{2}-1}^{\frac{N}{2}} \left[\frac{\frac{1}{2\epsilon_\tau^2}}{\frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)]} \right]^{\frac{1}{2}} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{2\epsilon_\tau N} \right] \left[\sum_{j=-\frac{N}{2}-1}^{\frac{N}{2}} \frac{e^{-i\frac{2\pi j(s-r)}{N}}}{\frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)]} \right] \\
 & \times \prod_{j=-\frac{N}{2}-1}^{\frac{N}{2}} \left[\frac{\frac{1}{2\epsilon_\tau^2}}{\frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{4} [1 + \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)]} \right]^{\frac{1}{2}}. \tag{2.76}
 \end{aligned}$$

Por consiguiente, la función de dos puntos (2.57) resulta de combinar (2.57), (2.69) y (2.76)

$$\begin{aligned}
 & D_{\mathbf{k}}(-i\tau_s, -i\tau_r) \\
 &= \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \left\{ \lim_{\epsilon_\tau \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\epsilon_\tau N} \sum_{j=-\frac{N}{2}-1}^{\frac{N}{2}} \frac{e^{-i\frac{2\pi j(s-r)}{N}}}{\frac{1}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} [1 + \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)]} \right] \right\}, \tag{2.77}
 \end{aligned}$$

donde hemos empleado la propiedad del límite de una división: $\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} = \frac{\lim_{x \rightarrow a} f(x)}{\lim_{x \rightarrow a} g(x)}$.

Por último, mencionamos anteriormente que el propagador puede ser calculado a través de (2.27), con $D_{\mathbf{k}}(-i\tau_r)$ y $D_{\mathbf{k}}(-i\tau_s, -i\tau_r)$ definidos en (2.56) y (2.57), respectivamente. Por tanto, si sustituimos (2.73) y (2.77) en (2.27) obtenemos

$$\begin{aligned} & \left\langle \Omega \left| \widehat{T} \left[\widehat{\phi}(-i\tau_s, \mathbf{x}) \widehat{\phi}(-i\tau_r, \mathbf{x}') \right] \right| \Omega \right\rangle \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \left[\lim_{\epsilon_\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon_\tau N} \sum_{j = -(\frac{N}{2}-1)}^{\frac{N}{2}} \frac{e^{-i\frac{2\pi j(s-r)}{N}}}{\frac{2}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\frac{2\pi j}{N})] + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} [1 + \cos(\frac{2\pi j}{N})]} \right]. \end{aligned}$$

Notemos que hemos agregado el operador de ordenamiento temporal \widehat{T} a la ecuación (2.27), pues como ya mencionamos, esta vez obtendremos el propagador en lugar de función Wightman de frecuencias positivas. Esto es debido a que utilizamos la transformación de Fourier finita, cuyo límite continuo corresponde a la transformación de Fourier usual, como a continuación mostraremos.

Entonces, debemos tomar dos límites, el límite al continuo que normalmente se obtiene con $\epsilon \rightarrow 0$, y el límite para obtener el valor expectación en vacío $\tau_b \rightarrow \infty$ y $\tau_a \rightarrow -\infty$, notemos que éste último es equivalente a $\epsilon N \rightarrow \infty$. Para calcular ambos límites debemos tomar en cuenta que $\omega_{0j} = \frac{2\pi j}{\epsilon_\tau N}$, así

$$\frac{\Delta\omega_{0j}}{2\pi} = \frac{\omega_{0j+1} - \omega_{0j}}{2\pi} = \frac{1}{\epsilon_\tau N}, \quad \text{donde} \quad -\frac{\pi}{\epsilon_\tau} \left(1 - \frac{2}{N}\right) \leq \omega_{0j} \leq \frac{\pi}{\epsilon_\tau}. \quad (2.78)$$

Seguimos el orden de la fórmula, así primero consideramos el límite continuo $\epsilon \rightarrow 0$, con $\epsilon N = \tau_b - \tau_a$. De las fórmulas anteriores vemos que ω_{0j} sigue siendo una variable discreta pero ahora su dominio es \mathbb{Z} :

$$\lim_{\epsilon_\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon_\tau N} \sum_{j = -(\frac{N}{2}-1)}^{\frac{N}{2}} = \frac{1}{\epsilon_\tau N} \sum_{j = -\infty}^{\infty}, \quad \text{con} \quad -\infty \leq \omega_{0j} \leq \infty.$$

Además

$$\lim_{\epsilon_\tau \rightarrow 0} \frac{2}{\epsilon_\tau^2} [1 - \cos(\omega_{0j}\epsilon_\tau)] = \omega_{0j}^2, \quad \lim_{\epsilon_\tau \rightarrow 0} \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{2} [1 + \cos(\omega_{0j}\epsilon_\tau)] = \omega_{\mathbf{k}}^2. \quad (2.79)$$

De esta forma, en el límite $\epsilon_\tau \rightarrow 0$, con $\tau_s = s\epsilon_\tau$ y $\tau_r = r\epsilon_\tau$, tenemos

$$\left\langle \Omega \left| \widehat{\phi}(-i\tau_s, \mathbf{x}) \widehat{\phi}(-i\tau_r, \mathbf{x}') \right| \Omega \right\rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \left[\frac{1}{\epsilon_\tau N} \sum_{j = -\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega_{0j}(\tau_s - \tau_r)}}{\omega_{0j}^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2} \right]. \quad (2.80)$$

Por último, tomemos $\epsilon N \rightarrow \infty$. De la primera expresión de (2.78), vemos que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\epsilon_\tau N} \sum_{j = -\infty}^{\infty} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_0}{2\pi}, \quad \text{con} \quad -\infty \leq \omega_0 \leq \infty. \quad (2.81)$$

Así, finalmente obtenemos el propagador (2.55)

$$\left\langle \Omega \left| \widehat{T} \left[\widehat{\phi}(-i\tau_s, \mathbf{x}) \widehat{\phi}(-i\tau_r, \mathbf{x}') \right] \right| \Omega \right\rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_0}{2\pi} \frac{e^{-i\omega_0(\tau_s - \tau_r)}}{\omega_0^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2} \right]. \quad (2.82)$$

La última expresión corresponde al negativo de la transformada de Fourier de (2.32). Esto lo verificamos si consideramos que estamos trabajando en las variables euclidianas definidas mediante una rotación de Wick: $\omega_0 = -i\omega$ y $\tau = it$, e introducimos el término $i\epsilon$ tal que obtengamos el propagador de Feynman, esto es

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_0}{2\pi} \frac{e^{-i\omega_0(\tau_s - \tau_r)}}{\omega_0^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2} = -\frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{2i\omega_{\mathbf{k}} e^{-i\omega(t_s - t_r)}}{\omega_{\mathbf{k}}^2 - \omega^2 - i\epsilon}.$$

Si tenemos en cuenta el ordenamiento temporal $t_s > t_r$ y realizamos la integral considerando el contorno de la parte inferior del plano (vea la discusión de la ecuación (2.33) y la figura 2.1), recuperamos el negativo la función Wightman de frecuencias positivas (2.32).

Con esto finalizamos nuestro análisis de la teoría cuántica del campo escalar real. Nuestro análisis estuvo basado en el desarrollo de Fourier del campo en los modos $q_{\mathbf{k}}$, cuya teoría cuántica se llevó a cabo en la representación de Schrödinger. En el siguiente capítulo analizaremos la teoría cuántica polimérica del OAS y el modelo del campo escalar polimérico. El modelo del campo polimérico se definirá siguiendo el mismo procedimiento de este capítulo: escribiremos el campo en términos de los modos $q_{\mathbf{k}}$, pero ahora estos serán representados en la teoría cuántica polimérica.

Capítulo 3

Oscilador armónico polimérico mediante teoría de perturbaciones

En este capítulo presentamos los conceptos más relevantes de la mecánica cuántica polimérica y resolvemos el oscilador armónico polimérico (OAP) mediante teoría de perturbaciones. La teoría del OAP en espacio de momentos es análoga a la teoría de un péndulo cuántico, por lo que es posible considerar al OAP como un rotor plano bajo la influencia de un potencial perturbativo proporcional al $\cos(2u)$. A esta aproximación le llamamos régimen de rotor o de altas energías del OAP. Además, calculamos la función de un punto y de dos puntos del OAP en el régimen de rotor, esto a través de los desarrollos perturbativos de las funciones propias y los valores propios del OAP. Por último, obtenemos el propagador del campo escalar en el régimen de rotor, el cual fue calculado en [15] mediante la función de dos puntos del OAP.

3.1. Teoría polimérica y el oscilador armónico simple

3.1.1. Teoría polimérica

En esta subsección presentamos las ideas más relevantes de la representación polimérica. La principal diferencia entre la representación de Schrödinger y la representación polimérica es el espacio de Hilbert. En la representación de Schrödinger, el espacio de Hilbert es el espacio de funciones cuadrado integrables en la medida de Lebesgue $L^2(\mathbb{R}, d\mu)$. En el caso de la representación polimérica el espacio de Hilbert es el espacio de funciones cuasiperiódicas [50]. De la teoría de estas funciones se sabe que todo elemento de este espacio vectorial admite un desarrollo del tipo

$$\psi(p) = \sum_{j=1}^n a_j e^{\frac{i}{\hbar} x_j p}, \text{ con } a \in \mathbb{C}, \quad (3.1)$$

donde el conjunto de puntos sobre los que está definida la suma: $\{x_j | x_j \in \mathbb{R}\}$, es llamado gráfico y es cualquier conjunto finito de puntos que se pueda formar con \mathbb{R} . El conjunto de todas las posibles combinaciones lineales finitas del tipo (3.1) forma un espacio vectorial. Además, es posible definir un producto interno tal que la base es ortonormal

$$\left\langle e^{\frac{i}{\hbar} x_j p} \middle| e^{\frac{i}{\hbar} x_k p} \right\rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dp e^{\frac{i}{\hbar} (x_k - x_j) p} = \delta_{x_k, x_j}. \quad (3.2)$$

De esta forma, el espacio de Hilbert de funciones cuasiperiódicas es la cerradura del espacio vectorial formado por combinaciones lineales de la forma (3.1). Un elemento de este espacio de Hilbert es una serie de la forma

$$\psi(p) = \sum_{j=1}^{\infty} a_j e^{-\frac{i}{\hbar} x_j p}, \quad \text{tal que} \quad \sum_{j=1}^{\infty} |a_j|^2 < \infty, \quad (3.3)$$

donde el conjunto de puntos $\{x_j | x_j \in \mathbb{R}\}$, ahora es cualquier conjunto numerable de puntos que se pueda formar con \mathbb{R} .

El álgebra básica de observables es definida como [19, 23, 25]

$$[\hat{x}, \hat{V}_\lambda] = -\lambda \hat{V}_\lambda, \quad \lambda \in \mathbb{R}. \quad (3.4)$$

la cual se cumple con la siguiente representación de los operadores \hat{x} y \hat{V}_λ^1

$$\hat{x} \Psi_{x_k}(p) = i\hbar \frac{\partial \Psi_{x_k}(p)}{\partial p}, \quad \hat{V}_\lambda \Psi_{x_k}(p) = e^{\frac{i}{\hbar} p \lambda} \Psi_{x_k}(p), \quad (3.5)$$

aquí hemos considerado $\Psi_{x_k}(p) := e^{\frac{i}{\hbar} p x_k}$. Los operadores \hat{V}_λ cumplen el álgebra

$$\hat{V}_{\lambda_1} \hat{V}_{\lambda_2} = \hat{V}_{\lambda_1 + \lambda_2}. \quad (3.6)$$

Vemos que estos operadores forman un grupo uniparamétrico siendo la identidad $\hat{V}_{\lambda=0} = I$ y el inverso es $\hat{V}_\lambda^{-1} = \hat{V}_\lambda^\dagger = \hat{V}_{-\lambda}$.

Consideremos los elementos de matriz de $\hat{V}(\lambda)$ en la base polimérica empleando (3.2) y la segunda ecuación de (3.5):

$$\begin{aligned} \langle \psi_\nu | \hat{V}(\lambda) | \psi_\mu \rangle &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dp e^{\frac{i}{\hbar} (\nu - \mu + \lambda) p} \\ &= \delta_{\nu + \lambda, \mu}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Si nos enfocamos en los elementos matriz de la diagonal, $\nu = \mu$, notamos que en el límite $\lambda \rightarrow 0$, estos elementos de matriz son cero, ya que de la definición de límite hallamos

$$\begin{aligned} |\delta_{\mu + \lambda, \mu} - 0| < \epsilon, \quad |\lambda - 0| < \delta \quad \forall \lambda = \epsilon = \delta \neq 0, \\ \Rightarrow \lim_{\lambda \rightarrow 0} \langle \psi_\mu | \hat{V}(\lambda) | \psi_\mu \rangle = 0. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Por otro lado, si ahora tenemos en cuenta los elementos de matriz de $\hat{V}(\lambda = 0)$ con $\nu = \mu$, encontramos

$$\langle \psi_\mu | \hat{V}(\lambda = 0) | \psi_\mu \rangle = 1. \quad (3.9)$$

Del análisis anterior concluimos que

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \langle \psi_\mu | \hat{V}(\lambda) | \psi_\mu \rangle \neq \langle \psi_\mu | \hat{V}(\lambda = 0) | \psi_\mu \rangle. \quad (3.10)$$

Esto nos dice que los operadores $\hat{V}(\lambda)$ no son débilmente continuos en la representación polimérica. Por consiguiente, no existe el generador del grupo, de acuerdo con el teorema de Stone-von Neumann [51]. Este generador es el operador de momento \hat{p} .

¹ \hat{V}_λ multiplica a la función de onda $\Phi(p)$ por una fase.

Ahora, sabemos que para pasar a la descripción cuántica del sistema debemos cambiar las funciones del espacio fase $f(p, q)$ a un conjunto de operadores definidos en un espacio de Hilbert $\hat{f}(p, q)$, omitiendo usualmente los problemas de ordenamiento. En la cuantización polimérica se presenta el problema de como representar la variable p . Una propuesta para solventar esto, es guiada por la descripción cuántica estándar, así como la descripción clásica del sistema: sabemos de la teoría de Schrödinger que el operador de traslaciones $\hat{V}(\lambda)$ se puede asociar con el operador $e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\hat{p}}$. Entonces, la propuesta es aproximar en el espacio fase el momento de la forma

$$p \sim \frac{\hbar}{\lambda} \sin\left(\frac{p\lambda}{\hbar}\right), \quad (3.11)$$

$$\Rightarrow p \sim \frac{\hbar}{2i\lambda} \left(e^{\frac{i}{\hbar}\lambda p} - e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda p} \right). \quad (3.12)$$

Esta aproximación es válida en el régimen que $p \ll \frac{\hbar}{\lambda}$. Lo que sigue es promover la ec. (3.12) a operador

$$\hat{p}_\lambda := \frac{\hbar}{2i\lambda} \left(\hat{V}_\lambda - \hat{V}_{-\lambda} \right), \quad (3.13)$$

Luego, podemos construir el operador $\hat{p}_\lambda^2 := \hat{p}_\lambda \hat{p}_\lambda$, para definir el operador Hamiltoniano \hat{H}_λ , así tenemos

$$\hat{H}_\lambda = \frac{\hbar^2}{8m\lambda^2} \left[2 - \hat{V}_{2\lambda} - \hat{V}_{-2\lambda} \right] + \mathcal{V}(\hat{x}). \quad (3.14)$$

Por otra parte, como vimos anteriormente, el espacio de Hilbert polimérico \mathcal{H}_{poly} depende de los conjuntos de puntos numerables $\{x_k\}$ que se pueden formar con la recta real \mathbb{R} . Existe otra forma equivalente de definir \mathcal{H}_{poly} [19, 23]. Ésta es a través de redes regulares infinitas, γ_{λ_0, x_0} , las cuales están caracterizadas por el tamaño del paso de la red λ_0 y un punto de referencia x_0 , que cumple la condición: $x_0 \in [0, \lambda_0)$. Así, una red se define como

$$\gamma_{\lambda_0, x_0} := \{x_k | x_k = x_0 + k\lambda_0, \forall k \in \mathbb{Z}\}.$$

De igual forma, asociamos un espacio de Hilbert de la forma (3.3) con cada red $\mathcal{H}_{\gamma_{\lambda_0, x_0}}$. Por consiguiente, el espacio de Hilbert polimérico se representará como

$$\mathcal{H}_{poly} = \bigoplus_{x_0 \in [0, \lambda_0)} \mathcal{H}_{\gamma_{\lambda_0, x_0}}. \quad (3.15)$$

Dada la forma del espacio del Hilbert polimérico (3.15) y la forma del término cinético en el hamiltoniano polimérico (3.14), restringimos el operador de traslaciones \hat{V}_λ a traslaciones sobre la misma red regular: $\hat{V}_{n\lambda_0}$, con $n \in \mathbb{Z}$, además, lo usual es trabajar en la red que pasa por el origen $x_0 = 0$ [19, 23]. De esta forma, el hamiltoniano polimérico (3.14) llega a ser

$$\hat{H}_{\lambda_0} = \frac{\hbar^2}{8m\lambda_0^2} \left[2 - \hat{V}_{2\lambda_0} - \hat{V}_{-2\lambda_0} \right] + \mathcal{V}(\hat{x}). \quad (3.16)$$

Asimismo, las relaciones de cerradura de los vectores propios de los operadores de posición y de traslación, respectivamente, son [23, 25]

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} |\lambda_0 l\rangle \langle \lambda_0 l| = \hat{1}, \quad \frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp |p\rangle \langle p| = \hat{1}. \quad (3.17)$$

Con esto hemos discutido los elementos más básicos de la cuantización polimérica. En la siguiente subsección discutiremos las propiedades más elementales del oscilador armónico polimérico.

3.1.2. Oscilador armónico simple en la representación polimérica

En esta subsección mencionamos las soluciones a la ecuación de valores propios del OAP en espacio de momentos, la cual es la ecuación de Mathieu [15, 19, 24]. La ecuación de Mathieu puede ser asociada con un péndulo cuántico, por lo que el OAP puede ser interpretado de forma análoga, así el espectro del OAP presenta dos regímenes [52, 53]: el de OAS (bajas energías) y el de rotor cuántico (altas energías).

El hamiltoniano del OAP de acuerdo con (3.16) será

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{8m\lambda_0^2} \left[2 - \hat{V}_{2\lambda_0} - \hat{V}_{-2\lambda_0} \right] + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2. \quad (3.18)$$

En espacio de momentos (donde \hat{V}_{λ_0} es diagonal), si consideramos la representación de \hat{x} y \hat{V}_{λ_0} (2), la ecuación de valores propios para el hamiltoniano (3.18) llega a ser

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{4m\lambda_0^2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\lambda_0 p}{\hbar}\right) \right] - \frac{m\omega^2 \lambda_0^2 \hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right\} \psi(p) = E\psi(p).$$

Esta ecuación se puede escribir como una ecuación de Mathieu si definimos:

$$u := \frac{\lambda_0 p}{\hbar} + \frac{\pi}{2}, \quad (3.19)$$

$$g := m\omega\lambda_0^2, \quad (3.20)$$

$$\alpha := \frac{\hbar^2}{4g^2}, \quad (3.21)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial u^2} \psi(u) + \left[\left(\frac{2E}{\omega g} - 2\alpha \right) - 2\alpha \cos(2u) \right] \psi(u) = 0. \quad (3.22)$$

La ecuación de Mathieu tiene soluciones periódicas [53], las cuales son compatibles con las condiciones de frontera del espacio de Hilbert polimérico vinculado a una red regular de paso λ_0 que pasa por el origen: los puntos en esta red tienen la forma $x_n = n\lambda_0$, por tanto los elementos del Hilbert (3.1) tienen la forma de series de Fourier. Las soluciones mencionadas de la ecuación de Mathieu son los cosenos y senos elípticos $ce_n(u)$ y $se_n(u)$, respectivamente [53]. Así, las funciones propias del OAP son [15, 19]

$$\psi_{2n} = \pi^{-\frac{1}{2}} ce_n(\alpha, u), \quad \psi_{2n+1} = \pi^{-\frac{1}{2}} se_{n+1}(\alpha, u). \quad (3.23)$$

El espectro de energía se obtiene de los valores característicos de la ecuación Mathieu a_n y b_n [53]. Los valores a_n corresponden a las soluciones pares ψ_{2n} mientras los valores b_n corresponden a las soluciones impares ψ_{2n+1} . En nuestro caso, los valores característicos de la ecuación Mathieu están relacionados con $\frac{2E}{\omega g} - 2\alpha$:

$$\frac{2E_{2n}}{g\omega} - 2\alpha = a_n(\alpha), \quad \frac{2E_{2n+1}}{g\omega} - 2\alpha = b_{n+1}(\alpha). \quad (3.24)$$

Estas expresiones presentan dos comportamientos asintóticos [15, 24, 53]: el que se denomina de bajas energías, $\alpha > 1$, que está relacionado con el OAS, y el llamado de altas energías, $\alpha < 1$, el cual está relacionado con un rotor cuántico

$$\frac{E_{2n}}{\omega} \approx \frac{E_{2n+1}}{\omega} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar - \frac{(2n+1)^2 + 1}{16} g + \mathcal{O}(g^2), \quad (3.25)$$

$$\frac{E_{2n-1}}{\omega} \approx \frac{E_{2n}}{\omega} = \frac{n^2 g}{2} - \frac{\hbar^2}{4g} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{g^3}\right). \quad (3.26)$$

Como habíamos dicho, el OAP puede ser asociado con el péndulo cuántico, esto refleja el hecho de que la cuantización polimérica no es una teoría equivalente a la de Schrödinger [19, 23]. Sin embargo, es posible recobrar el espectro estándar del OAS de la ecuación (3.25), si consideramos que la escala de la red λ_0 es mucho menor que la longitud característica de OAS $d = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, lo cual es equivalente a $g \ll \hbar$, así los términos proporcionales a g en (3.25) son negables, quedando el espectro del OAS.

En la siguiente sección resolveremos el OAP en el régimen de rotor mediante teoría de perturbaciones. El régimen de OAS puede ser consultado en [19, 52, 54, 26], aquí, sólo mencionaremos que este régimen ha sido estudiado mediante dos puntos de vista en la representación polimérica: Uno donde se asocia el paso de la red, el parámetro λ_0 , con la longitud de Planck [19], que si resulta muy pequeña comparada con la longitud característica del OAS $d = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, nos deja recuperar el espectro del OAP, como ya dijimos anteriormente. En la otra propuesta se considera el parámetro λ_0 como un parámetro de renormalización, el cual permite establecer el límite continuo de la representación polimérica, que resulta ser la representación de Schrödinger [26].

3.2. Oscilador armónico polimérico mediante teoría de perturbaciones

En esta sección calculamos el espectro de energía y los estados del OAP a altas energías (régimen de rotor) mediante teoría de perturbaciones. El OAP fue estudiado por primera vez en [19], y después en otros trabajos como [15, 24, 26, 55, 33]. Sin embargo, no se había implementado anteriormente la teoría de perturbaciones para su solución. Parte de nuestro trabajo es el análisis del OAP mediante teoría de perturbaciones. La teoría de perturbaciones es estudiada en el Apéndice B.

La idea de aproximar el OAP por medio de teoría de perturbaciones es inspirada del péndulo cuántico [52, 56], recordemos que el OAP puede ser pensado como un péndulo cuántico, pues la dinámica de ambos está gobernada por la ecuación de Mathieu. Debemos precisar que el análisis que presentaremos está basado sólo de manera parcial en [52], pues esta referencia analiza las correcciones hasta segundo orden del espectro de energía para el caso del péndulo cuántico. Nosotros hemos complementado el estudio con el cálculo de las correcciones a primer orden de los primeros cuatro estados excitados, pero en el contexto del OAP, para esto nos apoyamos de las referencias [46, 57], que fueron la base de la discusión del Apéndice B.

3.2.1. Rotor plano

Ahora estudiemos el hamiltoniano del OAP (3.18). Con el fin de llevar a cabo la teoría de perturbaciones, lo podemos considerar de la siguiente forma

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{W}, \quad \text{con} \quad \widehat{H}_0 = \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad \text{y} \quad \widehat{W} = \frac{\hbar^2}{8m\lambda_0^2}[2 - \widehat{V}_{2\lambda_0} - \widehat{V}_{-2\lambda_0}]. \quad (3.27)$$

Como trabajaremos en la representación de momentos, la parte con solución exacta será el término del potencial y el término cinético en este caso actuará como el potencial perturbativo. Definamos $\frac{\hbar^2}{8m\lambda_0^2} = \frac{\omega g \alpha}{2}$, donde g y α están dadas por las ecuaciones (3.20) y (3.21),

respectivamente. Así, el potencial perturbativo será

$$\widehat{W} = \frac{\omega g \alpha}{2} [2 - \widehat{V}_{2\lambda_0} - \widehat{V}_{-2\lambda_0}]. \quad (3.28)$$

Notemos que el potencial perturbativo tiene un parámetro natural para el orden de la correcciones: α .

El caso $\alpha = 0$ define lo que llamamos el régimen de rotor $\widehat{H}_0 = \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$. Este régimen se puede asociar con un régimen de altas energías, si consideramos el siguiente análisis:

$$\frac{E_{poly}}{\Delta E_n^{(OAS)}} := \frac{\frac{\hbar^2}{m\lambda_0^2}}{\omega\hbar} = \frac{\hbar}{m\omega\lambda_0^2} = \frac{\hbar}{g}. \quad \text{Si } \frac{g}{\hbar} \gg 1 \Rightarrow \frac{E_{poly}}{\Delta E_n^{(OAS)}} \rightarrow 0 \quad \text{y} \quad \alpha \rightarrow 0, \quad (3.29)$$

donde usamos (3.21) para establecer que $\alpha \rightarrow 0$. Observamos que el comportamiento $\alpha \rightarrow 0$, puede ser interpretado como resultado de que la frecuencia del oscilador ω , y por tanto la escala de energía $\Delta E_n^{(OAS)}$, es mucho mayor que la energía E_{poly} . Ésta última puede ser asociada con la energía de Planck, si consideramos $\lambda_0 = l_p$ y $m = m_p$, con l_p y m_p la longitud de Planck y la masa de Planck, respectivamente. Así E_{poly} es

$$E_{poly} = \frac{\hbar^2}{m\mu_0^2} = \frac{\hbar^2}{\sqrt{\frac{\hbar c}{G} \left(\frac{\hbar G}{c^3}\right)^2}} = \frac{\hbar^2}{\sqrt{\frac{\hbar^3 G}{c^5}}} = \sqrt{\frac{\hbar c^5}{G}} = E_p,$$

donde E_p denota la energía de Planck. De esta forma, el régimen de rotor puede ser asociado con energías transplanckianas, o como dijimos anteriormente, con un régimen de altas energías.

Ahora, nos enfocaremos en la parte soluble, en este caso en el régimen de rotor. La ecuación de valores propios para \widehat{H}_0 tomando el cambio de variable $u = \frac{\lambda_0 p}{\hbar} + \frac{\pi}{2}$ es

$$-\frac{\omega g}{2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} \varphi^{(0)}(u) = E \varphi^{(0)}(u). \quad (3.30)$$

Puesto que la variable u está definida en el intervalo $-\frac{\pi}{2} \leq u \leq \frac{3\pi}{2}$, y los estados poliméricos cumplen condiciones de frontera periódicas en el espacio de momentos, las soluciones deben cumplir la condiciones de frontera: $\varphi(-\frac{\pi}{2}) = \varphi(\frac{3\pi}{2})$. De esta forma las soluciones son

$$\varphi_n^{(0)}(u) = A_n e^{inu}, \quad \text{con} \quad \mathcal{E}_n^{(0)} = \frac{\omega g n^2}{2} \quad \text{y} \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (3.31)$$

Podemos ver que los niveles de energía $\mathcal{E}_n^{(0)}$ presentan una degeneración doble para $n \neq 0$. La constante A_n es determinada por normalización, realizando el cambio variable (3.19) en el producto interno polimérico, obtenemos

$$\begin{aligned} \langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} \left(\varphi_n^{(0)}(u) \right)^* \varphi_n^{(0)}(u) du = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\varphi_n^{(0)}(u) \right)^* \varphi_n^{(0)}(u) du \\ \Rightarrow 1 &= |A_n|^2 \Rightarrow \varphi_n^{(0)}(u) = e^{inu}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

aquí hemos asignado a la función de onda $\varphi_n^{(0)}(u)$ el ket $|n^{(0)}\rangle$. Notemos que en el primer paso hemos cambiado los límites de integración utilizando el período 2π del integrando, este paso siempre lo podemos hacer si el integrando presenta este período, debido a esto, en adelante ya no lo mencionaremos, sólo lo haremos.

3.2.2. Teoría de perturbaciones (caso sin degeneración)

En esta subsección calcularemos el estado base del OAP y su energía asociada implementando la teoría de perturbaciones desarrollada en el Apéndice B.2. Como vimos en la anterior subsección, el espectro de energía del rotor (3.31) es degenerado para casi todos los valores, excepto en el estado base $n = 0$. Resulta que la teoría de perturbaciones se realiza en forma diferente si tenemos un espectro de energía degenerado, o si tenemos un espectro sin degeneración (vea el Apéndice B), por lo que calcularemos de manera independiente las correcciones a la energía del estado base y al estado base.

Energía del estado base

De acuerdo a la ecuación (B.12) del Apéndice B.2, la primera corrección a la energía se obtiene del valor de expectación del potencial perturbativo en el estado base del rotor

$$\mathcal{E}_0^{(1)} = \widehat{W}_{00} = \frac{\omega g \alpha}{2} \langle 0^{(0)} | [2 - \widehat{V}_{2\lambda_0} - \widehat{V}_{-2\lambda_0}] | 0^{(0)} \rangle, \quad (3.33)$$

donde hemos introducido la notación $\widehat{W}_{nk} := \langle n | \widehat{W} | k \rangle$. Además, consideraremos α como el parámetro perturbativo, es decir, las potencias de α nos indican el orden de la corrección. Entonces, si tenemos en cuenta la relación de cerradura del operador de traslaciones $\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du |u\rangle \langle u| = \hat{1}$ y el estado base del rotor $\varphi_0^{(0)} = 1$, ecuación (3.31), $\mathcal{E}_0^{(1)}$ será

$$\mathcal{E}_0^{(1)} = \frac{\omega g \alpha}{2\pi} \int_0^{2\pi} du (\varphi_0^{(0)}(u))^* [1 + \cos(2u)] \varphi_0^{(0)}(u) = \omega g \alpha. \quad (3.34)$$

La segunda corrección a la energía del estado base, ecuación (B.15) del Apéndice B.2, es proporcional al cuadrado de la norma de los elementos matriz del potencial perturbativo entre el estado base y los demás estados propios del rotor:

$$\mathcal{E}_0^{(2)} = \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \frac{|\widehat{W}_{0k}|^2}{\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}}. \quad (3.35)$$

De esta forma, introduciendo las funciones propias del rotor (3.31), encontramos que

$$\widehat{W}_{0k} = \frac{\omega g \alpha}{2\pi} \int_0^{2\pi} du [1 + \cos(2u)] e^{iku} = \omega g \alpha \left[\delta_{k,0} + \frac{\delta_{k,2}}{2} + \frac{\delta_{k,-2}}{2} \right]. \quad (3.36)$$

$$\Rightarrow \mathcal{E}_0^{(2)} = \omega^2 g^2 \alpha^2 \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \frac{\left[\delta_{k,0} + \frac{\delta_{k,2}}{2} + \frac{\delta_{k,-2}}{2} \right]^2}{\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}} = -\frac{\omega g \alpha^2}{2}. \quad (3.37)$$

Luego, la energía del estado base a segundo orden sustituyendo (3.34) y (3.37) es

$$\begin{aligned} E_0 &= \mathcal{E}_0^{(0)} + \mathcal{E}_0^{(1)}(\alpha) + \mathcal{E}_0^{(2)}(\alpha^2) \\ &= \frac{\omega g}{2} (2\alpha) - \frac{\omega g \alpha^2}{2} \\ \Rightarrow \frac{2E_0}{\omega g} - 2\alpha &= -\frac{\alpha^2}{2}, \end{aligned} \quad (3.38)$$

Esta expresión coincide a orden α^2 con $a_0(\alpha)$ de la ecuación (20.2.25) de Abramowitz and Stegun [53]. Si sustituimos $\alpha = \frac{\hbar^2}{4g^2}$, obtenemos

$$\frac{E_0}{\omega} = \frac{\hbar^2}{4g} - \frac{\hbar^4}{64g^3}, \quad (3.39)$$

la cual coincide con Husain et-al [15]. Este resultado era de esperarse, si bien, en el contexto polimérico no se había hecho explícito el uso de la teoría de perturbaciones para resolver el OAP, si teníamos referencias [52, 56] de que la teoría de perturbaciones era un buen método para resolver de forma aproximada el péndulo.

Primera y segunda corrección al estado base

La primera corrección del estado base la obtenemos con el término proporcional a α de la ecuación (B.18):

$$\varphi_0^{(1)} = \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{0k} \varphi_k^{(0)}}{\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}}. \quad (3.40)$$

Como se tiene que $\widehat{W}_{k0} = \widehat{W}_{0k}^* = \widehat{W}_{0k}$, los elementos de matriz \widehat{W}_{k0} están dados por la ecuación (3.36), así la corrección a primer orden del estado base queda

$$\varphi_0^{(1)} = -\frac{\omega g \alpha}{2} \left[\frac{\varphi_2^{(0)}}{\mathcal{E}_2^{(0)}} + \frac{\varphi_{-2}^{(0)}}{\mathcal{E}_{-2}^{(0)}} \right] = -\frac{\alpha}{2} \cos(2u). \quad (3.41)$$

La corrección a segundo orden está dada por

$$\begin{aligned} \varphi_0^{(2)} = & \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \sum_{\substack{l=-\infty \\ l \neq 0}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{kl} \widehat{W}_{l0} \varphi_k^{(0)}}{(\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) (\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_l^{(0)})} - \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{00} \widehat{W}_{k0} \varphi_k^{(0)}}{(\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)})^2} \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \frac{|\widehat{W}_{k0}|^2 \varphi_0^{(0)}}{(\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)})^2}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

que son los términos proporcionales a α^2 en (B.18). De nuevo, los elementos de matriz \widehat{W}_{k0} están dados en (3.36), con lo que el primer término de la corrección a segundo orden (3.42) es

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \sum_{\substack{l=-\infty \\ l \neq 0}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{kl} \widehat{W}_{l0} \varphi_k^{(0)}}{\left(\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}\right) \left(\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_l^{(0)}\right)} \\
 &= \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \sum_{\substack{l=-\infty \\ l \neq 0}}^{\infty} \frac{(\omega g \alpha)^2 \left[\delta_{l,k} + \frac{\delta_{l,k-2}}{2} + \frac{\delta_{l,k+2}}{2} \right] \left[\delta_{l,0} + \frac{\delta_{l,2}}{2} + \frac{\delta_{l,-2}}{2} \right] \varphi_k^{(0)}}{\left(\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}\right) \left(\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_l^{(0)}\right)} \\
 &= \frac{(\omega g \alpha)^2}{2} \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \frac{\left[\delta_{k,2} + \frac{\delta_{k-2,2}}{2} + \frac{\delta_{k+2,2}}{2} \right] \varphi_k^{(0)}}{\mathcal{E}_k^{(0)} \mathcal{E}_2^{(0)}} + \frac{\left[\delta_{k,-2} + \frac{\delta_{k-2,-2}}{2} + \frac{\delta_{k+2,-2}}{2} \right] \varphi_k^{(0)}}{\mathcal{E}_k^{(0)} \mathcal{E}_{-2}^{(0)}} \\
 &= \frac{(\omega g \alpha)^2}{2 \mathcal{E}_2^{(0)}} \left[\frac{\varphi_2^{(0)}}{\mathcal{E}_2^{(0)}} + \frac{\varphi_4^{(0)}}{2 \mathcal{E}_4^{(0)}} + \frac{\varphi_{-2}^{(0)}}{\mathcal{E}_2^{(0)}} + \frac{\varphi_{-4}^{(0)}}{2 \mathcal{E}_4^{(0)}} \right] \\
 &= \frac{(\omega g \alpha)^2}{\mathcal{E}_2^{(0)}} \left[\frac{\cos(2u)}{\mathcal{E}_2^{(0)}} + \frac{\cos(4u)}{2 \mathcal{E}_4^{(0)}} \right]. \tag{3.43}
 \end{aligned}$$

El segundo término de la corrección a segundo orden (3.42) ocupando (3.34) y (3.36) es

$$\begin{aligned}
 \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{00} \widehat{W}_{k0} \varphi_k^{(0)}}{\left(\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}\right)^2} &= \omega^2 g^2 \alpha^2 \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \frac{\left[\delta_{k,0} + \frac{\delta_{k,2}}{2} + \frac{\delta_{k,-2}}{2} \right] \varphi_k^{(0)}}{\left(\mathcal{E}_k^{(0)}\right)^2} \\
 &= \frac{\omega^2 g^2 \alpha^2}{2} \left[\frac{\varphi_2^{(0)}}{\left(\mathcal{E}_2^{(0)}\right)^2} + \frac{\varphi_{-2}^{(0)}}{\left(\mathcal{E}_2^{(0)}\right)^2} \right] \\
 &= \frac{\omega^2 g^2 \alpha^2}{\left(\mathcal{E}_k^{(0)}\right)^2} \cos(2u). \tag{3.44}
 \end{aligned}$$

El tercer término de (3.42), el cual normaliza el estado base a segundo orden (vea el Apéndice B.2), lo evaluamos con (3.36) es

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \frac{|\widehat{W}_{k0}|^2 \varphi_0^{(0)}}{\left(\mathcal{E}_0^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}\right)^2} = \omega^2 g^2 \alpha^2 \sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \frac{\left[\delta_{k,0} + \frac{\delta_{k,2}}{2} + \frac{\delta_{k,-2}}{2} \right]^2}{\left(\mathcal{E}_k^{(0)}\right)^2} = \frac{\omega^2 g^2 \alpha^2}{4 \left(\mathcal{E}_2^{(0)}\right)^2}. \tag{3.45}$$

Así, la corrección a segundo orden del estado base (3.42) sustituyendo (3.43), (3.44) y (3.45) resulta ser

$$\begin{aligned}
 \varphi_0^{(2)} &= \frac{(\omega g \alpha)^2}{\mathcal{E}_2^{(0)}} \left[\frac{\cos(2u)}{\mathcal{E}_2^{(0)}} + \frac{\cos(4u)}{2 \mathcal{E}_4^{(0)}} \right] - \frac{\omega^2 g^2 \alpha^2}{\left(\mathcal{E}_k^{(0)}\right)^2} \cos(2u) - \frac{\omega^2 g^2 \alpha^2}{4 \left(\mathcal{E}_2^{(0)}\right)^2} \\
 &= \frac{(\omega g \alpha)^2}{\mathcal{E}_2^{(0)}} \left[\frac{\cos(4u)}{2 \mathcal{E}_4^{(0)}} - \frac{1}{4 \left(\mathcal{E}_2^{(0)}\right)} \right] \\
 &= \alpha^2 \left[\frac{\cos(4u)}{32} - \frac{1}{16} \right]. \tag{3.46}
 \end{aligned}$$

De esta forma, el estado base a segundo orden se escribe como

$$\psi_0 = \varphi_0^{(0)} + \varphi_0^{(1)} + \varphi_0^{(2)} = 1 - \frac{\alpha}{2} \cos(2u) + \alpha^2 \left[\frac{\cos(4u)}{32} - \frac{1}{16} \right], \quad (3.47)$$

aquí hemos cambiado $\varphi_0 \rightarrow \psi_0$ para que el estado base esté en concordancia con la notación de los estados excitados, en los cuales a orden cero habrá un cambio de base debido a la degeneración que presentan. La expresión del estado base, hasta orden α^2 , ecuación (3.47), es proporcional al coseno elíptico $ce_0(z, \alpha)$, ecuación (20.2.27) de Abramowitz and Stegun [53]: $\psi_0 = \sqrt{2}ce_0(z, \alpha)$. El factor $\sqrt{2}$ es consecuencia de que el producto interno que consideramos tiene el factor $\frac{1}{2}$, que no presenta el producto interno con el que usualmente se normalizan las funciones Mathieu [54].

3.2.3. Teoría de perturbaciones (caso degenerado)

En esta subsección calculamos las correcciones hasta segundo orden de los primeros cuatro niveles de energía del OAP, así como la corrección a primer orden de los estados correspondientes. Recordemos que los estados propios excitados del rotor presentan una degeneración doble, como podemos ver en (3.31), por lo que los estados que analizaremos provienen de considerar $n = 1, 2$. Por consiguiente, emplearemos la teoría de perturbaciones para el caso degenerado. Es notable que esta degeneración vaya desapareciendo conforme calculamos las correcciones del espectro de energía, es decir, la corrección a primer orden en la energía desdobra el primer estado excitado del rotor, mientras que el resto de los estados excitados permanecen degenerados. La corrección a segunda orden en la energía desdobra el segundo estado excitado del rotor y los demás estados excitados permanecen degenerados, y así sucesivamente.

Primera corrección a la energía de los estados excitados y orden cero de los primeros dos estados excitados del OAP

Puesto que los estados excitados del rotor son degenerados (3.31), para hallar la primera corrección del n -ésimo nivel de energía, debemos diagonalizar la matriz formada con el potencial perturbativo y los estados propios de n -ésimo nivel (B.24):

$$M^{(1)} = \begin{pmatrix} \widehat{W}_{n_+n_+} & \widehat{W}_{n_+n_-} \\ \widehat{W}_{n_-n_+} & \widehat{W}_{n_-n_-} \end{pmatrix}, \quad (3.48)$$

donde hemos considerado $n_{\pm} = \pm n \Rightarrow \varphi_{n_{\pm}}^{(0)} = e^{\pm inu}$, siendo $n > 0$. De esta forma, tenemos que los elementos de la matriz $M_{AB}^{(1)} = \widehat{W}_{AB}$, con $A, B = n_+, n_-$, son

$$\widehat{W}_{n_+n_+} = \frac{\omega g \alpha}{2\pi} \int_0^{2\pi} du (\varphi_{n_+}^{(0)}(u))^* [1 + \cos(2u)] \varphi_{n_+}^{(0)}(u) \quad (3.49)$$

$$\widehat{W}_{n_+n_+} = \omega g \quad (3.50)$$

de igual forma se obtiene

$$\widehat{W}_{n_-n_-} = \omega g \alpha, \quad (3.51)$$

$$\widehat{W}_{n_+n_-} = \widehat{W}_{n_-n_+} = \frac{\omega g \alpha}{2} \delta_{n,1}. \quad (3.52)$$

De las ecuaciones (3.50), (3.51) y (3.52), vemos que la matriz $M^{(1)}$ tiene la forma

$$M^{(1)} = \omega g \alpha \begin{pmatrix} 1 & \frac{\delta_{n,1}}{2} \\ \frac{\delta_{n,1}}{2} & 1 \end{pmatrix}, \quad n \geq 1. \quad (3.53)$$

A partir de esta matriz (3.53) se obtienen dos ecuaciones características: una para $n = 1$ y la otra para $n > 1$. Así, diagonalizamos la matriz (3.53) para $n = 1$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \omega g \alpha - \mathcal{E}_{\pm 1}^{(1)} & \frac{\omega g \alpha}{2} \\ \frac{\omega g \alpha}{2} & \omega g \alpha - \mathcal{E}_{\pm 1}^{(1)} \end{bmatrix} &= (\omega g \alpha - \mathcal{E}_1^{(1)})^2 - \left(\frac{\omega g \alpha}{2}\right)^2 = 0 \\ \Rightarrow \mathcal{E}_{\pm 1,1}^{(1)} &= \frac{\omega g \alpha}{2}, \quad \mathcal{E}_{\pm 1,2}^{(1)} = \frac{3\omega g \alpha}{2}, \end{aligned} \quad (3.54)$$

aquí hemos agregado un índice a la corrección a primer orden de la energía para distinguir las dos raíces diferentes de la ecuación característica. El vector propio correspondiente al primer valor propio es

$$\psi_1^{(0)} = v_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

recodemos que las componentes del vector propio son las proyecciones del vector en los estados propios del rotor $\varphi_n^{(0)}$, entonces

$$\psi_1^{(0)} = v_1 \left(\varphi_1^{(0)} - \varphi_{-1}^{(0)} \right) = 2iv_1 \sin(u),$$

si normalizamos $\psi_1^{(0)}$, obtenemos $v_1 = \frac{-i}{\sqrt{2}}$, así el primer estado excitado sin degeneración a orden cero es

$$\psi_1^{(0)} = \sqrt{2} \sin(u). \quad (3.55)$$

De igual forma, si tomamos la normalización: $v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, el segundo estado excitado sin degeneración a orden cero es

$$\psi_2^{(0)} = \sqrt{2} \cos(u). \quad (3.56)$$

El primer y segundo nivel de energía los encontramos considerando la respectiva corrección a primer orden (3.54)

$$E_1 = \mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} + \mathcal{E}_{\pm 1,1}^{(1)} = \frac{\omega g}{2} + \frac{\omega g \alpha}{2}, \quad E_2 = \mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} + \mathcal{E}_{\pm 1,2}^{(1)} = \frac{\omega g}{2} + \frac{3\omega g \alpha}{2}. \quad (3.57)$$

Ahora, si diagonalizamos la matriz (3.53) para el caso $n > 1$, obtenemos la primera corrección en la energía de los demás estados

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \omega g \alpha - \mathcal{E}_{\pm n}^{(1)} & 0 \\ 0 & \omega g \alpha - \mathcal{E}_{\pm n}^{(1)} \end{bmatrix} &= (\omega g \alpha - \mathcal{E}_{\pm n}^{(1)})^2 = 0 \\ \Rightarrow \mathcal{E}_{\pm n}^{(1)} &= \omega g \alpha, \end{aligned} \quad (3.58)$$

de lo cual vemos que la degeneración no se remueve para $n > 1$.

Segunda corrección a la energía de los primero dos estados excitados

Como vimos en el apartado pasado, los primero dos estados excitados ψ_1 y ψ_2 ya no son degenerados a primer orden, entonces podemos calcular la corrección a segundo orden de la energía de estos estados con la ecuación (B.30) del Apéndice B.3. Debemos tener en cuenta que en la ecuación (B.30) los índices k y n se usan para los estados $\psi_k^{(0)}$ y $\varphi_n^{(0)}$. De esta forma, la corrección a segundo orden en la energía del primer estado excitado, $\mathcal{E}_{\pm 1,1}^{(2)}$, considerando $\psi_1^{(0)}$ (3.55) y $\varphi_j^{(0)}$ (3.31) resulta ser

$$\mathcal{E}_{\pm 1,1}^{(2)} = \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 1}}^{\infty} \frac{|\widehat{W}_{1j}|^2}{\mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}}, \quad \text{con} \quad \widehat{W}_{1j} = \frac{\omega g \alpha}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} du [1 + \cos(2u)] \sin(u) e^{iju}, \quad (3.59)$$

Así,

$$\mathcal{E}_{\pm 1,1}^{(2)} = \frac{(\omega g \alpha)^2}{8} \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 1}}^{\infty} \frac{[\delta_{j,3} - \delta_{j,-3}]^2}{\mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}} = -\frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{8}. \quad (3.60)$$

Para el segundo estado excitado, la corrección a segundo orden de la energía, $\mathcal{E}_{\pm 1,2}^{(2)}$, la evaluamos con $\psi_2^{(0)}$ (3.56) y $\varphi_j^{(0)}$ (3.31), así como (B.30):

$$\mathcal{E}_{\pm 1,2}^{(2)} = \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 1}}^{\infty} \frac{|\widehat{W}_{2j}|^2}{\mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}}, \quad \text{con} \quad \widehat{W}_{2j} = \frac{\omega g \alpha}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} du [1 + \cos(2u)] \cos(u) e^{iju}. \quad (3.61)$$

Con lo que obtenemos

$$\mathcal{E}_{\pm 1,2}^{(2)} = \frac{(\omega g \alpha)^2}{8} \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 1}}^{\infty} \frac{[\delta_{j,3} + \delta_{j,-3}]^2}{\mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}} = -\frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{8}.$$

Así, combinando la energía E_1 (3.57) con la corrección a segundo orden (3.60), obtenemos

$$\begin{aligned} E_1 &= \mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} + \mathcal{E}_{\pm 1,1}^{(1)} + \mathcal{E}_{\pm 1,1}^{(2)} = \frac{\omega g}{2} + \frac{\omega g \alpha}{2} - \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{8} \\ &\Rightarrow \frac{2E_1}{\omega g} - 2\alpha = 1 - \alpha - \frac{\alpha^2}{8}. \end{aligned}$$

Del mismo modo, la energía E_2 (3.57) considerando (3.61) llega a ser

$$\begin{aligned} E_2 &= \mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} + \mathcal{E}_{\pm 1,2}^{(1)} + \mathcal{E}_{\pm 1,2}^{(2)} = \frac{\omega g}{2} + \frac{3\omega g \alpha}{2} - \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{8} \\ &\Rightarrow \frac{2E_2}{\omega g} - 2\alpha = 1 + \alpha - \frac{\alpha^2}{8}. \end{aligned}$$

Las expresiones para E_1 y E_2 coinciden, respectivamente, a orden α^2 con $b_1(\alpha)$ y $a_1(-\alpha)$ de la ecuación (20.2.25) de Abramowitz and Stegun [53].

Segunda corrección a la energía para los estados excitados $m > 2$ y orden cero del tercer y cuarto estado excitado

Como hemos visto, el espectro de energía, para los estados del rotor con $n > 1$, permanece degenerado, por consiguiente, la corrección a segundo orden en la energía para estos estados se obtendrá de diagonalizar la matriz dada por la ecuación (B.35) del Apéndice B.3, que toma la siguiente forma

$$M^{(2)} = \begin{pmatrix} \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm n}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{n+j}\widehat{W}_{jn+}}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}} & \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm n}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{n+j}\widehat{W}_{jn-}}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}} \\ \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm n}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{n-j}\widehat{W}_{jn+}}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}} & \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm n}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{n-j}\widehat{W}_{jn-}}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}} \end{pmatrix}, \quad n > 1. \quad (3.62)$$

Empezamos con el elemento de matriz $M_{n+n+}^{(2)}$, vemos que \widehat{W}_{n+j} y \widehat{W}_{jn+} son

$$\widehat{W}_{n+j} = \frac{\omega g \alpha}{2\pi} \int_0^{2\pi} du [1 + \cos(2u)] e^{-inu} e^{iju} = \omega g \alpha \left[\delta_{n,j} + \frac{\delta_{j,n+2}}{2} + \frac{\delta_{j,n-2}}{2} \right],$$

y

$$\widehat{W}_{jn+} = \frac{\omega g \alpha}{2\pi} \int_0^{2\pi} du [1 + \cos(2u)] e^{inu} e^{-iju} = \omega g \alpha \left[\delta_{n,j} + \frac{\delta_{j,n+2}}{2} + \frac{\delta_{j,n-2}}{2} \right].$$

Con lo que $M_{n+n+}^{(2)}$ llega a ser

$$M_{n+n+}^{(2)} = \frac{(\omega g \alpha)^2}{4} \left[\frac{1}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_{n+2}^{(0)}} + \frac{1}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_{n-2}^{(0)}} \right]. \quad (3.63)$$

Los denominadores dentro del paréntesis son iguales a

$$\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_{n+2}^{(0)} = \frac{n^2 \omega g}{2} - \frac{(n+2)^2 \omega g}{2} = -2\omega g(n+1),$$

$$\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_{n-2}^{(0)} = \frac{n^2 \omega g}{2} - \frac{(n-2)^2 \omega g}{2} = 2\omega g(n-1).$$

Sustituyendo ambas expresiones en $M_{n+n+}^{(2)}$ (3.63) hallamos

$$M_{n+n+}^{(2)} = \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{2} \frac{1}{n^2 - 1}, \quad n > 1. \quad (3.64)$$

De igual forma, el elemento de matriz $M_{n-n-}^{(2)}$ es

$$M_{n-n-}^{(2)} = \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{2} \frac{1}{n^2 - 1}, \quad n > 1. \quad (3.65)$$

Ahora los términos fuera de la diagonal de (3.62), tenemos que el elemento de matriz

$M_{n_+n_-}^{(2)}$ será

$$\begin{aligned} M_{n_+n_-}^{(2)} &= (\omega g \alpha)^2 \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm n}}^{\infty} \frac{\left[\delta_{n,j} + \frac{\delta_{j,n+2}}{2} + \frac{\delta_{j,n-2}}{2} \right] \left[\delta_{-n,j} + \frac{\delta_{j,-n+2}}{2} + \frac{\delta_{j,-n-2}}{2} \right]}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}} \\ &= \frac{(\omega g \alpha)^2}{4} \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm n}}^{\infty} \frac{[\delta_{j,n+2} + \delta_{j,n-2}] [\delta_{j,-n+2} + \delta_{j,-n-2}]}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}} \end{aligned}$$

Para hallar los términos diferentes de cero tenemos que, el argumento de alguna de las deltas de Kronecker en el primer paréntesis debe ser igual al argumento de alguna de las deltas de Kronecker del segundo paréntesis. De esta manera, encontramos 4 ecuaciones

$$\begin{aligned} n - 2 &= -n - 2 \Rightarrow n = -n = 0, \\ n - 2 &= -n + 2 \Rightarrow 2n = 4, \Rightarrow n = 2, \\ n + 2 &= -n - 2 \Rightarrow 2n = -4, \Rightarrow n = -2, \\ n + 2 &= -n + 2 \Rightarrow n = -n = 0. \end{aligned}$$

De las cuatro soluciones, la única consistente es $n = 2$, pues recordemos que estamos analizando los casos con $n > 1$.

Entonces para $n = 2$, tenemos

$$M_{n_+n_-}^{(2)} = \frac{(\omega g \alpha)^2}{4} \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 2}}^{\infty} \frac{[\delta_{j,4} + \delta_{j,0}] [\delta_{j,0} + \delta_{j,-4}]}{\mathcal{E}_2^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}} = \frac{(\omega g \alpha)^2}{4} \frac{1}{\mathcal{E}_2^{(0)} - \mathcal{E}_0^{(0)}} = \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{4}$$

Para $n > 2$

$$M_{n_+n_-}^{(2)} = 0.$$

Luego

$$M_{n_+n_-}^{(2)} = \begin{cases} \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{4}, & n = 2, \\ 0, & n > 2. \end{cases} \quad (3.66)$$

Para el otro elemento de matriz fuera de la diagonal $M_{n_-n_+}^{(2)}$ haciendo un análisis similar encontramos

$$M_{n_-n_+}^{(2)} = \begin{cases} \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{4}, & n = 2, \\ 0, & n > 2. \end{cases} \quad (3.67)$$

De esta forma, teniendo en cuenta los elementos de matriz $M_{AB}^{(2)}$, con $A, B = n_+, n_-$, ecuaciones (3.64),(3.65),(3.66) y (3.67), la matriz para la corrección a segundo orden de la energía (3.62), presentará la forma

$$M^{(2)} = \frac{\omega g \alpha^2}{4} \begin{pmatrix} \frac{1}{n^2-1} & \frac{\delta_{n,2}}{2} \\ \frac{\delta_{n,2}}{2} & \frac{1}{n^2-1} \end{pmatrix}, \quad n > 1, \quad (3.68)$$

la cual tiene dos casos: $n = 2$ y $n > 2$. La ecuación característica para $n = 2$ en (3.68) es

$$\begin{bmatrix} \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{6} - \mathcal{E}_{\pm 2}^{(2)} & \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{4} \\ \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{4} & \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{6} - \mathcal{E}_{\pm 2}^{(2)} \end{bmatrix} = 0.$$

Los valores propios son

$$\Rightarrow \left(\frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{6} - \mathcal{E}_{\pm 2}^{(2)} \right)^2 - \left(\frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{4} \right)^2 = 0$$

$$\mathcal{E}_{\pm 2,1}^{(2)} = -\frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{12}, \quad (3.69)$$

$$\mathcal{E}_{\pm 2,2}^{(2)} = \frac{\omega g}{2} \frac{5\alpha^2}{12}, \quad (3.70)$$

se ha agregado un índice a la corrección a segundo orden de la energía para diferenciar las dos raíces diferentes de la ecuación característica. El vector propio correspondiente al primer valor propio es

$$\begin{aligned} \psi_3^{(0)} &= v_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \psi_3^{(0)} &= v_1 \left(\varphi_2^{(0)} - \varphi_{-2}^{(0)} \right) = 2iv_1 \sin(2u). \end{aligned}$$

Si normalizamos $\psi_3^{(0)}$, entonces $v_1 = \frac{-i}{\sqrt{2}}$, así obtenemos el tercer estado excitado sin degeneración a orden cero

$$\psi_3^{(0)} = \sqrt{2} \sin(2u). \quad (3.71)$$

Asimismo, si normalizamos con $v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, el cuarto estado excitado sin degeneración a orden cero es

$$\psi_4^{(0)} = \sqrt{2} \cos(2u). \quad (3.72)$$

Las energías correspondientes al tercer y cuarto estado excitado, ψ_3 y ψ_4 , evaluando las ecuaciones (3.58), (3.69) y (3.70) adquieren la forma

$$\frac{2E_3}{\omega g} - 2\alpha = 4 - \frac{\alpha^2}{12}, \quad (3.73)$$

$$\frac{2E_4}{\omega g} - 2\alpha = 4 + \frac{5\alpha^2}{12}, \quad (3.74)$$

las cuales corresponden a b_2 y a_2 de la ecuación (20.2.25) en Abramowitz and Stegun [53], respectivamente.

Para $n > 2$, tenemos que la matriz (3.68) es

$$M_{n>2}^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{2(n^2-1)} & 0 \\ 0 & \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{2(n^2-1)} \end{pmatrix}.$$

La cual tiene la siguiente ecuación característica y valores propios

$$\begin{bmatrix} \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{2(n^2-1)} - \mathcal{E}_n^{(2)} & 0 \\ 0 & \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{2(n^2-1)} - \mathcal{E}_n^{(2)} \end{bmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \mathcal{E}_n^{(2)} = \frac{\omega g}{2} \frac{\alpha^2}{2(n^2 - 1)}, \quad n > 2.$$

Por tanto, para $n > 2$, la degeneración no se rompe.

Primera corrección a los primeros dos estados excitados

Puesto que, los vectores propios a orden cero asociados con $n = 1$, $\psi_1^{(0)}$ y $\psi_2^{(0)}$, han sido especificados, la corrección a primer orden del estado ψ_1 puede ser calculada a través de la ecuación (B.32) del Apéndice B.3, la cual consiste de dos términos:

$$\psi_1^{(1)} = \Psi_1^{(1)} + \Phi_1^{(1)}, \quad (3.75)$$

$$\Psi_1^{(1)} = \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 1}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{j1} \varphi_j^{(0)}}{\mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}}, \quad (3.76)$$

$$\Phi_1^{(1)} = \frac{1}{\mathcal{E}_{\pm 1,2}^{(1)} - \mathcal{E}_{\pm 1,1}^{(1)}} \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 1}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{j1} \widehat{W}_{2j} \psi_2^{(0)}}{\mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}}. \quad (3.77)$$

Entonces, para $\Psi_1^{(1)}$, ecuación (3.76), vemos que \widehat{W}_{j1} se puede obtener de (3.59), así

$$\widehat{W}_{j1} = \frac{-i\omega g \alpha}{2\sqrt{2}} [\delta_{j,3} - \delta_{j,-3}]. \quad (3.78)$$

De esta forma obtenemos

$$\Psi_1^{(1)}(u) = \frac{-i\omega g \alpha}{2\sqrt{2}} \left[\frac{\varphi_3^{(0)} - \varphi_{-3}^{(0)}}{\mathcal{E}_1^{(0)} - \mathcal{E}_3^{(0)}} \right] = -\frac{\alpha}{8} \sqrt{2} \sin(3u). \quad (3.79)$$

Para $\Phi_1^{(1)}$ además de \widehat{W}_{j1} requerimos de \widehat{W}_{2j} , que lo podemos hallar de (3.61), de esta forma

$$\widehat{W}_{2j} = \frac{\omega g \alpha}{2\sqrt{2}} [3\delta_{j,1} + 3\delta_{j,-1} + \delta_{j,3} + \delta_{j,-3}]. \quad (3.80)$$

Con lo que, si consideramos $\mathcal{E}_{\pm 1,1}^{(1)} - \mathcal{E}_{\pm 1,2}^{(1)}$ de (3.54) así como (3.78) y (3.80) en $\Phi_1^{(1)}$ (3.77), encontramos

$$\Phi_1^{(1)}(u) = -\frac{i\omega g \alpha}{4\sqrt{2}} \cos u \left[\frac{1}{\mathcal{E}_1^{(0)} - \mathcal{E}_3^{(0)}} - \frac{1}{\mathcal{E}_1^{(0)} - \mathcal{E}_{-3}^{(0)}} \right] = 0. \quad (3.81)$$

Luego, sustituyendo (3.79) y (3.81), $\psi_1^{(1)}$ dado en (3.75) es

$$\psi_1^{(1)} = -\frac{\alpha}{8} \sqrt{2} \sin(3u).$$

Para ψ_2 tenemos

$$\psi_2^{(1)} = \bar{\Psi}_2^{(1)} + \Phi_2^{(1)}, \quad (3.82)$$

$$\bar{\Psi}_2^{(1)} = \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 1}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{j2} \varphi_j^{(0)}}{\mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}}, \quad (3.83)$$

$$\Phi_2^{(1)} = \frac{1}{\mathcal{E}_{\pm 1,1}^{(1)} - \mathcal{E}_{\pm 1,2}^{(1)}} \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 1}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{j2} \widehat{W}_{1j} \psi_1^{(0)}}{\mathcal{E}_{\pm 1}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}}. \quad (3.84)$$

De esta forma, $\bar{\Psi}_2^{(2)}$ es

$$\bar{\Psi}_2^{(1)} = \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 1}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{j2} \varphi_j^{(0)}}{\mathcal{E}_1^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}}, \quad \text{con} \quad \widehat{W}_{j2} = \frac{\omega g \alpha}{2\sqrt{2}} [\delta_{j,3} + \delta_{j,-3}],$$

donde se utilizó la ecuación (3.61). Luego

$$\bar{\Psi}_2^{(1)} = \frac{\omega g \alpha}{2\sqrt{2}} \left[\frac{\varphi_3^{(0)} + \varphi_{-3}^{(0)}}{\mathcal{E}_1^{(0)} - \mathcal{E}_3^{(0)}} \right] = -\frac{\alpha}{8} \sqrt{2} \cos(3u).$$

Además, de manera semejante a $\Phi_1^{(1)}$, hallamos que $\Phi_2^{(2)} = 0$, por lo que $\psi_2^{(1)}$ será

$$\psi_2^{(1)} = -\frac{\alpha}{8} \sqrt{2} \cos(3u).$$

Así, los primero dos estados excitados a primer orden son:

$$\psi_1 = \psi_1^{(0)} + \psi_1^{(1)} = \sqrt{2} \sin(u) - \frac{\alpha}{8} \sqrt{2} \sin(3u)$$

y

$$\psi_2 = \psi_2^{(0)} + \psi_2^{(1)} = \sqrt{2} \cos(u) - \frac{\alpha}{8} \sqrt{2} \cos(3u).$$

Estos estados a orden α se pueden escribir como $\psi_1 = \sqrt{2} s e_1(u, \alpha)$ y $\psi_2 = \sqrt{2} c e_1(u, \alpha)$, ecuación (20.2.27) de [53].

Corrección a primer orden en el tercer y cuarto estado excitado

Puesto que los estados ψ_3 y ψ_4 han sido determinados a orden cero, podemos calcular sus correcciones a primer orden. Así, para ψ_3 tenemos

$$\psi_3^{(1)} = \Psi_3^{(1)} + \Phi_3^{(1)}, \quad (3.85)$$

$$\Psi_3^{(1)} = \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 2}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{j3} \varphi_j^{(0)}}{\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}}, \quad (3.86)$$

$$\begin{aligned} \Phi_3^{(1)} = & \frac{1}{\left(\mathcal{E}_{\pm 2,1}^{(2)} - \mathcal{E}_{\pm 2,2}^{(2)}\right)} \sum_{\substack{i,j=-\infty \\ i,j \neq \pm 2}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{i3} \widehat{W}_{ji} \widehat{W}_{4j} \psi_4^{(0)}}{(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_i^{(0)})(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)})} \\ & - \frac{1}{\mathcal{E}_{\pm 2,1}^{(2)} - \mathcal{E}_{\pm 2,2}^{(2)}} \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 2}}^{\infty} \frac{\mathcal{E}_{\pm 2}^{(1)} \widehat{W}_{j3} \widehat{W}_{4j} \psi_4^{(0)}}{\left(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}\right)^2}. \end{aligned} \quad (3.87)$$

donde hemos usado la ecuación (B.44). Entonces, para $\Psi_3^{(1)}$ tenemos

$$\Psi_3^{(1)} = \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 2}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{j3} \varphi_j^{(0)}}{\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}}, \quad \text{siendo} \quad \widehat{W}_{j3} = \frac{\omega g \alpha}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} du [1 + \cos(2u)] \sin(2u) e^{-iju},$$

donde hallamos

$$\widehat{W}_{j3} = \frac{-i\omega g \alpha}{\sqrt{2}} \left[\delta_{j,2} - \delta_{j,-2} + \frac{\delta_{j,4}}{2} - \frac{\delta_{j,-4}}{2} \right]. \quad (3.88)$$

Luego, $\Psi_3^{(1)}$ resulta ser

$$\Psi_3^{(1)} = -\frac{\alpha}{12} \sqrt{2} \sin(4u). \quad (3.89)$$

Para hallar $\Phi_3^{(1)}$, ecuación (3.87), necesitamos calcular \widehat{W}_{4j} y \widehat{W}_{ji} , que resultan ser

$$\begin{aligned} \widehat{W}_{4j} &= \frac{\omega g \alpha}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} du [1 + \cos(2u)] \cos(2u) e^{iju} \\ &= \frac{\omega g \alpha}{\sqrt{2}} \left[\delta_{s,0} + \delta_{s,2} + \delta_{s,-2} + \frac{\delta_{s,4}}{2} + \frac{\delta_{s,-4}}{2} \right] \end{aligned} \quad (3.90)$$

y

$$\begin{aligned} \widehat{W}_{ji} &= \frac{\omega g \alpha}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} du [1 + \cos(2u)] e^{i(i-j)u} \\ &= \omega g \alpha \left[\delta_{i,j} + \frac{\delta_{j+2,i}}{2} + \frac{\delta_{j-2,i}}{2} \right]. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Evaluando (3.88), (3.90) y (3.91) en (3.87), $\Phi_3^{(1)}$ llega a ser

$$\begin{aligned}
 \Phi_3^{(1)}(u) &= i\sqrt{2}\omega^2 g^2 \alpha \cos(2u) \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 2}}^{\infty} \left\{ \frac{\left[\delta_{j,4} + \frac{\delta_{j,6}}{2} \right] \left[\delta_{j,0} + \frac{\delta_{j,4}}{2} + \frac{\delta_{j,-4}}{2} \right]}{(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)})(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_4^{(0)})} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\left[\delta_{j,-4} + \frac{\delta_{j,-6}}{2} \right] \left[\delta_{j,0} + \frac{\delta_{j,4}}{2} + \frac{\delta_{j,-4}}{2} \right]}{(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)})(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_{-4}^{(0)})} + 2 \frac{\left[\frac{\delta_{j,4}}{2} - \frac{\delta_{j,-4}}{2} \right] \left[\delta_{j,0} + \frac{\delta_{j,4}}{2} + \frac{\delta_{j,-4}}{2} \right]}{(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)})^2} \right\} \\
 &= i\sqrt{2}\omega^2 g^2 \alpha \cos(2u) \left\{ \frac{1}{(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_4^{(0)})^2} - \frac{1}{(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_{-4}^{(0)})^2} \right\} \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{3.92}$$

Así, combinando (3.85), (3.89) y (3.92), $\psi_3^{(1)}$ es

$$\psi_3^{(1)} = -\frac{\alpha}{12} \sqrt{2} \sin(4u)$$

Por otro lado, para ψ_4 tenemos

$$\psi_4^{(1)} = \Psi_4^{(1)} + \Phi_4^{(1)}, \tag{3.93}$$

$$\Psi_4^{(1)} = \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 2}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{j4} \varphi_j^{(0)}}{\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}}, \tag{3.94}$$

$$\begin{aligned}
 \Phi_4^{(1)} &= \frac{1}{(\mathcal{E}_{\pm 2,2}^{(2)} - \mathcal{E}_{\pm 2,1}^{(2)})} \sum_{\substack{i,j=-\infty \\ i,j \neq \pm 2}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{i4} \widehat{W}_{ji} \widehat{W}_{3j} \psi_3^{(0)}}{(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_i^{(0)})(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)})} \\
 &\quad - \frac{1}{\mathcal{E}_{\pm 2,2}^{(2)} - \mathcal{E}_{\pm 2,1}^{(2)}} \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 2}}^{\infty} \frac{\mathcal{E}_{\pm 2}^{(1)} \widehat{W}_{j4} \widehat{W}_{3j} \psi_3^{(0)}}{(\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)})^2}.
 \end{aligned} \tag{3.95}$$

De esta forma, hallamos que $\Psi_4^{(1)}$ está dado por

$$\Psi_4^{(1)} = \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq \pm 2}}^{\infty} \frac{\widehat{W}_{j4} \varphi_j^{(0)}}{\mathcal{E}_{\pm 2}^{(0)} - \mathcal{E}_j^{(0)}}, \quad \text{con} \quad \widehat{W}_{j4} = \frac{\omega g \alpha}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} du [1 + \cos(2u)] \cos(2u) e^{-iju},$$

donde se tiene

$$\widehat{W}_{j4} = \frac{\omega g \alpha}{\sqrt{2}} \left[\delta_{j,0} + \delta_{j,2} + \delta_{j,-2} + \frac{\delta_{j,4}}{2} + \frac{\delta_{j,-4}}{2} \right].$$

Por consiguiente

$$\Psi_4^{(1)} = -\alpha \left[\frac{1}{12} \sqrt{2} \cos(4u) - \frac{\sqrt{2}}{4} \right].$$

Cuadro 3.1: Valores y vectores propios perturbativos del hamiltoniano del oscilador armónico polimérico. El espectro de energía es mostrado hasta segundo orden mientras que los estados son puestos hasta primer orden. Ellos llegan a ser los valores característicos y las soluciones de la ecuación de Mathieu [53].

m	$\frac{2E_m}{\omega g} - 2\alpha, \mathcal{O}(\alpha^2)$	$\psi_m, \mathcal{O}(\alpha)$
0	$-\frac{\alpha^2}{2} + \dots = a_0(\alpha)$	$1 - \frac{\alpha}{2} \cos(2u) + \dots = \sqrt{2} ce_0(u, \alpha)$
1	$1 - \alpha - \frac{\alpha^2}{8} + \dots = b_1(\alpha)$	$\sqrt{2} [\sin(u) - \frac{\alpha}{8} \sin(3u) + \dots] = \sqrt{2} se_1(u, \alpha)$
2	$1 + \alpha - \frac{\alpha^2}{8} + \dots = a_1(\alpha)$	$\sqrt{2} [\cos(u) - \frac{\alpha}{8} \cos(3u) + \dots] = \sqrt{2} ce_1(u, \alpha)$
3	$4 - \frac{\alpha^2}{12} + \dots = b_2(\alpha)$	$\sqrt{2} [\sin(2u) - \frac{\alpha}{12} \sin(4u) + \dots] = \sqrt{2} se_2(u, \alpha)$
4	$4 + \frac{5\alpha^2}{12} + \dots = a_2(\alpha)$	$\sqrt{2} \{ \cos(2u) - \alpha [\frac{1}{12} \cos(4u) - \frac{1}{4}] + \dots \} = \sqrt{2} ce_2(u, \alpha)$

Asimismo, del mismo modo a $\Phi_3^{(1)}$, obtenemos $\Phi_4^{(1)} = 0$. Por consiguiente, $\psi_4^{(1)}$ quedará

$$\psi_4^{(1)} = -\alpha \left[\frac{1}{12} \sqrt{2} \cos(4u) - \frac{\sqrt{2}}{4} \right].$$

Así, a primer orden, los estados ψ_3 y ψ_4 son

$$\psi_3 = \psi_3^{(0)} + \psi_3^{(1)} = \sqrt{2} \sin(2u) - \frac{\alpha}{12} \sqrt{2} \sin(4u),$$

$$\psi_4 = \psi_4^{(0)} + \psi_4^{(1)} = \sqrt{2} \cos(2u) - \alpha \left[\frac{1}{12} \sqrt{2} \cos(4u) - \frac{\sqrt{2}}{4} \right].$$

Estas expresiones, de acuerdo a la ecuación (20.2.27) en [53], se puede expresar: $\psi_3 = \sqrt{2} se_2(u, \alpha)$ y $\psi_4 = \sqrt{2} ce_2(u, \alpha)$.

Con esto finalizamos nuestro análisis de la teoría de perturbaciones para el OAP. Enfatizamos que guiados parcialmente en [52, 56], hemos incorporado la teoría de perturbaciones en el contexto del OAP, así calculamos las correcciones a segundo orden de la energía y la corrección a primer orden de los primero cuatro estados excitados. Nuestro resultados están resumidos en el cuadro 3.1.

Por otra parte, en las siguientes secciones y siguientes capítulos veremos que introducir la teoría de perturbaciones en la representación polimérica, nos permitirá ser sistemáticos en el tratamiento de la función de un punto y de dos puntos del OAP, tanto en el formalismo hamiltoniano como en el de integral de trayectoria. Notablemente, en ambos formalismos el punto de partida para realizar la teoría de perturbaciones es la aproximación de rotor en espacios de momentos. Esto nos ha llevado a pensar que implementar la teoría de perturbaciones en el régimen de rotor puede ser un método sistemático para resolver otros problemas en la representación polimérica, diferentes al OAP, esto es parte de nuestro trabajo futuro.

En la siguientes secciones calcularemos la función de un punto y de dos puntos del OAP dentro del formalismo hamiltoniano, la idea será usar las series perturbativas obtenidas en esta sección.

3.3. Simetría de paridad y correcciones a primer orden

En esta sección discutimos un argumento que generaliza los resultados que obtuvimos en la sección anterior de las correcciones a primer orden de los estados, nos referimos a las correcciones que provienen de los estados definidos en el subespacio degenerado \mathcal{D} : $\Phi_1^{(1)}$, $\Phi_2^{(1)}$, $\Phi_3^{(1)}$ y $\Phi_4^{(1)}$, las cuales fueron nulas, ecuaciones (3.81) y (3.92). Para este fin, utilizamos la simetría de paridad del OAP.

Los operadores básicos de la teoría polimérica \hat{x} y \hat{V}_{λ_0} , ecuación (3.5), presentan la siguiente paridad [43, 46]:

$$\mathcal{P}V_{\lambda_0}\mathcal{P}^\dagger = V_{\lambda_0}^\dagger = V_{-\lambda_0}, \quad (3.96)$$

$$\mathcal{P}x\mathcal{P}^\dagger = -x, \quad (3.97)$$

donde hemos omitido el acento circunflejo. A través de las ecuaciones (3.96) y (3.97), podemos ver que el hamiltoniano del OAP, ecuación (3.18), es invariante bajo la acción de operador \mathcal{P}

$$\mathcal{P}H\mathcal{P}^\dagger = H. \quad (3.98)$$

Además de la propiedad de paridad (3.98), el hamiltoniano del OAP no es degenerado [53], por lo que sus estados propios tienen paridad definida [46, 53]

$$\mathcal{P}|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle. \quad (3.99)$$

Por otra parte, de acuerdo al análisis hecho del OAP mediante teoría de perturbaciones, observamos que el hamiltoniano del rotor \hat{H}_0 , ecuación (3.27), es degenerado y sus estados propios, $\varphi_n^{(0)}$, no tienen paridad definida, esto último sigue de la definición $\hat{\mathcal{P}}$ y de ecuación (3.31):

$$\hat{\mathcal{P}}\varphi_n^{(0)}(u) = \varphi_n^{(0)}(-u) = \varphi_{-n}^{(0)}(u). \quad (3.100)$$

No obstante, notemos que al aplicar el método perturbativo cambiamos la base, la nueva base está definida por los estados $\psi_m^{(0)}$, ecuaciones (3.55), (3.56), (3.71) y (3.72). En general, podemos escribir la relación entre las bases $\psi_m^{(0)}$ y $\varphi_n^{(0)}$, como

$$\psi_m^{(0)}(u) := \begin{cases} \psi_{2n-1}^{(0)}(u) = -\frac{i}{\sqrt{2}} \left(\varphi_n^{(0)}(u) - \varphi_{-n}^{(0)}(u) \right), \\ \psi_{2n}^{(0)}(u) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_n^{(0)}(u) + \varphi_{-n}^{(0)}(u) \right). \end{cases} \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3.101)$$

Esta base presenta paridad definida

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}\psi_{2n-1}^{(0)}(u) &= -\psi_{2n-1}^{(0)}(u), \\ \hat{\mathcal{P}}\psi_{2n}^{(0)}(u) &= \psi_{2n}^{(0)}(u), \end{aligned}$$

lo cual se deduce de la definición (3.101) y de la ecuación (3.100). Asimismo, el potencial perturbativo, \hat{W} , ecuación (3.27), es invariante bajo el operador de paridad, de acuerdo a la ecuación (3.96). Por consiguiente, los elementos de matriz, \hat{W}_{kl} , en la base $\psi_m^{(0)}$, que son diferentes de cero son los elementos de la diagonal y presentan paridad par. Además, del análisis hecho en la sección 3.2, sabemos que la degeneración se va removiendo orden a orden (vea el cuadro 3.1). De esta forma, si consideramos estos elementos, es factible pensar que los

vectores propios del hamiltoniano del OAP obtenidos mediante teoría de perturbaciones, ψ_m (vea el cuadro 3.1), son compatibles con la expresión (3.99), es decir, tienen paridad definida:

$$\widehat{\mathcal{P}}\psi_{2n-1}(u) = -\psi_{2n-1}(u), \quad (3.102)$$

$$\widehat{\mathcal{P}}\psi_{2n}(u) = \psi_{2n}(u), \quad (3.103)$$

donde se consideró que los estados $\psi_m(u)$ son divididos en dos conjuntos: $\psi_{2n}(u)$ y $\psi_{2n-1}(u)$, de acuerdo con (3.101).

Del análisis hecho en el Apéndice B.3, sabemos que el estado $\psi_m(u)$ en términos de sus correcciones se escribe

$$\psi_m(u) = \sum_{r=0}^{\infty} \alpha^r \psi_m^{(r)}, \quad (3.104)$$

donde las correcciones $\psi_m^{(r)}(u)$ en la base $\psi_m^{(0)}$ en general se expresan como [57]

$$\psi_m^{(r)} = \sum_{k \notin \mathcal{D}} a_{mk}^{(r)} \psi_k^{(0)} + a_{mm}^{(r)} \psi_m^{(0)} + a_{m\bar{m}}^{(r)} \psi_{\bar{m}}^{(0)}, \quad (3.105)$$

con $\psi_m^{(0)}$ y $\psi_{\bar{m}}^{(0)}$ los vectores propios definidos en subespacio degenerado \mathcal{D} , es decir, uno corresponde a $m = 2n - 1$ y el otro a $\bar{m} = 2n$ en (3.101).

Ahora, nos enfocamos en la corrección a primer orden, $r = 1$ en (3.105). Como es discutido en el Apéndice B.2, el coeficiente $a_{mm}^{(1)}$ siempre puede ser considerado nulo [57], entonces la corrección a primer orden queda

$$\psi_m^{(1)} = \sum_{k \notin \mathcal{D}} a_{mk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + a_{m\bar{m}}^{(1)} \psi_{\bar{m}}^{(0)}. \quad (3.106)$$

Notemos que $\psi_{\bar{m}}^{(0)}$ tiene paridad opuesta a $\psi_m^{(0)}$, y por tanto a $\psi_m^{(1)}$ y ψ_m , ecuaciones (3.104) y (3.106), y puesto que ψ_m tiene paridad definida, ecuaciones (3.102) y (3.103), entonces $a_{m\bar{m}}^{(0)} = 0$. Luego, la corrección a primer orden de los estados propios del OAP llega a ser

$$\psi_m^{(1)} = \sum_{k \notin \mathcal{D}} a_{mk}^{(1)} \psi_k^{(0)}.$$

Es interesante notar que los vectores propios definidos en subespacio degenerado \mathcal{D} , no contribuyen a la corrección a primer orden, por lo que esta corrección se calcula muy similar al caso no degenerado (vea las ecuaciones (B.18), (B.32) y (B.44) en Apéndice B).

3.4. Función de un punto y de dos puntos en el régimen de rotor: esquema hamiltoniano

En este apartado calcularemos la función de un punto y de dos puntos en el estado base del OAP en el régimen rotor. Estas funciones nos permitirán calcular el propagador del campo escalar polimérico a altas energías, recordemos que el análisis hecho en el Apéndice A.1, nos permite escribir la función de Wightman de frecuencias positivas del campo en términos de la función de un punto y de dos puntos de los modos de Fourier $q_{\mathbf{k}}$ (2.27).

El cálculo que presentaremos a continuación es muy similar al hecho en [15], pero la diferencia será la interpretación que haremos de los términos involucrados en el cálculo: El trabajo hecho en [15] está basado en la evaluación directa de la funciones Mathieu ce_n y se_n ecuación (3.23), y de los valores característicos a_n y b_n ecuación (3.24), es decir, el trabajo parte del conocimiento de los estados propios y de los valores propios del OAP. En cambio nosotros, acorde al análisis hecho en la sección 3.2, consideramos los valores propios y los vectores propios del OAP en el régimen de altas energías como series perturbativas en α , esto es, que surgen de implementar la teoría de perturbaciones. Esta diferencia conceptual, podría ser relevante en sistemas que no involucren el OAP, como es el caso del hamiltoniano del campo escalar con una potencial de autointeracción proporcional a ϕ^4 , escrito en modos $q_{\mathbf{k}}$.

3.4.1. Función de un punto

La función de un punto para el rotor se define como

$$D^{(0)}(t) = \left\langle 0^{(0)} \mid \hat{x}(t) \mid 0^{(0)} \right\rangle, \quad \text{donde} \quad \hat{x}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_0} \hat{x} e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_0}. \quad (3.107)$$

De acuerdo a la primera ecuación de (3.31), el estado base del rotor es $\varphi_0^{(0)}(u) = 1$. Si en la primera ecuación de (3.107) utilizamos la relación de cerradura del operador de traslaciones, $\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du \mid u \rangle \langle u \mid = \hat{1}$, así como la segunda expresión de (3.17), y el cambio de variable $u = \frac{\lambda_0 p}{\hbar} + \frac{\pi}{2}$, la función de un punto llega a ser

$$\begin{aligned} \left\langle 0^{(0)} \mid \hat{x}(t) \mid 0^{(0)} \right\rangle &= e^{\frac{i}{\hbar}E_0^{(0)}(t-t)} \left\langle 0^{(0)} \mid \hat{x} \mid 0^{(0)} \right\rangle \\ &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du \left(\psi_0^{(0)}(u) \right)^* \partial_u \psi_0^{(0)}(u) \\ &= 0. \end{aligned}$$

A partir de este cálculo, expresamos de manera algebraica la siguiente propiedad del estado base del rotor

$$\hat{x} \mid 0^{(0)} \rangle = 0. \quad (3.108)$$

La función de un punto para el OAP se define de forma análoga a (3.107), pero ahora con el estado base resultante de la teoría de perturbaciones $\mid 0 \rangle$, ecuación (3.47). Como discutimos en la sección anterior, el hamiltoniano del OAP (3.18) presenta paridad par, por lo que sus estados propios tienen paridad definida, en el caso del estado base ésta es par (3.47) [53]. Por consiguiente, la función de un punto será cero, pues involucra el producto del estado base con su derivada, los cuales tienen paridad opuesta, por lo que su producto tiene paridad impar, que integrado en un período completo de 2π resulta ser cero:

$$\begin{aligned} \langle 0 \mid \hat{x}(t) \mid 0 \rangle &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du (\psi_0(u))^* \partial_u \psi_0(u) \\ &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{\pi} du (\psi_0(u))^* \partial_u \psi_0(u) + \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_{-\pi}^0 dw (\psi_0(w+2\pi))^* \partial_w \psi_0(w+2\pi) \\ &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{\pi} du (\psi_0(u))^* \partial_u \psi_0(u) - \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{\pi} dv (\psi_0(v))^* \partial_v \psi_0(v) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (3.109)$$

donde primero se ha considerado que $e^{\frac{i}{\hbar}E_0(t-t)} = 1$, luego separamos la integral $\int_0^{2\pi} = \int_0^\pi + \int_\pi^{2\pi}$, y realizamos el cambio de variable $w = u - 2\pi$ en la integral $\int_\pi^{2\pi}$, por último empleamos el carácter periódico (2π) de ψ_0 , realizamos el cambio de variable $v = -w$ y se utilizan la paridad par de ψ_0 .

3.4.2. Función de dos puntos

En esta sección calculamos la función de dos puntos del OAP en el régimen de rotor. La función de dos puntos se definirá como

$$D(t_s, t_r) = \langle 0 | \hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r) | 0 \rangle, \quad (3.110)$$

donde se tiene en cuenta el ordenamiento temporal $t_s > t_r$, nuevamente $|0\rangle$ representa el estado base del OAP en el régimen de rotor y $\hat{x}(t)$ será considerado en el esquema Heisenberg con \hat{H} definido en la ecuación (3.27).

Consideremos los estados propios de \hat{H} , las funciones Mathieu ce_n y se_n , ecuación (3.23), los cuales denotaremos de forma algebraica como $|m\rangle$. Como estos estados propios forman una base [54], los utilizamos para evaluar la función de dos puntos (3.110) empleando dos veces su relación de cerradura $\sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle\langle m| = 1$, por lo que (3.110) llega a ser

$$D(t_s, t_r) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta E_m(t_s-t_r)} |c_m|^2, \quad (3.111)$$

donde introdujimos

$$\begin{aligned} \Delta E_m &:= E_m - E_0, \\ c_m &:= \langle m | \hat{x} | 0 \rangle. \end{aligned}$$

Podemos relacionar la función de dos puntos (3.111), la cual presenta el ordenamiento temporal $t_s > t_r$, con el propagador de Feynman, que es simétrico en t_s y t_r , expresando la exponencial $e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta E_m(t_s-t_r)}$ como una integral de contorno:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta E_m(t_s-t_r)} = \frac{1}{2\pi} \int_C d\chi \frac{2i\Delta E_m e^{-i\chi(t_s-t_r)}}{\Delta E_m^2 - \chi^2 - i\epsilon}, \quad (3.112)$$

donde el signo de $i\epsilon$ corresponde al propagador de Feynman en espacio de momentos, la prescripción de los contornos y polos es la misma que en la integral (2.33), los polos están representados en la figura 2.1. Por tanto, combinando las ecuaciones (3.111) y (3.112), la función de dos puntos en espacio de momentos es

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{k}}(t, t') &= \frac{1}{2\pi} \int_C d\chi D_p e^{-i\chi(t-t')} \\ \Rightarrow D_p &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2i\Delta E_m |c_m|^2}{-p^2 + \Delta E_m^2 - \mathbf{k}^2 - i\epsilon}, \end{aligned} \quad (3.113)$$

con $p = (\chi, \mathbf{k})$ y $p^2 = \chi^2 - |\mathbf{k}|^2$.

Ahora nos enfocamos en el propagador de Feynman a segundo orden en α . Para esto primero detallaremos el factor c_m . En la sección 3.2 vimos que los estados $|m\rangle$ y $|0\rangle$ pueden

ser obtenidos a través de la teoría de perturbaciones, por tanto se pueden escribir de la siguiente forma

$$|m\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} |m^{(i)}(\alpha^i)\rangle, \quad |0\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} |0^{(j)}(\alpha^j)\rangle,$$

donde $|m^{(i)}(\alpha^i)\rangle$ representa la corrección a i -ésimo orden del estado del rotor $|m^{(0)}\rangle$. De forma similar para $|0^{(j)}(\alpha^j)\rangle$. Así, definimos

$$c_m = \sum_{k=0}^{\infty} c_m^{(k)}, \quad (3.114)$$

siendo

$$c_m^{(k)} = c_m^{ij}(\alpha^{i+j}) = \langle m^{(i)}(\alpha^i) | \hat{x} | 0^{(j)}(\alpha^j) \rangle, \quad \text{donde } k = i + j. \quad (3.115)$$

Si c_m es escrito hasta segundo orden, encontramos que $|c_m|^2$ resulta ser

$$\begin{aligned} |c_m|^2 &= \left[c_m^{(0)} + c_m^{(1)}(\alpha) + c_m^{(2)}(\alpha^2) \right] \left[c_m^{(0)} + c_m^{(1)}(\alpha) + c_m^{(2)}(\alpha^2) \right]^*, \\ &= c_m^{(0)} \left[\left(c_m^{(0)} \right)^* + \left(c_m^{(1)}(\alpha) \right)^* + \left(c_m^{(2)}(\alpha^2) \right)^* \right] + c_m^{(1)}(\alpha) \left[\left(c_m^{(0)} \right)^* + \left(c_m^{(1)}(\alpha) \right)^* \right] \\ &\quad + c_m^{(2)}(\alpha^2) \left(c_m^{(0)} \right)^* + \mathcal{O}(\alpha^3) \\ &= |c_m^{(0)}|^2 + \left[c_m^{(0)} \left(c_m^{(1)}(\alpha) \right)^* + c_m^{(1)}(\alpha) \left(c_m^{(0)} \right)^* \right] \\ &\quad + \left[c_m^{(0)} \left(c_m^{(2)}(\alpha^2) \right)^* + |c_m^{(1)}(\alpha)|^2 + c_m^{(2)}(\alpha^2) \left(c_m^{(0)} \right)^* \right] + \mathcal{O}(\alpha^3), \end{aligned} \quad (3.116)$$

con

$$c_m^{(0)} = c_m^{00}, \quad (3.117)$$

$$c_m^{(1)}(\alpha) = c_m^{01}(\alpha) + c_m^{10}(\alpha), \quad (3.118)$$

$$c_m^{(2)}(\alpha^2) = c_m^{02}(\alpha^2) + c_m^{11}(\alpha^2) + c_m^{20}(\alpha^2). \quad (3.119)$$

De forma similar, la diferencia de energía ΔE_m en (3.113) como desarrollo perturbativo se escribe de la siguiente forma

$$\Delta E_m = \sum_{k=0}^{\infty} \Delta \mathcal{E}_m^{(k)} \quad \text{con} \quad \Delta \mathcal{E}_m^{(k)} = \mathcal{E}_m^{(r)} - \mathcal{E}_0^{(r)}. \quad (3.120)$$

Además, si esta ecuación es expresada hasta segundo orden en α , hallamos que su cuadrado es

$$(\Delta E_m)^2 = e_m^{(0)} + e_m^{(1)}(\alpha) + e_m^{(2)}(\alpha^2) + \mathcal{O}(\alpha^3), \quad (3.121)$$

donde

$$\begin{aligned} e_m^{(0)} &= \left(\Delta E_m^{(0)} \right)^2, \\ e_m^{(1)}(\alpha) &= 2 \Delta E_m^{(0)} \Delta E_m^{(1)}(\alpha), \\ e_m^{(2)}(\alpha^2) &= 2 \Delta E_m^{(0)} \Delta E_m^{(2)}(\alpha^2) + \left(\Delta E_m^{(1)}(\alpha) \right)^2. \end{aligned}$$

Ahora, el factor $\Delta E_m |c_m|^2$ en el numerador de (3.113) resulta de multiplicar las ecuaciones (3.116) y (3.120), entonces hasta segundo orden en α hallamos

$$\Delta E_m |c_m|^2 = a_m^{(0)} + a_m^{(1)}(\alpha) + a_m^{(2)}(\alpha^2), \quad (3.122)$$

siendo

$$a_m^{(0)} = \Delta E_m^{(0)} |c_m^{(0)}|^2, \quad (3.123)$$

$$a_m^{(1)}(\alpha) = \Delta E_m^{(0)} \left[c_m^{(0)} \left(c_m^{(1)}(\alpha) \right)^* + c_m^{(1)}(\alpha) \left(c_m^{(0)} \right)^* \right] + \Delta E_m^{(1)}(\alpha) |c_m^{(0)}|^2, \quad (3.124)$$

$$\begin{aligned} a_m^{(2)}(\alpha^2) &= \Delta E_m^{(0)} \left[c_m^{(0)} \left(c_m^{(2)}(\alpha^2) \right)^* + |c_m^{(1)}(\alpha)|^2 + c_m^{(2)}(\alpha^2) \left(c_m^{(0)} \right)^* \right] \\ &\quad + \Delta E_m^{(1)}(\alpha) \left[c_m^{(0)} \left(c_m^{(1)}(\alpha) \right)^* + c_m^{(1)}(\alpha) \left(c_m^{(0)} \right)^* \right] + \Delta E_m^{(2)}(\alpha^2) |c_m^{(0)}|^2. \end{aligned} \quad (3.125)$$

Para el denominador de (3.113) si sustituimos (3.121) encontramos la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \frac{1}{-p^2 + (\Delta E_m)^2 - |\mathbf{k}|^2} &= \frac{1}{e_p} \left\{ 1 + \frac{e_m^{(1)}(\alpha) + e_m^{(2)}(\alpha^2)}{e_p} \right\}^{-1} \\ &= \frac{1}{e_p} \left\{ 1 - \frac{e_m^{(1)}(\alpha)}{e_p} - \frac{e_m^{(2)}(\alpha^2)}{e_p} + \frac{\left(e_m^{(1)}(\alpha) \right)^2}{e_p^2} + \mathcal{O}(\alpha^3) \right\}, \end{aligned} \quad (3.126)$$

donde utilizamos el desarrollo $(1+x)^{-1} = \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r x^r$ y definimos

$$e_p = -p^2 + e_m^{(0)} - |\mathbf{k}|^2.$$

De esta forma, combinando hasta segundo orden en α las ecuaciones (3.122) y (3.126), obtenemos

$$\begin{aligned} &\frac{\Delta E_m |c_m|^2}{-p^2 + (\Delta E_m)^2 - |\mathbf{k}|^2} \\ &= \frac{1}{e_p} \left[a_m^{(0)} + a_m^{(1)}(\alpha) + a_m^{(2)}(\alpha^2) \right] \left\{ 1 - \frac{e_m^{(1)}(\alpha)}{e_p} - \frac{e_m^{(2)}(\alpha^2)}{e_p} + \frac{\left(e_m^{(1)}(\alpha) \right)^2}{e_p^2} \right\} \\ &= \frac{1}{e_p} \left\{ a_m^{(0)} + a_m^{(1)}(\alpha) - \frac{a_m^{(0)} e_m^{(1)}(\alpha)}{e_p} + a_m^{(2)}(\alpha^2) - \frac{a_m^{(1)}(\alpha) e_m^{(1)}(\alpha)}{e_p} - \frac{a_m^{(0)} e_m^{(2)}(\alpha^2)}{e_p} \right. \\ &\quad \left. + \frac{a_m^{(0)} \left(e_m^{(1)}(\alpha) \right)^2}{e_p^2} \right\}. \end{aligned} \quad (3.127)$$

Calculamos explícitamente las corrección $c_m^{(0)}$, basados en la ecuaciones (3.115) y (3.117), encontramos que

$$c_m^{(0)} = \langle m^{(0)} | \hat{x} | 0^{(0)} \rangle = 0,$$

debido a la ecuación (3.108). Dadas las ecuaciones (3.123), (3.124) y (3.125), también se obtiene

$$a_m^{(0)} = 0, \quad a_m^{(1)}(\alpha) = 0, \quad a_m^{(2)}(\alpha^2) = \Delta E_m^{(0)} |c_m^{(1)}(\alpha)|^2. \quad (3.128)$$

Por consiguiente, sustituyendo (3.118) y los resultados de (3.128), en (3.127), llegamos a

$$\begin{aligned} \frac{\Delta E_m |c_m|^2}{-p^2 + (\Delta E_m)^2 - |\mathbf{k}|^2} &= \frac{\Delta E_m^{(0)} |c_m^{01}(\alpha) + c_m^{10}(\alpha)|^2}{-p^2 + (\Delta E_m^{(0)})^2 - |\mathbf{k}|^2} \\ &= \frac{\Delta E_m^{(0)} |c_m^{01}(\alpha)|^2}{-p^2 + (\Delta E_m^{(0)})^2 - |\mathbf{k}|^2}, \end{aligned} \quad (3.129)$$

en la segunda línea evaluamos $c_m^{10}(\alpha) = 0$, que es consecuencia de usar las ecuaciones (3.115) y (3.108).

Ahora, para calcular $c_m^{01}(\alpha)$ es conveniente recordar la correspondencia entre los estados propios del OAP y los estados propios del rotor:

$$\psi_{m=n=0}^{(0)}(u) = 1, \quad (3.130)$$

$$\psi_{m=2n-1}^{(0)}(u) = \sqrt{2} \sin(nu), \quad (3.131)$$

$$\psi_{m=2n}^{(0)}(u) = \sqrt{2} \cos(nu), \quad (3.132)$$

con $n > 0$.

Así, vemos que para determinar $c_m^{01}(\alpha)$ proseguimos en tres partes: $c_{m=0}^{01}$, $c_{m=2n}^{01}$ y $c_{m=2n-1}^{01}$. De esta forma, si consideramos (3.115), (3.130) y (3.41), $c_{m=0}^{01}$ es

$$\begin{aligned} c_{m=0}^{01} &= \langle 0^{(0)} | q | 0^{(1)} \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du \left(\psi_0^{(0)}(u) \right)^* i\lambda_0 \frac{\partial}{\partial u} \psi_0^{(1)}(u) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.133)$$

Asimismo, $c_{m=2n}^{01}$ se obtiene mediante las ecuaciones (3.115), (3.132) y (3.41)

$$\begin{aligned} c_{m=2n}^{01} &= \langle (2n)^{(0)} | q | 0^{(1)} \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du \left(\psi_{2n}^{(0)}(u) \right)^* i\lambda_0 \frac{\partial}{\partial u} \psi_0^{(1)}(u) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.134)$$

Por último, por medio de las ecuaciones (3.115), (3.131) y (3.41), encontramos que $c_{m=2n-1}^{01}$ resulta

$$\begin{aligned} c_{m=2n-1}^{01} &= \langle (2n-1)^{(0)} | q | 0^{(1)} \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du \left(\psi_{2n-1}^{(0)}(u) \right)^* i\lambda_0 \frac{\partial}{\partial u} \psi_0^{(1)}(u) \\ &= \frac{i\lambda_0 \alpha}{\sqrt{2}} \delta_{n,2}. \end{aligned} \quad (3.135)$$

Luego, si consideramos (3.133), (3.133) y (3.135), podemos expresar $c_m^{(0)}$ como

$$c_{m=2n-1}^{(0)} = \frac{i\lambda_0 \alpha}{\sqrt{2}} \delta_{2n-1,3}, \quad (3.136)$$

lo cual nos dice que el primer término diferente de cero en la serie D_p , ecuación (3.113), proviene del término $m = 3$.

Así, a través de conjuntar las ecuaciones (3.129) y (3.136), veremos que la contribución a orden más bajo en α de la función de dos puntos del OAP en espacio de momentos (3.113) será

$$D_p = \frac{2i\Delta E_3^{(0)} \left(\frac{\lambda_0^2 \alpha^2}{2} \right)}{-p^2 + \left(\Delta E_3^{(0)} \right)^2 - \mathbf{k}^2 - i\epsilon}, \quad (3.137)$$

$$= \frac{-\frac{i\hbar^4}{8g^2 m}}{p^2 - 4\omega^2 g^2 + |\mathbf{k}|^2 + i\epsilon}, \quad (3.138)$$

donde se ha sustituido $\Delta E_3^{(0)} = \mathcal{E}_2^{(0)} - \mathcal{E}_0^{(0)} = 2\omega g$, y se tenido en cuenta $\alpha = \frac{\hbar^2}{4g^2}$ y $g = m\omega\lambda_0^2$.

Como ya mencionamos anteriormente, podemos obtener la función de dos puntos $D(t_s, t_r)$, con $t_s > t_r$, en el espacio de posiciones, si realizamos la integral de contorno (3.112):

$$\begin{aligned} D(t_s, t_r) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\chi}{2\pi} D_p e^{-i\chi(t_s - t_r)} \\ &= \frac{\lambda_0^2 \alpha^2}{2} e^{-\frac{i}{\hbar}(2\omega g)(t_s - t_r)}, \end{aligned} \quad (3.139)$$

donde empleamos la ecuación (3.137) y para realizar la integral sólo consideramos el contorno C definido en la mitad inferior del plano complejo.

3.5. Propagador del campo escalar polimérico a altas energías: Esquema hamiltoniano

En esta sección calculamos el propagador del campo escalar a muy altas energías, o régimen de rotor. Para esto nos basamos en el desarrollo de Fourier del campo ϕ y su momento canónico π en los variables reales $q_{\mathbf{k}}$ y $p_{\mathbf{k}}$. Dado que en estos modos el hamiltoniano del campo escalar se expresa como una suma de osciladores armónicos desacoplados (2.22) y (2.23), podemos cuantizar cada par de variables canónicas $q_{\mathbf{k}}$ y $p_{\mathbf{k}}$ de forma independiente, por lo que, si llevamos a cabo el proceso de cuantización en la representación polimérica, a cada par canónico $q_{\mathbf{k}}$ y $p_{\mathbf{k}}$ le corresponden los operadores básicos $\hat{x}_{\mathbf{k}}$ y $\hat{V}_{\lambda_0 \mathbf{k}}$. Así, si relacionamos $q_{\mathbf{k}}$ con el operador de posición $\hat{x}_{\mathbf{k}}$, tendremos las siguientes relaciones

$$\langle 0_{\mathbf{k}} | \hat{q}_{\mathbf{k}}(t) | 0_{\mathbf{k}} \rangle = \langle 0 | \hat{x}(t) | 0 \rangle \Big|_{\hbar=1, m_{\text{OAS}}=1, \omega_{\text{OAS}}=\omega_{\mathbf{k}}=\sqrt{\mathbf{k}^2+\mu^2}}, \quad (3.140)$$

y

$$\langle 0_{\mathbf{k}} | \hat{q}_{\mathbf{k}}(t)\hat{q}_{\mathbf{k}}(t') | 0_{\mathbf{k}} \rangle = \langle 0 | \hat{x}(t)\hat{x}(t') | 0 \rangle \Big|_{\hbar=1, m_{\text{OAS}}=1, \omega_{\text{OAS}}=\omega_{\mathbf{k}}=\sqrt{\mathbf{k}^2+\mu^2}}, \quad (3.141)$$

donde $\langle 0 | \hat{x}(t) | 0 \rangle$ y $\langle 0 | \hat{x}(t)\hat{x}(t') | 0 \rangle$ representan la función de un punto y dos puntos del OAP, respectivamente, m_{OAS} y ω_{OAS} denotan la masa y frecuencia del oscilador armónico y μ la masa del campo escalar.

De esta forma, la función de Wightman de frecuencias positivas del campo escalar en términos de osciladores armónicos poliméricos lo hallamos a partir de las ecuaciones (2.27),

(3.140) y (3.141), donde las ecuaciones (3.140) y (3.141) son calculadas mediante (3.109) y (3.139), respectivamente. Así, la función de Wightman es

$$\langle \Omega | \hat{\phi}(t, \mathbf{x}) \hat{\phi}(t', \mathbf{x}') | \Omega \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} D_{\mathbf{k}}(t, t'), \quad (3.142)$$

con

$$D_{\mathbf{k}}(t, t') = \frac{\lambda_0^2 \alpha_{\mathbf{k}}^2}{2} e^{-\frac{i}{\hbar} (2\omega_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}})(t-t')}, \quad (3.143)$$

donde se consideró $t_s = t$ y $t_r = t'$, es decir, $t > t'$.

Un aspecto a notar es que la expresión del propagador en el régimen de altas energías del campo escalar polimérico se anula en límite de $g_{\mathbf{k}} \rightarrow \infty$, pues $\alpha_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$, dada la expresión $\alpha = \frac{1}{4g^2}$, ecuación (3.21), o como también se puede observar de la expresión en espacio de momento (3.138). Esto no sucede en caso estándar del campo escalar. Además, la misma ecuación (3.138) sugiere que el propagador no es invariante de Lorentz, sin embargo, esta aparente ruptura de la simetría de Lorentz puede ser resultado del truncamiento de la serie que define el propagador (3.113), como se ha analizado en otros modelos [58]. Esto sugiere que para determinar la invariancia de Lorentz de la serie (3.113), sería importante contar con propuestas que nos permitía estudiar de forma sistemática esta serie. En esta dirección está nuestra propuesta, aquí hemos tratado de ser un poco más sistemáticos en el origen de los términos de la serie (3.113), mediante la interpretación de los estados propios y valores propios del OAP como desarrollos perturbativos, a diferencia de lo hecho en [15], donde sólo obtiene el primer término diferente de cero.

Como veremos en los siguientes capítulos la integral de trayectoria nos permite plantear en forma sistemática y directa (sin hacer referencia a los estados propios y valores propios de la energía) el propagador del campo escalar en el régimen de rotor. Mediante la amplitud del rotor y teoría de perturbaciones, en el espíritu de los diagramas de Feynman, plantearemos el propagador del campo polimérico a altas energías por medio de la integral de trayectoria.

Por último, mencionaremos el propagador en el régimen de bajas energías del campo escalar polimérico. Recordemos que en este régimen el OAP se puede poner en contacto con el OAS mediante el límite continuo $\lambda_0 \rightarrow 0$. En el caso del propagador sucede lo mismo, éste tiene la forma [15]

$$D_p = \frac{-i(1 - 2g)}{p^2 - M^2 + g\omega_{\mathbf{k}}^2 + i\epsilon}, \quad (3.144)$$

vemos que en el límite $g \rightarrow 0$ recuperamos la forma usual del propagador del campo escalar. Notemos que si tomamos $\mu = 0$ en (3.144) el polo corresponde a un taquión. Debemos mencionar que si no hicimos un análisis similar en el régimen de bajas energías, o régimen de OAS, es porque aún ignoramos que método de aproximación, nos puede permitir resolver el OAP en este régimen. Con esto finalizamos nuestro análisis dentro del esquema hamiltoniano, en la siguiente capítulo analizaremos una propuesta para llevar a cabo la integral de trayectoria en la representación polimérica, en específico, calcularemos la amplitud de transición del OAP.

Capítulo 4

Oscilador armónico polimérico mediante integral de trayectoria

En este capítulo estudiamos el formalismo de integral de trayectoria para el oscilador armónico polimérico (OAP). La metodología que emplearemos dentro de la integral de trayectoria polimérica [30], será un esquema semejante al utilizado por Feynman cuando formuló la integral de trayectoria en la representación de Schrödinger [27], es decir, partiremos de una amplitud de transición, haremos una partición en el tiempo e introduciremos las relaciones de cerradura correspondientes a los vectores propios de los operadores canónicos de la teoría, en este caso los operadores de posición y de traslaciones. De esta forma, plantearemos la amplitud de transición del OAP en términos de la amplitud del rotor utilizando teoría de perturbaciones, esto en el régimen de altas energías. Por último, calcularemos explícitamente la amplitud de transición del OAP hasta segundo orden.

4.1. Amplitud de transición a través de la integral de trayectoria

En esta sección implementaremos la integral de trayectoria en la cuantización polimérica del OAP, la idea es seguir la construcción estándar de la integral de trayectoria [59], la cual está basada en evaluar la amplitud de transición entre dos estados propios dependientes del tiempo del operador de posición, o del operador de momento. La propuesta de seguir este esquema en la representación polimérica fue hecha por Ashtekar et-al para el modelo de Cosmología Cuántica por Lazos [30], después fue seguida por Parra y Vergara para el OAP [32] y por Kajuri para el campo escalar [31].

Nuestro punto de partida será la amplitud de transición entre dos estados propios del operador de traslaciones y el sistema al que nos referiremos será el OAP

$$\langle p_b, t_b | p_a, t_a \rangle = \langle p_b | e^{-\frac{i}{\hbar}(t_b - t_a)\hat{H}_{poly}} | p_a \rangle, \hat{H}_{poly} = \frac{\hbar^2}{8m\lambda_0^2} [2 - \hat{V}_{2\lambda_0} - \hat{V}_{-2\lambda_0}] + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2. \quad (4.1)$$

Dividimos el intervalo temporal $t_b - t_a$ en N segmentos iguales tal como lo hicimos en la ecuación (2.36). De esta forma, recordemos que el operador de evolución puede ser dividido en N operadores por la propiedad de composición

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(t_b - t_a)\hat{H}_{poly}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}_{poly}} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}_{poly}} \dots e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}_{poly}}. \quad (4.2)$$

Hacemos pasos análogos a los hechos de la ecuación (2.35) a la ecuación (2.38), es decir, usamos la relación de cerradura del operador de traslaciones, segunda relación de la ecuación (3.17), en el producto de operadores de evolución (4.2). Así la amplitud de transición (4.1) puede ser escrita como

$$\langle p_b, t_b | p_a, t_a \rangle = \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \langle p_n | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}_{poly}} | p_{n-1} \rangle \right). \quad (4.3)$$

Si sustituimos la relación de cerradura de la base de posiciones, primera relación de la ecuación (3.17), en la enésima amplitud de (4.3), hallamos

$$\begin{aligned} \langle p_b, t_b | p_a, t_a \rangle &= \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_n \right) \\ &\times \left(\prod_{n=1}^N \sum_{q_n \in \mathbb{Z}} \langle p_n | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon \left[\frac{\hbar^2}{8m\lambda_0^2} (2 - \widehat{V}(2\lambda_0) - \widehat{V}(-2\lambda_0)) + \frac{m\omega^2}{2} \hat{q}^2 \right]} | q_n \rangle \langle q_n | p_{n-1} \rangle \right) \end{aligned} \quad (4.4)$$

En la última expresión la amplitud enésima puede ser evaluada haciendo la misma aproximación hecha de la ecuación (2.39) a la ecuación (2.41). Si no consideremos una forma simétrica para los elementos de matriz del término cinético, hallamos que la amplitud de transición es

$$\begin{aligned} \langle p_b, t_b | p_a, t_a \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_n \right) \\ &\times \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \left[\sum_{n=1}^N \lambda_0 l_n (p_n - p_{n-1}) + \epsilon \left(\frac{\hbar^2}{4m\lambda_0^2} [1 - \cos(\frac{2\lambda_0 p_n}{\hbar})] + \frac{m\omega^2 \lambda_0^2 l_n^2}{2} \right) \right]} + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Si definimos $\frac{\hbar^2}{4m\lambda_0^2} = \omega g \alpha$, con $g = m\omega\lambda_0^2$ y $\alpha = \frac{\hbar^2}{4g^2}$, obtenemos

$$\begin{aligned} \langle p_b, t_b | p_a, t_a \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_n \right) \\ &\times \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \left[\sum_{n=1}^N \lambda_0 l_n (p_n - p_{n-1}) + \epsilon \left(\omega g \alpha [1 - \cos(\frac{2\lambda_0 p_n}{\hbar})] + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right) \right]} + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Además hacemos el siguiente cambio de variable $u_n = \frac{\lambda_0 p_n}{\hbar} + \frac{\pi}{2}$, este cambio no es un cambio de representación, sólo estamos cambiando las variables de integración y los puntos extremos por facilidad, por lo que la amplitud de transición seguirá en términos de p_b y p_a , así tenemos

$$\begin{aligned} \cos\left(\frac{2\lambda_0 p_n}{\hbar}\right) &= \cos\left[2\left(u_n - \frac{\pi}{2}\right)\right] = -\cos 2u_n \\ \frac{\lambda_0 p_n}{\hbar} - \frac{\lambda_0 p_{n-1}}{\hbar} &= u_n - \frac{\pi}{2} - u_{n-1} + \frac{\pi}{2} = u_n - u_{n-1} \\ du_n &= \frac{\lambda_0}{\hbar} dp_n \\ u_n\left(\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}\right) &= \frac{3\pi}{2}, \quad u_n\left(-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}\right) = -\frac{\pi}{2}, \quad -\frac{\pi}{2} \leq u_n \leq \frac{3\pi}{2}. \end{aligned}$$

Con lo que encontramos

$$\begin{aligned} \langle p_b, t_b | p_a, t_a \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} du_n \right) \\ &\times \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=1}^N l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\epsilon}{\hbar} \left(\omega g \alpha [1 + \cos 2u_n] + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right) \right]} + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (4.7)$$

Puesto que el integrando presenta período 2π en la variables u_n , los límites de integración pueden ser cambiados, así la amplitud de transición es

$$\begin{aligned} \langle p_b, t_b | p_a, t_a \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \\ &\times \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=1}^N l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\epsilon}{\hbar} \left(\omega g \alpha [1 + \cos 2u_n] + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right) \right]} + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (4.8)$$

A diferencia de lo que es propuesto en [33, 30, 32, 31], nosotros no obtendremos la fórmula de Feynman, escribir la amplitud de transición en términos de la acción, en este caso la del OAP, sino que trataremos de evaluar la expresión (4.8) de una manera directa. Por este motivo realizaremos la teoría de perturbaciones, la cual nos permite calcular la amplitud de transición del OAP en el régimen de rotor, como veremos en las siguientes secciones.

4.2. Amplitud de transición en el régimen del rotor

Del esquema hamiltoniano sabemos que una forma de aproximar el OAP es a través del régimen de rotor empleando la teoría de perturbaciones. Con esto como guía, en esta sección calcularemos la amplitud de transición del OAP en el régimen de rotor sin perturbar, ya que esta amplitud puede calcularse de forma exacta, ésta será la amplitud soluble sobre la cual desarrollemos la teoría de perturbaciones. Como veremos esta amplitud coincide con la calculada a través de las funciones propias del rotor rígido plano [60], no obstante nosotros la obtendremos de aproximar e integrar directamente de (4.8).

Habíamos dicho que la forma de aproximar el OAP en el régimen de rotor es considerar $\frac{g}{\hbar} \gg 1$, lo que implica $\alpha \rightarrow 0$, dado el análisis de la ecuación (3.29). De estos límites y de las ecuaciones (3.20) y (3.21) vemos que

$$g\alpha \sim \frac{1}{g} \rightarrow 0.$$

Por lo que, la amplitud de transición (4.8) en el régimen de rotor sin perturbar resulta de omitir el término $\omega g \alpha [1 + \cos 2u_n]$:

$$\langle p_b, t_b | p_a, t_a \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=1}^N l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\epsilon \omega g l_n^2}{2\hbar} \right]} + O(\epsilon^2). \quad (4.9)$$

De la expresión (4.9) podemos calcular la amplitud de transición en este régimen. Tenemos que (4.9) puede escribirse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} &\langle p_b, t_b | p_a, t_a \rangle \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \sum_{n=1}^N \frac{\epsilon \omega g l_n^2}{2\hbar}} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) e^{-i \sum_{n=1}^N l_n (u_n - u_{n-1})} + O(\epsilon^2). \end{aligned}$$

Para realizar las integrales en u_n tenemos lo siguiente. Veamos la integral en u_1

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 e^{-i[l_2(u_2-u_1)+l_1(u_1-u_0)]},$$

hacemos el cambio de variable $v_1 = u_1 - u_0$, así la integral se escribe

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-u_0}^{2\pi-u_0} dv_1 e^{-il_2(u_2-u_0)} e^{i(l_2-l_1)v_1} = \frac{e^{-il_2(u_2-u_0)}}{2\pi} \left[\int_{-u_0}^0 dv_1 e^{i(l_2-l_1)v_1} + \int_0^{2\pi-u_0} dv_1 e^{i(l_2-l_1)v_1} \right].$$

Hacemos otro cambio de variable en la primera integral $w_1 = 2\pi + v_1$, ahora tenemos

$$\begin{aligned} & \frac{e^{-il_2(u_2-u_0)}}{2\pi} \left[\int_{2\pi-u_0}^{2\pi} dw_1 e^{i(l_2-l_1)(w_1-2\pi)} + \int_0^{2\pi-u_0} dv_1 e^{i(l_2-l_1)v_1} \right] \\ &= \frac{e^{-il_2(u_2-u_0)}}{2\pi} \int_0^{2\pi} dw_1 e^{i(l_2-l_1)w_1} \\ &= e^{-il_2(u_2-u_0)} \delta_{l_2, l_1}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Ahora, con este resultado notamos que la integral en u_2 tiene la misma forma que la de u_1 , por lo que

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_2 e^{-i[l_3(u_3-u_2)+l_2(u_2-u_0)]} = e^{-il_3(u_3-u_0)} \delta_{l_3, l_2}, \quad (4.11)$$

y así será para el resto de variables u_n .

Entonces, la amplitud de transición del OAP en el régimen de rotor sin perturbar considerando (4.10) y (4.11) será

$$\begin{aligned} \langle p_b, t_b | p_a, t_a \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \sum_{n=1}^N \frac{\epsilon \omega g l_n^2}{2\hbar}} e^{-il_N(u_N-u_0)} \delta_{l_N, l_{N-1}} \dots \delta_{l_2, l_1} + O(\epsilon^2) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{l_N, l_1 \in \mathbb{Z}} e^{-il_N(u_N-u_0)} e^{-i \frac{\epsilon \omega g l_N^2}{2\hbar}} e^{-i \frac{(N-1)\epsilon \omega g l_1^2}{2\hbar}} \delta_{l_N, l_1} + O(\epsilon^2) \\ &= \sum_{l_N \in \mathbb{Z}} e^{-il_N(u_b-u_a)} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_N^2 (t_b-t_a)}{2}}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Este resultado corresponde al propagador de un rotor plano estándar calculado con las funciones propias y valores propios del rotor [59, 60]. Empero, en nuestro caso sólo evaluamos directamente la forma discreta de la integral de trayectoria polimérica, sin hacer referencia a las funciones propias y valores propios del rotor. Podemos reescribir el propagador del rotor en una forma más conveniente

$$\begin{aligned} k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) &= \sum_{l_0 \in \mathbb{Z}} e^{i(u_b-u_a)l_0 - \frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b-t_a)}{2}} \\ &= 1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_0(u_b-u_a)] e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b-t_a)}{2}}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Esta ecuación se puede expresar como una función Teta de Jacobi [24, 53, 61], si tomamos como argumento $\frac{u_b-u_a}{2}$ y como parámetro $e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g (t_b-t_a)}{2}}$:

$$k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) = \vartheta_3 \left(\frac{u_b-u_a}{2}, e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g (t_b-t_a)}{2}} \right).$$

Por último, debemos decir que la amplitud de transición del rotor rígido plano estándar presenta dos formas distintas [59, 60, 61], las cuales se pueden relacionar mediante la fórmula de suma de Poisson. El caso polimérico no es la excepción, hay otra expresión para el propagador del OAP en el régimen de rotor, $k^{(0)}$, que se obtiene a partir de la ecuación (4.12) mediante la fórmula de suma de Poisson. En este trabajo sólo trabajaremos con la forma (4.13), que será la base en el cálculo de la amplitud del OAP mediante teoría de perturbaciones, como veremos en las siguientes secciones.

4.3. Amplitud de transición mediante teoría de perturbaciones

En esta sección desarrollamos la teoría de perturbaciones de la integral de trayectoria del OAP en el régimen de rotor. Para esto, consideramos como la amplitud a orden cero a la amplitud del rotor (4.9), y como potencial perturbativo el término: $\omega g \alpha [1 + \cos 2u_n]$. Así, seguimos el desarrollo estándar [3, 59].

La amplitud de transición del OAP (4.8) puede ser reescrita de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
 & \langle p_b, t_b | p_a, t_a \rangle \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=1}^N l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right]} e^{-\frac{i\epsilon \omega g \alpha}{\hbar} \sum_{n=1}^N [1 + \cos 2u_n]} + O(\epsilon^2) \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=1}^N l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right]} \times \\
 & \quad \left\{ 1 - \frac{i\epsilon \omega g \alpha}{\hbar} \sum_{r=1}^N [1 + \cos 2u_r] + \frac{1}{2!} \left(\frac{i\epsilon \omega g \alpha}{\hbar} \right)^2 \left[\sum_{s=1}^N 1 + \cos 2u_s \right] \left[\sum_{r=1}^N 1 + \cos 2u_r \right] \right\} \quad (4.14)
 \end{aligned}$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \beta^m k^{(m)}(u_b, t_b; u_a, t_a), \quad (4.15)$$

donde hemos definido $\beta = -\frac{i\omega g \alpha}{\hbar}$. La expresión (4.15) es un desarrollo perturbativo de la amplitud del OAP, la cual a orden cero en β corresponde al propagador del rotor $k^{(0)}$, ecuación (4.12). Algo para remarcar es que, en principio, podemos calcular la corrección a n -ésimo orden $k^{(n)}$ mediante la amplitud a orden cero (4.12). Esto lo mostraremos para las correcciones a primer y segundo orden a continuación.

4.3.1. Corrección a primer orden

Veamos la corrección a primer orden en β de la amplitud de transición del OAP, $k^{(1)}$. De la ecuación (4.14) tenemos

$$\begin{aligned}
 & k^{(1)}(u_b, t_b; u_a, t_a) = \\
 & \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{r=1}^N \epsilon \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=1}^N l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right]} [1 + \cos 2u_r]. \quad (4.16)
 \end{aligned}$$

La expresión anterior puede ser escrita en términos de la amplitud de transición a orden cero (4.12). Para esto la suma de la exponencial y la medida de la integral de trayectoria en (4.16)

son reagrupadas de la siguiente manera

$$\sum_{n=1}^N l_n(u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} = \sum_{n=1}^r l_n(u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} + \sum_{n=r+1}^N l_n(u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2}, \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} & \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) \\ &= \left(\prod_{n=r+1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=r+1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \right) \left(\prod_{n=1}^{r-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^r \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Luego, la corrección a primer orden de la amplitud de transición (4.16) teniendo en cuenta (4.17) y (4.18) puede escribirse

$$\begin{aligned} & k^{(1)}(u_b, t_b; u_a, t_a) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{r=1}^N \epsilon \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \right) \times \\ & \quad \left(\prod_{n=r+1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=r+1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=r+1}^N l_n(u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right]} [1 + \cos 2u_r] \times \\ & \quad \left(\prod_{n=1}^{r-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^r \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=1}^r l_n(u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right]}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

En el límite $\epsilon \rightarrow 0$, utilizamos la expresión del propagador del rotor (4.13) y la definición de la integral de Riemann para la suma en r de la siguiente manera:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=r+1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=r+1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=r+1}^N l_n(u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right]} = k^{(0)}(u_b, t_b; u_r, t_r), \quad (4.20)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^{r-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^r \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=1}^r l_n(u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right]} = k^{(0)}(u_r, t_r; u_a, t_a), \quad (4.21)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{r=1}^N \epsilon = \int_{t_a}^{t_b} dt_r. \quad (4.22)$$

Así, mediante los límites (4.20), (4.21) y (4.22), la corrección a primer orden, ecuación (4.19), queda

$$\begin{aligned} & k^{(1)}(u_b, t_b; u_a, t_a) \\ &= \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_r \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_r, t_r) (1 + \cos(2u_r)) k^{(0)}(u_r, t_r; u_a, t_a). \end{aligned} \quad (4.23)$$

4.3.2. Corrección a segundo orden

Ahora veamos la corrección a segundo orden de la amplitud de transición del OAP, $k^{(2)}$. De la ecuación (4.14) tenemos

$$\begin{aligned}
 k^{(2)}(u_b, t_b; u_a, t_a) &= \frac{1}{2!} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=1}^N l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right]} \\
 &\quad \times \left[\epsilon \sum_{s=1}^N 1 + \cos 2u_s \right] \left[\epsilon \sum_{r=1}^N 1 + \cos 2u_r \right]. \quad (4.24)
 \end{aligned}$$

Reagrupamos la medida y la suma en el argumento de la exponencial de (4.24), similar a lo que hicimos en (4.17) y (4.18):

$$\begin{aligned}
 &\left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) \\
 &= \left(\prod_{n=s+1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=s+1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) \left(\prod_{n=r+1}^{s-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=r+1}^s \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) \\
 &\quad \times \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \right) \left(\prod_{n=1}^{r-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^r \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right). \quad (4.25)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &\sum_{n=1}^N l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \\
 &= \sum_{n=1}^r l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} + \sum_{n=r+1}^s l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \\
 &\quad + \sum_{n=s+1}^N l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2}. \quad (4.26)
 \end{aligned}$$

Vemos que la corrección a segundo orden (4.24) puede reescribirse con la ayuda de (4.25) y (4.26), como sigue

$$\begin{aligned}
 k^{(2)}(u_b, t_b; u_a, t_a) &= \frac{1}{2!} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \right) \\
 &\quad \times \left(\prod_{n=s+1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=s+1}^N \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=s+1}^N l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right]} \left[\epsilon \sum_{s=1}^N 1 + \cos 2u_s \right] \\
 &\quad \times \left(\prod_{n=r+1}^{s-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=r+1}^s \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=r+1}^s l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right]} \left[\epsilon \sum_{r=1}^N 1 + \cos 2u_r \right] \\
 &\quad \times \left(\prod_{n=1}^{r-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^r \sum_{l_n \in \mathbb{Z}} \right) e^{-i \left[\sum_{n=1}^r l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right]}. \quad (4.27)
 \end{aligned}$$

Si consideramos límites análogos a los de las ecuaciones (4.20) y (4.22) en la ecuación (4.27), entonces, en límite $\epsilon \rightarrow 0$, la corrección a segundo orden llega a ser

$$\begin{aligned}
 & k^{(2)}(u_b, t_b; u_a, t_a) \\
 &= \frac{1}{2!} \left(\frac{i\omega g q}{\hbar} \right)^2 \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \right) \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_s \right) \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_r \right) \\
 & \quad \times k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos 2u_s) k^{(0)}(u_s, t_s; u_r, t_r) (1 + \cos 2u_r) k^{(0)}(u_r, t_r; u_a, t_a) \quad (4.28)
 \end{aligned}$$

donde $k^{(0)}$ es el propagador del rotor (4.13).

En la ecuación (4.28) observemos que la región de integración en la parte temporal es un cuadrado de lados $t_b - t_a$, como se observa en la Figura 1 (línea negra). Podemos cambiar la región de integración si consideramos la recta $t_r = t_s$ (línea roja), esta recta divide en dos triángulos iguales el cuadrado de integración, un triángulo es el formada por los puntos del cuadrado que cumplen la condición $t_s < t_r$, y el otro triángulo está formado por los puntos que satisfacen la condición $t_s > t_r$.

Ahora, supondremos que el volumen que resulta de integrar una función $f(t_s, t_r)$ considerando el cuadrado, de lado $t_b - t_a$, como la región de integración, es el doble del volumen que resulta, si consideramos alguno de los triángulos, $t_s > t_r$, o $t_s < t_r$, como región de integración:

$$\int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^{t_b} dt_s dt_r f(t_s, t_r) = 2 \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^{t_s} dt_s dt_r f(t_s, t_r), \quad t_s > t_r, \quad (4.29)$$

$$\int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^{t_b} dt_s dt_r f(t_s, t_r) = 2 \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_s}^{t_b} dt_r dt_s f(t_s, t_r), \quad t_s < t_r. \quad (4.30)$$

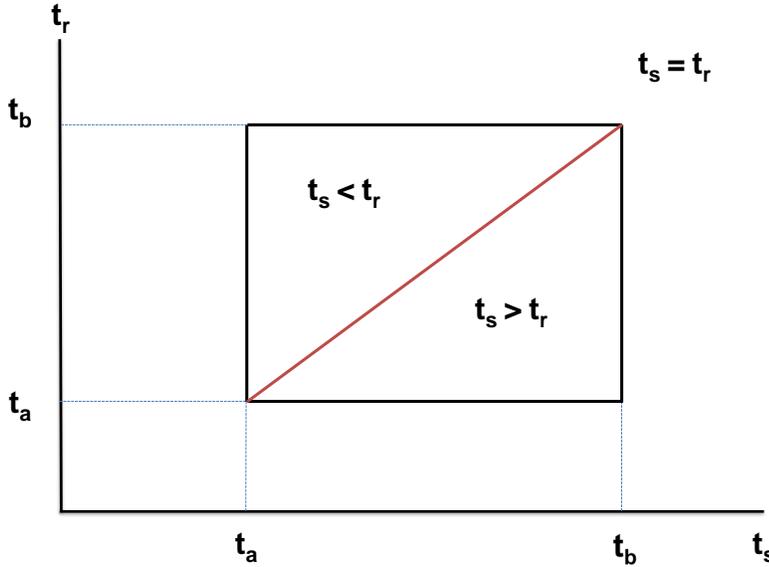


Figura 1

Entonces, podemos cambiar la región de integración temporal en (4.28), si restringimos esta región al triángulo $t_s > t_r$. Así, la ecuación (4.28) puede ser reescrita como la ecuación

(4.29)

$$\begin{aligned}
 & k^{(2)}(u_b, t_b; u_a, t_a) \\
 &= \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \right) \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_s \right) \left(\int_{t_a}^{t_s} dt_r \right) \\
 & \quad \times k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos 2u_s) k^{(0)}(u_s, t_s; u_r, t_r) (1 + \cos 2u_r) k^{(0)}(u_r, t_r; u_a, t_a), \quad (4.31)
 \end{aligned}$$

esta expresión nos da la corrección a segundo orden de la amplitud de transición del OAP.

En esta sección hemos propuesto la amplitud de transición del OAP en el régimen de rotor como un desarrollo perturbativo, donde las correcciones pueden ser calculadas por medio de la amplitud de transición del rotor (4.12), como sucede en los casos de la corrección a primer orden (4.23) y de la corrección a segundo orden (4.31). En las siguientes secciones calcularemos estas correcciones de forma explícita.

4.4. Cálculo explícito de la corrección a primer orden

En esta sección calculamos de forma explícita la corrección a primer orden a la amplitud de transición del OAP, ecuación (4.23). Podemos calcular esta corrección en dos partes

$$k^{(1)}(u_b, t_b; u_a, t_a) = k_1^{(1)} + k_2^{(1)}, \quad (4.32)$$

$$k_1^{(1)} = \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_r \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_r, t_r) k^{(0)}(u_r, t_r; u_a, t_a), \quad (4.33)$$

$$k_2^{(1)} = \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_r \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_r, t_r) \cos(2u_r) k^{(0)}(u_r, t_r; u_a, t_a). \quad (4.34)$$

Veamos el primer término $k_1^{(1)}$, ecuación (4.33). Éste representa la integral en el tiempo de la propiedad de composición de la amplitud de transición del rotor. Así, para mostrar esta propiedad introducimos la siguiente notación

$$k^{(0)}(u_b, t_b; u_r, t_r) = 1 + 2S(l_0, u_b, u_r), \quad k^{(0)}(u_r, t_r; u_a, t_a) = 1 + 2S(l_r, u_r, u_a), \quad (4.35)$$

con lo que la propiedad de composición se escribe

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r k^{(0)}(u_b, t_b; u_r, t_r) k^{(0)}(u_r, t_r; u_a, t_a) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \{1 + 2[S(l_0, u_b, u_r) + S(l_r, u_r, u_a)] + 4S(l_0, u_b, u_r)S(l_r, u_r, u_a)\}. \quad (4.36)
 \end{aligned}$$

Puesto que el segundo término de (4.36), $S(l_0, u_b, u_r)$, es función del $\cos[l_0(u_b - u_r)]$, compare (4.13) y (4.35), vemos que la integral respecto u_r es

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \cos[l_0(u_b - u_r)] = \cos(l_0 u_b) \delta_{l_0, 0}, \quad \text{con } l_0 = 1, 2, \dots \\
 & \Rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r S(l_0, u_b, u_r) = 0. \quad (4.37)
 \end{aligned}$$

De igual forma sucede para el tercer término de (4.36), $S(l_r, u_r, u_a)$, pues es función del $\cos[l_r(u_r - u_a)]$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r S(l_r, u_r, u_a) = 0. \quad (4.38)$$

El cuarto término de (4.36) es

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r 4S(l_0, u_b, u_r) S(l_r, u_r, u_a) &= 2 \sum_{l_0, l_r=1}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b - t_r)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_r^2 (t_r - t_a)}{2}} \cos[l_0 u_b - l_r u_a] \delta_{l_0, l_r} \\ &= 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_0(u_b - u_a)] e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b - t_a)}{2}}, \end{aligned} \quad (4.39)$$

donde en la última expresión se ha considerado que $l_0 > 0$ y $l_r > 0$.

De esta forma, si combinamos (4.37), (4.38) y (4.39) en (4.36), obtenemos la propiedad de composición de la amplitud de transición del rotor

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r k^{(0)}(u_b, t_b; u_r, t_r) k^{(0)}(u_r, t_r; u_a, t_a) = k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a). \quad (4.40)$$

Luego, el primer término de la corrección a primer orden $k_1^{(1)}$, ecuación (4.33), teniendo en cuenta la integral en el tiempo de (4.40), resulta ser

$$k_1^{(1)} = \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_r \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) = (t_b - t_a) k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a). \quad (4.41)$$

Ahora calculemos la integral en u_r de $k_2^{(1)}$, ecuación (4.34), utilicemos de nuevo la notación (4.35)

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_r, t_r) \cos(2u_r) k^{(0)}(u_r, t_r; u_a, t_a) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r [\cos(2u_r) + 2 \cos(2u_r) (S(l_0, u_b, u_r) + S(l_r, u_r, u_a)) \\ &\quad + 4S(l_0, u_b, u_r) S(l_r, u_r, u_a) \cos(2u_r)]. \end{aligned} \quad (4.42)$$

La primera integral de (4.42) es

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \cos(2u_r) = 0. \quad (4.43)$$

Para el segundo término de (4.42) tenemos las siguientes integrales

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \cos[l_r(u_r - u_a)] \cos(2u_r) &= \frac{1}{2} \cos(l_r u_a) \delta_{l_r, 2}, \quad l_r = 1, 2, \dots, \\ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \cos[l_0(u_b - u_r)] \cos(2u_r) &= \frac{1}{2} \cos(l_0 u_b) \delta_{l_0, 2}, \quad l_0 = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Así, el segundo término de (4.42) es

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r 2 \cos(2u_r) (S(l_0, u_b, u_r) + S(l_r, u_r, u_a)) = e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g(t_b - t_r)} \cos(2u_b) + e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g(t_r - t_a)} \cos(2u_a). \quad (4.44)$$

El tercer término de (4.42) resulta de la siguiente forma

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r 4S(l_0, u_b, u_r) S(l_r, u_r, u_a) \cos(2u_r) \\ &= \sum_{l_0, l_r=1}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b - t_r)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_r^2 (t_r - t_a)}{2}} \{ \cos[l_0 u_b + l_r u_a] [\delta_{l_r, -l_0 - 2} + \delta_{l_r, -l_0 + 2}] \\ & \quad + \cos[l_0 u_b - l_r u_a] [\delta_{l_r, l_0 - 2} + \delta_{l_r, l_0 + 2}] \}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Para evaluar las deltas de Kronecker debemos hacer un análisis del dominio de l_r y l_0 :

1. $\delta_{l_r, -l_0 + 2}$ con $l_r > 0$, $l_0 > 0$. Los únicos valores de l_r y l_0 que cumple la igualdad en el argumento de la delta de Kronecker, son $l_r = 1$, $l_0 = 1 \Rightarrow \delta_{l_r, -l_0 + 2} \rightarrow \delta_{l_0, l_r} \delta_{l_0, 1}$.
2. $\delta_{l_r, -l_0 - 2}$ con $l_r > 0$, $l_0 > 0$. No hay valores para los cuales se cumpla la igualdad en los argumentos de la delta de Kronecker, por tanto $\delta_{l_r, -l_0 - 2} = 0$.
3. $\delta_{l_r, l_0 - 2}$ con $l_r > 0$, $l_0 > 0$. Para que la igualdad se cumpla, debemos tener en el argumento de la delta de Kronecker $l_r = l_0 - 2 > 0 \Rightarrow l_0 > 2$.
4. $\delta_{l_r, l_0 + 2}$ con $l_r > 0$, $l_0 > 0 \Rightarrow l_r = l_0 + 2, \forall l_0 > 0$.

Con lo que, la ecuación (4.45) resulta ser

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r 4S(l_0, u_b, u_r) S(l_r, u_r, u_a) \cos(2u_r) = \sum_{l_0, l_r=1}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b - t_r)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_r^2 (t_r - t_a)}{2}} \\ & \quad \times \{ \cos[l_0 u_b + l_r u_a] [\delta_{l_0, l_r} \delta_{l_0, 1}] + \cos[l_0 u_b - l_r u_a] [\delta_{l_r, l_0 - 2} |_{l_0 > 2} + \delta_{l_r, l_0 + 2}] \} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g (t_b - t_a)}{2}} \cos(u_b + u_a) + \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b - t_r)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g (l_0 + 2)^2 (t_r - t_a)}{2}} \cos[l_0 u_b - (l_0 + 2) u_a] \\ & \quad + \sum_{l_0=3}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b - t_r)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g (l_0 - 2)^2 (t_r - t_a)}{2}} \cos[l_0 u_b - (l_0 - 2) u_a]. \end{aligned} \quad (4.46)$$

En el último término de (4.46) realizamos el cambio $l_0 \rightarrow l_0 + 2$, con $l_0 > 0$:

$$\begin{aligned} & \sum_{l_0=3}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b - t_r)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g (l_0 - 2)^2 (t_r - t_a)}{2}} \cos[l_0 u_b - (l_0 - 2) u_a] \rightarrow \\ & \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g (l_0 + 2)^2 (t_b - t_r)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_r - t_a)}{2}} \cos[(l_0 + 2) u_b - l_0 u_a], \end{aligned}$$

si además introducimos la notación $l_n := l_0 + n$, con $n = 1, 2, \dots$, la ecuación (4.46) llega a ser

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r 4S(l_0, u_b, u_r) S(l_r, u_r, u_a) \cos(2u_r) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g(t_b - t_a)}{2}} \cos(u_b + u_a) \\ &+ \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b - t_a)}{2}} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g l_1 (t_r - t_a)} \cos[l_0 u_b - l_2 u_a] + e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g l_1 (t_b - t_r)} \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] \right\} \end{aligned} \quad (4.47)$$

que es el tercer término de (4.42).

Así, si sustituimos (4.43), (4.44) y (4.47) en (4.42), encontramos

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_r, t_r) \cos(2u_r) k^{(0)}(u_r, t_r; u_a, t_a) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g (t_b - t_r)} \cos(2u_b) + e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g (t_r - t_a)} \cos(2u_a) + e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g (t_b - t_a)}{2}} \cos(u_b + u_a) \\ &+ \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b - t_a)}{2}} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g l_1 (t_r - t_a)} \cos[l_0 u_b - l_2 u_a] + e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g l_1 (t_b - t_r)} \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] \right\}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Con lo que, de acuerdo a (4.34), el segundo término de la corrección a primer orden $k_2^{(1)}$ es la integral en el tiempo de (4.48):

$$\begin{aligned} k_2^{(1)} &= (t_b - t_a) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g (t_b - t_a)}{2}} \cos(u_b + u_a) \\ &+ \cos(2u_b) \int_{t_a}^{t_b} dt_r e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g (t_b - t_r)} + \cos(2u_a) \int_{t_a}^{t_b} dt_r e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g (t_r - t_a)} \\ &+ \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\omega g l_0^2 (t_b - t_a)}{2}} \left[\cos[l_0 u_b - l_2 u_a] \int_{t_a}^{t_b} dt_r e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g l_1 (t_r - t_a)} \right. \\ &\quad \left. + \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] \int_{t_a}^{t_b} dt_r e^{-\frac{i}{\hbar} 2\omega g l_1 (t_b - t_r)} \right]. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Para realizar las integrales temporales en (4.49) consideramos las siguientes integrales

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_r e^{-d(t_r - t_a)} \quad \text{y} \quad \int_{t_a}^{t_b} dt_r e^{-d(t_b - t_r)}. \quad (4.50)$$

Realizando los cambios de variables $u = t_r - t_a$ y $u = t_b - t_r$, respectivamente, e introduciendo la función

$$F_1[ct_{nm}] := -\frac{1}{c} [e^{ct_{nm}} - 1], \quad \text{con } t_{nm} := t_n - t_m, \quad (4.51)$$

obtenemos en las integrales (4.50)

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_r e^{-d(t_r - t_a)} = -F_1[-dt_{ba}], \quad \int_{t_a}^{t_b} dt_r e^{-d(t_b - t_r)} = -F_1[-dt_{ba}]. \quad (4.52)$$

De esta forma, si evaluamos (4.52) en (4.49) y también definimos $\gamma := \frac{\hbar}{2i\omega g}$, hallamos

$$\begin{aligned} k_2^{(1)} &= t_{ba} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) - (\cos(2u_b) + \cos(2u_a)) F_1 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \\ &- \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_1 \left[-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] (\cos[l_0 u_b - l_2 u_a] + \cos[l_2 u_b - l_0 u_a]), \end{aligned} \quad (4.53)$$

donde volvimos considerar $t_{nm} = t_n - t_m$. Si utilizamos la definición de F_1 , ecuación (4.51), en el factor del $\cos [l_2 u_b - l_0 u_a]$ de (4.53), y escribimos en dicho factor

$$e^{-\frac{l_0^2(t_b-t_a)}{4\gamma} - \frac{(l_0+1)(t_b-t_a)}{\gamma}} = e^{-\frac{(t_b-t_a)(l_0^2+4(l_0+1))}{4\gamma}} = e^{-\frac{(l_0+2)^2(t_b-t_a)}{4\gamma}},$$

luego, la segunda contribución a la corrección a primer orden, ecuación (4.53), llega a ser

$$\begin{aligned} k_2^{(1)} &= t_{ba} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) - (\cos(2u_b) + \cos(2u_a)) F_1 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \\ &\quad + \sum_{l_0=1}^{\infty} E_1(l_0, l_1, l_2) + E_1(-l_2, -l_1, -l_0), \end{aligned} \quad (4.54)$$

donde hemos definido la función $E_1(x, y, z)$:

$$E_1(x, y, z) := \left(\frac{\gamma}{y} \right) \left(e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} - e^{-\frac{z^2 t_{ba}}{4\gamma}} \right) \cos [x u_b - z u_a]. \quad (4.55)$$

Por consiguiente, la corrección a primer orden, combinando (4.32) con (4.41) y (4.54), es

$$\begin{aligned} k^{(1)}(u_b, t_b; u_a, t_a) &= t_{ba} k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) + t_{ba} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) - (\cos(2u_b) + \cos(2u_a)) F_1 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \\ &\quad + \sum_{l_0=1}^{\infty} \{E_1(l_0, l_1, l_2) + E_1(-l_2, -l_1, -l_0)\}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

4.5. Cálculo explícito de la corrección a segundo orden

En esta sección calculamos explícitamente la corrección a segundo orden en la amplitud de transición, $k^{(2)}$, ecuación (4.31). Si combinamos las fórmulas para $k^{(1)}$ y $k^{(2)}$, ecuaciones (4.23) y (4.31), después sustituimos la forma explícita de $k^{(1)}$, ecuación (4.56), $k^{(2)}$ se puede expresar de la siguiente manera

$$\begin{aligned} k^{(2)}(u_b, t_b; u_a, t_a) &= \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_s \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) k^{(1)}(u_s, t_s; u_a, t_a) \\ &= k_1^{(2)} + k_2^{(2)} + k_3^{(2)} + k_4^{(2)}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

con

$$k_1^{(2)} = \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_s t_{sa} \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) k^{(0)}(u_s, t_s; u_a, t_a), \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned} k_2^{(2)} &= \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_s \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) \left\{ t_{sa} e^{-\frac{t_{sa}}{4\gamma}} \cos(u_s + u_a) \right. \\ &\quad \left. - (\cos(2u_s) + \cos(2u_a)) F_1 \left[-\frac{t_{sa}}{\gamma} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$k_3^{(2)} = \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_s \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) \left\{ \sum_{l_0=1}^{\infty} E_1(l_0, l_1, l_2) \right\}, \quad (4.60)$$

$$k_4^{(2)} = \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_s \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) \left\{ \sum_{l_0=1}^{\infty} E_1(-l_2, -l_1, -l_0) \right\} \quad (4.61)$$

Primera contribución a la corrección a segundo orden

En este apartado trabajamos con el primer término de (4.57), $k_1^{(2)}$. Entonces, de acuerdo a (4.58) tenemos

$$k_1^{(2)} = \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_s t_{sa} \right) \left\{ k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) + e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) + e^{-\frac{t_{bs}}{\gamma}} \cos(2u_b) + e^{-\frac{t_{sa}}{\gamma}} \cos(2u_a) \right. \\ \left. + \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left[\cos[l_2 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{l_1 t_{bs}}{\gamma}} + \cos[l_0 u_b - l_2 u_a] e^{-\frac{l_1 t_{sa}}{\gamma}} \right] \right\}, \quad (4.62)$$

donde hemos utilizado las expresiones de (4.40) y (4.48) en lugar de la integral en u_s de (4.58). Para las integrales temporales de cada término de (4.62), tenemos

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_s (t_s - t_a) = \frac{(t_b - t_a)^2}{2}, \quad (4.63)$$

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_s (t_s - t_a) e^{-d(t_s - t_a)} = -\frac{1}{d} \left[(t_b - t_a) e^{-d(t_b - t_a)} + \left(\frac{1}{d} \right) (e^{-d(t_b - t_a)} - 1) \right] = F_2[dt_{ba}] e^{-dt_{ba}}, \quad (4.64)$$

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_s (t_s - t_a) e^{-d(t_b - t_s)} = \frac{1}{d} \left[(t_b - t_a) + \left(\frac{1}{d} \right) (e^{-d(t_b - t_a)} - 1) \right] = F_2[-dt_{ba}]. \quad (4.65)$$

En las anteriores expresiones hemos definido

$$F_2[ct_{nm}] := -\frac{1}{c} (t_{nm} + F_1[ct_{nm}]). \quad (4.66)$$

Si evaluamos (4.63), (4.64) y (4.65), en los respectivos términos de (4.62), $k_1^{(2)}$ resulta

$$k_1^{(2)} = \frac{t_{ba}^2}{2} \left[k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) + e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) \right] + F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) \\ + F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \cos(2u_a) + \sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(l_0, l_1, l_2) + E_2(-l_2, -l_1, -l_0), \quad (4.67)$$

con la definición de la función $E_2(x, y, z)$ como

$$E_2(x, y, z) := e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[zu_b - xu_a] F_2 \left[-\frac{yt_{ba}}{\gamma} \right]. \quad (4.68)$$

Segunda contribución a la corrección a segundo orden

En este apartado calcularemos el segundo término de (4.57), $k_2^{(2)}$. Dada la ecuación (4.59), este término lo podemos separar en dos partes:

$$k_2^{(2)} = k_{21}^{(2)} + k_{22}^{(2)}, \quad (4.69)$$

$$k_{21}^{(2)} = - \int_{t_a}^{t_b} dt_s F_1 \left[-\frac{t_{sa}}{\gamma} \right] \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) [\cos(2u_s) + \cos(2u_a)] \quad (4.70)$$

$$k_{22}^{(2)} = \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_s t_{sa} e^{-\frac{t_{sa}}{4\gamma}} \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) \cos(u_s + u_a). \quad (4.71)$$

Primero calcularemos $k_{21}^{(2)}$, ecuación (4.70). Consideremos la integral en u_s que involucra el factor $\cos(2u_a)$ de (4.70), si sustituimos la expresión del propagador del rotor (4.13), encontramos

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) \left[1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_0(u_b - u_s)] e^{-\frac{l_0^2 t_{bs}}{4\gamma}} \right] (1 + \cos(2u_s)) \cos(2u_a) \\ & = \cos(2u_a) \left[1 + e^{-\frac{t_{bs}}{\gamma}} \cos(2u_b) \right], \end{aligned} \quad (4.72)$$

donde para obtener este resultado hemos utilizado

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} du_s (1 + \cos(2u_s)) &= 2\pi, \quad \int_0^{2\pi} du_s \cos[l_0(u_b - u_s)] = 2\pi \delta_{l_0,0}, \\ \int_0^{2\pi} du_s \cos[l_0(u_b - u_s)] \cos(2u_s) &= \pi \cos(l_0 u_b) \delta_{l_0,2}, \quad \text{con } l_0 > 0. \end{aligned}$$

Asimismo, para el término proporcional a $\cos(2u_s)$ de (4.70), nuevamente empleando (4.13), la integral en u_2 será

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{2\pi} du_s (1 + \cos(2u_s)) \cos(2u_s) \right. \\ & \left. + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} \int_0^{2\pi} du_s \cos[l_0(u_b - u_s)] (1 + \cos(2u_s)) \cos(2u_s) \right\} \\ & = \frac{1}{2\pi} \left\{ \pi + 2\pi \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} \left[\delta_{l_0,0} + \cos(l_0 u_b) \delta_{l_0,2} + \frac{1}{2} \cos(l_0 u_b) \delta_{l_0,4} \right] \right\} \\ & = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} e^{-\frac{4(t_b-t_s)}{\gamma}} \cos(4u_b) + e^{-\frac{(t_b-t_s)}{\gamma}} \cos(2u_b), \end{aligned} \quad (4.73)$$

aquí evaluamos las siguientes integrales

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} du_s (1 + \cos(2u_s)) \cos(2u_s) &= \pi, \\ \int_0^{2\pi} du_s \cos[l_0(u_b - u_s)] (1 + \cos(2u_s)) \cos(2u_s) &= \pi \cos(l_0 u_b) \delta_{l_0,2} + \pi \delta_{l_0,0} + \frac{\pi}{2} \cos(l_0 u_b) \delta_{l_0,4}. \end{aligned}$$

De esta forma, combinando (4.70), (4.72) y (4.73), $k_{21}^{(2)}$ llega a ser

$$k_{21}^{(2)} = \gamma \left\{ \left(\frac{1}{2} + \cos(2u_a) \right) I_{t1} + \frac{1}{2} \cos(4u_b) I_{t2} + (1 + \cos(2u_a)) \cos(2u_b) I_{t3} \right\}, \quad (4.74)$$

con

$$I_{t1} = \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(1 - e^{-\frac{t_s-t_a}{\gamma}} \right), \quad (4.75)$$

$$I_{t2} = \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(1 - e^{-\frac{t_s-t_a}{\gamma}} \right) e^{-\frac{4(t_b-t_s)}{\gamma}}, \quad (4.76)$$

$$I_{t3} = \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(1 - e^{-\frac{t_s-t_a}{\gamma}} \right) e^{-\frac{(t_b-t_s)}{\gamma}}, \quad (4.77)$$

donde fue usada la definición de F_1 , ecuación (4.51). Así, para I_{t1} , ecuación (4.75), tenemos

$$\begin{aligned} I_{t1} &= \int_0^{t_b-t_a} du \left(1 - e^{-\frac{u}{\gamma}}\right), \text{ con } u = t_s - t_a, \\ &= \frac{1}{\gamma} F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right]. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Para I_{t2} , ecuación (4.76), vemos que

$$\begin{aligned} I_{t2} &= \int_{t_a}^{t_b} dt_s e^{-\frac{4(t_b-t_s)}{\gamma}} - e^{-\frac{(t_b-t_a)}{\gamma}} \int_{t_a}^{t_b} dt_s e^{-\frac{3(t_b-t_s)}{\gamma}}. \\ &= -F_1 \left[-\frac{4t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[-\frac{3t_{ba}}{\gamma} \right], \end{aligned} \quad (4.79)$$

aquí fue empleada la segunda expresión en (4.52). Para I_{t3} , ecuación (4.77), de nuevo con ayuda de la segunda expresión de (4.52), encontramos

$$\begin{aligned} I_{t3} &= \int_{t_a}^{t_b} dt_s e^{-\frac{(t_b-t_s)}{\gamma}} - e^{-\frac{(t_b-t_a)}{\gamma}} \int_{t_a}^{t_b} dt_s \\ &= \frac{1}{\gamma} e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right]. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Así, si sustituimos (4.78), (4.79) y (4.80) en (4.74), $k_{21}^{(2)}$ es

$$\begin{aligned} k_{21}^{(2)} &= \left[\frac{1}{2} + \cos(2u_a) \right] F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] + \frac{\gamma}{2} \cos(4u_b) \left(-F_1 \left[-\frac{4t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[-\frac{3t_{ba}}{\gamma} \right] \right) \\ &\quad + (1 + \cos(2u_a)) \cos(2u_b) \left(e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \right). \end{aligned} \quad (4.81)$$

Para el segundo término de (4.69), $k_{22}^{(2)}$, dado por (4.71), si sustituimos el propagador del rotor (4.13), la integral en u_s se escribe como

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) \cos(u_s + u_a) \\ &= \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) \left\{ (1 + \cos(2u_s)) \cos(u_s + u_a) \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 t_{bs}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_b - u_s)] (1 + \cos(2u_s)) \cos(u_s + u_a) \right\}. \end{aligned} \quad (4.82)$$

Si desarrollamos el primer término de (4.82), $(1 + \cos(2u_s)) \cos(u_s + u_a)$, tenemos

$$\begin{aligned} &(1 + \cos(2u_s)) \cos(u_s + u_a) \\ &= \cos(u_s + u_a) + \frac{\cos(u_a)}{2} [\cos(u_s) + \cos(3u_s)] - \frac{\sin(u_a)}{2} [\sin(3u_s) - \sin(u_s)]. \end{aligned}$$

Con lo que, la integral en u_s del primer término de (4.82) es

$$\int_0^{2\pi} du_s (1 + \cos(2u_s)) \cos(u_s + u_a) = 0. \quad (4.83)$$

De manera similar realizamos la integral en u_s del segundo término de (4.82), $\cos[l_0(u_b - u_s)](1 + \cos(2u_s)) \cos(u_s + u_a)$, así hallaremos

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{2\pi} du_s \cos[l_0(u_b - u_s)](1 + \cos(2u_s)) \cos(u_s + u_a) \\
 &= \pi \delta_{l_0,1} \left(\cos l_0 u_b \cos u_a - \sin l_0 u_b \sin u_a + \frac{1}{2} \cos l_0 u_b \cos u_a + \frac{1}{2} \sin l_0 u_b \sin u_a \right) \\
 & \quad + \frac{\pi}{2} \delta_{l_0,3} (\cos l_0 u_b \cos u_a - \sin l_0 u_b \sin u_a) \\
 &= \pi \delta_{l_0,1} \left[\cos(l_0 u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(l_0 u_b - u_a) \right] + \frac{\pi}{2} \delta_{l_0,3} \cos(l_0 u_b + u_a). \tag{4.84}
 \end{aligned}$$

Por lo que, si sustituimos (4.83) y (4.84) en (4.82), la integral en u_s de $k_{22}^{(2)}$ resulta ser

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) \cos(u_s + u_a) \\
 &= \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 t_{bs}}{4\gamma}} \left(\delta_{l_0,1} \left[\cos(l_0 u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(l_0 u_b - u_a) \right] + \frac{1}{2} \delta_{l_0,3} \cos(l_0 u_b + u_a) \right) \\
 &= e^{-\frac{t_{bs}}{4\gamma}} \left[\cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] + \frac{1}{2} e^{-\frac{9t_{bs}}{4\gamma}} \cos(3u_b + u_a). \tag{4.85}
 \end{aligned}$$

Ahora, si combinamos (4.71) y (4.85), encontramos $k_{22}^{(2)}$

$$\begin{aligned}
 k_{22}^{(2)} &= \left(\int_{t_a}^{t_b} dt_s (t_s - t_a) e^{-\frac{(t_s - t_a)}{4\gamma}} \right) \left(e^{-\frac{(t_b - t_s)}{4\gamma}} \left[\cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] \right. \\
 & \quad \left. + \frac{1}{2} e^{-\frac{9(t_b - t_s)}{4\gamma}} \cos(3u_b + u_a) \right) \\
 &= e^{-\frac{(t_b - t_a)}{4\gamma}} \left[\cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] \int_{t_a}^{t_b} dt_s (t_s - t_a) \\
 & \quad + \frac{1}{2} e^{-\frac{(t_b - t_a)}{4\gamma}} \cos(3u_b + u_a) \int_{t_a}^{t_b} dt_s (t_s - t_a) e^{-\frac{2(t_b - t_s)}{\gamma}} \\
 &= \frac{t_{ba}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[\cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] + \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] \cos(3u_b + u_a) \tag{4.86}
 \end{aligned}$$

Por consiguiente, de acuerdo a (4.69), si sumamos $k_{21}^{(2)}$ y $k_{22}^{(2)}$, ecuaciones (4.81) y (4.86), obtenemos la segunda contribución a la corrección a segundo orden $k_2^{(2)}$ (4.59):

$$\begin{aligned}
 k_2^{(2)} &= \frac{t_{ba}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[\cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] + \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] \cos(3u_b + u_a) \\
 & \quad + \left[\frac{1}{2} + \cos(2u_a) \right] F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] + \frac{\gamma}{2} \cos(4u_b) \left(-F_1 \left[-\frac{4t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[-\frac{3t_{ba}}{\gamma} \right] \right) \\
 & \quad + (1 + \cos(2u_a)) \cos(2u_b) e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right]. \tag{4.87}
 \end{aligned}$$

Antes de calcular las contribuciones $k_3^{(2)}$ y $k_4^{(2)}$ de la corrección a segundo orden, $k^{(2)}$, ecuación (4.57), vamos a sumar las contribuciones $k_1^{(2)}$ y $k_2^{(2)}$, ecuaciones (4.67) y (4.87). Así, tenemos

$$\begin{aligned}
 k_1^{(2)} + k_2^{(2)} &= \frac{t_{ba}^2}{2} \left[k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) + e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) \right] \\
 &+ F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) + F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \cos(2u_a) \\
 &+ \frac{t_{ba}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[\cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] + \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] \cos(3u_b + u_a) \\
 &+ \left[\frac{1}{2} + \cos(2u_a) \right] F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] + \frac{\gamma}{2} \cos(4u_b) \left(-F_1 \left[-\frac{4t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[-\frac{3t_{ba}}{\gamma} \right] \right) \\
 &+ (1 + \cos(2u_a)) \cos(2u_b) e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \\
 &+ \sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(l_0, l_1, l_2) + E_2(-l_2, -l_1, -l_0)
 \end{aligned}$$

Simplificamos los siguientes términos semejantes:

$$\begin{aligned}
 &\frac{t_{ba}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) + \frac{t_{ba}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[\cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] \\
 &= \frac{t_{ba}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[2 \cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right],
 \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
 &F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) + F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \cos(2u_a) + \left[\frac{1}{2} + \cos(2u_a) \right] F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \\
 &+ (1 + \cos(2u_a)) \cos(2u_b) e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \\
 &= -t_{ba} F_1 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] (\cos 2u_b + \cos 2u_a) + \frac{1}{2} F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \cos 2u_b \cos 2u_a.
 \end{aligned}$$

Con esto, la corrección a segundo orden, $k^{(2)}$, considerando sólo hasta la segunda contribución, dada por la suma $k_1^{(2)} + k_2^{(2)}$, ecuaciones (4.67) y (4.87), llega a ser

$$\begin{aligned}
 &k_1^{(2)} + k_2^{(2)} \\
 &= \frac{t_{ba}^2}{2} k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) + \frac{t_{ba}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[2 \cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] \\
 &- t_{ba} F_1 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] (\cos 2u_b + \cos 2u_a) + \frac{1}{2} F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \cos 2u_b \cos 2u_a \\
 &+ \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] \cos(3u_b + u_a) + \frac{\gamma}{2} \cos(4u_b) \left(-F_1 \left[-\frac{4t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[-\frac{3t_{ba}}{\gamma} \right] \right) \\
 &+ \sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(l_0, l_1, l_2) + E_2(-l_2, -l_1, -l_0). \tag{4.88}
 \end{aligned}$$

Tercera contribución a la corrección a segundo orden

Ahora calculemos el tercer término de (4.57), $k_3^{(2)}$, sustituyendo (4.55) en (4.60), éste es

$$k_3^{(2)} = \sum_{l_s=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_s + 1} \right) \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(e^{-\frac{l_s^2 t_{sa}}{4\gamma}} - e^{-\frac{(l_s+2)^2 t_{sa}}{4\gamma}} \right) \times \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) \cos[l_s u_s - (l_s + 2)u_a]. \quad (4.89)$$

Si utilizamos la expresión explícita del propagador del rotor (4.13) para la integral en u_s de (4.89), tenemos

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) \cos[l_s u_s - (l_s + 2)u_a] \\ &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{2\pi} du_s (1 + \cos(2u_s)) \cos[l_s u_s - (l_s + 2)u_a] \right. \\ & \quad \left. + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 t_{bs}}{4\gamma}} \int_0^{2\pi} du_s \cos[l_0(u_b - u_s)] (1 + \cos(2u_s)) \cos[l_s u_s - (l_s + 2)u_a] \right\} \quad (4.90) \end{aligned}$$

Vemos que la integral en u_s del primer término de (4.90) es

$$\int_0^{2\pi} du_s (1 + \cos(2u_s)) \cos[l_s(u_s - u_a) - 2u_a] = \pi \cos((l_s + 2)u_a) \delta_{l_s, 2}, \quad (4.91)$$

aquí sólo hemos considerado los términos que son compatibles con la condición $l_s > 0$. De igual forma, para la integral en u_s del segundo término de (4.90), hallamos

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} du_s \cos[l_0(u_b - u_s)] (1 + \cos(2u_s)) \cos[l_s(u_s - u_a) - 2u_a] \\ &= \pi \delta_{l_0, l_s} \cos[l_0 u_b - (l_s + 2)u_a] \\ & \quad + \frac{\pi}{2} \delta_{l_0, l_s - 2} \cos[l_0 u_b - (l_s + 2)u_a] + \frac{\pi}{2} \delta_{l_0, -l_s + 2} \cos[l_0 u_b + (l_s + 2)u_a] \\ & \quad + \frac{\pi}{2} \delta_{l_0, l_s + 2} \cos[l_0 u_b - (l_s + 2)u_a]. \quad (4.92) \end{aligned}$$

También sólo hemos retenido los términos que son compatibles con las condiciones $l_0 > 0$ y $l_s > 0$. Ahora, en la ecuación (4.92) aún podemos analizar algunas consecuencias de las condiciones $l_0 > 0$ y $l_s > 0$:

1.

$\delta_{l_0, -l_s + 2}$, como $l_0 > 0$, se debe tener $-l_s + 2 > 0, \Rightarrow l_s < 2$. Pero $l_s > 0, \Rightarrow l_s = 1$.

$$\text{Así } l_0 = -l_s + 2 = 1 \Rightarrow \delta_{l_0, -l_s + 2} = \delta_{l_0, l_s} \delta_{l_s, 1}.$$

2.

$$\delta_{l_0, l_s - 2}, l_0 > 0 \Rightarrow l_s - 2 > 0 \Rightarrow l_s > 2.$$

3.

δ_{l_0, l_s+2} , se cumple $\forall l_s > 0, l_0 > 0$.

Con esto, la ecuación (4.92) se puede anotar en la manera siguiente

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} du_s \cos[l_0(u_b - u_s)] (1 + \cos(2u_s)) \cos[l_s(u_s - u_a) - 2u_a] \\ &= \pi \delta_{l_0, l_s} \cos[l_0 u_b - (l_s + 2)u_a] + \frac{\pi}{2} \delta_{l_0, l_s-2} \cos[l_0 u_b - (l_s + 2)u_a] |_{l_s > 2} \\ & \quad + \frac{\pi}{2} \delta_{l_0, l_s} \delta_{l_s, 1} \cos[l_0 u_b + (l_s + 2)u_a] + \frac{\pi}{2} \delta_{l_0, l_s+2} \cos[l_0 u_b - (l_s + 2)u_a]. \end{aligned} \quad (4.93)$$

Entonces, si sustituimos (4.91) y (4.93) en (4.90), hallamos la integral en u_s de $k_3^{(2)}$ (4.89)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) \cos[l_s(u_s - u_a) - 2u_a] \\ &= \frac{1}{2} \cos((l_s + 2)u_a) \delta_{l_s, 2} + e^{-\frac{l_s^2(t_b - t_s)}{4\gamma}} \cos[l_s u_b - (l_s + 2)u_a] \\ & \quad + \frac{1}{2} e^{-\frac{(l_s-2)^2(t_b - t_s)}{4\gamma}} \cos[(l_s - 2)u_b - (l_s + 2)u_a] |_{l_s > 2} \\ & \quad + \frac{1}{2} e^{-\frac{l_s^2(t_b - t_s)}{4\gamma}} \cos[l_s u_b + (l_s + 2)u_a] \delta_{l_s, 1} \\ & \quad + \frac{1}{2} e^{-\frac{(l_s+2)^2(t_b - t_s)}{4\gamma}} \cos[(l_s + 2)(u_b - u_a)]. \end{aligned} \quad (4.94)$$

Por consiguiente, evaluando (4.94) en (4.89), $k_3^{(2)}$ puede ser escrita como

$$\begin{aligned} k_3^{(2)} &= \frac{\gamma}{6} \cos(4u_a) I_{t4} + \frac{\gamma}{4} \cos[u_b + 3u_a] I_{t5} + \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos[l_0 u_b - l_2 u_a] I_{t6} \\ & \quad + \sum_{l_0=3}^{\infty} \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos[(l_0 - 2)u_b - l_2 u_a] I_{t7} + \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos[l_2(u_b - u_a)] I_{t8} \end{aligned} \quad (4.95)$$

con

$$I_{t4} = \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(e^{-\frac{(t_s - t_a)}{\gamma}} - e^{-\frac{4(t_s - t_a)}{\gamma}} \right), \quad (4.96)$$

$$I_{t5} = \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(e^{-\frac{t_s - t_a + t_b - t_s}{4\gamma}} - e^{-\frac{9(t_s - t_a) + (t_b - t_s)}{4\gamma}} \right), \quad (4.97)$$

$$I_{t6} = \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(e^{-\frac{l_0^2(t_s - t_a + t_b - t_s)}{4\gamma}} - e^{-\frac{(l_0+2)^2(t_s - t_a) + l_0^2(t_b - t_s)}{4\gamma}} \right), \quad (4.98)$$

$$I_{t7} = \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(e^{-\frac{l_0^2(t_s - t_a) + (l_0-2)^2(t_b - t_s)}{4\gamma}} - e^{-\frac{(l_0+2)^2(t_s - t_a) + (l_0-2)^2(t_b - t_s)}{4\gamma}} \right), \quad (4.99)$$

$$I_{t8} = \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(e^{-\frac{l_0^2(t_s - t_a) + (l_0+2)^2(t_b - t_s)}{4\gamma}} - e^{-\frac{(l_0+2)^2(t_s - t_a) + (l_0+2)^2(t_b - t_s)}{4\gamma}} \right), \quad (4.100)$$

donde hicimos el cambio $l_s \rightarrow l_0$ y evaluamos $l_n = l_0 + n$.

De esta forma, mediante la primera fórmula de (4.52), la integral I_{t4} , ecuación (4.96), es

$$I_{t4} = F_1 \left[\frac{-4t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-t_{ba}}{\gamma} \right]. \quad (4.101)$$

Para la integral I_{t5} , ecuación (4.97), realizamos el cambio de variable $u = t_s - t_a$ y empleamos (4.52) con (4.66)

$$\begin{aligned} I_{t5} &= e^{-\frac{t_b-t_a}{4\gamma}} (t_b - t_a) - e^{-\frac{t_b-t_a}{4\gamma}} \int_0^{t_b-t_a} du e^{-\frac{2u}{\gamma}} \\ &= \frac{2}{\gamma} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right]. \end{aligned} \quad (4.102)$$

En la tercera integral I_{t6} , ecuación (4.98), de nuevo llevamos a cabo el cambio de variable $u = t_s - t_a$, y empleamos (4.52) con (4.66)

$$\begin{aligned} I_{t6} &= e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ (t_b - t_a) - \int_0^{t_b-t_a} du e^{-\frac{(l_s+1)u}{\gamma}} \right\} \\ &= \frac{l_1}{\gamma} e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-l_1 t_{ba}}{\gamma} \right]. \end{aligned} \quad (4.103)$$

Ahora, consideremos completo el cuarto término de (4.95), el término con la integral I_{t7} , primero cambiamos la etiqueta de la suma: $l_0 \rightarrow l_0 + 2$ con $l_0 > 0$

$$\begin{aligned} &\sum_{l_0=3}^{\infty} \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos [(l_0 - 2)u_b - l_2 u_a] I_{t7} \rightarrow \\ &\sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{l_3} \right) \cos [l_0 u_b - l_4 u_a] \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(e^{-\frac{(l_0+2)^2(t_s-t_a)+l_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} - e^{-\frac{(l_0+4)^2(t_s-t_a)+l_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} \right), \end{aligned} \quad (4.104)$$

donde se usó (4.99). Si ahora hacemos el cambio de variable $u = t_s - t_a$, las exponenciales pueden escribirse así

$$e^{-\frac{(l_0+2)^2(t_s-t_a)+l_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} = e^{-\frac{l_0^2(t_b-t_a)}{4\gamma}} e^{-\frac{(l_0+1)u}{\gamma}}, \quad (4.105)$$

$$e^{-\frac{(l_0+4)^2(t_s-t_a)+l_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} = e^{-\frac{l_0^2(t_b-t_a)}{4\gamma}} e^{-\frac{2(l_0+2)u}{\gamma}}. \quad (4.106)$$

Así, tomando en cuenta (4.105) y (4.106) en (4.104), luego empleando (4.52), encontramos que el cuarto de término de (4.95) resulta ser

$$\begin{aligned} &\sum_{l_0=3}^{\infty} \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos [(l_0 - 2)u_b - l_2 u_a] I_{t7} \\ &\rightarrow \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{l_3} \right) \cos [l_0 u_b - l_4 u_a] e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \int_0^{t_b-t_a} du \left(e^{-\frac{(l_0+1)u}{\gamma}} - e^{-\frac{2(l_0+2)u}{\gamma}} \right) \\ &= \sum_{l_0=1}^{\infty} E_3(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4), \end{aligned} \quad (4.107)$$

con

$$E_3(x, y, z, v, w) := \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{v} \right) \cos[xu_b - wu_a] e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ F_1 \left[\frac{-2zt_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-yt_{ba}}{\gamma} \right] \right\}. \quad (4.108)$$

Por último, la quinta integral I_{t8} , ecuación (4.100), si hacemos el cambio de variable $u = t_s - t_a$, obtenemos

$$\begin{aligned} I_{t8} &= e^{-\frac{i_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left(\int_0^{t_b - t_a} du e^{\frac{(l_0+1)u}{\gamma}} - (t_b - t_a) \right) \\ &= \frac{l_1}{\gamma} e^{-\frac{i_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right], \end{aligned} \quad (4.109)$$

donde se utilizó las ecuaciones (4.52) y (4.66).

Ahora, si sustituimos las ecuaciones (4.101), (4.102), (4.103), (4.107) y (4.109) en (4.95), obtenemos $k_3^{(2)}$, la tercera contribución a segundo orden

$$\begin{aligned} k_3^{(2)} &= \frac{\gamma}{6} \cos(4u_a) \left\{ F_1 \left[\frac{-4t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-t_{ba}}{\gamma} \right] \right\} + \frac{1}{2} \cos[u_b + 3u_a] e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] \\ &+ \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_0 u_b - l_2 u_a] e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] \\ &+ \sum_{l_0=1}^{\infty} E_3(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(-l_2, -l_1, -l_2), \end{aligned} \quad (4.110)$$

donde se ha utilizado (4.68) para obtener el término E_2 .

Si sumamos las ecuaciones (4.88) y (4.110), obtenemos $k_1^{(2)} + k_2^{(2)} + k_3^{(2)}$, que sería la corrección a segundo orden de la amplitud de transición hasta la tercera contribución:

$$\begin{aligned} &k_1^{(2)} + k_2^{(2)} + k_3^{(2)} \\ &= \frac{t_{ba}^2}{2} k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) + \frac{t_{ba}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[2 \cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] \\ &- t_{ba} F_1 \left[\frac{-t_{ba}}{\gamma} \right] (\cos 2u_b + \cos 2u_a) + \frac{1}{2} F_2 \left[\frac{-t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \cos 2u_b \cos 2u_a \\ &+ \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] \cos(3u_b + u_a) + \frac{\gamma}{2} \cos(4u_b) \left(-F_1 \left[\frac{-4t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{-3t_{ba}}{\gamma} \right] \right) \\ &+ \sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(l_0, l_1, l_2) + E_2(-l_2, -l_1, -l_0) + \frac{1}{2} E_2(-l_2, -l_1, -l_2) + E_3(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) \\ &+ \frac{\gamma}{6} \cos(4u_a) \left\{ F_1 \left[\frac{-4t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-t_{ba}}{\gamma} \right] \right\} + \frac{1}{2} \cos[u_b + 3u_a] e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] \\ &+ \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_0 u_b - l_2 u_a] e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-l_1 t_{ba}}{\gamma} \right]. \end{aligned} \quad (4.111)$$

Vemos que tenemos los siguientes términos semejantes en (4.111)

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] \cos(3u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b + 3u_a) e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] \\ &= \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] [\cos(3u_b + u_a) + \cos(u_b + 3u_a)]. \end{aligned} \quad (4.112)$$

También

$$\begin{aligned}
 & \frac{\gamma}{2} \cos(4u_b) \left(-F_1 \left[-\frac{4t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[-\frac{3t_{ba}}{\gamma} \right] \right) + \frac{\gamma}{6} \cos(4u_a) \left\{ F_1 \left[\frac{-4t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-t_{ba}}{\gamma} \right] \right\} \\
 &= \frac{\gamma^2}{6} \cos(4u_b) \left\{ \frac{1}{4} e^{-\frac{4t_{ab}}{\gamma}} - e^{-\frac{t_{ab}}{\gamma}} + \frac{3}{4} \right\} + \frac{\gamma}{6} \cos(4u_a) \left\{ F_1 \left[\frac{-4t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-t_{ba}}{\gamma} \right] \right\} \\
 &= \frac{\gamma}{6} \{ \cos(4u_b) + \cos(4u_a) \} \left\{ F_1 \left[\frac{-4t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-t_{ba}}{\gamma} \right] \right\}. \tag{4.113}
 \end{aligned}$$

Asimismo

$$\begin{aligned}
 & \sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(-l_2, -l_1, -l_0) + \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_0 u_b - l_2 u_a] e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] \\
 &= \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_0 u_b - l_2 u_a] e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ e^{-\frac{l_1 t_{ab}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] + F_2 \left[\frac{-l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] \right\} \\
 &= - \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_0 u_b - l_2 u_a] t_{ba} e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_1 \left[\frac{-l_1 t_{ba}}{\gamma} \right]. \tag{4.114}
 \end{aligned}$$

Si sustituimos (4.112) (4.113) (4.114) en (4.111), encontramos $k_1^{(2)} + k_2^{(2)} + k_3^{(2)}$:

$$\begin{aligned}
 & k_1^{(2)} + k_2^{(2)} + k_3^{(2)} \\
 &= \frac{t_{ba}^2}{2} k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) + \frac{t_{ba}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[2 \cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] \\
 &\quad - t_{ba} F_1 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] (\cos 2u_b + \cos 2u_a) + \frac{1}{2} F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \cos 2u_b \cos 2u_a \\
 &\quad + \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] [\cos(3u_b + u_a) + \cos(u_b + 3u_a)] \\
 &\quad + \frac{\gamma}{6} \{ \cos(4u_b) + \cos(4u_a) \} \left\{ F_1 \left[\frac{-4t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-t_{ba}}{\gamma} \right] \right\} \\
 &\quad - \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_0 u_b - l_2 u_a] t_{ba} e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_1 \left[\frac{-l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] \\
 &\quad + \sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(l_0, l_1, l_2) + \frac{1}{2} E_2(-l_2, -l_1, -l_2) + E_3(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4). \tag{4.115}
 \end{aligned}$$

Cuarta contribución a la corrección a segundo orden

Ahora calcularemos la última contribución $k_4^{(2)}$, ecuación (4.61). De esta forma, combinando (4.55) y (4.61) tenemos

$$\begin{aligned}
 k_4^{(2)} &= \sum_{l_s=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_s + 1} \right) \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(e^{-\frac{l_s^2 (t_s - t_a)}{4\gamma}} - e^{-\frac{(l_s+2)^2 (t_s - t_a)}{4\gamma}} \right) \\
 &\quad \times \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) \cos[l_s(u_s - u_a) + 2u_s]. \tag{4.116}
 \end{aligned}$$

Si nos restringimos a la integral respecto a u_s de (4.116) y utilizamos la expresión del propagador del rotor (4.13), tendremos los siguientes pasos

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_s \right) k^{(0)}(u_b, t_b; u_s, t_s) (1 + \cos(2u_s)) \cos[l_s(u_s - u_a) + 2u_s] \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{2\pi} du_s (1 + \cos(2u_s)) \cos[(l_s + 2)u_s - l_s u_a] \right. \\
 & \quad \left. + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} \int_0^{2\pi} du_s \cos[l_0(u_b - u_s)] (1 + \cos(2u_s)) \cos[(l_s + 2)u_s - l_s u_a] \right\} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left\{ 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} \left[\frac{\pi}{2} \cos(l_0 u_b - l_s u_a) \delta_{l_0, l_s+4} + \frac{\pi}{2} \cos(l_0 u_b - l_s u_a) \delta_{l_0, l_s} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \pi \cos(l_0 u_b - l_s u_a) \delta_{l_0, l_s+2} \right] \right\} \\
 &= \frac{1}{2} e^{-\frac{(l_s+4)^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} \cos[l_s(u_b - u_a) + 4u_b] \\
 & \quad + \frac{1}{2} e^{-\frac{l_s^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} \cos[l_s(u_b - u_a)] + e^{-\frac{(l_s+2)^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} \cos[l_s(u_b - u_a) + 2u_b]. \quad (4.117)
 \end{aligned}$$

En la integración anterior sólo hemos considerado los términos que están en concordancia con las condiciones $l_0 > 0$ y $l_s > 0$.

Si evaluamos (4.117) en (4.116) y además cambiamos $l_s \rightarrow l_0$, entonces $k_4^{(2)}$ resulta ser

$$\begin{aligned}
 k_4^{(2)} &= \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos[l_4 u_b - l_0 u_a] I_{t9} + \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos[l_0(u_b - u_a)] I_{t10} \\
 & \quad + \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] I_{t11}, \quad (4.118)
 \end{aligned}$$

con

$$I_{t9} = \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(e^{-\frac{l_0^2(t_s-t_a)+(l_0+4)^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} - e^{-\frac{(l_0+2)^2(t_s-t_a)+(l_0+4)^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} \right), \quad (4.119)$$

$$I_{t10} = \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(e^{-\frac{l_0^2(t_s-t_a)+l_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} - e^{-\frac{(l_0+2)^2(t_s-t_a)+l_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} \right), \quad (4.120)$$

$$I_{t11} = \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left(e^{-\frac{l_0^2(t_s-t_a)+(l_0+2)^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} - e^{-\frac{(l_0+2)^2(t_s-t_a)+(l_0+2)^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} \right). \quad (4.121)$$

Primero calculemos la integral I_{t9} , ecuación (4.119). Hacemos el cambio de variable $u = t_s - t_a$ en los argumentos de la exponenciales, con lo que las integrales son

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_s e^{-\frac{l_0^2(t_s-t_a)+(l_0+4)^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} = e^{-\frac{l_4^2 t_{ba}}{4\gamma}} \int_0^{t_b-t_a} du e^{\frac{2(l_0+2)u}{\gamma}} = -F_1 \left[\frac{2l_2 t_{ba}}{\gamma} \right] e^{-\frac{l_4^2 t_{ba}}{4\gamma}}, \quad (4.122)$$

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_s e^{-\frac{(l_0+2)^2(t_s-t_a)+(l_0+4)^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} = e^{-\frac{l_4^2 t_{ba}}{4\gamma}} \int_0^{t_b-t_a} du e^{\frac{(l_0+3)u}{\gamma}} = -F_1 \left[\frac{l_3 t_{ba}}{\gamma} \right] e^{-\frac{l_4^2 t_{ba}}{4\gamma}}. \quad (4.123)$$

De esta manera, combinando (4.122) y (4.123) en el primer término de (4.118), éste es

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos [l_4 u_b - l_0 u_a] I_{t9} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos [l_4 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{i_4^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ F_1 \left[\frac{l_3 t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{2l_2 t_{ba}}{\gamma} \right] \right\} \\
 &= \sum_{l_0=1}^{\infty} E_3(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0), \tag{4.124}
 \end{aligned}$$

donde se ha ocupado (4.108).

Ahora veamos la integral I_{t10} , ecuación (4.120). En el segundo término nuevamente hacemos el cambio $u = t_s - t_a$, así las integrales de las exponenciales son

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_s e^{-\frac{i_0^2(t_s-t_a)+i_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} = e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} t_{ba}, \tag{4.125}$$

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_s e^{-\frac{(l_0+2)^2(t_s-t_a)+i_0^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} = e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \int_0^{t_b-t_a} du e^{-\frac{(l_0+1)u}{\gamma}} = -F_1 \left[-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}}. \tag{4.126}$$

Con lo que, combinando (4.125) y (4.126) en el segundo término de (4.118), encontramos

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos [l_0(u_b - u_a)] I_{t10} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos [l_0(u_b - u_a)] e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] = \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(l_0, l_1, l_0), \tag{4.127}
 \end{aligned}$$

donde hemos usado (4.66) y (4.68).

Por último, evaluemos la integral I_{t11} . Para el argumento de la primera exponencial, de nuevo realizamos el cambio $u = t_s - t_a$, así las integrales de las exponenciales son

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_s e^{-\frac{i_0^2(t_s-t_a)+(l_0+2)^2(t_b-t_s)}{4\gamma}} = e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \int_0^{t_b-t_a} du e^{-\frac{(l_0+1)u}{\gamma}} = -F_1 \left[\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}}, \tag{4.128}$$

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_s e^{-\frac{i_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} = e^{-\frac{i_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} t_{ba}. \tag{4.129}$$

Luego, combinando (4.128) y (4.129) en el tercer término de (4.118), obtenemos

$$\sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos [l_2 u_b - l_0 u_a] I_{t11} = \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos [l_2 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{i_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right], \tag{4.130}$$

donde se usó (4.66).

Ahora, si tomamos en cuenta (4.124), (4.127) y (4.130) en (4.118), la cuarta contribución a segundo orden del propagador, $k_4^{(2)}$, es

$$k_4^{(2)} = \sum_{l_0=1}^{\infty} E_3(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0) + \frac{1}{2} E_2(l_0, l_1, l_0) + \cos [l_2 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{i_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] \tag{4.131}$$

Para finalizar, sumaremos $k_4^{(2)}$ a $k_1^{(2)} + k_2^{(2)} + k_3^{(2)}$, ecuaciones (4.131) y (4.115), respectivamente, así encontraremos $k^{(2)}$, la corrección a segundo orden de la amplitud de transición, ecuación (4.57). De esta forma, hallamos

$$\begin{aligned}
 & k^{(2)}(u_b, t_b; u_a, t_a) \\
 &= \frac{t_{ba}^2}{2} k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) + \frac{t_{ba}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[2 \cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] \\
 &\quad - t_{ba} F_1 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] (\cos 2u_b + \cos 2u_a) + \frac{1}{2} F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \cos 2u_b \cos 2u_a \\
 &\quad + \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] [\cos(3u_b + u_a) + \cos(u_b + 3u_a)] \\
 &\quad + \frac{\gamma}{6} \{ \cos(4u_b) + \cos(4u_a) \} \left\{ F_1 \left[\frac{-4t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-t_{ba}}{\gamma} \right] \right\} \\
 &\quad - \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_0 u_b - l_2 u_a] t_{ba} e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_1 \left[\frac{-l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] \\
 &\quad + \sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(l_0, l_1, l_2) + \frac{1}{2} E_2(-l_2, -l_1, -l_2) + E_3(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) \\
 &\quad + \sum_{l_0=1}^{\infty} E_3(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0) + \frac{1}{2} E_2(l_0, l_1, l_0) + \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{i_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] \quad (4.132)
 \end{aligned}$$

Algunos términos de la ecuación (4.132) puede ser simplificados. Primero veamos el último término de (4.132), en el cual con ayuda de (4.66) y (4.51) hallamos

$$\begin{aligned}
 & \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{i_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] \\
 &= - \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} e^{-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}} \left\{ t_{ba} - \frac{\gamma}{l_1} \left(e^{\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}} - 1 \right) \right\} \\
 &= - \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ t_{ba} e^{-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}} + \frac{\gamma}{l_1} \left(e^{-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}} - 1 \right) \right\}. \quad (4.133)
 \end{aligned}$$

Ahora, combinemos el término anterior (4.133) con el término $\sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(l_0, l_1, l_2)$ de (4.132), ocupando (4.68) y (4.66) hallamos

$$\begin{aligned}
 & \sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(l_0, l_1, l_2) - \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ t_{ba} e^{-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}} + \frac{\gamma}{l_1} \left(e^{-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}} - 1 \right) \right\} \\
 &= \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ t_{ba} + \frac{\gamma}{l_1} \left(e^{-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}} - 1 \right) - t_{ba} e^{-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}} - \frac{\gamma}{l_1} \left(e^{-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}} - 1 \right) \right\} \\
 &= \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} t_{ba} e^{-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \left(e^{\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}} - 1 \right) \\
 &= - \sum_{l_0=1}^{\infty} \cos[l_2 u_b - l_0 u_a] e^{-\frac{i_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} t_{ba} F_1 \left[\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] = t_{ba} \sum_{l_0=1}^{\infty} E_4(-l_2, -l_1, -l_0), \quad (4.134)
 \end{aligned}$$

donde introdujimos

$$E_4(x, y, z) := -\cos[xu_b - zu_a] e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_1 \left[-\frac{yt_{ba}}{\gamma} \right]. \quad (4.135)$$

Si sustituimos (4.134) en (4.132) encontramos la corrección a segundo orden de amplitud de transición del OAP

$$\begin{aligned} & k^{(2)}(u_b, t_b; u_a, t_a) \\ &= \frac{t_{ba}^2}{2} k^{(0)}(u_b, t_b; u_a, t_a) + \frac{t_{ba}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[2 \cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] \\ &\quad - t_{ba} F_1 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] (\cos 2u_b + \cos 2u_a) + \frac{1}{2} F_2 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] + e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \cos 2u_b \cos 2u_a \\ &\quad + \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[\frac{-2t_{ba}}{\gamma} \right] [\cos(3u_b + u_a) + \cos(u_b + 3u_a)] \\ &\quad + \frac{\gamma}{6} \{ \cos(4u_b) + \cos(4u_a) \} \left\{ F_1 \left[\frac{-4t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-t_{ba}}{\gamma} \right] \right\} \\ &\quad + \sum_{l_0=1}^{\infty} t_{ba} (E_4(l_0, l_1, l_2) + E_4(-l_2, -l_1, -l_0)) + E_3(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + E_3(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} E_2(l_0, l_1, l_0) + E_2(-l_2, -l_1, -l_2). \end{aligned} \quad (4.136)$$

Con esto finalizamos nuestra discusión de la amplitud de transición del OAP. Como hemos visto, podemos formular esta amplitud como una serie, ecuación (4.15), donde cada término depende del propagador del rotor $k^{(0)}$, ecuación (4.13), y el potencial perturbativo $1 + \cos(2u_r)$. Debemos notar que podemos calcular cualquier término de la serie, como lo hicimos explícitamente para $k^{(1)}$ y $k^{(2)}$, ecuaciones (4.56) y (4.136). Además, de forma notable, esta serie nos permitirá calcular las funciones de un punto y de dos puntos del OAP, esto en régimen de rotor y dentro del formalismo de integral de trayectoria, como veremos en el siguiente capítulo.

Capítulo 5

Campo escalar polimérico e integral de trayectoria

En este capítulo plantaremos la función de un punto y de dos puntos del oscilador armónico polimérico (OAP) como desarrollos perturbativos. Esto será resultado de emplear el desarrollo perturbativo de la amplitud de transición del OAP, ecuación (4.15). Calcularemos hasta segundo orden la función de un punto y de dos puntos, con lo que podremos recuperar el propagador del campo escalar en el régimen de rotor calculado en el formalismo hamiltoniano, ecuación (3.143).

5.1. Elementos de matriz de un operador de posición y un producto de dos operadores de posición: planteamiento

En esta sección proponemos como realizar el cálculo de los elementos de matriz de un operador de posición $\hat{x}(t_r)$, y del producto de dos operadores de posición a diferentes tiempos $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$, en la base del operador de traslaciones, esto para el caso del OAP. Para esto, empleamos el desarrollo perturbativo de la amplitud de transición calculado en el capítulo cuatro, ecuación (4.15). Por consiguiente, obtendremos un desarrollo perturbativo para los elementos de matriz de $\hat{x}(t_r)$ y $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$, donde los términos involucrados tendrán su origen en el propagador de rotor $k^{(0)}$, ecuación (4.13), lo cual nos dice que estos desarrollos podrían ser calculado de modo sistemático a cualquier orden.

Iniciamos con el caso de los elementos de matriz del operador de posición, $\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle$, donde $| p, t \rangle$ es la base dependiente del tiempo del operador de traslaciones \hat{V}_{λ_0} . El operador $\hat{x}(t_r)$ y los vectores propios de \hat{V}_{λ_0} en el esquema de Heisenberg están definidos como [46]

$$\hat{x}(t_r) = e^{\frac{i}{\hbar} t_r \hat{H}_{poly}} \hat{x} e^{-\frac{i}{\hbar} t_r \hat{H}_{poly}}, \text{ con } \hat{H}_{poly} = \frac{\hbar^2}{8m\lambda_0^2} [2 - \hat{V}_{2\lambda_0} - \hat{V}_{-2\lambda_0}] + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2,$$
$$| p, t \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} t \hat{H}_{poly}} | p \rangle.$$

Por lo que, el elemento de matriz de $\hat{x}(t_r)$ es

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle = \left\langle p_b \left| e^{-\frac{i}{\hbar} t_b \hat{H}_{poly}} \hat{x} e^{-\frac{i}{\hbar} t_r \hat{H}_{poly}} \right| p_a \right\rangle. \quad (5.1)$$

De manera similar a como procedimos de la ecuación (2.35) a (2.37), hacemos una partición en el tiempo $t_N - t_0 = \epsilon N$, donde reescribimos los puntos extremos del intervalo temporal $t_a = t_0$ y $t_b = t_N$. Además, consideramos que t_r está incluido en la partición temporal y cumple la condición $t_0 < t_r < t_N$ [48, 61]. Debido a la propiedad de composición del operador de evolución, podemos partir este operador

en N operadores de la siguiente forma

$$e^{-\frac{i}{\hbar}t_b\hat{H}_{poly}} = e^{-\frac{i}{\hbar}t_b\hat{H}_{poly}}e^{-\frac{i}{\hbar}t_{ra}\hat{H}_{poly}} = \left(\prod_{j=1}^{N-r} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}_{poly}} \right) \left(\prod_{n=1}^r e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}_{poly}} \right). \quad (5.2)$$

Entonces, si en la amplitud de transición (5.1) insertamos las relaciones de cerradura $\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_r$ y $\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp'_r$, donde p_r y p'_r están asociados con los valores propios de $\hat{V}_{\lambda_0}(t_r)$, y además consideramos la ecuación (5.2), la amplitud puede ser escrita como

$$\begin{aligned} & \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle \\ &= \left(\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_r dp'_r \langle p_b | \left(\prod_{j=1}^{N-r} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}_{poly}} \right) | p_r \rangle \langle p_r | \hat{x} | p'_r \rangle \langle p'_r | \left(\prod_{n=1}^r e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}_{poly}} \right) | p_a \rangle. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Si introducimos ahora una relación de cerradura de la base del operador de traslaciones, la segunda expresión de la ecuación (3.17), para cada p_n del conjunto $\{p_1, \dots, p_{r-1}, p_{r+1}, \dots, p_{N-1}\}$, el elemento de matriz de $\hat{x}(t_r)$ se pueden expresar de la siguiente forma

$$\begin{aligned} & \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle \\ &= \left(\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_r dp'_r \left(\prod_{j=1}^{N-r-1} \frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_{j+r} \right) \left(\prod_{j=1}^{N-r} \langle p_{r+j} | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}_{poly}} | p_{r+j-1} \rangle \right) \\ & \quad \times \langle p_r | \hat{x} | p'_r \rangle \left(\prod_{n=1}^{r-1} \frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_n \right) \left(\prod_{n=1}^r \langle p_n | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}_{poly}} | p_{n-1} \rangle \right), \end{aligned} \quad (5.4)$$

donde hemos considerado $p_{r+1-1} = p_r$ y $p_{n=r} = p'_r$. Si insertamos la relación de cerradura de la base del operador de posición, la primera expresión de la ecuación (3.17), en las amplitudes $\langle p_n | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}_{poly}} | p_{n-1} \rangle$, y tenemos en cuenta el cambio de variable $u_n = \frac{\lambda_0 p_n}{\hbar} + \frac{\pi}{2}$, hallamos

$$\begin{aligned} & \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\prod_{n=r+1}^{N-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=r+1}^N \sum_{l_n=-\infty}^{\infty} \right) e^{-i \left[\sum_{n=r+1}^N l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\epsilon}{\hbar} \left(\omega g q [1 + \cos 2u_n] + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right) \right]} \\ & \quad \times \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r du'_r \langle u_r | \hat{x} | u'_r \rangle \\ & \quad \times \left(\prod_{n=1}^{r-1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_n \right) \left(\prod_{n=1}^r \sum_{l_n=-\infty}^{\infty} \right) e^{-i \left[\sum_{n=1}^r l_n (u_n - u_{n-1}) + \frac{\epsilon}{\hbar} \left(\omega g q [1 + \cos 2u_n] + \frac{\omega g l_n^2}{2} \right) \right]} + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (5.5)$$

En el límite $\epsilon \rightarrow 0$ el elemento de matriz de $\hat{x}(t_r)$, ecuación (5.5), llega a ser

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle = \left(\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_r dp'_r \langle p_b, t_b | p_r, t_r \rangle \hat{x}_{rr'} \langle p'_r, t_r | p_a, t_a \rangle, \quad (5.6)$$

donde $\langle p_f, t_f | p_i, t_i \rangle$ representa la amplitud de transición del OAP y definimos $\hat{x}_{rr'} := \langle p_r | \hat{x} | p'_r \rangle$.

Si sustituimos el desarrollo perturbativo de la amplitud de transición del OAP, ecuación (4.15), en ambas amplitudes de transición que aparecen en la ecuación (5.6), e introducimos

la siguiente notación $k^{(s)}(b; a) = k^{(s)}(u_b, t_b; u_a, t_a)$ y $k^{(s)}(b'; a) = k^{(s)}(u'_b, t_b; u_a, t_a)$, vemos que el elemento de matriz de $\hat{x}(t_r)$ se escribe como el siguiente desarrollo perturbativo (potencias de beta):

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \beta^m \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle^{(m)}, \quad (5.7)$$

de forma explícita, hasta segundo orden, tenemos

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle^{(0)} = A_0, \quad (5.8)$$

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle^{(1)} = A_1 + A_2, \quad (5.9)$$

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle^{(2)} = A_3 + A_4 + A_5, \quad (5.10)$$

con

$$A_0 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r du'_r k^{(0)}(b; r) \hat{x}_{rr'} k^{(0)}(r'; a), \quad (5.11)$$

$$A_1 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r du'_r k^{(0)}(b; r) \hat{x}_{rr'} k^{(1)}(r'; a), \quad (5.12)$$

$$A_2 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r du'_r k^{(1)}(b; r) \hat{x}_{rr'} k^{(0)}(r'; a), \quad (5.13)$$

$$A_3 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r du'_r k^{(0)}(b; r) \hat{x}_{rr'} k^{(2)}(r'; a), \quad (5.14)$$

$$A_4 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r du'_r k^{(2)}(b; r) \hat{x}_{rr'} k^{(0)}(r'; a), \quad (5.15)$$

$$A_5 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r du'_r k^{(1)}(b; r) \hat{x}_{rr'} k^{(1)}(r'; a). \quad (5.16)$$

Los factores $k^{(0)}$, $k^{(1)}$ y $k^{(2)}$ en la expresiones de (5.11) a (5.16), son las contribuciones hasta segundo orden de la amplitud de transición del OAP (4.15), y las cuales obtuvimos explícitamente: ecuaciones (4.13), (4.56) y (4.136). Como mostramos en el capítulo cuatro, las contribuciones $k^{(1)}$ y $k^{(2)}$ son obtenidas sistemáticamente mediante el propagador del rotor $k^{(0)}$, implementando un esquema perturbativo en la integral de trayectoria, ecuaciones (4.23) y (4.31). En general, así podemos obtener cualquier corrección $k^{(m)}$ a la amplitud de transición del OAP. Por tanto, el desarrollo perturbativo del elemento de matriz de $\hat{x}(t_r)$, ecuación (5.7), puede ser calculado a un orden arbitrario a través del propagador de rotor $k^{(0)}$ (4.13) y empleando la teoría de perturbaciones en la integral de trayectoria polimérica.

Para evaluar el elemento de matriz $\hat{x}_{rr'} = \langle p_r | \hat{q} | p'_r \rangle$ usamos la relación de cerradura polimérica de los estados propios de posición, ecuación (3.17):

$$\begin{aligned} \hat{x}_{rr'} &= \sum_{l_n=-\infty}^{\infty} \langle p_r | l_n \lambda_0 \rangle l_n \lambda_0 \langle l_n \lambda_0 | p'_r \rangle \\ &= \lambda_0 \sum_{l_n=-\infty}^{\infty} l_n e^{il_n(u'_r - u_r)} \\ &= \begin{cases} -2\pi i \lambda_0 \frac{\partial \delta(u'_r - u_r)}{\partial u'_r}, \\ 2\pi i \lambda_0 \frac{\partial \delta(u'_r - u_r)}{\partial u_r}, \end{cases} \end{aligned} \quad (5.17)$$

donde fue usado el cambio de variable $u = \frac{\lambda_0 p}{\hbar} + \frac{\pi}{2}$ y fue introducida la definición periódica de la delta de Dirac [49]

$$\delta(\phi' - \phi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\phi' - \phi)}. \quad (5.18)$$

Como podemos observar en la ecuación (5.17), tenemos dos opciones para evaluar $\hat{x}_{rr'}$, las cuales son equivalentes. Esto se puede mostrar realizando una integración por partes y considerando el período 2π en u_b y u_a de la amplitud transición del OAP y de la delta de Dirac, como podemos ver en la ecuaciones (4.8) y (5.18), respectivamente. Si evaluamos la primera definición de (5.17) en la ecuación (5.6), podemos escribir

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r du'_r k(b; r) \left[-2\pi i \lambda_0 \frac{\partial \delta(u'_r - u_r)}{\partial u'_r} \right] k(r'; a),$$

en el segundo miembro de la anterior ecuación hemos introducido el cambio de variable $u_n = \frac{\lambda_0 p_n}{\hbar} + \frac{\pi}{2}$ y la notación $k(f, i) := \langle p_f, t_f | p_i, t_i \rangle$. Si integramos por partes obtenemos

$$\begin{aligned} \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r k(b; r) \left\{ -2\pi i \lambda_0 \int_0^{2\pi} du'_r \left[\frac{\partial \delta(u'_r - u_r)}{\partial u'_r} \right] k(r'; a) \right\} \\ &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r k(b; r) \left\{ -2\pi i \lambda_0 \delta(u'_r - u_r) k(r'; a) \Big|_0^{2\pi} \right. \\ &\quad \left. + 2\pi i \lambda_0 \int_0^{2\pi} du'_r \delta(u'_r - u_r) \frac{\partial k(r'; a)}{\partial u'_r} \right\} \\ &= \frac{i \lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r k(b; r) \frac{\partial k(r; a)}{\partial u_r}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Procedemos de forma similar para la segunda definición de (5.17):

$$\begin{aligned} \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du'_r k(r'; a) \left\{ 2\pi i \lambda_0 \int_0^{2\pi} du_r \left[\frac{\partial \delta(u'_r - u_r)}{\partial u_r} \right] k(b; r) \right\} \\ &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r k(r'; a) \left\{ 2\pi i \lambda_0 \delta(u'_r - u_r) k(b; r) \Big|_0^{2\pi} \right. \\ &\quad \left. - 2\pi i \lambda_0 \int_0^{2\pi} du'_r \delta(u'_r - u_r) \frac{\partial k(b; r)}{\partial u_r} \right\} \\ &= -\frac{i \lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r k(r; a) \frac{\partial k(b; r)}{\partial u_r} \end{aligned} \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{i \lambda_0}{2\pi} \left\{ k(b; r) k(r; a) \Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} du_r k(b; r) \frac{\partial k(r; a)}{\partial u_r} \right\} \\ &= \frac{i \lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_r k(b; r) \frac{\partial k(r; a)}{\partial u_r}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Puesto que (5.19) y (5.21) son iguales, se muestra que podemos usar cualquiera de las dos fórmulas de (5.17) para evaluar (5.6). También, del análisis observamos que la derivada de la delta de Dirac puede ser aplicada tanto a la amplitud que está a su derecha, como a la amplitud de su izquierda, teniendo presente la forma adecuada: vea las ecuaciones (5.19) y (5.20). Además, notemos que en este análisis podemos sustituir la amplitud total $k(f, i)$

por cualquiera de los términos del desarrollo perturbativo $k^{(m)}(f, i)$, ya que estos también presentan período $2\pi^1$, por lo que podemos usar las fórmulas (5.19) y (5.20) para evaluar explícitamente las contribuciones del elemento de matriz de $\hat{x}(t_r)$, de la ecuación (5.11) a (5.16).

Para el elemento de matriz del producto de dos operadores de posición a diferentes tiempos $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$, en la base del operador de traslaciones, seguimos el mismo procedimiento empleado para el caso del elemento de matriz de $\hat{x}(t_r)$, por lo que después de remover la partición temporal obtendremos

$$\begin{aligned} & \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle \\ &= \left(\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \right)^4 \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_s dp'_s dp_r dp'_r \langle p_b, t_b | p_s, t_s \rangle \hat{x}_{ss'} \langle p'_s, t_s | p_r, t_r \rangle \hat{x}_{rr'} \langle p'_r, t_r | p_a, t_a \rangle \\ &= \left(\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_s dp'_s \langle p_b, t_b | p_s, t_s \rangle \hat{x}_{ss'} \langle p'_s, t_s | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle, \end{aligned} \quad (5.22)$$

donde hemos identificado el elemento de matriz de $\hat{x}(t_r)$, ecuación (5.6), en la primera igualdad, además notemos que hemos considerado un ordenamiento en el tiempo $t_s > t_r$, por consiguiente, cuando realicemos el cálculo de forma explícita, t_s representará el tiempo mayor y t_r el tiempo menor. Si utilizamos el desarrollo perturbativo de la amplitud de transición del OAP, ecuación (4.15), obtendremos un desarrollo en potencias de beta del elemento de matriz de $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$ (5.22):

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \beta^m \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle^{(m)}, \quad (5.23)$$

en específico, hasta segundo orden encontramos

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle^{(0)} = B_0, \quad (5.24)$$

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle^{(1)} = B_1 + B_2, \quad (5.25)$$

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle^{(2)} = B_3 + B_4 + B_5, \quad (5.26)$$

donde

$$B_0 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_s du'_s k^{(0)}(b; s) \hat{x}_{ss'} \langle s' | \hat{x}(t_r) | a \rangle^{(0)}, \quad (5.27)$$

$$B_1 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_s du'_s k^{(0)}(b; s) \hat{x}_{ss'} \langle s' | \hat{x}(t_r) | a \rangle^{(1)}, \quad (5.28)$$

$$B_2 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_s du'_s k^{(1)}(b; s) \hat{x}_{ss'} \langle s' | \hat{x}(t_r) | a \rangle^{(0)}, \quad (5.29)$$

$$B_3 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_s du'_s k^{(0)}(b; s) \hat{x}_{ss'} \langle s' | \hat{x}(t_r) | a \rangle^{(2)}, \quad (5.30)$$

$$B_4 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_s du'_s k^{(1)}(b; s) \hat{x}_{ss'} \langle s' | \hat{x}(t_r) | a \rangle^{(1)}, \quad (5.31)$$

$$B_5 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_s du'_s k^{(2)}(b; s) \hat{x}_{ss'} \langle s' | \hat{x}(t_r) | a \rangle^{(0)}. \quad (5.32)$$

¹ Vea $k^{(0)}, k^{(1)}$ y $k^{(2)}$, ecuaciones (4.13), (4.56) y (4.136), respectivamente.

En las contribuciones de B_0 a B_5 del elemento de matriz de $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$, ecuaciones de (5.27) a (5.32), introducimos la notación $\langle f | \hat{x}(t_r) | i \rangle^{(m)} = \langle p_f, t_f | \hat{x}(t_r) | p_i, t_i \rangle^{(m)}$, donde se debe considerar el cambio de variable $u = \frac{\lambda_0 p_n}{\hbar} + \frac{\pi}{2}$.

Al igual que el caso de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_r)$, ecuación (5.7), podemos utilizar cualquiera de las dos formas explícitas de los elementos de matriz $\hat{x}_{ss'}$ ecuación (5.17). Como ya vimos ambas formas son equivalentes a través de una integración por partes (5.19) y (5.21). Más aún, podemos usar cualquiera de las fórmulas (5.19) y (5.20) para calcular explícitamente las contribuciones de B_0 a B_5 de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$.

Asimismo, podemos calcular explícitamente el desarrollo perturbativo de los elementos de matriz del producto $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$, ecuación (5.23), a cualquier orden, pues los términos de la serie pueden ser obtenidos utilizando la teoría de perturbaciones en la integral de trayectoria polimérica y el propagador del rotor $k^{(0)}$, ecuación (4.13). De la misma forma podemos hacer esto con los elementos de matriz de $\hat{x}(t_r)$, ecuación (5.7).

Por último, enfatizamos que la implementación de la teoría de perturbaciones, basada en el rotor, en la representación polimérica, ha sido de utilidad para estudiar el OAP, en esta sección hemos visto como a través del desarrollo perturbativo de la amplitud de transición del OAP, ecuación (4.15), podemos plantear de forma sistemática el cálculo de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_r)$ y del producto $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$, empleando el propagador del rotor $k^{(0)}$, ecuación (4.13).

En las siguientes secciones calcularemos explícitamente los elementos de matriz de $\hat{x}(t_r)$ y del producto $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$ hasta segundo orden, aunque como ya mencionamos estos pueden ser calculados a cualquier orden.

5.2. Orden cero de los elementos de matriz de un operador de posición y del producto de dos operadores de posición

Los elementos de matriz de $\hat{x}(t_1)$ a orden cero corresponden a los del rotor, ecuaciones (5.8) y (5.11) con $r = 1$. Para evaluar éstos, consideramos la primera igualdad de ecuación (5.17) para la derivada del la delta de Dirac y $k^{(0)}$ definido en la ecuación (4.13). Procedemos como lo hicimos en la ecuación (5.19), hacemos una integración por partes y tenemos en cuenta que $k^{(0)}$ (4.13) y la delta de Dirac (5.18) presentan período 2π . Así, la combinación de las ecuaciones (5.8) y (5.11) llega a ser

$$\begin{aligned} \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_1) | p_a, t_a \rangle^{(0)} &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) \frac{\partial k^{(0)}(1; a)}{\partial u_1} \\ &= -2i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 \left[\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) e^{-\frac{l_0^2 t_1 a}{4\gamma}} \sin l_0 (u_1 - u_a) \right], \end{aligned}$$

para evaluar la integral en u_1 utilizamos I_2 , ecuación (C.3) (vea el Apéndice C.1), luego, los elementos de matriz de $\hat{x}(t_1)$ a orden cero (5.8) resulta ser

$$\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_1) | p_a, t_a \rangle^{(0)} = -2i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_1 a}{4\gamma}} \sin l_0 (u_b - u_a). \quad (5.33)$$

Asimismo, los elementos de matriz del producto de un par de operadores de posición a diferentes tiempos, pueden ser evaluado para el rotor mediante las ecuaciones (5.24) y (5.27),

siendo $s = 2$ y $r = 1$, éstos son

$$\begin{aligned}
 \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_2) \hat{x}(t_1) | p_a, t_a \rangle^{(0)} &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_2 du_2' k^{(0)}(b; 2) \hat{x}_{22'} \langle 2' | \hat{x}(t_1) | a \rangle^{(0)} \\
 &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_2 du_2' k^{(0)}(b; 2) \left(-2\pi i \lambda_0 \frac{\partial \delta(u_2' - u_2)}{\partial u_2'} \right) \langle 2' | \hat{x}(t_1) | a \rangle^{(0)} \\
 &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_2 k^{(0)}(b; 2) \frac{\partial}{\partial u_2} \left[-2i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \sin l_0 (u_2 - u_a) \right] \\
 &= 2\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos l_0 (u_b - u_a), \tag{5.34}
 \end{aligned}$$

donde en primer lugar empleamos la primera expresión de la ecuación (5.17) además de la ecuación (5.33), hicimos una integración por partes considerando que los factores de la segunda línea tienen período 2π , similar al análisis de la ecuación (5.19), y por último usamos I_3 , ecuación (C.4), para realizar la integral en u_2 . Notemos que la expresión (5.34) no depende de t_2 ni de t_1 , por lo que, obtendremos el mismo resultado si consideramos el caso $s = 1$ y $r = 2$ en la ecuación (5.24).

5.3. Primer y segundo orden de los elementos de matriz del operador de posición

En esta sección calculamos de forma explícita las correcciones a primer y segundo orden de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_1)$, ecuaciones (5.9) y (5.10) respectivamente.

5.3.1. Corrección a primer orden

Primera contribución de la corrección a primer orden

En este apartado calcularemos la primera aportación a la corrección a primer orden de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_1)$, el término A_1 dado por la ecuación (5.12). Si continuamos como en la sección anterior esta contribución se escribe como

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_1 du_1' k^{(0)}(b; 1) \left(-2\pi i \lambda_0 \frac{\partial \delta(u_1' - u_1)}{\partial u_1'} \right) k^{(1)}(1'; a) \\
 &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) \frac{\partial}{\partial u_1} k^{(1)}(1; a). \tag{5.35}
 \end{aligned}$$

Si evaluamos la derivada $\frac{\partial}{\partial u_1} k^{(1)}$ de la ecuación (4.56), obtenemos

$$A_1 = A_{11} + A_{12} + A_{13} + A_{14} + A_{15}, \tag{5.36}$$

con

$$A_{11} = -2i\lambda_0 t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) e^{-\frac{l_0^2 t_{1a}}{4\gamma}} \sin l_0 (u_1 - u_a) \right\}, \quad (5.37)$$

$$A_{12} = -i\lambda_0 t_{1a} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) e^{-\frac{t_{1a}}{4\gamma}} \sin(u_1 + u_a) \right\}, \quad (5.38)$$

$$A_{13} = \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) \left\{ 2F_1 \left[-\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \sin(2u_1) \right\}, \quad (5.39)$$

$$A_{14} = \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) \left\{ \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial E_1(l_0, l_1, l_2)}{\partial u_1} \right\}, \quad (5.40)$$

$$A_{15} = \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) \left\{ \frac{\partial E_1(-l_2, -l_1, -l_0)}{\partial u_1} \right\}, \quad (5.41)$$

donde $\frac{\partial}{\partial u_1} E_1(x, y, z)$ es calculada de la ecuación (4.55) resultando ser

$$\frac{\partial E_1(x, y, z)}{\partial u_1} = -\gamma \left(\frac{x}{y} \right) \left(e^{-\frac{x^2 t_{1a}}{4\gamma}} - e^{-\frac{z^2 t_{1a}}{4\gamma}} \right) \sin [xu_1 - zu_a]. \quad (5.42)$$

Para calcular el primer y segundo término de la ecuación (5.36), A_{11} y A_{12} , podemos usar I_2 , ecuación (C.3), para evaluar la integral en u_1 . Así, el primer término A_{11} , ecuación (5.37), es

$$A_{11} = -2i\lambda_0 t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin l_0 (u_b - u_a). \quad (5.43)$$

Mientras que el segundo término A_{12} , ecuación (5.38), queda como

$$A_{12} = -i\lambda_0 t_{1a} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \sin(u_b + u_a). \quad (5.44)$$

Para el tercer término A_{13} , sustituimos la definición de F_1 (4.51) y usamos I_1 (C.2) para realizar la integral en u_1 , así (5.39) es

$$\begin{aligned} A_{13} &= -\frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) \left\{ 2\gamma \left(e^{\frac{t_{1a}}{\gamma}} - 1 \right) e^{-\frac{t_{1a}}{\gamma}} \sin(2u_1) \right\} \\ &= 2i\lambda_0 F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \sin(2u_b). \end{aligned} \quad (5.45)$$

En el cuarto y quinto término A_{14} y A_{15} , ecuaciones (5.40) y (5.41), respectivamente, empleamos (5.42) y nuevamente I_2 (C.3). El cuarto término A_{14} es

$$\begin{aligned} A_{14} &= -i\lambda_0 \gamma \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{l_0}{l_1} \right) \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) \left\{ \left(e^{-\frac{l_0^2 t_{1a}}{4\gamma}} - e^{-\frac{l_2^2 t_{1a}}{4\gamma}} \right) \sin [l_0 u_1 - l_2 u_a] \right\} \\ &= -i\lambda_0 \gamma \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{l_0}{l_1} \right) \left(1 - e^{-\frac{(l_2^2 - l_0^2) t_{1a}}{4\gamma}} \right) \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) e^{-\frac{l_0^2 t_{1a}}{4\gamma}} \sin [l_0 u_1 - l_2 u_a] \\ &= -i\lambda_0 \gamma \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{l_0}{l_1} \right) \left(1 - e^{-\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma}} \right) e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin [l_0 u_b - l_2 u_a] \\ &= i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} M_1(l_0, l_1, l_2), \end{aligned} \quad (5.46)$$

donde

$$M_1(x, y, z) := xF_1 \left[-\frac{yt_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[xu_b - zu_a]. \quad (5.47)$$

Para el quinto término A_{15} hallamos

$$\begin{aligned} A_{15} &= -i\lambda_0\gamma \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{l_2}{l_1} \right) \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) \left\{ \left(e^{-\frac{i_0^2 t_{1a}}{4\gamma}} - e^{-\frac{i_2^2 t_{1a}}{4\gamma}} \right) \sin[l_2 u_1 - l_0 u_a] \right\} \\ &= -i\lambda_0\gamma \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{l_2}{l_1} \right) \left(e^{-\frac{(i_0^2 - i_2^2) t_{1a}}{4\gamma}} - 1 \right) \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) e^{-\frac{i_2^2 t_{1a}}{4\gamma}} \sin[l_2 u_1 - l_0 u_a] \\ &= -i\lambda_0\gamma \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{l_2}{l_1} \right) \left(e^{\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma}} - 1 \right) e^{-\frac{i_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[l_2 u_b - l_0 u_a] \\ &= i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} M_1(-l_2, -l_1, -l_0). \end{aligned} \quad (5.48)$$

Por consiguiente, la primera contribución A_1 a la corrección a primer orden de los elementos de matriz $\hat{x}(t_1)$, ecuación (5.9), se obtiene de la suma (5.36), dada por las ecuaciones (5.43), (5.44), (5.45), (5.46), y (5.48)

$$\begin{aligned} A_1 &= -2i\lambda_0 t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin l_0(u_b - u_a) - i\lambda_0 t_{1a} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \sin(u_b + u_a) \\ &\quad + 2i\lambda_0 F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \sin(2u_b) + i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0)\}. \end{aligned} \quad (5.49)$$

Segunda contribución de la corrección a primer orden

En este apartado calcularemos la segunda contribución A_2 , ecuación (5.13), de la corrección a primer orden, ecuación (5.9). Primero debemos notar que la contribución a orden cero de la amplitud de transición, $k^{(0)}$, y su corrección a primer orden, $k^{(1)}$, cumplen las siguientes propiedades

$$\left[k^{(0)}(b; a) \right]^* = k^{(0)}(a; b), \quad (5.50)$$

$$\left[k^{(1)}(b; a) \right]^* = -k^{(1)}(a; b), \quad (5.51)$$

las cuales se pueden mostrar con la forma explícita que tienen $k^{(0)}$ y $k^{(1)}$, ecuaciones (4.13) y (4.56), respectivamente. A partir de estas ecuaciones podemos ver que se cumple la siguiente propiedad para A_2 (5.13)

$$A_2 = -A_1^* |_{b \leftrightarrow a}, \quad (5.52)$$

donde $b \leftrightarrow a$ significa que intercambiamos los índices b y a en la variable u y en el tiempo t .

Esta propiedad de A_2 , ecuación (5.52), se puede obtener de la definición de A_1 , ecuación

(5.12), de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
 A_1^* &= \left[\left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r du_r' k^{(0)}(b; r) \hat{x}_{rr'} k^{(1)}(r'; a) \right]^* \\
 &= - \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r du_r' k^{(0)}(r; b) \hat{x}_{r'r} k^{(1)}(a; r') \\
 \Rightarrow -A_1^* |_{b \leftrightarrow a} &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_0^{2\pi} du_r' du_r k^{(1)}(b; r') \hat{x}_{r'r} k^{(0)}(r; a) \\
 &= A_2,
 \end{aligned}$$

donde utilizamos las ecuaciones (5.50) y (5.51), además se intercambiaron b y a , y se empleó la definición de A_2 , ecuación (5.13).

Por otro lado, si recordamos la definición $\gamma = \frac{\hbar}{2i\omega g}$, vemos que $\gamma^* = -\gamma$, lo cual de la definición de F_1 , ecuación (4.43), implica

$$F_1 \left[\frac{ct_{nm}}{\gamma} \right]^* = -F_1 \left[\frac{ct_{mn}}{\gamma} \right], \quad (5.53)$$

con c una constante real.

Luego, la segunda contribución A_2 , empleando las ecuaciones (5.52) y (5.53), es

$$\begin{aligned}
 A_2 &= -2i\lambda_0 t_{b1} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[l_0(u_b - u_a)] + i\lambda_0 t_{b1} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \sin[u_b + u_a] \\
 &\quad - 2i\lambda_0 F_1 \left[-\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{1a}}{\gamma}} \sin 2u_a + i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} [M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0)]_{b \leftrightarrow a}^* \quad (5.54)
 \end{aligned}$$

con

$$[M_1(x, y, z)] |_{b \leftrightarrow a}^* = x F_1 \left[-\frac{y t_{b1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[zu_b - xu_a]. \quad (5.55)$$

Remarcamos que las variables x, y y z en $M_1(x, y, z)$ son reales.

Por consiguiente, la corrección a primer orden de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_r)$, ecuación

(5.9), resulta de sumar A_1 y A_2 , ecuaciones (5.49) y (5.54):

$$\begin{aligned}
 & \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_1) | p_a, t_a \rangle^{(1)} \\
 &= -2i\lambda_0 t_{ba} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[l_0(u_b - u_a)] + i\lambda_0(t_{b1} - t_{1a}) e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \sin(u_b + u_a) \\
 &+ 2i\lambda_0 \left\{ e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \sin[2u_b] - e^{-\frac{t_{1a}}{\gamma}} F_1 \left[-\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] \sin[2u_a] \right\} \\
 &+ i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[l_0 u_b - l_2 u_a] \left\{ l_0 F_1 \left[-\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] + l_2 \left(F_1 \left[-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[-\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] \right) \right\} \\
 &+ i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[l_2 u_b - l_0 u_a] \left\{ l_2 F_1 \left[\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] + l_0 \left(F_1 \left[\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] \right) \right\} \\
 &= -2i\lambda_0 t_{ba} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[l_0(u_b - u_a)] + i\lambda_0(t_{b1} - t_{1a}) e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \sin(u_b + u_a) \\
 &+ 2i\lambda_0 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \sin[2u_b] - F_1 \left[\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] \sin[2u_a] \right\} \\
 &+ i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} M_2(l_0, l_1, l_2) + M_2(-l_2, -l_1, -l_0). \tag{5.56}
 \end{aligned}$$

En la primera igualdad se agruparon los términos $M_1(l_0, l_1, l_2)$ y $[M_1(-l_2, -l_1, -l_0)]_{b \leftrightarrow a}^*$, además, utilizando $l_n = l_0 + n$ y la definición de F_1 (4.43) en el término $[M_1(-l_2, -l_1, -l_0)]_{b \leftrightarrow a}^*$, se reescribieron los siguientes factores

$$F_1 \left[\frac{l_1 t_{b1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{l_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} = e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ F_1 \left[-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[-\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] \right\}.$$

De igual forma, se agruparon los términos $M_1(-l_2, -l_1, -l_0)$ y $[M_1(l_0, l_1, l_2)]_{b \leftrightarrow a}^*$, y en el término $[M_1(l_0, l_1, l_2)]_{b \leftrightarrow a}^*$, se reescribieron los siguientes factores

$$F_1 \left[-\frac{l_1 t_{b1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{l_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} = e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ F_1 \left[\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] \right\}.$$

Así introdujimos

$$M_2(x, y, z) := e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[xu_b - zu_a] \left\{ -2F_1 \left[-\frac{yt_{1a}}{\gamma} \right] + zF_1 \left[-\frac{yt_{ba}}{\gamma} \right] \right\}. \tag{5.57}$$

5.3.2. Corrección a segundo orden

Primera contribución de la corrección a segundo orden

La corrección a segundo orden de los elementos de matriz del operador $\hat{x}(t_r)$ está dada por la ecuación (5.10), en este apartado calculamos la primera contribución A_3 , ecuación (5.14). Procedemos en forma análoga a los casos anteriores, es decir, aplicaremos la derivada respecto u_1 a $k^{(2)}$, por lo que utilizaremos las expresiones de $k^{(0)}$ y $k^{(2)}$, ecuaciones (4.13) y (4.136),

respectivamente. De esta forma, obtenemos

$$\begin{aligned}
 A_3 &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) \frac{\partial}{\partial u_1} k^{(2)}(1; a) = \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(b; 1) \\
 &\times \left\{ -t_{1a}^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{1a}}{4\gamma}} \sin[l_0(u_1 - u_a)] - \frac{t_{1a}^2}{2} e^{-\frac{t_{1a}}{4\gamma}} \left[2 \sin(u_1 + u_a) + \frac{1}{2} \sin(u_1 - u_a) \right] \right. \\
 &+ 2t_{1a} F_1 \left[-\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \sin(2u_1) - 2F_2 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{1a}}{\gamma}} \sin(2u_1) \cos(2u_a) \\
 &- \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{1a}}{4\gamma}} F_2 \left[-\frac{2t_{1a}}{\gamma} \right] [\sin(u_1 + 3u_a) + 3 \sin(3u_1 + u_a)] \\
 &- \frac{2\gamma}{3} \left\{ F_1 \left[-\frac{4t_{1a}}{\gamma} \right] - F_1 \left[-\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \right\} \sin(4u_1) \\
 &+ t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_1} \{ E_4(l_0, l_1, l_2) + E_4(-l_2, -l_1, -l_0) \} \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_1} \{ E_2(l_0, l_1, l_0) + E_2(-l_2, -l_1, -l_2) \} \\
 &\left. + \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_1} \{ E_3(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + E_3(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0) \} \right\}, \tag{5.58}
 \end{aligned}$$

donde las derivadas $\frac{\partial}{\partial u_1} E_4$, $\frac{\partial}{\partial u_1} E_3$ y $\frac{\partial}{\partial u_1} E_2$ son calculadas con las ecuaciones (4.135), (4.108), y (4.68), respectivamente, luego

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial u_1} E_4(x, y, z) &= F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] x e^{-\frac{x^2 t_{1a}}{4\gamma}} \sin[xu_1 - zu_a], \\
 \frac{\partial}{\partial u_1} E_3(x, y, z, v, w) &= \frac{\gamma}{2} e^{-\frac{x^2 t_{1a}}{4\gamma}} \left(\frac{x}{v} \right) \sin[xu_1 - wu_a] \left(F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2zt_{1a}}{\gamma} \right] \right), \\
 \frac{\partial}{\partial u_1} E_2(x, y, z) &= -F_2 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] z e^{-\frac{x^2 t_{1a}}{4\gamma}} \sin(zu_1 - xu_a).
 \end{aligned}$$

Para efectuar la integral en u_1 en la ecuación (5.58), nos apoyamos de I_1 (C.2) y I_2 (C.3), así hallamos la primera contribución

$$\begin{aligned}
 A_3 &= -i\lambda_0 t_{1a}^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[l_0(u_b - u_a)] - \frac{i\lambda_0}{2} t_{1a}^2 e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[2 \sin(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \sin(u_b - u_a) \right] \\
 &+ 2i\lambda_0 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ t_{1a} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \sin(2u_b) - F_2 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \sin(2u_b) \cos(2u_a) \right\} \\
 &- \frac{i\lambda_0}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[-\frac{2t_{1a}}{\gamma} \right] \left[\sin(u_b + 3u_a) + 3e^{-\frac{2t_{b1}}{\gamma}} \sin(3u_b + u_a) \right] \\
 &+ \frac{i\lambda_0 \gamma}{2} \left\{ e^{\frac{3t_{1a}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{3t_{1a}}{\gamma} \right] \right\} e^{-\frac{4t_{ba}}{\gamma}} \sin(4u_b) \\
 &+ i\lambda_0 t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0) \} \\
 &+ \frac{i\lambda_0}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ M_3(l_0, l_1, l_0) + M_3(-l_2, -l_1, -l_2) \} \\
 &+ i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ M_4(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + M_4(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0) \}, \tag{5.59}
 \end{aligned}$$

donde M_1 está dada por (5.47) y también tenemos las siguientes definiciones:

$$M_3(x, y, z) := -F_2 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] x e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[xu_b - zu_a], \tag{5.60}$$

$$M_4(x, y, z, v, w) := \frac{\gamma}{2} e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left(\frac{x}{v} \right) \sin[xu_b - wu_a] \left(F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2zt_{1a}}{\gamma} \right] \right). \tag{5.61}$$

Segunda contribución de la corrección a segundo orden

Evaluaremos la segunda contribución de la corrección a segundo orden, A_4 , ecuación (5.15). Semejante a como procedimos en A_2 , pero ahora partiendo de la definición de A_3 , ecuación (5.14), podemos deducir que

$$A_4 = A_3^* |_{b \leftrightarrow a}, \tag{5.62}$$

para esto usamos el valor de $[k^{(0)}(b; a)]^*$, ecuación (5.50), y la propiedad

$$[k^{(2)}(b; a)]^* = k^{(2)}(a; b). \tag{5.63}$$

Luego, combinando (5.59) y (5.62), A_4 es

$$\begin{aligned}
 A_4 = & -i\lambda_0 t_{b1}^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[l_0(u_b - u_a)] + \frac{i\lambda_0}{2} t_{b1}^2 e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[2 \sin(u_b + u_a) - \frac{1}{2} \sin(u_b - u_a) \right] \\
 & - 2i\lambda_0 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ t_{b1} F_1 \left[\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] \sin(2u_a) - F_2 \left[\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) \sin(2u_a) \right\} \\
 & + \frac{i\lambda_0}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[-\frac{2t_{b1}}{\gamma} \right] \left[\sin(3u_b + u_a) + 3e^{-\frac{2t_{ba}}{\gamma}} \sin(u_b + 3u_a) \right] \\
 & - \frac{i\lambda_0 \gamma}{2} \left\{ e^{\frac{3t_{b1}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{3t_{b1}}{\gamma} \right] \right\} e^{-\frac{4t_{ba}}{\gamma}} \sin(4u_a) \\
 & + i\lambda_0 t_{b1} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0)\} |_{b \leftrightarrow a}^* \\
 & - \frac{i\lambda_0}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_3(l_0, l_1, l_0) + M_3(-l_2, -l_1, -l_2)\} |_{b \leftrightarrow a}^* \\
 & - i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_4(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + M_4(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0)\} |_{b \leftrightarrow a}^* .
 \end{aligned} \tag{5.64}$$

En la anterior ecuación volvimos a usar que $\gamma^* = -\gamma$ así como la ecuación (5.53), y la siguiente expresión para F_2

$$F_2 \left[\frac{ct_{nm}}{\gamma} \right]^* = F_2 \left[\frac{ct_{mn}}{\gamma} \right], \tag{5.65}$$

la cual se deduce de la definición de F_2 , ecuación (4.66). Por consiguiente, introducimos $M_1^* |_{b \leftrightarrow a}$ definida en (5.55) y las siguientes funciones

$$[M_3(x, y, z)] |_{b \leftrightarrow a}^* = F_2 \left[\frac{-yt_{b1}}{\gamma} \right] x e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin(zu_b - xu_a), \tag{5.66}$$

$$[M_4(x, y, z, v, w)] |_{b \leftrightarrow a}^* = -\frac{\gamma}{2} e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left(\frac{x}{v} \right) \sin[wu_b - xu_a] \left(F_1 \left[\frac{-yt_{b1}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2zt_{b1}}{\gamma} \right] \right). \tag{5.67}$$

Tercera contribución de la corrección de segundo orden

Ahora evaluaremos la tercera contribución de la corrección a segundo orden, A_5 definido en la ecuación (5.16). Puesto que A_5 es función de la derivada $\frac{\partial k^{(1)}(1; a)}{\partial u_1}$, se puede expresar similar a A_1 , de la ecuación (5.35) a la ecuación (5.41):

$$\begin{aligned}
 A_5 &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(1)}(b; 1) \frac{\partial k^{(1)}(1; a)}{\partial u_1} \\
 &= A_{51} + A_{52} + A_{53} + A_{54} + A_{55},
 \end{aligned} \tag{5.68}$$

pero con

$$A_{51} = -2i\lambda_0 t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(1)}(b; 1) e^{-\frac{i_0^2 t_{1a}}{4\gamma}} \sin l_0 (u_1 - u_a) \right\}, \quad (5.69)$$

$$A_{52} = -i\lambda_0 t_{1a} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(1)}(b; 1) e^{-\frac{t_{1a}}{4\gamma}} \sin(u_1 + u_a) \right\}, \quad (5.70)$$

$$A_{53} = \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(1)}(b; 1) \left\{ 2F_1 \left[-\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \sin(2u_1) \right\}, \quad (5.71)$$

$$A_{54} = \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(1)}(b; 1) \left\{ \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial E_1(l_0, l_1, l_2)}{\partial u_1} \right\}, \quad (5.72)$$

$$A_{55} = \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(1)}(b; 1) \left\{ \frac{\partial E_1(-l_2, -l_1, -l_0)}{\partial u_1} \right\}. \quad (5.73)$$

El primer término A_{51} , ecuación (5.69), lo calculamos por medio de I_6 , ecuación (C.29):

$$\begin{aligned} A_{51} &= -2i\lambda_0 t_{1a} t_{b1} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[l_0(u_b - u_a)] + i\lambda_0 t_{1a} t_{b1} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \sin(u_b + u_a) \\ &\quad - 2i\lambda_0 t_{1a} F_1 \left[\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \sin(2u_a) + i\lambda_0 t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0)\} |_{b \leftrightarrow a}^*, \end{aligned} \quad (5.74)$$

con la función $M_1^* |_{b \leftrightarrow a}$ definida en (5.55), además en el término $[M_1(-l_2, -l_1, -l_0)] |_{b \leftrightarrow a}^*$ se hizo el cambio $l_0 \rightarrow l_2$, debido a la condición $n > 2$ que aparece en el cuarto término de la fórmula I_6 , ecuación (C.29).

En el segundo término A_{52} , ecuación (5.70), llevamos a cabo la integral en u_1 con I_6 (C.29), y para A_{53} , ecuación (5.71), utilizamos I_4 (C.16) con la definición de F_1 (4.51), por tanto, encontramos

$$\begin{aligned} A_{52} + A_{53} &= -i\lambda_0 t_{1a} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ t_{b1} \left[\sin(u_b + u_a) - \frac{1}{2} \sin(u_b - u_a) \right] - \frac{1}{2} F_1 \left[-\frac{2t_{b1}}{\gamma} \right] \sin(3u_b + u_a) \right\} \\ &\quad + 2i\lambda_0 t_{b1} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \sin(2u_b) - i\lambda_0 e^{-\frac{4t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \left(F_1 \left[\frac{3t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{3t_{1a}}{\gamma} \right] \right) \sin(4u_b). \end{aligned} \quad (5.75)$$

Asimismo, el cuarto término A_{54} , ecuación (5.72), lo hallamos mediante $\frac{\partial}{\partial u_1} E_1$ (5.42) y la integral I_6 (C.29)

$$\begin{aligned} A_{54} &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(1)}(b; 1) \left[-\gamma \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{l_0}{l_1} \right) \left[e^{-\frac{i_0^2 t_{1a}}{4\gamma}} - e^{-\frac{i_2^2 t_{1a}}{4\gamma}} \right] \sin(l_0 u_1 - l_2 u_a) \right] \\ &= i\lambda_0 t_{b1} \sum_{l_0=1}^{\infty} M_1(l_0, l_1, l_2) - \frac{i\lambda_0}{2} t_{b1} F_1 \left[-\frac{2t_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \sin(u_b + 3u_a) - i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} M_5(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) \\ &\quad + i\lambda_0 e^{-\frac{4t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] \left(F_1 \left[\frac{3t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{3t_{b1}}{\gamma} \right] \right) \sin(4u_a) - i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} M_5(-l_2, -l_1, -l_0, l_1, -l_2) \end{aligned} \quad (5.76)$$

donde M_1 está definido en la ecuación (5.47), e introdujimos la función

$$M_5(x, y, z, v, w) := \frac{z}{2} e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_1 \left[\frac{-y t_{b1}}{\gamma} \right] F_1 \left[\frac{-v t_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{y t_{1a}}{\gamma}} \sin[xu_b - wu_a]. \quad (5.77)$$

Aquí debemos tener en cuenta que en el término $M_5(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4)$ se llevó a cabo el cambio $l_0 \rightarrow l_2$, por la condición $n > 2$ que aparece en el cuarto término de la fórmula I_6 (C.29).

Por último, el quinto término A_{55} , ecuación (5.73), es calculado combinando $\frac{\partial}{\partial u_1} E_1$ (5.42) y la integral I_6 (C.29)

$$\begin{aligned}
 A_{55} &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(1)}(b; 1) \left[-\gamma \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{l_2}{l_1} \right) \left[e^{-\frac{l_0^2 t_{1a}}{4\gamma}} - e^{-\frac{l_2^2 t_{1a}}{4\gamma}} \right] \sin(l_2 u_1 - l_0 u_a) \right] \\
 &= i\lambda_0 t_{b1} \sum_{l_0=1}^{\infty} M_1(-l_2, -l_1, -l_0) - i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} M_5(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0) \\
 &\quad - i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} M_5(l_0, l_1, l_2, -l_1, l_0), \tag{5.78}
 \end{aligned}$$

con M_1 y M_5 dados por las ecuaciones (5.47) y (5.77), respectivamente.

Por consiguiente, la tercera contribución A_5 , ecuación (5.68), es la suma de las ecuaciones (5.74), (5.75), (5.76) y (5.78):

$$\begin{aligned}
 A_5 &= -2i\lambda_0 t_{1a} t_{b1} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[l_0(u_b - u_a)] + \frac{i\lambda_0}{2} t_{1a} t_{b1} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \sin(u_b - u_a) \\
 &\quad + 2i\lambda_0 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ t_{b1} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \sin(2u_b) - t_{1a} F_1 \left[\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] \sin(2u_a) \right\} \\
 &\quad - \frac{i\lambda_0}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ t_{b1} F_1 \left[-\frac{2t_{1a}}{\gamma} \right] \sin(u_b + 3u_a) - t_{1a} F_1 \left[-\frac{2t_{b1}}{\gamma} \right] \sin(3u_b + u_a) \right\} \\
 &\quad - i\lambda_0 e^{-\frac{4t_{ba}}{\gamma}} \left\{ F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \left(F_1 \left[\frac{3t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{3t_{1a}}{\gamma} \right] \right) \sin(4u_b) \right. \\
 &\quad \quad \left. - F_1 \left[\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] \left(F_1 \left[\frac{3t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{3t_{b1}}{\gamma} \right] \right) \sin(4u_a) \right\} \\
 &\quad + i\lambda_0 t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0) \} \Big|_{b \leftrightarrow a}^* \\
 &\quad + i\lambda_0 t_{b1} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0) \} \\
 &\quad - i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ M_5(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + M_5(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0) \} \\
 &\quad - i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ M_5(l_0, l_1, l_2, -l_1, l_0) + M_5(-l_2, -l_1, -l_0, l_1, -l_2) \} \tag{5.79}
 \end{aligned}$$

Luego, la corrección a segundo orden de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_r)$, ecuación (5.10), se obtiene de sumar sus tres contribuciones A_3 , A_4 y A_5 , ecuaciones (5.59), (5.64) y (5.79),

así obtenemos

$$\begin{aligned}
 & \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_1) | p_a, t_a \rangle^{(2)} \\
 &= -i\lambda_0 t_{ba}^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0 e^{-\frac{i_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[l_0(u_b - u_a)] + i\lambda_0 e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} t_{ba} (t_{b1} - t_{1a}) \sin(u_b + u_a) \\
 & \quad - \frac{i\lambda_0}{4} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} (t_{b1} - t_{1a})^2 \sin(u_b - u_a) + 2i\lambda_0 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} t_{ba} \left\{ F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \sin(2u_b) - F_1 \left[\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] \sin(2u_a) \right\} \\
 & \quad + 2i\lambda_0 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ F_2 \left[\frac{t_{b1}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) \sin(2u_a) - F_2 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \sin(2u_b) \cos(2u_a) \right\} \\
 & \quad + \frac{i\lambda_0}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} [T_1[t_{b1}, t_{1a}] \sin(3u_b + u_a) - T_1[t_{1a}, t_{b1}] \sin(u_b + 3u_a)] \\
 & \quad + i\lambda_0 e^{-\frac{4t_{ba}}{\gamma}} \{T_2[t_{1a}] \sin(4u_b) - T_2[t_{b1}] \sin(4u_a)\} \\
 & \quad + i\lambda_0 t_{ba} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_6(l_0, l_1, l_2) + M_6(-l_2, -l_1, -l_0)\} - \frac{i\lambda_0}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_7(l_0, l_1, l_2) + M_7(-l_2, -l_1, -l_0)\} \\
 & \quad + i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_4(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + M_4(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0)\} \\
 & \quad - i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_4(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + M_4(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0)\}^*_{|b \leftrightarrow a} \\
 & \quad - i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_5(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + M_5(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0)\}. \tag{5.80}
 \end{aligned}$$

Donde M_4 , $M_4^*_{|b \leftrightarrow a}$ y M_5 están definidas en las ecuaciones (5.61), (5.67) y (5.77), además simplificamos los términos

$$\begin{aligned}
 & i\lambda_0 t_{ba} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_6(l_0, l_1, l_2) + M_6(-l_2, -l_1, -l_0)\} \\
 &= i\lambda_0 t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0)\} \\
 & \quad + i\lambda_0 t_{b1} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0)\}^*_{|b \leftrightarrow a} \\
 & \quad + i\lambda_0 t_{b1} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0)\} \\
 & \quad + i\lambda_0 t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0)\}^*_{|b \leftrightarrow a},
 \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
 & -\frac{i\lambda_0}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_7(l_0, l_1, l_2) + M_7(-l_2, -l_1, -l_0)\} \\
 & = \frac{i\lambda_0}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_3(l_0, l_1, l_0) + M_3(-l_2, -l_1, -l_2)\} \\
 & \quad -\frac{i\lambda_0}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_3(l_0, l_1, l_0) + M_3(-l_2, -l_1, -l_2)\}^*_{b \leftrightarrow a} \\
 & \quad -i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{M_5(l_0, l_1, l_2, -l_1, l_0) + M_5(-l_2, -l_1, -l_0, l_1, -l_2)\},
 \end{aligned}$$

siendo

$$M_6(x, y, z) := e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[xu_b - zu_a] \left\{ -2F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] + zF_1 \left[\frac{-yt_{ba}}{\gamma} \right] \right\}, \quad (5.81)$$

y

$$\begin{aligned}
 & M_7(x, y, z) \\
 & := e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \sin[x(u_b - u_a)] \left\{ x \left(F_2 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] + F_2 \left[\frac{-yt_{b1}}{\gamma} \right] \right) + zF_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] F_1 \left[\frac{-yt_{b1}}{\gamma} \right] \right\} \quad (5.82)
 \end{aligned}$$

Asimismo, introducimos las funciones

$$T_1[t_x, t_y] = F_2 \left[-\frac{2t_x}{\gamma} \right] + t_y F_1 \left[-\frac{2t_x}{\gamma} \right] - 3F_2 \left[-\frac{2t_y}{\gamma} \right] e^{-\frac{2t_x}{\gamma}}, \quad (5.83)$$

$$T_2[t_x] = \left(\frac{\gamma}{2} \right) \left(e^{\frac{3t_x}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_x}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{3t_x}{\gamma} \right] \right) - F_1 \left[\frac{t_x}{\gamma} \right] \left(F_1 \left[\frac{3t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{3t_x}{\gamma} \right] \right). \quad (5.84)$$

Con esto damos por finalizado nuestro cálculo de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_1)$ en la base de traslaciones finitas hasta segundo orden. Recordemos que el orden cero está dado por la ecuación (5.33), la primera corrección por la ecuación (5.56) y la segunda corrección por la ecuación (5.80). En la siguiente sección calcularemos las correcciones a primer y segundo orden de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$ en la base de traslaciones finitas, ecuaciones (5.25) y (5.26).

5.4. Primer y segundo orden de los elementos de matriz del producto de dos operadores de posición

En esta sección calculamos de forma explícita las corrección a primer orden (5.25), y la corrección a segundo orden (5.26), de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$. Semejante a lo que hicimos a orden cero (5.34), consideramos el ordenamiento $t_2 > t_1$, es decir, $s = 2$ y $r = 1$.

5.4.1. Corrección a primer orden

Primera contribución de la corrección a primer orden

La corrección a primer orden del producto $\hat{x}(t_2)\hat{x}(t_1)$ está formada por B_1 y B_2 , ecuación (5.25), en este apartado calculamos la primera contribución, B_1 , definida en la ecuación (5.28).

Puesto que, la corrección a primer orden de $\hat{x}(t_1)$ presenta período 2π en u'_2 y u_a , ecuación (5.56), con $u_b = u'_2$, podemos integrar por partes con respecto du'_2 empleando la primera ecuación de (5.17):

$$\begin{aligned}
 B_1 &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_0^{2\pi} du_2 du'_2 k^{(0)}(b; 2) \left[-2\pi i \lambda_0 \frac{\partial \delta(u'_2 - u_2)}{\partial u'_2} \right] \langle 2' | \hat{x}(t_1) | a \rangle^{(1)} \\
 &= \left(\frac{i\lambda_0}{2\pi}\right) \int_0^{2\pi} du_2 k^{(0)}(b; 2) \frac{\partial}{\partial u_2} \langle 2 | \hat{x}(t_1) | a \rangle^{(1)} \\
 &= \left(\frac{-\lambda_0^2}{2\pi}\right) \int_0^{2\pi} du_2 k^{(0)}(b; 2) \left\{ -2t_{2a} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_2 - u_a)] + (t_{21} - t_{1a}) e^{-\frac{t_{2a}}{4\gamma}} \cos(u_2 + u_a) \right. \\
 &\quad \left. + 4e^{-\frac{t_{2a}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_2) + \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_2} \{M_2(l_0, l_1, l_2) + M_2(-l_2, -l_1, -l_0)\} \right\}, \quad (5.85)
 \end{aligned}$$

donde la derivada $\frac{\partial}{\partial u_2} \langle 2 | \hat{x}(t_1) | a \rangle^{(1)}$ fue calculada de (5.56), y la derivada $\frac{\partial}{\partial u_2} M_2$ la hallamos de (5.57):

$$\frac{\partial M_2(x, y, z)}{\partial u_2} = x e^{-\frac{x^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[xu_2 - zu_a] \left\{ -2F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] + zF_1 \left[\frac{-yt_{2a}}{\gamma} \right] \right\}. \quad (5.86)$$

Si utilizamos las fórmulas I_0 (C.1) y I_3 (C.4) en la ecuación (5.85), la primera contribución B_1 es

$$\begin{aligned}
 B_1 &= 2\lambda_0^2 t_{2a} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_b - u_a)] - \lambda_0^2 (t_{21} - t_{1a}) e^{-\frac{t_{2a}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) \\
 &\quad - 4\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{2a}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) - \lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_1(l_0, l_1, l_2) + N_1(-l_2, -l_1, -l_0)\}, \quad (5.87)
 \end{aligned}$$

con

$$N_1(x, y, z) := x e^{-\frac{x^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[xu_b - zu_a] \left\{ -2F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] + zF_1 \left[\frac{-yt_{2a}}{\gamma} \right] \right\}. \quad (5.88)$$

Segunda contribución de la corrección a primer orden

Ahora calculamos la segunda contribución de la corrección a primer orden, el término B_2 , ecuación (5.29), que mediante condiciones de periodicidad de los factores involucrados se puede escribir

$$\begin{aligned}
 B_2 &= \left(\frac{i\lambda_0}{2\pi}\right) \int_0^{2\pi} du_2 k^{(1)}(b; 2) \frac{\partial}{\partial u_2} \langle 2 | \hat{x}(t_1) | a \rangle^{(0)} \\
 &= 2\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_2 k^{(1)}(b; 2) e^{-\frac{l_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_2 - u_a)] \right\},
 \end{aligned}$$

donde la derivada $\frac{\partial}{\partial u_2} \langle 2 | \hat{x}(t_1) | a \rangle^{(0)}$ fue calculada de (5.33).

Luego, a través de la integral I_7 , ecuación (C.30), encontramos

$$\begin{aligned} B_2 = & 2\lambda_0^2 t_{b2} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_b - u_a)] + \lambda_0^2 t_{b2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) \\ & - 4\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{2a}}{\gamma}} F_1 \left[-\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] \cos(2u_a) - \lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_2(l_0, l_1, l_2) + N_2(-l_2, -l_1, -l_0)\}, \end{aligned} \quad (5.89)$$

donde definimos

$$N_2(x, y, z) := z e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[xu_b - zu_a] \left\{ F_1 \left[\frac{-yt_{ba}}{\gamma} \right] + F_1 \left[\frac{-yt_{2a}}{\gamma} \right] \right\}. \quad (5.90)$$

Debemos notar que para obtener el término $N_2(l_0, l_1, l_2)$ hicimos el cambio $l_0 \rightarrow l_2$, esto como consecuencia de la condición $n > 2$ en el cuarto término de I_7 (C.30), además consideramos $e^{-\frac{l_2^2 t_{ba}}{4\gamma}} = e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} e^{-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma}}$.

Así, la corrección a primer orden de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$, ecuación (5.25), se obtiene de sumar B_1 y B_2 , ecuaciones (5.87) y (5.89):

$$\begin{aligned} & \langle p_b, t_b | \hat{x}(t_2)\hat{x}(t_1) | p_a, t_a \rangle^{(1)} \\ & = 2\lambda_0^2 t_{ba} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_b - u_a)] + \lambda_0^2 e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} (t_{ba} - 2t_{21}) \cos(u_b + u_a) \\ & \quad - 4\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) + F_1 \left[\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] \cos(2u_a) \right\} \\ & \quad - \lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_3(l_0, l_1, l_2) + N_3(-l_2, -l_1, -l_0)\}. \end{aligned} \quad (5.91)$$

Aquí hemos reescrito el cuarto término mediante la definición de F_1 , ecuación (4.43), como sigue

$$-4\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{2a}}{\gamma}} F_1 \left[-\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] \cos(2u_a) = -4\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] \cos(2u_a),$$

y simplificamos

$$\begin{aligned} & -\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} N_3(l_0, l_1, l_2) = -\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_1(l_0, l_1, l_2) + N_2(l_0, l_1, l_2)\}, \\ & -\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} N_3(-l_2, -l_1, -l_0) = -\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_1(-l_2, -l_1, -l_0) + N_2(-l_2, -l_1, -l_0)\}, \end{aligned}$$

siendo

$$\begin{aligned} & N_3(x, y, z) \\ & := e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[xu_b - zu_a] \left\{ -2 \left(x F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] + z F_1 \left[\frac{-yt_{2a}}{\gamma} \right] \right) + z^2 F_1 \left[\frac{-yt_{ba}}{\gamma} \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.92)$$

De esta forma, finalizamos nuestro análisis de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_2)\hat{x}(t_1)$ a primer orden, ecuación (5.91). En el cálculo se consideró el ordenamiento $t_2 > t_1$. Notemos que para el caso $t_1 > t_2$, debemos considerar $s = 1$ y $r = 2$, en las ecuaciones (5.25) y (5.26), lo que nos lleva a intercambiar $t_2 \longleftrightarrow t_1$ en la ecuación (5.91).

5.4.2. Corrección a segundo orden

Primera contribución de la corrección a segundo orden

En este apartado obtendremos B_3 , ecuación (5.30), que es la primera contribución a la corrección a segundo orden, ecuación (5.26). De manera semejante a los anteriores casos, utilizamos el hecho de que los factores involucrados presentan período 2π :

$$\begin{aligned}
 B_3 &= \left(\frac{i\lambda_0}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_2 k^{(0)}(b; 2) \frac{\partial}{\partial u_2} \langle 2|\hat{x}(t_1)|a \rangle^{(2)} \\
 &= \left(\frac{-\lambda_0^2}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_2 k^{(0)}(b; 2) \left\{ -t_{2a}^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{t_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_2 - u_a)] + t_{2a}(t_{21} - t_{1a}) e^{-\frac{t_{2a}}{4\gamma}} \cos(u_2 + u_a) \right. \\
 &\quad - \frac{1}{4}(t_{21} - t_{1a})^2 e^{-\frac{t_{2a}}{4\gamma}} \cos(u_2 - u_a) + 4t_{2a} e^{-\frac{t_{2a}}{4\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_2) \\
 &\quad - 4e^{-\frac{t_{2a}}{4\gamma}} \left\{ F_2 \left[\frac{t_{21}}{\gamma} \right] \sin(2u_2) \sin(2u_a) + F_2 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_2) \cos(2u_a) \right\} \\
 &\quad + \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{2a}}{4\gamma}} [3T_1[t_{21}, t_{1a}] \cos(3u_2 + u_a) - T_1[t_{1a}, t_{21}] \cos(u_2 + 3u_a)] \\
 &\quad + 4e^{-\frac{4t_{2a}}{4\gamma}} T_2[t_{1a}] \cos(4u_2) + t_{2a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_2} \{M_6(l_0, l_1, l_2) + M_6(-l_2, -l_1, -l_0)\} \\
 &\quad - \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_2} \{M_7(l_0, l_1, l_2) + M_7(-l_2, -l_1, -l_0)\} \\
 &\quad - \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_2} \{M_4(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + M_4(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0)\} \Big|_{2 \leftrightarrow a}^* \\
 &\quad \left. + \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_2} [M_4 - M_5] |_{(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4)} + \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_2} [M_4 - M_5] |_{(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0)} \right\} \quad (5.93)
 \end{aligned}$$

donde calculamos la derivada de la ecuación (5.80) para evaluar $\frac{\partial}{\partial u_2} \langle 2|\hat{x}(t_1)|a \rangle^{(2)}$, por lo que debemos tener en cuenta la derivada de las ecuaciones (5.81), (5.82), (5.61), (5.67) y (5.77):

$$\frac{\partial M_6(x, y, z)}{\partial u_2} = x e^{-\frac{x^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[xu_2 - zu_a] \left\{ -2F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] + zF_1 \left[\frac{-yt_{2a}}{\gamma} \right] \right\}, \quad (5.94)$$

$$\frac{\partial M_7(x, y, z)}{\partial u_2} = x e^{-\frac{x^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[x(u_2 - u_a)] \left\{ x \left(F_2 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] + F_2 \left[\frac{-yt_{21}}{\gamma} \right] \right) + zF_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] F_1 \left[\frac{-yt_{21}}{\gamma} \right] \right\}, \quad (5.95)$$

$$\frac{\partial M_4(x, y, z, v, w)}{\partial u_2} = \frac{\gamma}{2} e^{-\frac{x^2 t_{2a}}{4\gamma}} \left(\frac{x^2}{v} \right) \cos[xu_2 - wu_a] \left(F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2zt_{1a}}{\gamma} \right] \right), \quad (5.96)$$

$$\frac{\partial [M_4(x, y, z, v, w)] \Big|_{2 \leftrightarrow a}^*}{\partial u_2} = -\frac{\gamma}{2} e^{-\frac{x^2 t_{2a}}{4\gamma}} \left(\frac{wx}{v} \right) \cos[wu_2 - xu_a] \left(F_1 \left[\frac{-yt_{21}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2zt_{21}}{\gamma} \right] \right), \quad (5.97)$$

$$\frac{\partial M_5(x, y, z, v, w)}{\partial u_2} = \frac{zx}{2} e^{-\frac{x^2 t_{2a}}{4\gamma}} F_1 \left[\frac{-yt_{21}}{\gamma} \right] F_1 \left[\frac{-vt_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{yt_{1a}}{\gamma}} \cos[xu_2 - wu_a]. \quad (5.98)$$

Antes de evaluar la integral en u_2 en (5.93), es conveniente reescribir los términos provenientes de la ecuación (5.97). Primero, de la ecuación (5.97), vemos que el término $\frac{\partial}{\partial u_2} [M_4(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4)] \Big|_{2 \leftrightarrow a}^*$

corresponde a

$$\begin{aligned} & \frac{\partial [M_4(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4)] |_{2 \leftrightarrow a}^*}{\partial u_2} \\ &= -\frac{\gamma}{2} e^{-\frac{l_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \left(\frac{l_4 l_0}{l_3} \right) \cos[l_4 u_2 - l_0 u_a] \left(F_1 \left[\frac{-l_1 t_{21}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2l_2 t_{21}}{\gamma} \right] \right), \end{aligned} \quad (5.99)$$

donde nos concentramos en los siguientes factores

$$\left(\frac{l_4 l_0}{l_3} \right) e^{-\frac{l_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \left(F_1 \left[\frac{-l_1 t_{21}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2l_2 t_{21}}{\gamma} \right] \right).$$

Si usamos el hecho de que $\frac{l_4^2}{4\gamma} = \frac{(l_0+4)^2}{4\gamma} = \frac{l_0^2}{4\gamma} + \frac{2l_2}{\gamma}$, así como la definición de F_1 , ecuación (4.43), la anterior expresión llega a ser

$$\begin{aligned} & \left(\frac{l_4 l_0}{l_3} \right) e^{-\frac{l_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \left(F_1 \left[\frac{-l_1 t_{21}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2l_2 t_{21}}{\gamma} \right] \right) \\ &= \left(\frac{l_4 l_0}{l_3} \right) e^{-\frac{l_4^2 t_{2a}}{4\gamma}} e^{\frac{2l_2 t_{21}}{4\gamma}} e^{\frac{2l_2 t_{1a}}{\gamma}} \left[\left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \left(e^{\frac{-l_1 t_{21}}{\gamma}} - 1 \right) - \left(\frac{\gamma}{2l_2} \right) \left(e^{\frac{-2l_2 t_{21}}{\gamma}} - 1 \right) \right] \\ &= -\left(\frac{l_4 l_0}{l_1} \right) e^{-\frac{l_4^2 t_{2a}}{4\gamma}} e^{\frac{2l_2 t_{1a}}{\gamma}} \left(F_1 \left[\frac{l_3 t_{21}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{2l_2 t_{21}}{\gamma} \right] \right), \end{aligned}$$

aquí usamos $2l_2 = l_3 + l_1$. Así la ecuación (5.99) queda como

$$\begin{aligned} & \frac{\partial [M_4(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4)] |_{2 \leftrightarrow a}^*}{\partial u_2} \\ &= \frac{\gamma}{2} e^{-\frac{l_4^2 t_{2a}}{4\gamma}} \left(\frac{l_4 l_0}{l_1} \right) \cos[l_4 u_2 - l_0 u_a] e^{\frac{2l_2 t_{1a}}{\gamma}} \left(F_1 \left[\frac{l_3 t_{21}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{2l_2 t_{21}}{\gamma} \right] \right). \end{aligned} \quad (5.100)$$

De igual forma para $\frac{\partial}{\partial u_2} \{M_4(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0)\} |_{2 \leftrightarrow a}^*$ obtenemos

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial u_2} \{M_4(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0)\} |_{2 \leftrightarrow a}^* \\ &= -\frac{\gamma}{2} e^{-\frac{l_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \left(\frac{l_4 l_0}{l_3} \right) \cos[l_0 u_2 - l_4 u_a] e^{-\frac{2l_2 t_{1a}}{\gamma}} \left(F_1 \left[\frac{-l_1 t_{21}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2l_2 t_{21}}{\gamma} \right] \right). \end{aligned} \quad (5.101)$$

Por lo tanto, si aplicamos I_0 (C.1) y I_3 (C.4) en (5.93) considerando (5.100) y (5.101),

resulta que la primera contribución de la corrección a segundo orden es

$$\begin{aligned}
 B_3 &= \lambda_0^2 t_{2a}^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_b - u_a)] - \lambda_0^2 t_{2a} (t_{21} - t_{1a}) e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) \\
 &+ \frac{\lambda_0^2}{4} (t_{21} - t_{1a})^2 e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b - u_a) - 4\lambda_0^2 t_{2a} e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) \\
 &+ 4\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ F_2 \left[\frac{t_{21}}{\gamma} \right] \sin(2u_b) \sin(2u_a) + F_2 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) \cos(2u_a) \right\} \\
 &- \frac{\lambda_0^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[3T_1 [t_{21}, t_{1a}] e^{-\frac{2t_{b2}}{\gamma}} \cos(3u_b + u_a) - T_1 [t_{1a}, t_{21}] \cos(u_b + 3u_a) \right] \\
 &- 4\lambda_0^2 e^{-\frac{4t_{ba}}{\gamma}} T_2 [t_{1a}] \cos(4u_b) - \lambda_0^2 t_{2a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_4(l_0, l_1, l_2) + N_4(-l_2, -l_1, -l_0)\} \\
 &+ \frac{\lambda_0^2}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_5(l_0, l_1, l_2) + N_5(-l_2, -l_1, -l_0)\} \\
 &- \frac{\lambda_0^2}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} N_6(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + N_6(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0), \tag{5.102}
 \end{aligned}$$

hemos definido en la anterior ecuación las siguientes funciones

$$N_4(x, y, z) := x e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[xu_b - zu_a] \left\{ -2F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] + zF_1 \left[\frac{-yt_{2a}}{\gamma} \right] \right\}, \tag{5.103}$$

$$\begin{aligned}
 N_5(x, y, z) &:= x e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[x(u_b - u_a)] \left\{ x \left(F_2 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] + F_2 \left[\frac{-yt_{21}}{\gamma} \right] \right) + zF_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] F_1 \left[\frac{-yt_{21}}{\gamma} \right] \right\} \tag{5.104}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 N_6(x, y, z, v, w) &:= x e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[xu_b - wu_a] \left\{ \gamma \left(\frac{x}{v} \right) \left(F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2zt_{1a}}{\gamma} \right] \right) \right. \\
 &\left. + \gamma \left(\frac{w}{v} \right) e^{-\frac{2zt_{1a}}{\gamma}} \left(F_1 \left[\frac{-yt_{21}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2zt_{21}}{\gamma} \right] \right) - zF_1 \left[\frac{-yt_{21}}{\gamma} \right] F_1 \left[\frac{-vt_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{yt_{1a}}{\gamma}} \right\} \tag{5.105}
 \end{aligned}$$

Segunda contribución de la corrección a segundo orden

Ahora calcularemos la segunda contribución de la corrección a segundo orden, B_4 , definida en (5.31). Otra vez empleamos el carácter periódico de los factores que están en dicho término, con lo que tenemos

$$\begin{aligned}
 B_4 &= \left(\frac{i\lambda_0}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_2 k^{(1)}(b; 2) \frac{\partial}{\partial u_2} \langle 2 | \hat{x}(t_1) | a \rangle^{(1)} \\
 &= B_{41} + B_{42} + B_{43} + B_{44} + B_{45}, \tag{5.106}
 \end{aligned}$$

donde usamos el hecho de que la derivada $\frac{\partial}{\partial u_2} \langle 2 | \hat{x}(t_1) | a \rangle^{(1)}$, definida en la ecuación (5.85) y siendo el factor entre llaves, consiste de cinco términos. De esta forma, los términos de (5.106) los hallamos reemplazando $k^{(0)}$ por $k^{(1)}$ en (5.85).

Luego, para el primer término empleando I_7 , ecuación (C.30), encontramos

$$\begin{aligned}
 B_{41} &= \left(\frac{-\lambda_0^2}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_2 k^{(1)}(b; 2) \left\{ -2t_{2a} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_2 - u_a)] \right\} \\
 &= 2\lambda_0^2 t_{b2} t_{2a} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_b - u_a)] + \lambda_0^2 t_{b2} t_{2a} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) \\
 &\quad - 4\lambda_0^2 t_{2a} e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] \cos(2u_a) - \lambda_0^2 t_{2a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_7(l_0, l_1, l_2) + N_7(-l_2, -l_1, -l_0)\} \quad (5.107)
 \end{aligned}$$

con

$$N_7(x, y, z) := z^2 \left(F_1 \left[-\frac{yt_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[-\frac{yt_{2a}}{\gamma} \right] \right) e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos(xu_b - zu_a). \quad (5.108)$$

Para el segundo término mediante I_7 (C.30) hallamos

$$\begin{aligned}
 B_{42} &= \left(\frac{-\lambda_0^2}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_2 k^{(1)}(b; 2) \left\{ (t_{21} - t_{1a}) e^{-\frac{t_{2a}}{4\gamma}} \cos(u_2 + u_a) \right\} \\
 &= -\lambda_0^2 (t_{21} - t_{1a}) e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left\{ t_{b2} \cos(u_b + u_a) + \frac{t_{b2}}{2} \cos(u_b - u_a) - \frac{1}{2} F_1 \left[-\frac{2t_{b2}}{\gamma} \right] \cos(3u_b + u_a) \right\} \quad (5.109)
 \end{aligned}$$

Asimismo, el tercer término a través de I_5 , ecuación (C.28), es

$$\begin{aligned}
 B_{43} &= \left(\frac{-\lambda_0^2}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_2 k^{(1)}(b; 2) \left\{ 4e^{-\frac{t_{2a}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_2) \right\} \\
 &= -4\lambda_0^2 F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \left\{ t_{b2} e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \cos(2u_b) - \frac{1}{2} F_1 \left[-\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{2a}}{\gamma}} - \frac{1}{2} F_1 \left[-\frac{3t_{b2}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \cos(4u_b) \right\} \quad (5.110)
 \end{aligned}$$

El cuarto término de (5.106) resulta de combinar la derivada de M_2 (5.86) evaluada en (l_0, l_1, l_2) y la fórmula I_7 (C.30)

$$\begin{aligned}
 B_{44} &= \left(\frac{-\lambda_0^2}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_2 k^{(1)}(b; 2) \left\{ l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[l_0 u_2 - l_2 u_a] \left\{ -2F_1 \left[\frac{-l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] + l_2 F_1 \left[\frac{-l_1 t_{2a}}{\gamma} \right] \right\} \right\} \\
 &= -\frac{\lambda_0^2}{2} t_{b2} \left(-2F_1 \left[\frac{-2t_{1a}}{\gamma} \right] + 3F_1 \left[\frac{-2t_{2a}}{\gamma} \right] \right) e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(3u_b + u_a) \\
 &\quad + \lambda_0^2 \left(-2F_1 \left[\frac{-3t_{1a}}{\gamma} \right] + 4F_1 \left[\frac{-3t_{2a}}{\gamma} \right] \right) F_1 \left[-\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{2a}}{\gamma}} \cos(4u_a) \\
 &\quad - \lambda_0^2 t_{b2} \sum_{l_0=1}^{\infty} N_8(l_0, l_1, l_2) + \frac{\lambda_0^2}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_9(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + N_9(l_2, -l_1, l_0, l_1, l_2)\}, \quad (5.111)
 \end{aligned}$$

donde introdujimos

$$N_8(x, y, z) := x \left(-2F_1 \left[-\frac{yt_{1a}}{\gamma} \right] + zF_1 \left[-\frac{yt_{2a}}{\gamma} \right] \right) e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos(xu_b - zu_a), \quad (5.112)$$

$N_9(x, y, z, v, w)$

$$:= z \left(F_1 \left[-\frac{yt_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[-\frac{yt_{2a}}{\gamma} \right] \right) \left(-2F_1 \left[-\frac{vt_{1a}}{\gamma} \right] + wF_1 \left[-\frac{vt_{2a}}{\gamma} \right] \right) e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos(xu_b - wu_a) \quad (5.113)$$

Por último, el quinto término proviene de combinar la derivada de M_2 (5.86) evaluada en $(-l_2, -l_1, -l_0)$ y la fórmula I_7 (C.30)

$$\begin{aligned} B_{45} &= \left(\frac{-\lambda_0^2}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_2 k^{(1)}(b; 2) \left\{ l_2 e^{-\frac{l_2^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[l_2 u_2 - l_0 u_a] \left\{ 2F_1 \left[\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] + l_0 F_1 \left[\frac{l_1 t_{2a}}{\gamma} \right] \right\} \right\} \\ &= +\frac{\lambda_0^2}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ N_9(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0) + N_9(-l_0, l_1, -l_2, -l_1, -l_0) \} \\ &\quad -\lambda_0^2 t_{b2} \sum_{l_0=1}^{\infty} N_8(-l_2, -l_1, -l_0), \end{aligned} \quad (5.114)$$

con N_8 y N_9 definidos en las ecuaciones (5.112) y (5.113).

La segunda contribución de la corrección a segundo orden B_4 , de acuerdo con la ecuación (5.106), lo obtenemos de sumar (5.107), (5.109), (5.110), (5.111) y (5.114), por lo tanto, obtenemos

B_4

$$\begin{aligned} &= 2\lambda_0^2 t_{b2} t_{2a} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_b - u_a)] + 2\lambda_0^2 t_{b2} t_{1a} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b + u_a) \\ &\quad -\frac{\lambda_0^2}{2} t_{b2} (t_{21} - t_{1a}) e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(u_b - u_a) + 2\lambda_0^2 F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] F_1 \left[-\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{2a}}{\gamma}} \\ &\quad -4\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ t_{b2} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) + t_{2a} F_1 \left[\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] \cos(2u_a) \right\} \\ &\quad +\frac{\lambda_0^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \cos(3u_b + u_a) \left\{ (t_{21} - t_{1a}) F_1 \left[-\frac{2t_{b2}}{\gamma} \right] - t_{b2} \left(-2F_1 \left[\frac{-2t_{1a}}{\gamma} \right] + 3F_1 \left[\frac{-2t_{2a}}{\gamma} \right] \right) \right\} \\ &\quad +2\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] F_1 \left[-\frac{3t_{b2}}{\gamma} \right] \cos(4u_b) + \left(-F_1 \left[\frac{-3t_{1a}}{\gamma} \right] + 2F_1 \left[\frac{-3t_{2a}}{\gamma} \right] \right) F_1 \left[\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] \cos(4u_a) \right\} \\ &\quad -\lambda_0^2 t_{2a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ N_7(l_0, l_1, l_2) + N_7(-l_2, -l_1, -l_0) \} - \lambda_0^2 t_{b2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ N_8(l_0, l_1, l_2) + N_8(-l_2, -l_1, -l_0) \} \\ &\quad +\frac{\lambda_0^2}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ N_9(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + N_9(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0) \} \\ &\quad +\frac{\lambda_0^2}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ N_9(l_2, -l_1, l_0, l_1, l_2) + N_9(-l_0, l_1, -l_2, -l_1, -l_0) \}, \end{aligned} \quad (5.115)$$

con N_7 , N_8 y N_9 definidos en (5.108), (5.112) y (5.113), respectivamente.

Tercera contribución de la corrección a segundo orden

Por último, toca el turno de la tercera contribución de la corrección a segundo orden, el término B_5 dado en (5.32). Para esto reescribiremos este término combinando (5.8) y (5.11),

y luego sustituyendo en (5.32)

$$B_5 = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^4 \int_0^{2\pi} du_2 du'_2 du_1 du'_1 k^{(2)}(b; 2) \hat{x}_{22'} k^{(0)}(2'; 1) \hat{x}_{11'} k^{(0)}(1'; a).$$

Si implementamos las propiedades de conjugación compleja de $k^{(0)}$ y $k^{(2)}$, ecuaciones (5.50) y (5.63), la anterior ecuación se puede expresar como

$$\begin{aligned} B_5 &= \left\{ \left(\frac{1}{2\pi}\right)^4 \int_0^{2\pi} du_2 du'_2 du_1 du'_1 k^{(0)}(b; 2) \hat{x}_{22'} k^{(0)}(2'; 1) \hat{x}_{11'} k^{(2)}(1'; a) \right\}_{b \leftrightarrow a; 2 \leftrightarrow 1}^* \\ &= \left\{ \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_0^{2\pi} du_2 du'_2 k^{(0)}(b; 2) \hat{x}_{22'} A_3(s'; a) \right\}_{b \leftrightarrow a; 2 \leftrightarrow 1}^*, \end{aligned}$$

donde se sustituyó la definición de A_3 , ecuación (5.14).

Primero nos enfocamos en la integral entre llaves. Por consiguiente, utilizando el hecho de que el integrando presenta periodo 2π , así como la forma explícita de A_3 (5.59), esta integral llega a ser

$$\begin{aligned} & \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_2 k^{(0)}(b; 2) \frac{\partial}{\partial u_2} A_3(2; a) \\ &= \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_2 k^{(0)}(b; 2) \left\{ -i\lambda_0 t_{1a}^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_2 - u_a)] \right. \\ & \quad - \frac{i\lambda_0}{2} t_{1a}^2 e^{-\frac{t_{2a}}{4\gamma}} \left[2 \cos(u_2 + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_2 - u_a) \right] \\ & \quad + 4i\lambda_0 e^{-\frac{t_{2a}}{\gamma}} \left\{ t_{1a} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_2) - F_2 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_2) \cos(2u_a) \right\} \\ & \quad - \frac{i\lambda_0}{2} e^{-\frac{t_{2a}}{4\gamma}} F_2 \left[-\frac{2t_{1a}}{\gamma} \right] \left[\cos(u_2 + 3u_a) + 9e^{-\frac{2t_{21}}{\gamma}} \cos(3u_2 + u_a) \right] \\ & \quad + 2i\lambda_0 \gamma \left\{ e^{\frac{3t_{1a}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{3t_{1a}}{\gamma} \right] \right\} e^{-\frac{4t_{2a}}{\gamma}} \cos(4u_2) \\ & \quad + i\lambda_0 t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_2} \{ M_1(l_0, l_1, l_2) + M_1(-l_2, -l_1, -l_0) \} \\ & \quad + \frac{i\lambda_0}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_2} \{ M_3(l_0, l_1, l_0) + M_3(-l_2, -l_1, -l_2) \} \\ & \quad \left. + i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial u_2} \{ M_4(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + M_4(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0) \} \right\}, \quad (5.116) \end{aligned}$$

donde $\frac{\partial}{\partial u_2} M_4(x, y, z, v, w)$ está definida en la ecuación (5.96), las derivadas de M_1 y M_3 las

encontramos mediante (5.47) y (5.60) respectivamente:

$$\frac{\partial}{\partial u_2} M_1(x, y, z) = x^2 F_1 \left[-\frac{yt_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{x^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[xu_2 - zu_a], \quad (5.117)$$

$$\frac{\partial}{\partial u_2} M_3(x, y, z) = -x^2 F_2 \left[-\frac{yt_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{x^2 t_{2a}}{4\gamma}} \cos[xu_2 - zu_a]. \quad (5.118)$$

Ahora, por medio de I_0 (C.1) y I_3 (C.4) e introduciendo las siguientes funciones

$$\tilde{N}_1(x, y, z) := x^2 F_1 \left[-\frac{yt_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[xu_b - zu_a], \quad (5.119)$$

$$\tilde{N}_2(x, y, z) := -x^2 F_2 \left[-\frac{yt_{1a}}{\gamma} \right] e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[xu_b - zu_a], \quad (5.120)$$

$$\tilde{N}_3(x, y, z, v, w) := \frac{\gamma}{2} e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left(\frac{x^2}{v} \right) \cos[xu_b - wu_a] \left(F_1 \left[\frac{-yt_{1a}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2zt_{1a}}{\gamma} \right] \right), \quad (5.121)$$

la ecuación (5.116) es

$$\begin{aligned} & \frac{i\lambda_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_2 k^{(0)}(b; 2) \frac{\partial}{\partial u_2} A_3(2; a) \\ &= -\lambda_0^2 \left\{ -t_{1a}^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_b - u_a)] \right. \\ & \quad - \frac{t_{1a}^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[2 \cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] \\ & \quad + 4e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ t_{1a} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) - F_2 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) \cos(2u_a) \right\} \\ & \quad - \frac{1}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[-\frac{2t_{1a}}{\gamma} \right] \left[\cos(u_b + 3u_a) + 9e^{-\frac{2t_{b1}}{\gamma}} \cos(3u_b + u_a) \right] \\ & \quad + 2i\lambda_0 \gamma \left\{ e^{\frac{3t_{1a}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{3t_{1a}}{\gamma} \right] \right\} e^{-\frac{4t_{ba}}{\gamma}} \cos(4u_b) \\ & \quad + i\lambda_0 t_{1a} \sum_{l_0=1}^{\infty} \left\{ \tilde{N}_1(l_0, l_1, l_2) + \tilde{N}_1(-l_2, -l_1, -l_0) \right\} \\ & \quad + \frac{i\lambda_0}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \left\{ \tilde{N}_2(l_0, l_1, l_0) + \tilde{N}_2(-l_2, -l_1, -l_2) \right\} \\ & \quad \left. + i\lambda_0 \sum_{l_0=1}^{\infty} \left\{ \tilde{N}_3(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + \tilde{N}_3(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0) \right\} \right\}. \quad (5.122) \end{aligned}$$

Así, si calculamos el complejo conjugado de la ecuación (5.122) y cambiamos los índices

$b \leftrightarrow a$ y $2 \leftrightarrow 1$ de la variable u y del tiempo t , la tercera contribución B_5 será

$$\begin{aligned}
 B_5 &= \lambda_0^2 t_{b2}^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[l_0(u_b - u_a)] + \frac{\lambda_0^2}{2} t_{b2}^2 e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} \left[2 \cos(u_b + u_a) + \frac{1}{2} \cos(u_b - u_a) \right] \\
 &\quad - 4\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ t_{b2} F_1 \left[\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] \cos(2u_a) - F_2 \left[\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] \cos(2u_b) \cos(2u_a) \right\} \\
 &\quad + \frac{\lambda_0^2}{2} e^{-\frac{t_{ba}}{4\gamma}} F_2 \left[-\frac{2t_{b2}}{\gamma} \right] \left[\cos(3u_b + u_a) + 9e^{-\frac{2t_{2a}}{\gamma}} \cos(u_b + 3u_a) \right] \\
 &\quad - 2\lambda_0^2 \gamma \left\{ e^{\frac{3t_{b2}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{3t_{b2}}{\gamma} \right] \right\} e^{-\frac{4t_{ba}}{\gamma}} \cos(4u_a) \\
 &\quad - \lambda_0^2 t_{b2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_{10}(l_0, l_1, l_2) + N_{10}(-l_2, -l_1, -l_0)\} \\
 &\quad - \frac{\lambda_0^2}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_{11}(l_0, l_1, l_0) + N_{11}(-l_2, -l_1, -l_2)\} \\
 &\quad - \frac{\lambda_0^2 \gamma}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{N_{12}(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4) + N_{12}(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0)\}, \tag{5.123}
 \end{aligned}$$

donde se ha considerado

$$N_{10}(x, y, z) := F_1 \left[\frac{-yt_{b2}}{\gamma} \right] x^2 e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos[zu_b - xu_a], \tag{5.124}$$

$$N_{11}(x, y, z) := -F_2 \left[\frac{-yt_{b2}}{\gamma} \right] x^2 e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \cos(zu_b - xu_a), \tag{5.125}$$

$$N_{12}(x, y, z, v, w) := e^{-\frac{x^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left(\frac{w^2}{v} \right) \cos[xu_b - wu_a] e^{-\frac{2zt_{2a}}{\gamma}} \left(F_1 \left[\frac{-yt_{b2}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2zt_{b2}}{\gamma} \right] \right). \tag{5.126}$$

Para definir $N_{12}(x, y, z, v, w)$ se trabajaron los términos provenientes de $\tilde{N}_3(x, y, z, v, w)_{b \leftrightarrow a; 2 \leftrightarrow 1}^*$. En específico, el término

$$\tilde{N}_3(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4)_{b \leftrightarrow a; 2 \leftrightarrow 1}^* = \frac{\gamma}{2} e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left(\frac{l_0^2}{l_3} \right) \cos[l_4 u_b - l_0 u_a] \left(F_1 \left[\frac{-l_1 t_{b2}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2l_2 t_{b2}}{\gamma} \right] \right), \tag{5.127}$$

es reescrito considerando los factores

$$e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left(\frac{l_0^2}{l_3} \right) \left(F_1 \left[\frac{-l_1 t_{b2}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2l_2 t_{b2}}{\gamma} \right] \right).$$

Así, empleando la igualdad $\frac{l_4^2}{4\gamma} = \frac{l_0^2}{4\gamma} + \frac{2l_2}{\gamma}$ y la definición de F_1 , ecuación (4.43), estos factores

resultan

$$\begin{aligned}
 & e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left(\frac{l_0^2}{l_3} \right) \left(F_1 \left[\frac{-l_1 t_{b2}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{-2l_2 t_{b2}}{\gamma} \right] \right) \\
 &= e^{-\frac{l_4^2 t_{ba}}{4\gamma}} e^{\frac{2l_2 t_{b2}}{\gamma}} e^{\frac{2l_2 t_{2a}}{\gamma}} \left(\frac{l_0^2}{l_3} \right) \left[\left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \left(e^{-\frac{l_1 t_{b2}}{\gamma}} - 1 \right) - \left(\frac{\gamma}{2l_2} \right) \left(e^{-\frac{2l_2 t_{b2}}{\gamma}} - 1 \right) \right] \\
 &= -e^{-\frac{l_4^2 t_{ba}}{4\gamma}} e^{\frac{2l_2 t_{2a}}{\gamma}} \left(\frac{l_0^2}{l_1} \right) \left(F_1 \left[\frac{l_3 t_{b2}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{2l_2 t_{b2}}{\gamma} \right] \right), \tag{5.128}
 \end{aligned}$$

donde fue utilizado $2l_2 = l_3 + l_1$.

Luego, si combinamos las ecuaciones (5.127) y (5.128) obtenemos

$$\tilde{N}_3(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4)_{b \leftrightarrow a; 2 \leftrightarrow 1}^* = \frac{\gamma}{2} N_{12}(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0),$$

con N_{12} dada por la ecuación (5.126). De forma similar, hallamos

$$\tilde{N}_3(-l_4, -l_3, -l_2, -l_1, -l_0)_{b \leftrightarrow a; 2 \leftrightarrow 1}^* = \frac{\gamma}{2} N_{12}(l_0, l_1, l_2, l_3, l_4).$$

De esta forma, finalizamos nuestro análisis del segundo orden de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$, que está dada por la suma: $B_3 + B_4 + B_5$, la suma de las ecuaciones (5.102), (5.115) y (5.123). Recordemos que hemos considerado $t_2 > t_1$. Por lo que, para obtener el caso $t_1 > t_2$, como en el caso de la corrección a primer orden (5.91), intercambiamos $t_2 \leftrightarrow t_1$.

En la siguiente sección calcularemos la función de un punto y de dos puntos del OAP utilizando los resultados obtenidos para los elementos de transición del operador de posición y del producto de dos operadores de posición.

5.5. Función de un punto y función de dos puntos del oscilador armónico polimérico en el régimen de rotor

En esta sección calcularemos a segundo orden la función de un punto y la función de dos puntos del OAP mediante las ecuaciones (2.56) y (2.57), respectivamente. Estas fórmulas para el caso del OAP tienen la siguiente forma

$$\langle 0 | \hat{x}(-i\tau_1) | 0 \rangle = \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_b \langle p_b, -i\tau_b | \hat{x}(-i\tau_1) | p_a, -i\tau_a \rangle |_{p_b=p_a}}{\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_b \langle p_b, -i\tau_b | p_a, -i\tau_a \rangle |_{p_b=p_a}}, \tag{5.129}$$

$$\langle 0 | \hat{x}(-i\tau_2)\hat{x}(-i\tau_1) | 0 \rangle = \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_b \langle p_b, -i\tau_b | \hat{x}(-i\tau_2)\hat{x}(-i\tau_1) | p_a, -i\tau_a \rangle |_{p_b=p_a}}{\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_b \langle p_b, -i\tau_b | p_a, -i\tau_a \rangle |_{p_b=p_a}}. \tag{5.130}$$

Estas ecuaciones implican la traza de los elementos de $\hat{x}(-i\tau_1)$, y de $\hat{x}(-i\tau_2)\hat{x}(-i\tau_1)$, así como la traza de la amplitud de transición. Además debemos evaluar una rotación de Wick $\tau = it$ y los límites $\tau_b \rightarrow \infty$ y $\tau_a \rightarrow -\infty$, pues así relacionamos la traza de los elementos de matriz con el valor expectación en el estado de vacío del OAP. Una forma de mostrar las ecuaciones (5.129) y (5.130) es introducir la relación de cerradura de los estados propios del operador hamiltoniano en el lado derecho de las ecuaciones y evaluar la rotación Wick así como los límites $\tau_b \rightarrow \infty$ y $\tau_a \rightarrow -\infty$ [48].

Por otro lado, el desarrollo perturbativo de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_r)$ y del producto $\hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r)$, ecuaciones (5.7) y (5.23), del mismo modo que la serie perturbativa de la amplitud de transición (4.15), nos permiten plantear a la función de un punto y la función de dos puntos, ecuaciones (5.129) y (5.130), como series perturbativas. Estas series, como hemos visto, dependen del propagador del rotor (4.13) y el potencial $W = \omega g \alpha (1 + \cos(2u))$. En las siguientes subsecciones ahondaremos en esto.

5.5.1. Función de un punto

Calcularemos la función de un punto a segundo orden. Consideremos la traza del desarrollo perturbativo de los elementos de matriz de $\hat{x}(t_r)$, ecuación (5.7), para esto igualamos los estados inicial y final e integramos respecto a alguno de los puntos frontera:

$$\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_b \langle p_b, -i\tau_b | \hat{x}(-i\tau_1) | p_a, -i\tau_a \rangle |_{p_b=p_a} = \sum_{m=0}^{\infty} \beta^m J^{(m)}, \quad (5.131)$$

donde los $J^{(m)}$ son evaluados en la variable $u = \frac{\lambda_0 p}{\hbar} + \frac{\pi}{2}$, y tienen la forma

$$J^{(m)} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_b \langle b | \hat{x}(-i\tau_1) | a \rangle^{(m)} |_{u_b=u_a}. \quad (5.132)$$

De la misma manera encontramos la traza del desarrollo perturbativo de la amplitud de transición, ecuación (4.15):

$$\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_b \langle p_b, -i\tau_b | p_a, -i\tau_a \rangle |_{p_b=p_a} = \sum_{m=0}^{\infty} \beta^m K^{(m)}, \quad (5.133)$$

con

$$K^{(m)} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_b k^{(m)}(u_b, -i\tau_b; u_a, -i\tau_a) |_{u_b=u_a}. \quad (5.134)$$

De esta forma, si sustituimos los desarrollos perturbativos (5.131) y (5.133), en la función de un punto (5.129), hallamos

$$\langle 0 | \hat{x}(-i\tau_1) | 0 \rangle = \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{\sum_{m=0}^{\infty} \beta^m H^{(m)}}{\sum_{m=0}^{\infty} \beta^m K^{(m)}}. \quad (5.135)$$

Ahora, de las ecuaciones (5.33), (5.56) y (5.80), observamos que sus trazas $J^{(0)}$, $J^{(1)}$ y $J^{(2)}$ son cero, esto es debido a que todos los términos involucrados son proporcionales a $\sin(c_1 u_b + c_2 u_a)$ con c_1 y c_2 constantes arbitrarias:

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_b \sin(c_1 u_b + c_2 u_a) |_{u_b=u_a} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_b \sin(c u_b) = 0, \text{ siendo } c \text{ cualquier constante.}$$

Este resultado está de acuerdo con nuestro análisis hamiltoniano de la subsección 3.4.1.

Podemos generalizar el hecho de que la función de un punto es nula a todo orden. Para esto tenemos que apoyarnos en el análisis hamiltoniano y de simetría de paridad realizados

en la secciones 3.1.2 y 3.3, respectivamente. Inserte dos relaciones de cerradura de los vectores propios del hamiltoniano del OAP, ecuación (3.23), en la ecuación (5.131)

$$\begin{aligned}
 & \frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_b \langle p_b, -i\tau_b | \hat{x}(-i\tau_1) | p_a, -i\tau_a \rangle |_{p_b=p_a} \\
 &= \sum_{n,m=0}^{\infty} e^{-i(t_b-t_1)E_n} e^{-i(t_1-t_a)E_m} \langle n | \hat{x} | m \rangle \left\{ \frac{\lambda_0}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{\lambda_0}}^{\frac{\pi}{\lambda_0}} \psi_n(p_b) \psi_m^*(p_b) dp_b \right\} \\
 &= \sum_{m=0}^{\infty} e^{-i(t_b-t_a)E_m} \langle m | \hat{x} | m \rangle \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Aquí en la segunda igualdad usamos la propiedad de ortonormalidad de los vectores propios exactos del hamiltoniano del OAP [54]. La última igualdad resulta de que los estados propios $|m\rangle$ tienen paridad definida, ecuación (3.99), y del operador \hat{x} tiene paridad impar, ecuación (3.97), por consiguiente, todos valores de expectación $\langle m | \hat{x} | m \rangle$ son nulos [43]. De esta forma, la función de un punto llega a ser cero incluso sin tomar el límite

$$D(t_1) = \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{\int dp_b \langle p_b, -i\tau_b | \hat{x}(t_1) | p_a, -i\tau_a \rangle |_{p_b=p_a}}{\int dp_b \langle p_b, -i\tau_b | p_a, -i\tau_a \rangle |_{p_b=p_a}} = 0. \quad (5.136)$$

Debemos enfatizar que en la representación polimérica no se había calculado la función de un punto dentro del esquema de la integral de trayectoria, por lo que se ignoraba si el formalismo hamiltoniano y de integral de trayectoria serían equivalentes. En particular, hemos visto explícitamente que hasta segundo orden la función de un punto por medio de la integral de trayectoria es nula, por lo que a ese orden coincide con el caso hamiltoniano. Sin embargo, hemos dado un argumento de porque la función de un punto calculada mediante la integral de trayectoria será nula a todo orden como es el resultado previsto por el esquema hamiltoniano, ecuación (3.109).

5.5.2. Función de dos puntos a segundo orden

Para la función de dos puntos emplearemos el desarrollo perturbativo de los elementos de matriz de $\hat{x}(-i\tau_2)\hat{x}(-i\tau_1)$, ecuación (5.23), teniendo en cuenta el ordenamiento temporal $s = 2$ y $r = 1$. De esta forma, la traza es

$$\frac{\lambda_0}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}}^{\frac{\pi\hbar}{\lambda_0}} dp_b \langle p_b, -i\tau_b | \hat{x}(-i\tau_2)\hat{x}(-i\tau_1) | p_a, -i\tau_a \rangle |_{p_b=p_a} = \sum_{m=0}^{\infty} \beta^m G^{(m)}, \quad (5.137)$$

siendo los $G^{(m)}$ evaluados en la variable $u = \frac{\lambda_0 p}{\hbar} + \frac{\pi}{2}$ y definidos por

$$G^{(m)} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_b \langle b | \hat{x}(-i\tau_2)\hat{x}(-i\tau_1) | a \rangle^{(m)} |_{u_b=u_a}. \quad (5.138)$$

Si sustituimos los desarrollos perturbativos que tienen en cuenta la traza, ecuaciones (5.137) y (5.133), la función de dos puntos, ecuación (5.130), llega a ser

$$\langle 0 | \hat{x}(-i\tau_2)\hat{x}(-i\tau_1) | 0 \rangle = \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{\sum_{m=0}^{\infty} \beta^m G^{(m)}}{\sum_{m=0}^{\infty} \beta^m K^{(m)}}. \quad (5.139)$$

De este modo, la traza de la amplitud de transición hasta segundo orden $K^{(0)} + \beta K^{(1)} + \beta^2 K^{(2)}$, será calculada mediante las ecuaciones (4.13), (4.56) y (4.136). También hasta segundo orden, la traza de los elementos de matriz de $\hat{x}(-i\tau_2)\hat{x}(-i\tau_1)$ involucra las ecuaciones (5.34), (5.91), y la suma de (5.102), (5.115) y (5.123). Luego, los términos diferentes de cero resultan ser

$$K^{(0)} = 1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}}, \quad K^{(1)} = -i\tau_{ba}K^{(0)}, \quad (5.140)$$

$$K^{(2)} = -\frac{\tau_{ba}^2}{2}K^{(0)} - \frac{\tau_{ba}^2}{4}e^{-\frac{\tau_{ba}}{4\gamma'}} - \frac{1}{2}F_2 \left[-\frac{\tau_{ba}}{\gamma'} \right] - \frac{1}{2}e^{-\frac{\tau_{ba}}{\gamma'}} F_2 \left[\frac{\tau_{ba}}{\gamma'} \right] + \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{C_1(l_0, l_1) + C_1(-l_2, -l_1)\}, \quad (5.141)$$

y

$$G^{(0)} = 2\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}}, \quad G^{(1)} = -i\tau_{ba}G^{(0)}, \quad (5.142)$$

$$\begin{aligned} G^{(2)} &= -\frac{\tau_{ba}^2}{2}G^{(0)} - \frac{\lambda_0^2}{4}[2\tau_{21} - \tau_{ba}]^2 e^{-\frac{\tau_{ba}}{4\gamma'}} - 2\lambda_0^2 e^{-\frac{\tau_{ba}}{\gamma'}} F_2 \left[\frac{\tau_{ba}}{\gamma'} \right] \\ &\quad - 2\lambda_0^2 \gamma' \left(F_1 \left[-\frac{\tau_{21}}{\gamma'} \right] - e^{-\frac{\tau_{ba}}{\gamma'}} F_1 \left[\frac{\tau_{21}}{\gamma'} \right] \right) + \frac{\lambda_0^2}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{C_2(l_0, l_1, l_2) + C_2(-l_2, -l_1, -l_0)\}. \end{aligned} \quad (5.143)$$

Se simplificaron los siguientes términos en $G^{(2)}$

$$\begin{aligned} &2\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left(F_2 \left[\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] + F_2 \left[\frac{t_{21}}{\gamma} \right] + F_2 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \right) + 2\lambda_0^2 F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] F_1 \left[-\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] e^{-\frac{t_{2a}}{\gamma}} \\ &= 2\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} \left\{ F_2 \left[\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] + F_2 \left[\frac{t_{21}}{\gamma} \right] + F_2 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] + \gamma \left(e^{\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[-\frac{t_{21}}{\gamma} \right] - F_1 \left[-\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + F_1 \left[\frac{t_{b2}}{\gamma} \right] + F_1 \left[\frac{t_{1a}}{\gamma} \right] \right) \right\} \\ &= 2\lambda_0^2 e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_2 \left[\frac{t_{ba}}{\gamma} \right] + 2\lambda_0^2 \gamma \left(F_1 \left[-\frac{t_{21}}{\gamma} \right] - e^{-\frac{t_{ba}}{\gamma}} F_1 \left[\frac{t_{21}}{\gamma} \right] \right), \end{aligned}$$

donde se utilizó la definición de F_1 , ecuación (4.51), y después la definición de F_2 , ecuación (4.66). Del mismo modo, en $G^{(2)}$, también se reescribió

$$\begin{aligned} &l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left(F_1 \left[\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[\frac{l_1 t_{2a}}{\gamma} \right] \right) \left(-2F_1 \left[-\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] + l_2 F_1 \left[-\frac{l_1 t_{2a}}{\gamma} \right] \right) \\ &= l_0 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_1 \left[-\frac{l_1 t_{b2}}{\gamma} \right] \left(-2F_1 \left[-\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] + l_2 F_1 \left[-\frac{l_1 t_{2a}}{\gamma} \right] \right), \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} &l_2 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} \left(F_1 \left[-\frac{l_1 t_{ba}}{\gamma} \right] - F_1 \left[-\frac{l_1 t_{2a}}{\gamma} \right] \right) \left(2F_1 \left[\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] + l_0 F_1 \left[\frac{l_1 t_{2a}}{\gamma} \right] \right) \\ &= l_2 e^{-\frac{l_0^2 t_{ba}}{4\gamma}} F_1 \left[\frac{l_1 t_{b2}}{\gamma} \right] \left(2F_1 \left[\frac{l_1 t_{1a}}{\gamma} \right] + l_0 F_1 \left[\frac{l_1 t_{2a}}{\gamma} \right] \right), \end{aligned}$$

se usó $\frac{l_2^2}{4\gamma} = \frac{(l_0+2)^2}{4\gamma} = \frac{l_0^2}{4\gamma} + \frac{l_1}{\gamma}$, y la definición de F_1 , ecuación (4.51). Estos términos forman parte de la definición de $C_2(x, y, z)$, que se muestra adelante, ecuación (5.147).

Además, en las expresiones, de la ecuación (5.140) a la ecuación (5.143), se ha considerado la rotación de Wick, por lo que se ha definiendo $\gamma' := i\gamma$, y se han introducido las siguientes funciones

$$F_1 [c' \tau_{nm}] = -\frac{1}{c'} \left(e^{c' \tau_{nm}} - 1 \right) = iF_1 [ct_{nm}], \quad \text{con } c' = c(\gamma'), \quad (5.144)$$

$$F_2 [c' \tau_{nm}] = -\frac{1}{c'} (\tau_{nm} + F_1 [c' \tau_{nm}]) = -F_2 [ct_{nm}], \quad \text{con } c' = c(\gamma'). \quad (5.145)$$

También se introdujo

$$C_1(x, y) = -e^{-\frac{x^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} F_2 \left[-\frac{y\tau_{ba}}{\gamma'} \right], \quad (5.146)$$

y

$$\begin{aligned} C_2(x, y, z) &= -e^{-\frac{x^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \left\{ x^2 \left(F_2 \left[-\frac{y\tau_{1a}}{\gamma'} \right] + F_2 \left[-\frac{y\tau_{21}}{\gamma'} \right] + F_2 \left[-\frac{y\tau_{b2}}{\gamma'} \right] \right) \right. \\ &\quad \left. + xz F_1 \left[-\frac{y\tau_{1a}}{\gamma'} \right] F_1 \left[-\frac{y\tau_{21}}{\gamma'} \right] + x F_1 \left[-\frac{y\tau_{b2}}{\gamma'} \right] \left(z F_1 \left[-\frac{y\tau_{2a}}{\gamma'} \right] - 2F_1 \left[-\frac{y\tau_{1a}}{\gamma'} \right] \right) \right\} \quad (5.147) \end{aligned}$$

Ahora, en el análisis hamiltoniano que hicimos en la subsección 3.4.2 de la función de dos puntos del OAP en el régimen de rotor, observamos que la primera contribución diferente de cero es proporcional β^2 . Esto nos dice que la función de dos puntos definida en la ecuación (5.139), al menos, debe ser desarrollada a esa potencia de beta. Así, si desarrollamos hasta segundo orden el numerador y el denominador de la ecuación (5.139), después factorizamos $K^{(0)}$ en el denominador y utilizamos el desarrollo en potencias de $(1+x)^{-1}$ hasta β^2 , hallamos:

$$\begin{aligned} &D(-i\tau_2, -i\tau_1) \\ &= \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{G^{(0)} + \beta G^{(1)} + \beta^2 G^{(2)}}{K^{(0)}} \left(1 + \beta \frac{K^{(1)}}{K^{(0)}} + \beta^2 \frac{K^{(2)}}{K^{(0)}} \right)^{-1} \\ &= \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{G^{(0)}}{K^{(0)}} + \beta \left[\frac{G^{(1)}}{K^{(0)}} - \frac{G^{(0)} K^{(1)}}{(K^{(0)})^2} \right] + \beta^2 \left[\frac{G^{(2)}}{K^{(0)}} - \frac{G^{(1)} K^{(1)}}{(K^{(0)})^2} + \frac{G^{(0)}}{K^{(0)}} \left(\frac{(K^{(1)})^2}{(K^{(0)})^2} - \frac{K^{(2)}}{K^{(0)}} \right) \right] \quad (5.148) \end{aligned}$$

Notemos que los términos en los denominadores están bien definido en los límites $\tau_b(\tau_a) \rightarrow \infty(-\infty)$, pues $\lim_{\tau_b(\tau_a) \rightarrow \infty(-\infty)} K^{(0)} = 1$. Por otra parte, si consideramos los siguientes límites

$$\lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} = 0, \quad \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \tau_{ba} e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} = 0, \quad \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \tau_{ba}^2 e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} = 0, \quad (5.149)$$

y las expresiones de las trazas, de la ecuación (5.140) a la ecuación (5.143), obtenemos los

límites de los siguientes términos en (5.148):

$$\begin{aligned}
 \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{G^{(0)}}{K^{(0)}} &= \frac{2\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}}}{1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}}} = 0, \\
 \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{G^{(1)}}{K^{(0)}} &= \frac{-2i\lambda_0^2 \tau_{ba} \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}}}{1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}}} = 0, \\
 \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{G^{(0)}K^{(1)}}{(K^{(0)})^2} &= \frac{\left[2\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \right] (-i\tau_{ba}) \left[1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \right]}{\left[1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \right]^2} = 0, \\
 \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{G^{(1)}K^{(1)}}{(K^{(0)})^2} &= \frac{-\tau_{ba}^2 \left[2\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \right] \left[1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \right]}{\left[1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \right]^2} = 0, \\
 \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{G^{(0)}(K^{(1)})^2}{K^{(0)}(K^{(0)})^2} &= \frac{-\tau_{ba}^2 \left[2\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \right] \left[1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \right]^2}{\left[1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \right]^3} = 0, \\
 \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{G^{(0)}K^{(2)}}{(K^{(0)})^2} &= \frac{\left[2\lambda_0^2 \sum_{l_0=1}^{\infty} l_0^2 e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \right]}{\left[1 + 2 \sum_{l_0=1}^{\infty} e^{-\frac{l_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \right]^2} \left\{ -\frac{\tau_{ba}^2}{2} K^{(0)} - \frac{\tau_{ba}^2}{4} e^{-\frac{\tau_{ba}}{4\gamma'}} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} F_2 \left[-\frac{\tau_{ba}}{\gamma'} \right] - \frac{1}{2} e^{-\frac{\tau_{ba}}{\gamma'}} F_2 \left[\frac{\tau_{ba}}{\gamma'} \right] + \frac{1}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{C_1(l_0, l_1) + C_1(-l_2, -l_1)\} \right\} \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Por tanto, la función de dos puntos hasta segundo orden, ecuación (5.148), nos queda

$$D(-i\tau_2, -i\tau_1) = \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \beta^2 G^{(2)}. \quad (5.150)$$

Antes de evaluar el límite de la anterior ecuación, necesitamos reescribir la expresión de $G^{(2)}$, ecuación (5.143). Podemos simplificar los siguientes términos de (5.143), si utilizamos las expresiones de F_1 y F_2 , ecuaciones (5.144) y (5.145), respectivamente. Así, tenemos

$$-2\lambda_0^2 e^{-\frac{\tau_{ba}}{\gamma'}} F_2 \left[\frac{\tau_{ba}}{\gamma'} \right] - 2\lambda_0^2 \gamma' F_1 \left[-\frac{\tau_{21}}{\gamma'} \right] = 2\lambda_0^2 \gamma' e^{-\frac{\tau_{ba}}{\gamma'}} (\tau_{ba} + \gamma') + \left(\frac{\lambda_0^2 \alpha^2}{2\beta^2} \right) e^{-\frac{2\omega g}{h}(\tau_2 - \tau_1)}, \quad (5.151)$$

donde hemos sustituido $\gamma' = \frac{\hbar}{2\omega g}$ y $(\gamma')^2 = -\frac{\alpha^2}{4\beta^2}$ en el segundo término del lado derecho de la ecuación. Además, podemos trabajar con $C_2(l_0, l_1, l_2)$ definido en (5.147), si empleamos la definición de F_2 (5.145), hallamos

$$\begin{aligned}
 & C_2(l_0, l_1, l_2) \\
 &= -e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \left\{ l_0^2 \left(F_2 \left[-\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right] + F_2 \left[-\frac{l_1 \tau_{21}}{\gamma'} \right] + F_2 \left[-\frac{l_1 \tau_{b2}}{\gamma'} \right] \right) \right. \\
 &\quad \left. + l_0 l_2 F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right] F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{21}}{\gamma'} \right] + l_0 F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{b2}}{\gamma'} \right] \left(l_2 F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{2a}}{\gamma'} \right] - 2F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right] \right) \right\} \\
 &= -\gamma' \frac{l_0^2}{l_1} e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \left(\tau_{ba} + F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right] + F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{21}}{\gamma'} \right] + F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{b2}}{\gamma'} \right] \right) \\
 &\quad - l_0 l_2 e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right] F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{21}}{\gamma'} \right] \\
 &\quad - l_2 l_0 e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{b2}}{\gamma'} \right] F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{2a}}{\gamma'} \right] + 2l_0 e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{b2}}{\gamma'} \right] F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right]. \quad (5.152)
 \end{aligned}$$

De forma similar, podemos expresar $C_2(-l_2, -l_1, -l_0)$ mediante (5.145), pero además consideramos $e^{-\frac{i_2^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} = e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} e^{-\frac{l_1 \tau_{ba}}{\gamma'}}$, y que F_1 cumple la propiedad $F_1[c'\tau_{nm}] = e^{c'\tau_{nm}} F_1[-c'\tau_{nm}]$, así

$$\begin{aligned}
 & C_2(-l_2, -l_1, -l_0) \\
 &= -e^{-\frac{i_2^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \left\{ l_2^2 \left(F_2 \left[\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right] + F_2 \left[\frac{l_1 \tau_{21}}{\gamma'} \right] + F_2 \left[\frac{l_1 \tau_{b2}}{\gamma'} \right] \right) \right. \\
 &\quad \left. + l_2 l_0 F_1 \left[\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right] F_1 \left[\frac{l_1 \tau_{21}}{\gamma'} \right] + l_2 F_1 \left[\frac{l_1 \tau_{b2}}{\gamma'} \right] \left(l_0 F_1 \left[\frac{l_1 \tau_{2a}}{\gamma'} \right] + 2F_1 \left[\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right] \right) \right\} \\
 &= \gamma' \frac{l_2^2}{l_1} e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} \left(\tau_{ba} e^{-\frac{l_1 \tau_{ba}}{\gamma'}} + e^{-\frac{l_1 \tau_{b1}}{\gamma'}} F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right] + e^{-\frac{l_1 \tau_{ba}}{\gamma'}} F_1 \left[\frac{l_1 \tau_{21}}{\gamma'} \right] + e^{-\frac{l_1 \tau_{2a}}{\gamma'}} F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{b2}}{\gamma'} \right] \right) \\
 &\quad - l_2 l_0 e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} e^{-\frac{l_1 \tau_{b1}}{\gamma'}} F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right] F_1 \left[\frac{l_1 \tau_{21}}{\gamma'} \right] \\
 &\quad - l_0 l_2 e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{b2}}{\gamma'} \right] F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{2a}}{\gamma'} \right] - 2l_2 e^{-\frac{i_0^2 \tau_{ba}}{4\gamma'}} e^{-\frac{l_1 \tau_{21}}{\gamma'}} F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{b2}}{\gamma'} \right] F_1 \left[-\frac{l_1 \tau_{1a}}{\gamma'} \right]. \quad (5.153)
 \end{aligned}$$

Por consiguiente, la función de dos puntos (5.150) toma la siguiente forma

$$D(\tau_2, \tau_1) = \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \beta^2 \left[R + \left(\frac{\lambda_0^2 \alpha^2}{2\beta^2} \right) e^{-\frac{2\omega g}{\hbar}(\tau_2 - \tau_1)} \right],$$

donde hemos tenido en cuenta (5.151) y definimos

$$\begin{aligned}
 R &= -\frac{\tau_{ba}^2}{2} G^{(0)} - \frac{\lambda_0^2}{4} [2\tau_{21} - \tau_{ba}]^2 e^{-\frac{\tau_{ba}}{4\gamma'}} + 2\lambda_0^2 \gamma' e^{-\frac{\tau_{ba}}{\gamma'}} F_1 \left[\frac{\tau_{21}}{\gamma'} \right] + 2\lambda_0^2 \gamma' e^{-\frac{\tau_{ba}}{\gamma'}} (\tau_{ba} + \gamma') \\
 &\quad + \frac{\lambda_0^2}{2} \sum_{l_0=1}^{\infty} \{ C_2(l_0, l_1, l_2) + C_2(-l_2, -l_1, -l_0) \},
 \end{aligned}$$

con $C_2(l_0, l_1, l_2)$ y $C_2(-l_2, -l_1, -l_0)$ dados por la ecuaciones (5.152) y (5.153) respectivamente.

Por otro lado, además de los límites (5.149), podemos obtener los siguientes límites para la función F_1 a partir de su definición (5.144)

$$\lim_{\tau_b \rightarrow \infty} F_1 [-c' \tau_{bd}] = -\frac{1}{c'}, \quad \lim_{\tau_a \rightarrow -\infty} F_1 [-c' \tau_{da}] = -\frac{1}{c'}. \quad (5.154)$$

De esta forma, mediante las ecuaciones (5.149) y (5.154) vemos que $\lim_{\tau_b(\tau_a) \rightarrow \infty(-\infty)} R = 0$, por tanto la función de dos puntos a segundo orden es

$$D(\tau_2, \tau_1) = \left(\frac{\lambda_0^2 \alpha^2}{2} \right) e^{-\frac{2\omega g}{\hbar}(\tau_2 - \tau_1)}, \quad (5.155)$$

la cual es la expresión que obtuvimos a través de teoría de la perturbaciones en el enfoque hamiltoniano ecuación (3.139).

Nuestro análisis de la función de dos puntos dentro del formalismo de la integral de trayectoria polimérica, notoriamente coincide con la función de dos puntos obtenida en el capítulo tres, ecuación (3.139), mediante el esquema hamiltoniano. Debemos señalar que éste es el primer cálculo explícito hecho en ambos enfoques en el contexto de la representación polimérica, por lo que este estudio podría ser útil para estudiar la equivalencia entre los dos formalismos. Por otro lado, en ambos análisis el punto clave es implementar la teoría de perturbaciones basados en la teoría del rotor, el cual se resuelve de manera natural en el espacio de Hilbert polimérico en espacio de momentos. Esto nos hace pensar que la aproximación de rotor podría ser de utilidad en otros problemas donde la cuantización polimérica sea empleada.

5.6. Propagador del campo escalar polimérico a altas energías: Integral de trayectoria

En esta sección calculamos el propagador del campo escalar a muy altas energías, o régimen de rotor, como lo hicimos en la sección 3.5. De acuerdo al análisis hecho en el Apéndice A.2, la función de Wightman de frecuencias positivas se puede calcular mediante las funciones de un punto y de dos punto de los modos $q_{\mathbf{k}}$, a través de la ecuación (2.27), pero ahora con estas funciones definidas mediante las ecuaciones (2.56) y (2.57), respectivamente.

Así, si relacionamos $q_{\mathbf{k}}$ con el operador de posición $\hat{x}_{\mathbf{k}}$, tendremos las siguientes relaciones

$$D_{\mathbf{k}}(t) = D(t_1 = t) \Big|_{\hbar=1, m_{\text{OAS}}=1, \omega_{\text{OAS}}=\omega_{\mathbf{k}}=\sqrt{\mathbf{k}^2+\mu^2}}, \quad (5.156)$$

$$D_{\mathbf{k}}(t, t') = D(t_2 = t, t_1 = t') \Big|_{\hbar=1, m_{\text{OAS}}=1, \omega_{\text{OAS}}=\omega_{\mathbf{k}}=\sqrt{\mathbf{k}^2+\mu^2}}, \quad (5.157)$$

donde $D(t_1)$ y $D(t_2, t_1)$ representan la función de un punto y dos puntos del OAP, dadas por las ecuaciones (5.135) y (5.139) respectivamente, m_{OAS} y ω_{OAS} denotan la masa y frecuencia del oscilador armónico y μ la masa del campo escalar.

De esta forma, la función de Wightman de frecuencias positivas del campo escalar en términos de osciladores armónicos poliméricos la hallamos a partir de las ecuaciones (2.27), (5.156) y (5.157), donde las ecuaciones (5.156) y (5.157) son calculadas mediante (5.136) y (5.155), respectivamente. Así, la función de Wightman es

$$\langle \Omega | \hat{\phi}(t, \mathbf{x}) \hat{\phi}(t', \mathbf{x}') | \Omega \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} D_{\mathbf{k}}(t, t'),$$

con

$$D_{\mathbf{k}}(t, t') = \frac{\lambda_0^2 \alpha_{\mathbf{k}}^2}{2} e^{-\frac{i}{\hbar}(2\omega_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}})(t-t')}, \quad (5.158)$$

donde se consideró $t_s = t$ y $t_r = t'$, es decir, $t > t'$.

Con esto finalizamos nuestro análisis del propagador del campo escalar polimérico mediante la integral de trayectoria. Como hemos visto el formalismo hamiltoniano y la integral de trayectoria proporcionan la misma expresión para el propagador del campo polimérico en el régimen de rotor. Nos gustaría remarcar que, por primera vez, podemos contrastar el resultado de [15], pues no se había calculado el propagador del campo mediante otro método, distinto al hamiltoniano, en este caso se usó la integral de trayectoria polimérica. Además, ésta es la primera vez que se calcula un valor de expectación, y no únicamente la amplitud de transición, como es común en la integral de trayectoria polimérica.

Capítulo 6

Conclusiones y perspectivas

6.1. Discusión y conclusiones

Los dos hitos de la física del siglo XX, la relatividad general (RG) y la teoría cuántica de campos (TCC), son aún teorías incompletas, pues ambas presentan singularidades en sus predicciones físicas que originan interrogantes conceptuales y técnicas. Notablemente, la raíz de esta problemática podría estar relacionada con la hipótesis de un espacio-tiempo continuo. De esta forma, en algunas propuestas de gravedad cuántica se propone que el carácter continuo del espacio-tiempo no sea fundamental, en su lugar se hace referencia a una estructura discreta del espacio-tiempo en el régimen cuántico, con la que se podría dar una descripción satisfactoria de dichas singularidades.

Con la idea de estudiar el probable comportamiento de los campos cuánticos a altas energías teniendo en cuenta una posible estructura cuántica del espacio-tiempo, Hossain *et al* [15], así como Chung y Morales [18], estudiaron el propagador de un campo escalar y de un campo de Dirac, respectivamente. Para esto utilizaron un camino intuitivo que consiste en emplear un desarrollo en modos de Fourier del campo, el cual cumple con condiciones de frontera periódicas. Además, se introducen las variables adecuadas para aplicar la teoría polimérica en los grados de libertad mecánicos que el campo presenta en cada punto. En el caso del campo escalar, resulta que el campo está formado por una torre de osciladores poliméricos (péndulos cuánticos), así el propagador presenta dos comportamientos asintóticos: el régimen de rotor y el régimen de oscilador. De éste último se puede recuperar el propagador estándar del campo escalar. De esta forma, propusimos estudiar el propagador del campo escalar a altas energías (régimen de rotor) mediante el esquema hamiltoniano y la integral de trayectoria polimérica, en ambos tuvimos que implementar teoría de perturbaciones.

En el capítulo 2 presentamos algunos aspectos de la teoría cuántica estándar de un campo escalar real. El motivo fue introducir los elementos que nos permiten definir el modelo de un campo escalar polimérico y notar las diferencias entre la teoría canónica y el modelo polimérico.

La dinámica del OAP en el espacio de momentos fue estudiada en el capítulo 3. La dinámica corresponde a un péndulo cuántico, por lo que aprovechamos que el hamiltoniano consiste en un rotor y en un potencial trigonométrico. Para valores de la frecuencia del oscilador que involucren energías mayores que la energía $\frac{\hbar^2}{m\lambda_0^2}$ la teoría de perturbaciones puede ser aplicada sin problema. De esta forma, hicimos un análisis detallado de la teoría de perturbaciones en la descripción hamiltoniana del OAP complementando los trabajos previos [15, 19, 52, 56]. Así, obtuvimos las energías propias y funciones propias del OAP hasta segundo y primer

orden, respectivamente, vea el cuadro 3.1. Éstos son comúnmente expresados mediante los valores característicos de la ecuación de Mathieu y las funciones Mathieu, respectivamente, [15, 53]. Incorporar la teoría de perturbaciones al análisis del OAP, nos permitió plantear sistemáticamente la función de dos puntos del OAP (ecuaciones (3.111), (3.113), (3.114) y (3.120)) a cualquier orden, y por consiguiente el propagador del campo, ecuación (3.142).

Este análisis mediante teoría de perturbaciones es uno de nuestros resultados. Nuestro propósito ha sido desarrollar un tratamiento sistemático para el análisis del propagador polimérico de un campo escalar, que sea independiente de las propiedades asociadas con la ecuación de Mathieu. Esto es deseable al menos por dos razones. En primer lugar, la forma de proceder en [15] no permite tener una interpretación física de las correcciones a orden arbitrario. Segundo, para incorporar posteriormente interacciones. Nuestro estudio muestra hasta el momento que la teoría de perturbaciones nos ha permitido responder la primera cuestión y nos posibilitará responder la segunda, ya que nos esclareció un carácter perturbativo del propagador a altas energías y conjeturamos que su implementación nos permitirá estudiar el caso con interacciones en ese régimen de energía.

En el capítulo 4, con base al procedimiento ideado por Feynman en la formulación de la integral de trayectoria [27, 30, 32], hicimos una propuesta para la amplitud de transición del OAP, como un desarrollo perturbativo en el régimen de rotor, ecuación (4.15). Los términos de esta serie sólo dependen del propagador del rotor, ecuación (4.13), y del potencial $\omega g \alpha (1 + \cos(2u))$, por lo que pueden ser calculados a cualquier orden. De forma explícita, calculamos las contribuciones hasta segundo orden de la amplitud de transición del OAP: $k^{(0)}$, $k^{(1)}$ y $k^{(2)}$, ecuaciones (4.13), (4.56) y (4.136). Cabe señalar que en nuestro trabajo no cambiamos las variables definidas en la integral de trayectoria, ecuación (4.8), que son variables discretas y acotadas, por variables continuas y no acotadas, este cambio es comúnmente hecho en la literatura donde también se estudia la integral de trayectoria del OAP [31, 32, 33]. Asimismo, subrayamos que en este trabajo hemos calculado explícitamente hasta segundo orden la amplitud del OAP en el régimen de rotor, lo cual contribuye al análisis hecho en [32], donde la amplitud fue expresada formalmente en términos de la acción. De esta forma, todos los resultados de este capítulo son nuevos.

En el capítulo cinco con base en la serie perturbativa de la amplitud de transición (4.15), planteamos la función de un punto y de dos puntos del OAP como desarrollos perturbativos, ecuaciones (5.135) y (5.139), respectivamente. Estos desarrollos involucran las trazas de los elementos de matriz de $\hat{x}(-i\tau_1)$, y de $\hat{x}(-i\tau_2)\hat{x}(-i\tau_1)$, así como la traza de la amplitud de transición, ecuaciones (5.132) (5.138) y (5.134), respectivamente. Por lo que, además del cálculo explícito de la amplitud de transición del OAP, se requirió de la forma específica de los elementos de matriz de $\hat{x}(-i\tau_1)$ y $\hat{x}(-i\tau_2)\hat{x}(-i\tau_1)$, los cuales fueron calculados hasta segundo orden: ecuaciones (5.33), (5.56), (5.80), (5.34), (5.91), (5.102), (5.115) y (5.123). Estos son parte de nuestros resultados. Asimismo, mediante los modos $q_{\mathbf{k}}$ calculamos el propagador del campo escalar polimérico mediante la integral de trayectoria, ecuación (5.158). Así, resultados previos obtenidos mediante el formalismo hamiltoniano [15], fueron recuperados por medio de la integral de trayectoria, siendo la primera vez que se contrastan ambos tipos de análisis en este contexto. De esta forma, nuestro estudio del propagador del campo escalar hecho explícitamente en ambos formalismos podría ser útil para establecer la equivalencia entre ellos en la representación polimérica.

Por otra parte, enfatizamos las diferencias de nuestro trabajo con lo hecho en [31]. Como ya mencionamos los modos mecánicos del campo en los que se realiza la integral de trayectoria polimérica son distintos. Además, en el trabajo [31] sólo se formula la amplitud de transición

del campo escalar en términos de la acción de manera formal, mientras que en nuestro trabajo formulamos y calculamos de forma explícita el propagador del campo, acentuamos que esto implicó calcular un valor de expectación, es decir, elementos de matriz y amplitud de transición, en la representación de integral de trayectoria polimérica, hasta donde tenemos conocimiento nuestra propuesta es el primer cálculo de esta índole.

6.2. Perspectivas

Nos enfocamos en el régimen de altas energías debido a que en este sector la teoría perturbativa es naturalmente implementada. Sin embargo, queda la pregunta si es posible aproximar sistemáticamente el régimen de oscilador (de bajas energías) en los formalismos hamiltoniano y de integral de trayectoria, esto es, si podemos utilizar métodos de aproximación, como la teoría de perturbaciones, de tal forma que podamos generalizar este proceso a otros modelos. Como ya hemos mencionado el interés de hacer esto es contar con un proceso que no dependa de las propiedades de la ecuación de Mathieu, y así podamos estudiar el caso de un campo escalar con una interacción del tipo $\lambda\phi^4$, por ejemplo. La relevancia de poder estudiar esta interacción es porque podríamos analizar aspectos relacionados con las divergencias ultravioletas, como la renormalización, dentro del esquema de la representación polimérica. Estas cuestiones pueden ser parte de estudios futuros.

Un punto pendiente es el análisis del régimen de rotor mediante el esquema de renormalización propuesto por [26], y como este análisis sería compatible con el límite continuo de la teoría polimérica. También, sería interesante analizar la implementación de este esquema de renormalización [26], en el formalismo de integral trayectoria.

Asimismo, otra perspectiva interesante que se deriva de nuestro trabajo, es investigar si con nuestra propuesta basada en la teoría de perturbaciones podemos establecer qué sucede con la invarianza de Lorentz en el modelo de un campo escalar polimérico. Como ya indicamos, la ruptura a la simetría de Lorentz que presenta la expresión del propagador polimérico [15], puede ser aparente, pues como es discutido en [58], esto puede ser causado por el truncamiento de la serie (3.113), por lo que debe ser considerada con más meticulosidad.

Por último, sería interesante estudiar el campo de Dirac desde la perspectiva de la integral de trayectoria polimérica, esto podría ayudar a seguir desarrollando el modelo propuesto en [18].

Apéndice A

Función de Wightman del campo escalar en modos de Fourier

En este apéndice expresamos la función de Wightman de frecuencias positivas del campo escalar como una serie de las funciones de un punto y de dos puntos de los modos de Fourier $q_{\mathbf{k}}$. Esto lo realizaremos para en el formalismo hamiltoniano y en la integral de trayectoria, ecuación (2.27). La función de un punto y de dos puntos del modo $q_{\mathbf{k}}$, en el formalismo hamiltoniano, están definidas por las ecuaciones (2.28) y (2.29), respectivamente. Mientras que en la integral de trayectoria estas funciones están dadas por las ecuaciones (2.56) y (2.57), respectivamente.

A.1. Formalismo hamiltoniano

En esta sección deducimos la fórmula (2.27), con $D_{\mathbf{k}}(t)$ y $D_{\mathbf{k}}(t, t')$ dadas por las ecuaciones (2.28) y (2.29), respectivamente. En primer lugar consideremos la condición de realidad para $\phi_{\mathbf{k}}$, la primera expresión de ecuación (2.14), si combinamos esta ecuación con la relación entre $\phi_{\mathbf{k}}$ y $q_{\mathbf{k}}$, la primera ecuación de (2.21), obtenemos

$$\begin{aligned}\phi_{-\mathbf{k}} &:= \frac{q_{\mathbf{k}} - iq_{-\mathbf{k}}}{\sqrt{2}}, \quad \text{con } \mathbf{k} \in \mathcal{L}^+, \\ \Rightarrow \phi_{\mathbf{k}} &:= \frac{q_{-\mathbf{k}} - iq_{\mathbf{k}}}{\sqrt{2}}, \quad \text{con } \mathbf{k} \in \mathcal{L}^-, \end{aligned} \tag{A.1}$$

donde se hizo el cambio

$$\mathbf{k}, \text{ con } \mathbf{k} \in \mathcal{L}^+ \rightarrow -\mathbf{k}, \text{ con } \mathbf{k} \in \mathcal{L}^-,$$

mediante la definición de \mathcal{L}^- , ecuación (2.19). De esta forma, la serie de Fourier del campo, la primera ecuación de (2.13), se puede reescribir de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\phi(t, \mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \left\{ \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}^+} \phi_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}^-} \phi_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} + \phi_0 \right\}. \\ &= \frac{1}{\sqrt{2V}} \left\{ \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}^+} (q_{\mathbf{k}}(t) + iq_{-\mathbf{k}}(t)) e^{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}^-} (q_{-\mathbf{k}}(t) - iq_{\mathbf{k}}(t)) e^{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} + \sqrt{2}q_0 \right\} \end{aligned} \tag{A.2}$$

aquí hemos usado la primera y última ecuación de (2.21) y la ecuación (A.1), también hemos omitido el acento circunflejo de los operadores $\hat{\phi}(t, \mathbf{x})$ y $\hat{q}_{\mathbf{k}}(t)$, para simplificar las expresiones.

Por consiguiente, el producto de dos campos expresados en modos $q_{\mathbf{k}}$, teniendo en cuenta $t > t'$ y la ecuación (A.2), resulta ser:

$$\phi(t, \mathbf{x})\phi(t', \mathbf{x}') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} q_{\mathbf{k}}(t) q_{\mathbf{k}'}(t'), \quad (\text{A.3})$$

con

$$\Gamma_{00} = 1, \quad \Gamma_{\mathbf{k}0} = \begin{cases} \sqrt{2} \cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}), & \mathbf{k} \in \mathcal{L}^+, \\ \sqrt{2} \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}), & \mathbf{k} \in \mathcal{L}^-, \end{cases} \quad \Gamma_{0\mathbf{k}'} = \begin{cases} \sqrt{2} \cos(\mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}'), & \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^+, \\ \sqrt{2} \sin(\mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}'), & \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^-, \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

$$\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}') - \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} - \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}'), & \mathbf{k} \in \mathcal{L}^+, \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^-, \\ \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}') + \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} - \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}'), & \mathbf{k} \in \mathcal{L}^-, \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^+, \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

$$\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} \cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}') + \cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} - \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}'), & \mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^+, \\ -\cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}') + \cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} - \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}'), & \mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^-. \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

Para obtener la ecuación (A.3) se hicieron los siguientes cambios en los índices, de acuerdo con (2.19):

$$\begin{aligned} -\mathbf{k}, & \text{ con } \mathbf{k} \in \mathcal{L}^+ \rightarrow \mathbf{k}, \text{ con } \mathbf{k} \in \mathcal{L}^-, \\ -\mathbf{k}', & \text{ con } \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^+ \rightarrow \mathbf{k}', \text{ con } \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^-. \end{aligned}$$

De igual forma se cambiaron los índices $-\mathbf{k}$, con $\mathbf{k} \in \mathcal{L}^-$ y $-\mathbf{k}'$, con $\mathbf{k}' \in \mathcal{L}^-$.

Ahora, para calcular el valor de expectación en el vacío del producto de los campos (A.3), consideraremos la definición que hemos hecho del vacío del campo: $|\Omega\rangle = \bigotimes_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} |0_{\mathbf{k}}\rangle$. Además, es conveniente notar que la sumas en \mathbf{k} y \mathbf{k}' en la ecuación (A.3) pueden separarse en dos partes: una suma que contiene los términos con $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, y otra suma que contiene los términos con $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$. De esta forma, el valor de expectación en vacío de (A.3) es

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}', t') | \Omega \rangle &= \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} = \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}} D_{\mathbf{k}}(t, t') \prod_{\substack{\mathbf{j} \in \mathcal{L} \\ \mathbf{j} \neq \mathbf{k}}} \langle 0_{\mathbf{k}} | 0_{\mathbf{k}} \rangle \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} D_{\mathbf{k}}(t) D_{\mathbf{k}'}(t') \prod_{\substack{\mathbf{j} \in \mathcal{L} \\ \mathbf{j} \neq \mathbf{k}, \mathbf{k}'}} \langle 0_{\mathbf{k}} | 0_{\mathbf{k}} \rangle, \\ &= \frac{1}{V} \left\{ \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} D_{\mathbf{k}}(t) D_{\mathbf{k}'}(t') + \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} = \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}} D_{\mathbf{k}}(t, t') \right\}, \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

donde supusimos que los estados bases $|0_{\mathbf{k}}\rangle$ están normalizados, también definimos la función de un punto y de dos puntos de $q_{\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{k}}(t) &:= \langle 0_{\mathbf{k}} | q_{\mathbf{k}}(t) | 0_{\mathbf{k}} \rangle, \\ D_{\mathbf{k}}(t, t') &:= \langle 0_{\mathbf{k}} | q_{\mathbf{k}}(t) q_{\mathbf{k}}(t') | 0_{\mathbf{k}} \rangle, \end{aligned}$$

y reescribimos los coeficientes $\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ correspondientes a la ecuación (A.6), como sigue

$$\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}} = \begin{cases} \cos [(\mathbf{x} + \mathbf{x}') \cdot \mathbf{k}] \cos [(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{k}], & \mathbf{k} = \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^+, \\ -\cos [(\mathbf{x} + \mathbf{x}') \cdot \mathbf{k}] + \cos [(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{k}], & \mathbf{k} = \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^-, \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

$$\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} \cos (\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}') + \cos (\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} - \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}'), & \mathbf{k} \neq \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^+, \\ -\cos (\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}') + \cos (\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} - \mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}'), & \mathbf{k} \neq \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^-. \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

Aún podemos trabajar la ecuación (A.7). De la definición del hamiltoniano, ecuación (2.22), y de la expresión $\omega_{\mathbf{k}}^2 = \mathbf{k}^2 + \mu^2$, vemos que la dependencia implícita del hamiltoniano en el vector de onda \mathbf{k} es cuadrática. Además, puesto que $q_{\mathbf{k}}(t)$ está definido en el esquema de Heisenberg, entonces se cumplen las siguientes identidades:

$$D_{\mathbf{k}}(t) = D_{-\mathbf{k}}(t), \quad D_{\mathbf{k}}(t, t') = D_{-\mathbf{k}}(t, t'). \quad (\text{A.10})$$

Para implementar estas propiedades en (A.7), debemos cambiar los índices de suma \mathbf{k} y \mathbf{k}' definidos en \mathcal{L}^- :

$$\mathbf{k}, \text{ con } \mathbf{k} \in \mathcal{L}^- \rightarrow -\mathbf{k}, \text{ con } \mathbf{k} \in \mathcal{L}^+, \quad (\text{A.11})$$

$$\mathbf{k}', \text{ con } \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^- \rightarrow -\mathbf{k}', \text{ con } \mathbf{k}' \in \mathcal{L}^+. \quad (\text{A.12})$$

Por tanto, si desarrollamos las sumas en (A.7) teniendo en cuenta que $\mathcal{L} = \mathcal{L}^+ \cup \mathcal{L}^- \cup \{\mathbf{k} = \mathbf{0}\}$, luego empleamos los cambios (A.11) y (A.12), y implementamos las propiedades (A.10), entonces hallamos la expresión para la función de dos puntos del campo escalar en términos de los modos $q_{\mathbf{k}}$, ecuación (2.27), con $D_{\mathbf{k}}(t)$ y $D_{\mathbf{k}}(t, t')$ dadas por las ecuaciones (2.28) y (2.29), respectivamente.

A.2. Formalismo de integral de trayectoria

En esta sección demostraremos como la fórmula de la traza para el campo, ecuación (2.55), implica la ecuación (2.27), con $D_{\mathbf{k}}(t)$ y $D_{\mathbf{k}}(t, t')$ dadas por las ecuaciones (2.56) y (2.57), respectivamente. Partimos de los elementos de matriz del producto de dos campos entre dos vectores propios del operador de momento: $\langle \pi_b, t_b | \phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}', t') | \pi_a, t_a \rangle$, donde los índices b y a denotan estado final e inicial, respectivamente. Consideremos el producto de los campos expresado en los modos $q_{\mathbf{k}}$, ecuación (A.3), donde los coeficientes $\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$ están dados por las ecuaciones (A.4), (A.5), (A.8) y (A.9). Asimismo, proponemos que los vectores propios del momento canónico se expresan como un producto tensorial de los vectores propios de modos $p_{\mathbf{k}}: | \pi, t \rangle = \bigotimes_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}} | p_{\mathbf{k}}, t \rangle$. Por tanto, los elementos de matriz de ϕ^2 llegan a ser

$$\begin{aligned} \langle \pi_b, t_b | \phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}', t') | \pi_a, t_a \rangle &= \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} = \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}} (q_{\mathbf{k}}(t) q_{\mathbf{k}}(t'))_{ba} \prod_{\substack{\mathbf{j} \in \mathcal{L} \\ \mathbf{j} \neq \mathbf{k}}} k_{\mathbf{j}}(b; a) \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (q_{\mathbf{k}}(t))_{ba} (q_{\mathbf{k}'}(t'))_{ba} \prod_{\substack{\mathbf{j} \in \mathcal{L} \\ \mathbf{j} \neq \mathbf{k}, \mathbf{k}'}} k_{\mathbf{j}}(b; a), \end{aligned}$$

donde introdujimos la notación

$$\begin{aligned} (q_{\mathbf{k}}(t) q_{\mathbf{k}}(t'))_{ba} &= \langle p_{b\mathbf{k}}, t_b | q_{\mathbf{k}}(t) q_{\mathbf{k}}(t') | p_{a\mathbf{k}}, t_a \rangle, \\ (q_{\mathbf{k}}(t))_{ba} (q_{\mathbf{k}'}(t'))_{ba} &= \langle p_{b\mathbf{k}}, t_b | q_{\mathbf{k}}(t) | p_{a\mathbf{k}}, t_a \rangle \langle p_{b\mathbf{k}'}, t_b | q_{\mathbf{k}'}(t') | p_{a\mathbf{k}'}, t_a \rangle, \\ k_{\mathbf{j}}(b; a) &= \langle p_{b\mathbf{j}}, t_b | p_{a\mathbf{j}}, t_a \rangle. \end{aligned}$$

De esta forma, proponemos que la traza de los elementos de matriz de ϕ^2 corresponde a tomar la traza en cada modo $q_{\mathbf{k}}$ en la base $|p_{\mathbf{k}}\rangle$, como se muestra

$$\begin{aligned} & \int d\pi_b \langle \pi_b, t_b | \phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}', t') | \pi_a, t_a \rangle_{\pi_b = \pi_a} \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} = \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \int dp_{b\mathbf{k}} (q_{\mathbf{k}}(t) q_{\mathbf{k}}(t'))_{ba} |_{p_{b\mathbf{k}} = p_{a\mathbf{k}}} \prod_{\substack{j \in \mathcal{L} \\ j \neq \mathbf{k}}} Z_j \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int dp_{b\mathbf{k}} dp_{b\mathbf{k}'} (q_{\mathbf{k}}(t))_{ba} |_{p_{b\mathbf{k}} = p_{a\mathbf{k}}} (q_{\mathbf{k}'}(t'))_{ba} |_{p_{b\mathbf{k}'} = p_{a\mathbf{k}'}} \prod_{\substack{j \in \mathcal{L} \\ j \neq \mathbf{k}, \mathbf{k}'}} Z_j, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

con

$$Z_j = \int dp_{bj} k_j(b; a)_{p_{bj} = p_{aj}}. \quad (\text{A.14})$$

Análogamente, es conveniente expresar la amplitud de transición del campo de la siguiente forma

$$\int d\pi_b \langle \pi_b, t_b | \pi_a, t_a \rangle_{\pi_b = \pi_a} = \begin{cases} Z_{\mathbf{k}} \prod_{\substack{j \in \mathcal{L} \\ j \neq \mathbf{k}}} Z_j, \\ Z_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}'} \prod_{\substack{j \in \mathcal{L} \\ j \neq \mathbf{k}, \mathbf{k}'}} Z_j, \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

donde empleamos (A.14).

Así, si dividimos la ecuación (A.13) por (A.15), tal que el primer término de (A.13) lo dividimos por la primera ecuación de (A.15), y el segundo término de (A.13) por la segunda ecuación de (A.15), obtenemos

$$\begin{aligned} & \frac{\int d\pi_b \langle \pi_b, t_b | \phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}', t') | \pi_a, t_a \rangle_{\pi_b = \pi_a}}{\int d\pi_b \langle \pi_b, t_b | \pi_a, t_a \rangle_{\pi_b = \pi_a}} \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} = \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \frac{\int dp_{b\mathbf{k}} (q_{\mathbf{k}}(t) q_{\mathbf{k}}(t'))_{ba} |_{p_{b\mathbf{k}} = p_{a\mathbf{k}}}}{Z_{\mathbf{k}}} \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\int dp_{b\mathbf{k}} dp_{b\mathbf{k}'} (q_{\mathbf{k}}(t))_{ba} |_{p_{b\mathbf{k}} = p_{a\mathbf{k}}} (q_{\mathbf{k}'}(t'))_{ba} |_{p_{b\mathbf{k}'} = p_{a\mathbf{k}'}}}{Z_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}'}} , \end{aligned}$$

donde fueron simplificados los factores $\prod_{\substack{j \in \mathcal{L} \\ j \neq \mathbf{k}}} Z_j$ y $\prod_{\substack{j \in \mathcal{L} \\ j \neq \mathbf{k}, \mathbf{k}'}} Z_j$ en el primer y segundo término, respectivamente. Si llevamos a cabo una rotación de Wick $\tau = it$ y tomamos los límites $\tau_b(\tau_a) \rightarrow \infty(-\infty)$, la expresión anterior se puede escribir en términos de las funciones de uno y de dos puntos del modo $q_{\mathbf{k}}$

$$\begin{aligned} & \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{\int d\pi_b \langle \pi_b, -i\tau_b | \phi(\mathbf{x}, -i\tau) \phi(\mathbf{x}', -i\tau') | \pi_a, -i\tau_a \rangle_{\pi_b = \pi_a}}{\int d\pi_b \langle \pi_b, -i\tau_b | \pi_a, -i\tau_a \rangle_{\pi_b = \pi_a}} \\ &= \frac{1}{V} \left\{ \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} = \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}} D_{\mathbf{k}}(-i\tau, -i\tau') + \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{L} \\ \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} D_{\mathbf{k}}(-i\tau) D_{\mathbf{k}'}(-i\tau') \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

donde

$$\begin{aligned}
 D_{\mathbf{k}}(-i\tau) &= \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{\int dp_{b\mathbf{k}} \langle p_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{\mathbf{k}}(-i\tau) | p_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{p_{b\mathbf{k}}=p_{a\mathbf{k}}}}{\int dp_{b\mathbf{k}} \langle p_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | p_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{p_{b\mathbf{k}}=p_{a\mathbf{k}}}}, \\
 D_{\mathbf{k}}(-i\tau, -i\tau') &= \lim_{\substack{\tau_b \rightarrow \infty \\ \tau_a \rightarrow -\infty}} \frac{\int dp_{b\mathbf{k}} \langle p_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | q_{\mathbf{k}}(-i\tau) q_{\mathbf{k}}(-i\tau') | p_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{p_{b\mathbf{k}}=p_{a\mathbf{k}}}}{\int dp_{b\mathbf{k}} \langle p_{b\mathbf{k}}, -i\tau_b | p_{a\mathbf{k}}, -i\tau_a \rangle |_{p_{b\mathbf{k}}=p_{a\mathbf{k}}}},
 \end{aligned}$$

con $\tau_a < \tau' < \tau < \tau_b$.

Por otra parte, puesto que estamos trabajando en el esquema de Heisenberg podemos volver a considerar las identidades (A.10). De esta forma, si nuevamente desarrollamos las sumas en (A.16) teniendo en cuenta que $\mathcal{L} = \mathcal{L}^+ \cup \mathcal{L}^- \cup \{\mathbf{k} = \mathbf{0}\}$, empleamos los cambios (A.11) y (A.12), y utilizamos las identidades (A.10), hallaremos (2.27), con $D_{\mathbf{k}}(t)$ y $D_{\mathbf{k}}(t, t')$ dadas por las ecuaciones (2.56) y (2.57), respectivamente.

Apéndice B

Teoría de perturbaciones

En este apéndice discutimos de forma general la teoría de perturbaciones, la cual fue implementada en el capítulo 3 para el OAP. Estudiaremos tanto el caso no degenerado como el caso degenerado. El siguiente análisis está basado en [46, 52, 57]

B.1. Teoría de perturbaciones: preliminares.

La idea es resolver la ecuación de valores propios del hamiltoniano:

$$\widehat{H}\varphi_m = E_m\varphi_m, \quad (\text{B.1})$$

donde el hamiltoniano \widehat{H} está definido como la suma de dos términos $\widehat{H}_0 + \alpha\widehat{W}$. El término \widehat{H}_0 representa la parte de \widehat{H} cuya ecuación de valores propios ha sido resuelta

$$\widehat{H}_0\varphi_i^{(0)} = \mathcal{E}_i^{(0)}\varphi_i^{(0)}.$$

Mientras que $\alpha\widehat{W}$ es conocida como la perturbación, siendo α un parámetro real que cumple la condición $0 \leq \alpha \leq 1$.

Para resolver la ecuación de valores propios (B.1), se proponen al estado φ_m y al nivel de energía E_m como desarrollos de potencias de α

$$\varphi_m = \varphi_m^{(0)} + \alpha\varphi_m^{(1)} + \alpha^2\varphi_m^{(2)} + \mathcal{O}(\alpha^3), \quad (\text{B.2})$$

$$E_m = \mathcal{E}_m^{(0)} + \alpha\mathcal{E}_m^{(1)} + \alpha^2\mathcal{E}_m^{(2)} + \mathcal{O}(\alpha^3). \quad (\text{B.3})$$

Así, si sustituimos los desarrollos perturbativos hasta segundo orden en α , de φ_m (B.2) y E_m (B.3), en la ecuación de valores propios de \widehat{H} (B.1), encontramos

$$\left(\widehat{H}_0 + \alpha\widehat{W}\right) \left(\varphi_m^{(0)} + \alpha\varphi_m^{(1)} + \alpha^2\varphi_m^{(2)}\right) = \left(\mathcal{E}_m^{(0)} + \alpha\mathcal{E}_m^{(1)} + \alpha^2\mathcal{E}_m^{(2)}\right) \left(\varphi_m^{(0)} + \alpha\varphi_m^{(1)} + \alpha^2\varphi_m^{(2)}\right).$$

Si igualamos las potencias de α obtenemos las siguientes tres ecuaciones

$$\alpha^0: \quad \widehat{H}_0\varphi_m^{(0)} = \mathcal{E}_m^{(0)}\varphi_m^{(0)} \quad (\text{B.4})$$

$$\alpha: \quad \widehat{H}_0\varphi_m^{(1)} + \widehat{W}\varphi_m^{(0)} = \mathcal{E}_m^{(0)}\varphi_m^{(1)} + \mathcal{E}_m^{(1)}\varphi_m^{(0)} \quad (\text{B.5})$$

$$\alpha^2: \quad \widehat{H}_0\varphi_m^{(2)} + \widehat{W}\varphi_m^{(1)} = \mathcal{E}_m^{(0)}\varphi_m^{(2)} + \mathcal{E}_m^{(1)}\varphi_m^{(1)} + \mathcal{E}_m^{(2)}\varphi_m^{(0)} \quad (\text{B.6})$$

Ahora, expresamos la corrección a primer orden del estado, $\varphi_m^{(1)}$, como un desarrollo lineal de los estados propios $\varphi_i^{(0)}$

$$\varphi_m^{(1)} = \sum_{n \neq m} a_n^{(1)} \varphi_n^{(0)} + a_m^{(1)} \varphi_m^{(0)}, \quad (\text{B.7})$$

por lo que, la ecuación a primer orden en α , ecuación (B.5), sustituyendo (B.7) queda como

$$\widehat{W} \varphi_m^{(0)} = \sum_{n \neq m} a_n^{(1)} \varphi_n^{(0)} (\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}) + \mathcal{E}_m^{(1)} \varphi_m^{(0)}. \quad (\text{B.8})$$

De manera semejante, proponemos que la corrección a segundo orden del estado, $\varphi_m^{(2)}$, es expresada en la base del problema soluble $\varphi_i^{(0)}$

$$\varphi_m^{(2)} = \sum_{n \neq m} a_n^{(2)} \varphi_n^{(0)} + a_m^{(2)} \varphi_m^{(0)}. \quad (\text{B.9})$$

Luego, si sustituimos (B.7) y (B.9) en la ecuación correspondiente a α^2 , ecuación (B.6), obtenemos

$$\begin{aligned} \sum_{n \neq m} a_n^{(1)} \widehat{W} \varphi_n^{(0)} + a_m^{(1)} \widehat{W} \varphi_m^{(0)} &= \sum_{n \neq m} a_n^{(2)} \varphi_n^{(0)} (\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}) + \mathcal{E}_m^{(1)} \sum_{n \neq m} a_n^{(1)} \varphi_n^{(0)} \\ &\quad + \mathcal{E}_m^{(1)} a_m^{(1)} \varphi_m^{(0)} + \mathcal{E}_m^{(2)} \varphi_m^{(0)}. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Hasta aquí no hemos dicho si el estado $\varphi_m^{(0)}$ es degenerado o no, es decir, las ecuaciones (B.8) y (B.10) pueden ser consideradas para ambos casos, pero debemos tener en cuenta que en el caso degenerado, $\varphi_m^{(0)}$ representa una combinación lineal de estados que pertenecen al subespacio degenerado \mathcal{D} . Sin embargo, para encontrar específicamente las correcciones al estado φ_m y la energía E_m , sí es necesario saber si $\varphi_m^{(0)}$ es degenerado o no, pues el análisis depende de esta propiedad, por lo que discutiremos cada caso por separado en las siguientes secciones. En particular, el análisis que haremos en el caso degenerado será el apropiado para el OAP.

B.2. Caso no degenerado

En esta sección supondremos que el estado $\varphi_m^{(0)}$ no presenta degeneración. Para calcular la corrección a primer orden en la energía y en el estado proyectamos la ecuación (B.8) en $\varphi_k^{(0)}$, es decir, multiplicamos por $(\varphi_k^{(0)})^*$ e integramos, así hallamos

$$\int d\tau (\varphi_k^{(0)})^* \widehat{W} \varphi_m^{(0)} := \widehat{W}_{km} = \sum_{n \neq m} a_n^{(1)} \delta_{k,n} (\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}) + \mathcal{E}_m^{(1)} \delta_{k,m}, \quad (\text{B.11})$$

aquí hemos usado el hecho de que los estados $\varphi_i^{(0)}$ forman una base ortonormal y τ denota una variable de integración. La anterior ecuación puede ser evaluada de dos maneras dependiendo del valor de k : $k = m$ y $k \neq m$. Si consideramos $k = m$ en la ecuación (B.11), hallamos la primera corrección a la energía

$$\mathcal{E}_m^{(1)} = \widehat{W}_{mm}. \quad (\text{B.12})$$

Si ahora tomamos $k \neq m$, encontramos la magnitud de la proyección de $\varphi_m^{(1)}$ sobre los estados propios $\varphi_n^{(0)}$, ecuación (B.7):

$$a_k^{(1)} = \frac{\widehat{W}_{km}}{\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}}, \quad \text{con } k \neq m. \quad (\text{B.13})$$

Las correcciones a segundo orden las obtenemos de la ecuación (B.10), proyectamos esta ecuación en $\varphi_k^{(0)}$

$$\begin{aligned} \sum_{n \neq m} a_n^{(1)} \widehat{W}_{kn} + a_m^{(1)} \widehat{W}_{km} &= \sum_{n \neq m} a_n^{(2)} \delta_{k,n} (\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}) + \mathcal{E}_m^{(1)} \sum_{n \neq m} a_n^{(1)} \delta_{k,n} \\ &+ \mathcal{E}_m^{(1)} a_m^{(1)} \delta_{k,m} + \mathcal{E}_m^{(2)} \delta_{k,m}. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Si tomamos $k = m$ en la ecuación (B.14), obtenemos la corrección a segundo orden de la energía

$$\begin{aligned} \sum_{n \neq m} a_n^{(1)} \widehat{W}_{mn} + a_m^{(1)} \widehat{W}_{mm} &= \mathcal{E}_m^{(1)} a_m^{(1)} + \mathcal{E}_m^{(2)} \\ \Rightarrow \mathcal{E}_m^{(2)} &= \sum_{n \neq m} \frac{|\widehat{W}_{nm}|^2}{\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}}, \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

donde sustituimos las expresiones de $\mathcal{E}_m^{(1)}$ y $a_n^{(1)}$ dadas en las ecuaciones (B.12) y (B.13), respectivamente. Si ahora consideramos $k \neq m$ en la ecuación (B.14), esta resulta

$$\sum_{n \neq m} a_n^{(1)} \widehat{W}_{kn} + a_m^{(1)} \widehat{W}_{km} = a_k^{(2)} (\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) + \mathcal{E}_m^{(1)} a_k^{(1)},$$

empleando la ecuación (B.13) tenemos

$$a_k^{(2)} = \sum_{n \neq m} \frac{\widehat{W}_{nm} \widehat{W}_{kn}}{(\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}) (\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)})} - \frac{\widehat{W}_{km} \mathcal{E}_m^{(1)}}{(\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)})^2} + \frac{\widehat{W}_{km} a_m^{(1)}}{(\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)})}, \quad k \neq m, \quad (\text{B.16})$$

que es la magnitud de la proyección de $\varphi_m^{(2)}$ en los estados propios $\varphi_n^{(0)}$, ecuación (B.9).

Hasta aquí, no hemos mencionado los coeficientes $a_m^{(1)}$ y $a_m^{(2)}$, una forma de determinar estos coeficientes es por medio de la normalización del estado φ_m [57]

$$\int d\tau \varphi_m^* \varphi_m = 1.$$

Si sustituimos el desarrollo perturbativo de φ_m , hasta segundo orden, ecuación (B.2), obtenemos un desarrollo en potencias de α para la norma de φ_m , que hasta segundo orden produce tres ecuaciones: a orden cero, α^0 :

$$\int d\tau (\varphi_m^{(0)})^* \varphi_m^{(0)} = 1.$$

A primer orden, α :

$$\int d\tau \left[\left(\varphi_m^{(0)} \right)^* \varphi_m^{(1)} + \left(\varphi_m^{(1)} \right)^* \varphi_m^{(0)} \right] = a_m^{(1)} + \left(a_m^{(1)} \right)^* = 0.$$

Y a segundo orden, α^2 :

$$\int d\tau \left[\left(\varphi_m^{(0)} \right)^* \varphi_m^{(2)} + \left(\varphi_m^{(2)} \right)^* \varphi_m^{(0)} + \left| \varphi_m^{(1)} \right|^2 \right] = a_m^{(2)} + \left(a_m^{(2)} \right)^* + \sum_n \left| a_n^{(1)} \right|^2 = 0.$$

Como podemos ver, estas ecuaciones sólo determinan la parte real de $a_m^{(1)}$ y $a_m^{(2)}$, sin embargo, se puede elegir que las partes imaginarias sean nulas [57]: $Im\{a_m^{(1)}\} = 0$ y $Im\{a_m^{(2)}\} = 0$. Por consiguiente, $a_m^{(1)}$ y $a_m^{(2)}$ serán

$$a_m^{(1)} = 0 \quad y \quad a_m^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \left| a_n^{(1)} \right|^2. \quad (\text{B.17})$$

Entonces, mediante las ecuaciones (B.12), (B.13), (B.15), (B.16) y (B.17), el nivel de energía E_m (B.3) y el estado normalizado φ_m (B.2) a segundo orden son

$$E_m = \mathcal{E}_m^{(0)} + \alpha \widehat{W}_{mm} + \alpha^2 \sum_{n \neq m} \frac{\left| \widehat{W}_{nm} \right|^2}{\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}}$$

y

$$\begin{aligned} \varphi_m = & \varphi_m^{(0)} + \alpha \sum_{n \neq m} \frac{\widehat{W}_{nm} \varphi_n^{(0)}}{\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}} + \alpha^2 \sum_{n \neq m} \sum_{k \neq m} \frac{\widehat{W}_{km} \widehat{W}_{nk} \varphi_n^{(0)}}{\left(\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)} \right) \left(\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)} \right)} \\ & - \alpha^2 \sum_{n \neq m} \frac{\widehat{W}_{nm} \mathcal{E}_m^{(1)} \varphi_n^{(0)}}{\left(\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)} \right)^2} - \frac{\alpha^2}{2} \sum_{n \neq m} \frac{\left| \widehat{W}_{nm} \right|^2 \varphi_m^{(0)}}{\left(\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)} \right)^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Con esto finalizamos el análisis del caso no degenerado, en la siguiente sección nos enfocamos en el caso degenerado.

B.3. Caso degenerado apropiado para oscilador armónico poli-mérico

En esta sección estudiaremos el caso cuando el nivel de energía presenta doble degeneración. Calcularemos la corrección a primer orden de la energía $\mathcal{E}_m^{(1)}$, y si la degeneración es removida a primer orden, también determinaremos la correspondiente corrección al estado: $\psi_m^{(1)}$. Sin embargo, veremos que si la degeneración no es removida a primer orden no podemos determinar por completo $\psi_m^{(1)}$. Entonces, procederemos a calcular la corrección a segundo orden en la energía $\mathcal{E}_m^{(2)}$, así, si la degeneración es removida a segundo orden seremos capaces de determinar $\psi_m^{(1)}$.

Por otra parte, notemos el cambio en la notación en la primera corrección del estado: $\varphi_m^{(1)} \rightarrow \psi_m^{(1)}$. Esto es causado por el estándar cambio de base en el subespacio degenerado D , el cual nos permite diagonalizar la perturbación \widehat{W} [46, 57], por consiguiente, en esta sección los índices i, j, n, s y p denotarán la base original y los índices k, l, r y v la base donde \widehat{W} es diagonal en el subespacio degenerado \mathcal{D} .

B.3.1. Degeneración removida a primer orden

Nos enfocaremos en un nivel de energía con doble degeneración y en el cual la degeneración se remueve con la corrección a primer orden. Debido a que el sistema presenta degeneración existe una infinidad de estados con el mismo valor propio, por ejemplo: si $\widehat{H}_0\varphi_1^{(0)} = \mathcal{E}_1^{(0)}\varphi_1^{(0)}$ y $\widehat{H}_0\varphi_2^{(0)} = \mathcal{E}_1^{(0)}\varphi_2^{(0)}$, entonces $\widehat{H}_0\left(a_1\varphi_1^{(0)} + a_2\varphi_2^{(0)}\right) = \mathcal{E}_1^{(0)}\left(a_1\varphi_1^{(0)} + a_2\varphi_2^{(0)}\right)$. Por lo tanto, el orden cero del estado φ_1 no es único. No obstante, utilizaremos esta libertad en la base del subespacio degenerado \mathcal{D} para diagonalizar la perturbación. Así, reescribiremos la ecuación de valores propios a primer orden (B.5)

$$\widehat{H}\psi_k^{(1)} + \widehat{W}\psi_k^{(0)} = \mathcal{E}_k^{(0)}\psi_k^{(1)} + \mathcal{E}_k^{(1)}\psi_k^{(0)}, \quad (\text{B.19})$$

donde $\psi_k^{(0)}$ es una combinación lineal de los estados propios, $\varphi_j^{(0)}$, definidos en el subespacio degenerado \mathcal{D} :

$$\psi_k^{(0)} = \sum_{j \in \mathcal{D}} a_{kj}^{(0)} \varphi_j^{(0)}, \quad (\text{B.20})$$

con $\varphi_j^{(0)} \in \mathcal{D}$.

La corrección a primer orden del estado $\psi_k^{(1)}$ es propuesta como un desarrollo lineal en la base a orden cero, este desarrollo consistirá de los estados $\varphi_n^{(0)}$, para $n \neq k$, así como $\psi_l^{(0)}$, con $\psi_l^{(0)} \in \mathcal{D}$ [46, 57], entonces

$$\psi_k^{(1)} = \sum_{n \notin \mathcal{D}} a_{kn}^{(1)} \varphi_n^{(0)} + \sum_{l \in \mathcal{D}} a_{kl}^{(1)} \psi_l^{(0)}. \quad (\text{B.21})$$

De esta forma, considerando (B.21), la ecuación de valores propios a primer orden (B.19) es

$$\sum_{n \notin \mathcal{D}} a_{kn}^{(1)} \varphi_n^{(0)} (\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) + \sum_{l \in \mathcal{D}} a_{kl}^{(1)} \psi_l^{(0)} (\mathcal{E}_l^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) + \widehat{W}\psi_k^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(1)}\psi_k^{(0)} = 0,$$

como los estados $\psi_k^{(0)}, \psi_l^{(0)} \in \mathcal{D}$, entonces $\mathcal{E}_k^{(0)} = \mathcal{E}_l^{(0)}$, luego

$$\sum_{n \notin \mathcal{D}} a_{kn}^{(1)} \varphi_n^{(0)} (\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) + \widehat{W}\psi_k^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(1)}\psi_k^{(0)} = 0. \quad (\text{B.22})$$

Proyectando esta ecuación en $\varphi_s^{(0)}$ y considerando la ecuación (B.20) obtenemos

$$\sum_{n \notin \mathcal{D}} a_{kn}^{(1)} (\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) \delta_{s,n} + \sum_{j \in \mathcal{D}} a_{kj}^{(0)} \widehat{W}_{sj} - \mathcal{E}_k^{(1)} \sum_{j \in \mathcal{D}} a_{kj}^{(0)} \delta_{j,s} = 0. \quad (\text{B.23})$$

Si $\varphi_s^{(0)} = \varphi_i^{(0)} \in \mathcal{D}$ hallamos

$$\sum_{j \in \mathcal{D}} a_{kj}^{(0)} \left[\widehat{W}_{ij} - \mathcal{E}_k^{(1)} \delta_{j,i} \right] = 0. \quad (\text{B.24})$$

Si resolvemos la ecuación de valores propios para \widehat{W}_{ji} , además de obtener las correcciones a primer orden en la energía $\mathcal{E}_k^{(1)}$, encontramos la base a orden cero que diagonaliza \widehat{W} en el subespacio degenerado \mathcal{D} , esto mediante los coeficientes $a_{kj}^{(0)}$.

Ahora, si $\varphi_s^{(0)} \notin D$ la ecuación (B.23) es

$$\begin{aligned} a_{ks}^{(1)}(\mathcal{E}_s^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) + \widehat{W}_{sk} &= 0 \\ \Rightarrow a_{ks}^{(1)} &= \frac{\widehat{W}_{sk}}{\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_s^{(0)}}, \quad \varphi_s^{(0)} \notin D, \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

donde volvimos a tener en cuenta la relación (B.20).

Aún debemos determinar $a_{kl}^{(1)}$ en la ecuación (B.21) [46]. Para esto utilizamos la ecuación de valores propios a segundo orden, ecuación (B.6), reescrita como

$$\widehat{H}_0 \psi_k^{(2)} + \widehat{W} \psi_k^{(1)} = \mathcal{E}_k^{(0)} \psi_k^{(2)} + \mathcal{E}_k^{(1)} \psi_k^{(1)} + \mathcal{E}_k^{(2)} \psi_k^{(0)}. \quad (\text{B.26})$$

Como hicimos con $\psi_k^{(1)}$, proponemos un desarrollo de $\psi_k^{(2)}$ en la base a orden cero

$$\psi_k^{(2)} = \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(2)} \varphi_n^{(0)} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(2)} \psi_l^{(0)}. \quad (\text{B.27})$$

Así, combinando (B.26), (B.27) y (B.21), hallamos

$$\begin{aligned} \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(2)} \varphi_n^{(0)} (\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(2)} \psi_l^{(0)} (\mathcal{E}_l^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) - \mathcal{E}_k^{(2)} \psi_k^{(0)} \\ + \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} (\widehat{W} - \mathcal{E}_k^{(1)}) \varphi_n^{(0)} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(1)} (\widehat{W} - \mathcal{E}_k^{(1)}) \psi_l^{(0)} = 0. \end{aligned}$$

De nuevo, como los estados $\psi_k^{(0)}, \psi_l^{(0)} \in \mathcal{D}$, entonces $\mathcal{E}_k^{(0)} = \mathcal{E}_l^{(0)}$, luego

$$\sum_{n \notin D} a_{kn}^{(2)} \varphi_n^{(0)} (\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) + \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} (\widehat{W} - \mathcal{E}_k^{(1)}) \varphi_n^{(0)} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(1)} (\widehat{W} - \mathcal{E}_k^{(1)}) \psi_l^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(2)} \psi_k^{(0)} = 0. \quad (\text{B.28})$$

Proyectando en $\psi_v^{(0)}$, con $\psi_v^{(0)} \in \mathcal{D}$, hallamos

$$\sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{vn} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(1)} (\widehat{W}_{vl} - \mathcal{E}_k^{(1)} \delta_{v,l}) - \mathcal{E}_k^{(2)} \delta_{k,v} = 0. \quad (\text{B.29})$$

Si consideramos $\psi_v^{(0)} = \psi_k^{(0)}$

$$\sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{kn} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(1)} \widehat{W}_{kl} - a_{kk}^{(1)} \mathcal{E}_k^{(1)} - \mathcal{E}_k^{(2)} = 0.$$

Dado que la matriz \widehat{W}_{kl} es diagonal en la base $\psi_l^{(0)}$, y consideramos que se presenta una degeneración doble, esto es, l toma los valores r, k , entonces tenemos: $\widehat{W}_{kk} = \mathcal{E}_k^{(1)}$ y $\widehat{W}_{kr} = 0$, luego

$$\begin{aligned} \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{kn} + a_{kk}^{(1)} \mathcal{E}_k^{(1)} - a_{kk}^{(1)} \mathcal{E}_k^{(1)} - \mathcal{E}_k^{(2)} &= 0 \\ \Rightarrow \mathcal{E}_k^{(2)} &= \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{kn} = \sum_{n \notin D} \frac{\widehat{W}_{nk} \widehat{W}_{kn}}{\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}}. \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Si ahora consideramos $\psi_v^{(0)} = \psi_r^{(0)} \neq \psi_k^{(0)}$, la ecuación (B.29) es

$$\begin{aligned} \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{rn} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(1)} \left(\widehat{W}_{rl} - \mathcal{E}_k^{(1)} \delta_{r,l} \right) &= 0 \\ \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{rn} + a_{kk}^{(1)} \left(\widehat{W}_{rk} - \mathcal{E}_k^{(1)} \delta_{r,k} \right) + a_{kr}^{(1)} \left(\widehat{W}_{rr} - \mathcal{E}_k^{(1)} \delta_{r,r} \right) &= 0, \end{aligned}$$

donde nuevamente tuvimos en cuenta que el nivel de energía es doble degenerado, entonces $l = k, r$. Ahora, si la degeneración se removió: $\mathcal{E}_k^{(1)} = \widehat{W}_{kk} \neq \widehat{W}_{rr} = \mathcal{E}_r^{(1)}$, por lo tanto, encontramos [46]

$$\begin{aligned} \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{rn} + a_{kr}^{(1)} \left(\mathcal{E}_r^{(1)} - \mathcal{E}_k^{(1)} \right) &= 0, \\ \Rightarrow a_{kr}^{(1)} &= \frac{1}{\mathcal{E}_k^{(1)} - \mathcal{E}_r^{(1)}} \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{rn} \\ &= \frac{1}{\mathcal{E}_k^{(1)} - \mathcal{E}_r^{(1)}} \sum_{n \notin D} \frac{\widehat{W}_{nk} \widehat{W}_{rn}}{\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}}, \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

donde en la última línea se sustituyó (B.25).

De los coeficientes $a_{kl}^{(1)}$ en (B.21), sólo basta por determinar $a_{kk}^{(1)}$, como hicimos en el caso no degenerado fijamos este coeficiente como cero: $a_{kk}^{(1)} = 0$. De esta forma, la corrección a primer orden, $\psi_k^{(1)}$ definida en (B.21), empleando (B.25) y (B.31) será

$$\psi_k^{(1)} = \sum_{n \notin D} \frac{\widehat{W}_{nk} \varphi_n^{(0)}}{\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}} + \frac{1}{\mathcal{E}_k^{(1)} - \mathcal{E}_r^{(1)}} \sum_{n \notin D} \frac{\widehat{W}_{nk} \widehat{W}_{rn} \psi_r^{(0)}}{\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}}. \quad (\text{B.32})$$

Algo que debemos remarcar, es el hecho de que esta ecuación es válida cuando la degeneración en el nivel de energía $\mathcal{E}_k^{(0)}$ ha sido removida a primer orden, es decir, $\mathcal{E}_k^{(1)} \neq \mathcal{E}_r^{(1)}$. Por lo que, es posible determinar la magnitud de la proyección de $\psi_k^{(1)}$ en el subespacio \mathcal{D} , el coeficiente $a_{kr}^{(1)}$ (B.31). En la siguiente sección mostraremos como calcular $\psi_k^{(1)}$ cuando la degeneración en la energía no se remueve a primer orden, esto es, $\mathcal{E}_k^{(1)} = \mathcal{E}_r^{(1)}$.

B.3.2. Degeneración removida a segundo orden

En la anterior subsección estudiamos el caso en el que la degeneración se remueve a primer orden, empero, algunas veces no es así, como vemos en el siguiente caso: Sea la ecuación característica (B.24), si el nivel de energía tiene una degeneración doble, es decir, $j = i, p$, se puede tener que $\widehat{W}_{ii} = \widehat{W}_{pp}$ y $\widehat{W}_{ip} = 0$, entonces $\mathcal{E}_k^{(1)} = \mathcal{E}_r^{(1)} = \widehat{W}_{ii}$, lo cual no remueve la degeneración de los estados $\varphi_i^{(0)}, \varphi_p^{(0)} \in \mathcal{D}$. Por lo tanto, como ya mencionamos, si $\mathcal{E}_k^{(1)} = \mathcal{E}_r^{(1)}$, no podemos determinar $a_{kr}^{(1)}$, ecuación (B.31), por lo que, debemos calcular la nueva forma de este coeficiente. En este apartado estudiamos el caso en que la degeneración en la energía se rompe hasta la corrección a segundo orden.

Entonces, primero notemos que los coeficientes $a_{kn}^{(1)}$ de la corrección a primer orden, ecuación (B.21), permanecen igual, dados por la ecuación (B.25), sin embargo, debemos tener en

cuenta que aún tenemos la libertad de escoger la combinación lineal que sea más adecuada como orden cero: $\psi_k^{(0)} = \sum_{j \in D} a_{kj}^{(0)} \varphi_j^{(0)}$, por lo que, el coeficiente $a_{kn}^{(1)}$ (B.25), en general se puede escribir como

$$a_{kn}^{(1)} = \frac{\sum_{j \in D} a_{kj}^{(0)} \widehat{W}_{nj}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})}, \quad \varphi_n^{(0)} \notin D. \quad (\text{B.33})$$

Ahora, consideraremos la ecuación de valores propios a segundo orden, ecuación (B.28), en la cual ya han sido evaluadas las ecuaciones (B.21) y (B.27). Si proyectamos (B.28) en $\varphi_s^{(0)}$, obtenemos

$$\sum_{n \notin D} a_{kn}^{(2)} (\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) \delta_{s,n} + \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} (\widehat{W}_{sn} - \mathcal{E}_k^{(1)} \delta_{s,n}) + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(1)} (\widehat{W}_{sl} - \mathcal{E}_k^{(1)} \delta_{s,l}) - \mathcal{E}_k^{(2)} \delta_{k,s} = 0. \quad (\text{B.34})$$

Si hacemos $\varphi_s^{(0)} = \varphi_i^{(0)} \in D$, la anterior ecuación es

$$\sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{in} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(1)} (\widehat{W}_{il} - \mathcal{E}_k^{(1)} \delta_{i,l}) - \mathcal{E}_k^{(2)} \delta_{k,i} = 0.$$

Si tenemos en cuenta que $\psi_k^{(0)}$ es una combinación lineal de la forma de (B.20), siendo $j = i, p$, así como $\widehat{W}_{ii} = \mathcal{E}_k^{(0)}$ y $\widehat{W}_{ip} = 0$, hallamos

$$\begin{aligned} \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{in} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(1)} \left(\sum_{j \in D} a_{lj}^{(0)} \widehat{W}_{ij} - \mathcal{E}_k^{(1)} \sum_{j \in D} a_{lj}^{(0)} \delta_{i,j} \right) - \mathcal{E}_k^{(2)} \sum_{j \in D} a_{kj}^{(0)} \delta_{i,j} &= 0 \\ \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{in} - \mathcal{E}_k^{(2)} \sum_{j \in D} a_{kj}^{(0)} \delta_{i,j} &= 0 \\ \sum_{j \in D} a_{kj}^{(0)} \left[\sum_{n \notin D} \frac{\widehat{W}_{nj} \widehat{W}_{in}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} - \mathcal{E}_k^{(2)} \delta_{i,j} \right] &= 0, \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

donde en la última línea hemos sustituido la ecuación (B.33). La solución a esta ecuación de valores propios nos da las correcciones de la energía a segundo orden $\mathcal{E}_k^{(2)}$ y $\mathcal{E}_r^{(2)}$, y también los vectores propios a orden cero: $a_{kj}^{(0)}$ [52, 57].

Si ahora tenemos $\varphi_s^{(0)} \notin D$ en (B.34), encontramos

$$\begin{aligned} a_{ks}^{(2)} (\mathcal{E}_s^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) + \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{sn} - \mathcal{E}_k^{(1)} a_{ks}^{(1)} + a_{kk}^{(1)} \widehat{W}_{sk} + a_{kr}^{(1)} \widehat{W}_{sr} &= 0 \\ \Rightarrow a_{ks}^{(2)} = \frac{1}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_s^{(0)})} \left\{ \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{sn} - \mathcal{E}_k^{(1)} a_{ks}^{(1)} + a_{kk}^{(1)} \widehat{W}_{sk} + a_{kr}^{(1)} \widehat{W}_{sr} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

en la primera línea hemos considerado que el sistema presenta una degeneración doble, por lo que, l toma los valores k, r . Necesitamos introducir la ecuación de valores propios a tercer orden

$$\alpha^3 : \quad \widehat{H}_0 \psi_k^{(3)} + \widehat{W} \psi_k^{(2)} = \mathcal{E}_k^{(0)} \psi_k^{(3)} + \mathcal{E}_k^{(1)} \psi_k^{(2)} + \mathcal{E}_k^{(2)} \psi_k^{(1)} + \mathcal{E}_k^{(3)} \psi_k^{(0)}. \quad (\text{B.37})$$

Asimismo, proponemos que la corrección a tercer orden sea

$$\psi_k^{(3)} = \sum_{l \notin D} a_{kl}^{(3)} \varphi_l^{(0)} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(3)} \psi_l^{(0)}. \quad (\text{B.38})$$

De esta forma, si empleamos (B.21), (B.27) y (B.38), la ecuación de valores propios a tercer orden (B.37) llega a ser

$$\begin{aligned} & \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(3)} (\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) \varphi_n^{(0)} + \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(2)} (\widehat{W} - \mathcal{E}_k^{(1)}) \varphi_n^{(0)} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(2)} (\widehat{W} - \mathcal{E}_k^{(1)}) \psi_l^{(0)} \\ & - \mathcal{E}_k^{(2)} \left(\sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \varphi_n^{(0)} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(1)} \psi_l^{(0)} \right) - \mathcal{E}_k^{(3)} \psi_k^{(0)} = 0. \end{aligned}$$

Proyectamos esta ecuación en $\varphi_s^{(0)}$

$$\begin{aligned} & \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(3)} (\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}) \delta_{s,n} + \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(2)} [\widehat{W}_{sn} - \mathcal{E}_k^{(1)} \delta_{s,n}] \\ & + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(2)} [\widehat{W}_{sl} - \mathcal{E}_k^{(1)} \delta_{s,l}] - \mathcal{E}_k^{(2)} \left(\sum_{n \notin D} a_{kn}^{(1)} \delta_{s,n} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(1)} \delta_{s,l} \right) - \mathcal{E}_k^{(3)} \delta_{s,k} = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

Si tomamos el caso $\varphi_s^{(0)} = \psi_k^{(0)}$ en la ecuación (B.39), entonces tenemos

$$\begin{aligned} & \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(2)} \widehat{W}_{kn} + \sum_{l \in D} a_{kl}^{(2)} [\widehat{W}_{kl} - \mathcal{E}_k^{(1)} \delta_{k,l}] - \mathcal{E}_k^{(2)} \sum_{l \in D} a_{kl}^{(1)} \delta_{k,l} - \mathcal{E}_k^{(3)} = 0 \\ & \sum_{n \notin D} a_{kn}^{(2)} \widehat{W}_{kn} - \mathcal{E}_k^{(2)} a_{kk}^{(1)} - \mathcal{E}_k^{(3)} = 0, \end{aligned} \quad (\text{B.40})$$

donde evaluamos $l = k, r$, $\widehat{W}_{kk} = \mathcal{E}_k^{(1)}$ y $\widehat{W}_{kr} = 0$. Si sustituimos $a_{kn}^{(2)}$, ecuación (B.36), y luego empleamos las ecuaciones

$$\sum_{n \notin D} \frac{\widehat{W}_{nr} \widehat{W}_{rn}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} = \mathcal{E}_r^{(2)}, \quad (\text{B.41})$$

$$\sum_{n \notin D} \frac{\widehat{W}_{nk} \widehat{W}_{rn}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} = 0, \quad (\text{B.42})$$

que son obtenidas de evaluar los estados $\psi_k^{(0)}$ y $\psi_r^{(0)}$ en (B.35), y por último empleamos (B.25) para sustituir $a_{kn}^{(1)}$, encontramos que (B.40) llega a ser

$$\mathcal{E}_k^{(3)} = \sum_{m, n \notin D} \frac{\widehat{W}_{kn} \widehat{W}_{nm} \widehat{W}_{mk}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)}) (\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} - \sum_{n \notin D} \frac{\mathcal{E}_k^{(1)} |\widehat{W}_{nk}|^2}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})^2}.$$

Por otra parte, consideremos $\varphi_s^{(0)} = \psi_r^{(0)} \in \mathcal{D}$ con $\psi_r^{(0)} \neq \psi_k^{(0)}$ en (B.39), así esta ecuación es

$$\sum_{n \notin D} a_{kn}^{(2)} \widehat{W}_{rn} + a_{kk}^{(2)} \widehat{W}_{rk} + a_{kr}^{(2)} [\widehat{W}_{rr} - \mathcal{E}_k^{(1)}] - \mathcal{E}_k^{(2)} a_{kr}^{(1)} = 0,$$

puesto que $\widehat{W}_{rr} = \mathcal{E}_k^{(1)}$ y $\widehat{W}_{rk} = 0$, esta ecuación resulta

$$\sum_{n \notin D} a_{kn}^{(2)} \widehat{W}_{rn} - \mathcal{E}_k^{(2)} a_{kr}^{(1)} = 0,$$

sustituyendo (B.36) en la anterior ecuación hallamos

$$\begin{aligned} \sum_{n \notin D} \frac{1}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} \left\{ \sum_{m \notin D} a_{km}^{(1)} \widehat{W}_{nm} - \mathcal{E}_k^{(1)} a_{kn}^{(1)} + a_{kk}^{(1)} \widehat{W}_{nk} + a_{kr}^{(1)} \widehat{W}_{nr} \right\} \widehat{W}_{rn} - \mathcal{E}_k^{(2)} a_{kr}^{(1)} = 0 \\ \sum_{n, m \notin D} \frac{a_{km}^{(1)} \widehat{W}_{nm} \widehat{W}_{rn}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} - \sum_{n \notin D} \frac{\mathcal{E}_k^{(1)} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{rn}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} \\ + \sum_{n \notin D} \frac{a_{kk}^{(1)} \widehat{W}_{nk} \widehat{W}_{rn}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} + \sum_{n \notin D} \frac{a_{kr}^{(1)} \widehat{W}_{nr} \widehat{W}_{rn}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} - \mathcal{E}_k^{(2)} a_{kr}^{(1)} = 0. \end{aligned}$$

Si evaluamos las ecuaciones (B.41) y (B.42) en la última ecuación, encontramos

$$\begin{aligned} \sum_{n, m \notin D} \frac{a_{km}^{(1)} \widehat{W}_{nm} \widehat{W}_{rn}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} - \sum_{n \notin D} \frac{\mathcal{E}_k^{(1)} a_{kn}^{(1)} \widehat{W}_{rn}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} + a_{kr}^{(1)} (\mathcal{E}_r^{(2)} - \mathcal{E}_k^{(2)}) = 0 \\ a_{kr}^{(1)} = \frac{1}{(\mathcal{E}_k^{(2)} - \mathcal{E}_r^{(2)})} \sum_{n, m \notin D} \frac{\widehat{W}_{mk} \widehat{W}_{nm} \widehat{W}_{rn}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)}) (\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} \\ - \frac{1}{(\mathcal{E}_k^{(2)} - \mathcal{E}_r^{(2)})} \sum_{n \notin D} \frac{\mathcal{E}_k^{(1)} \widehat{W}_{nk} \widehat{W}_{rn}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})^2}, \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$

donde sustituimos (B.25).

Por consiguiente, teniendo en cuenta las ecuaciones (B.25) y (B.43), así como $a_{kk}^{(1)} = 0$, la corrección a primer orden del estado $\psi_k^{(1)}$ de acuerdo a (B.21) es

$$\begin{aligned} \psi_k^{(1)} = \sum_{n \notin D} \frac{\widehat{W}_{nk} \varphi_n^{(0)}}{\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}} + \frac{1}{(\mathcal{E}_k^{(2)} - \mathcal{E}_r^{(2)})} \sum_{n, m \notin D} \frac{\widehat{W}_{mk} \widehat{W}_{nm} \widehat{W}_{rn} \psi_r^{(0)}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)}) (\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})} \\ - \frac{1}{(\mathcal{E}_k^{(2)} - \mathcal{E}_r^{(2)})} \sum_{n \notin D} \frac{\mathcal{E}_k^{(1)} \widehat{W}_{nk} \widehat{W}_{rn} \psi_r^{(0)}}{(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)})^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

Observemos que esta expresión es válida si la degeneración ya se removió a segundo orden, ya que supone $\mathcal{E}_k^{(2)} \neq \mathcal{E}_r^{(2)}$.

Apéndice C

Integrales que contienen $k^{(0)}\varphi$ y $k^{(1)}\varphi$

En este apéndice derivaremos algunas fórmulas que nos permitirán evaluar las contribuciones de los elementos de matriz $\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle$: de A_0 a A_5 , ecuaciones de (5.8) a (5.16), así como las contribuciones de los elementos de matriz $\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_s)\hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle$: de B_0 a B_5 , ecuaciones de (5.24) a (5.32).

C.1. Caso $k^{(0)}$ y $\varphi = e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \sin(nu_1 - mu_0)$

Primero, hallaremos algunas fórmulas que involucran la amplitud de transición del rotor $k^{(0)}$, ecuación (4.13), que corresponde al orden cero del OAP. Para esto, nos basamos en el hecho de que $k^{(0)}$ evoluciona a las funciones propias del rotor con paridad definida:

$$I_0 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_0 k^{(0)}(N; 0) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \cos(nu_0) = e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos(nu_N), \quad (\text{C.1})$$

$$I_1 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_0 k^{(0)}(N; 0) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \sin(nu_0) = e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin(nu_N), \quad (\text{C.2})$$

donde $n = 0, 1, \dots$, además hemos retomado la notación $k^{(0)}(N; 0) = k^{(0)}(u_N, t_N; u_0, t_0)$ y $\gamma := \frac{\hbar}{2i\omega g}$.

Del par de integrales (C.1) y (C.2) podemos obtener un par de integrales más generales que involucran $k^{(0)}$. La primera es

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(N; 1) e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \sin(nu_1 - mu_0) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(N; 1) \left(e^{-\frac{n^2 t_1}{4\gamma}} \sin nu_1 \right) \left(e^{\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \cos mu_0 \right) \\ &\quad - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(N; 1) \left(e^{-\frac{n^2 t_1}{4\gamma}} \cos nu_1 \right) \left(e^{\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \sin mu_0 \right), \\ &= \left(e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin nu_N \right) \left(e^{\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \cos mu_0 \right) - \left(e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos nu_N \right) \left(e^{\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \sin mu_0 \right) \\ &= e^{-\frac{n^2 t_{N0}}{4\gamma}} \sin(nu_N - mu_0), \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

aquí $m = 0, 1, \dots$, además utilizamos la notación $t_{sr} := t_s - t_r$. Las fórmulas (C.1) y (C.2) fueron empleadas en la segunda igualdad.

C.2. Caso $k^{(0)}$ y $\varphi = e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \cos(nu_1 - mu_0)$

De la misma forma, si aplicamos las fórmulas (C.1) y (C.2), hallamos

$$I_3 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(0)}(N; 1) e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \cos(nu_1 - mu_0) = e^{-\frac{n^2 t_{N0}}{4\gamma}} \cos(nu_N - mu_0). \quad (\text{C.4})$$

C.3. Caso $k^{(1)}$ y $\varphi = e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \sin(nu_1 - mu_0)$

Ahora encontraremos integrales donde aparece la corrección a primer orden de la amplitud de transición del OAP, $k^{(1)}$. De forma análoga a $k^{(0)}$, podemos obtener el efecto de $k^{(1)}$ sobre las funciones propias del rotor con paridad definida. Empezaremos con una función propia del tipo seno. Así, si utilizamos la forma explícita de $k^{(1)}$, ecuación (4.56), tenemos

$$I_4 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_0 k^{(1)}(N; 0) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \sin(nu_0) = I_{41} + I_{42} + I_{43} + I_{44} + I_{45}, \quad (\text{C.5})$$

con

$$I_{41} = t_{N0} \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_0 k^{(0)}(N; 0) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \sin(nu_0), \quad (\text{C.6})$$

$$I_{42} = t_{N0} e^{-\frac{t_{N0}}{4\gamma}} e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_0 \cos(u_N + u_0) \sin(nu_0), \quad (\text{C.7})$$

$$I_{43} = -F_1 \left[-\frac{t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_0 (\cos(2u_N) + \cos(2u_0)) \sin(nu_0), \quad (\text{C.8})$$

$$I_{44} = \sum_{l_0=1}^{\infty} A_{l_0} \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_0 \cos[l_0 u_N - l_2 u_0] \sin(nu_0), \quad (\text{C.9})$$

$$I_{45} = \sum_{l_0=1}^{\infty} A_{l_0} \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_0 \cos[l_2 u_N - l_0 u_0] \sin(nu_0), \quad (\text{C.10})$$

donde en I_{44} y I_{45} se sustituyó la forma explícita de $E_1(l_0, l_1, l_2)$ y $E_1(-l_2, -l_1, -l_0)$, respectivamente, ecuación (4.55), y se definió $A_{l_0} := \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \left(e^{-\frac{l_0^2 t_{N0}}{4\gamma}} - e^{-\frac{l_2^2 t_{N0}}{4\gamma}} \right) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}}$.

La primera integral I_{41} , ecuación (C.6), la realizamos mediante (C.2)

$$I_{41} = t_{N0} e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin(nu_N). \quad (\text{C.11})$$

La segunda y tercera integrales I_{42} y I_{43} , ecuaciones (C.7) y (C.8), respectivamente, resultan

$$I_{42} = -\frac{t_{N0}}{2} e^{-\frac{t_{N0} + n^2 t_0}{4\gamma}} \sin(nu_N) \delta_{n,1}, \quad (\text{C.12})$$

$$I_{43} = 0. \quad (\text{C.13})$$

La cuarta integral I_{44} , ecuación (C.9), llega a ser

$$I_{44} = \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \left(e^{-\frac{l_0^2 t_{N0}}{4\gamma}} - e^{-\frac{l_2^2 t_{N0}}{4\gamma}} \right) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \frac{1}{2} \sin[(n-2)u_N] \delta_{l_0, n-2}.$$

Para evaluar la delta de Kronecker, $\delta_{l_0, n-2}$, debemos tener en cuenta que l_0 es positivo, $l_0 > 0$, por lo que la igualdad implícita del argumento de la delta de Kronecker, $l_0 = n - 2$, implica la condición $n > 2$. De esta forma

$$I_{44} = -\frac{1}{2}F_1 \left[\frac{(n-1)t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin[(n-2)u_N] |_{n>2}, \quad (\text{C.14})$$

donde utilizamos la definición F_1 , ecuación (4.51). Por último, la quinta integral I_{45} , ecuación (C.10), será

$$\begin{aligned} I_{45} &= \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1} \right) \left(e^{-\frac{l_0^2 t_{N0}}{4\gamma}} - e^{-\frac{l_2^2 t_{N0}}{4\gamma}} \right) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \frac{1}{2} \sin((n+2)u_N) \delta_{l_0, n} \\ &= -\frac{1}{2}F_1 \left[-\frac{(n+1)t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin[(n+2)u_N] |_{n>0}. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Así, sustituyendo de I_{41} a I_{45} , ecuaciones de (C.11) a (C.15), en I_4 , ecuación (C.5), obtenemos el efecto de $k^{(1)}$ en una función propia del rotor tipo seno

$$\begin{aligned} I_4 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_0 k^{(1)}(N; 0) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \sin(nu_0) \\ &= t_{N0} e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin(nu_N) - \frac{t_{N0}}{2} e^{-\frac{t_{N0} + n^2 t_0}{4\gamma}} \sin(nu_N) \delta_{n,1} \\ &\quad - \frac{1}{2}F_1 \left[\frac{(n-1)t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin[(n-2)u_N] |_{n>2} \\ &\quad - \frac{1}{2}F_1 \left[-\frac{(n+1)t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin[(n+2)u_N] |_{n>0}. \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Ahora derivaremos el efecto de $k^{(1)}$ en una función propia del rotor tipo coseno. Entonces, empleando $k^{(1)}$, ecuación (4.56), encontramos

$$I_5 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_0 k^{(1)}(N; 0) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \cos(nu_0) = I_{51} + I_{52} + I_{53} + I_{54} + I_{55}, \quad (\text{C.17})$$

con

$$I_{51} = t_{N0} \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_0 k^{(0)}(N; 0) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \cos(nu_0), \quad (\text{C.18})$$

$$I_{52} = t_{N0} e^{-\frac{t_{N0}}{4\gamma}} e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_0 \cos(u_N + u_0) \cos(nu_0), \quad (\text{C.19})$$

$$I_{53} = -F_1 \left[-\frac{t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_0 (\cos(2u_N) + \cos(2u_0)) \cos(nu_0), \quad (\text{C.20})$$

$$I_{54} = \sum_{l_0=1}^{\infty} A_{l_0} \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_0 \cos[l_0 u_N - l_2 u_0] \cos(nu_0), \quad (\text{C.21})$$

$$I_{55} = \sum_{l_0=1}^{\infty} A_{l_0} \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_0^{2\pi} du_0 \cos[l_2 u_N - l_0 u_0] \cos(nu_0), \quad (\text{C.22})$$

donde nuevamente usamos $E_1(l_0, l_1, l_2)$ y $E_1(-l_2, -l_1, -l_0)$, ecuación (4.55), para I_{54} y I_{55} , respectivamente, así como $A_{l_0} = \left(\frac{\gamma}{l_1}\right) \left(e^{-\frac{l_0^2 t_{N0}}{4\gamma}} - e^{-\frac{l_2^2 t_{N0}}{4\gamma}}\right) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}}$.

Para la primera integral I_{51} , ecuación (C.18), usamos (C.1)

$$I_{51} = t_{N0} e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos(nu_N). \quad (\text{C.23})$$

La segunda y tercera integrales I_{52} y I_{53} , ecuaciones (C.19) y (C.20), respectivamente, son

$$I_{52} = \frac{t_{N0}}{2} e^{-\frac{t_{N0} + n^2 t_0}{4\gamma}} \cos(nu_N) \delta_{n,1}, \quad (\text{C.24})$$

$$I_{53} = -F_1 \left[-\frac{t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \left[\cos(2u_N) \delta_{n,0} + \frac{1}{2} \delta_{n,2} \right]. \quad (\text{C.25})$$

También tenemos que la cuarta integral I_{54} es

$$\begin{aligned} I_{54} &= \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1}\right) \left(e^{-\frac{l_0^2 t_{N0}}{4\gamma}} - e^{-\frac{l_2^2 t_{N0}}{4\gamma}}\right) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \frac{1}{2} \cos[(n-2)u_N] \delta_{l_0, n-2} \\ &= -\frac{1}{2} F_1 \left[\frac{(n-1)t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos[(n-2)u_N] \Big|_{n>2}, \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

aquí, como en I_{44} , ecuación (C.14), volvimos considerar $n > 2$, pues se tienen que cumplir las expresiones $l_0 = n - 2$ y $l_0 > 0$.

Por último para la quinta integral I_{55} hallamos

$$\begin{aligned} I_{55} &= \sum_{l_0=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{l_1}\right) \left(e^{-\frac{l_0^2 t_{N0}}{4\gamma}} - e^{-\frac{l_2^2 t_{N0}}{4\gamma}}\right) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \frac{1}{2} \cos[(n+2)u_N] \delta_{l_0, n} \\ &= -\frac{1}{2} F_1 \left[\frac{-(n+1)t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos[(n+2)u_N] \Big|_{n>0}. \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

De esta forma, el efecto de $k^{(1)}$ sobre una función propia del rotor tipo coseno I_5 , ecuación (C.17), resulta de sumar de I_{51} a I_{55} , ecuaciones de (C.23) a (C.27):

$$\begin{aligned} I_5 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_0 k^{(1)}(N; 0) e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \cos(nu_0) \\ &= t_{N0} e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos(nu_N) + \frac{t_{N0}}{2} e^{-\frac{t_{N0} + n^2 t_0}{4\gamma}} \cos(nu_N) \delta_{n,1} \\ &\quad - F_1 \left[-\frac{t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \left[\cos(2u_N) \delta_{n,0} + \frac{1}{2} \delta_{n,2} \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} F_1 \left[\frac{(n-1)t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos[(n-2)u_N] \Big|_{n>2} \\ &\quad - \frac{1}{2} F_1 \left[\frac{-(n+1)t_{N0}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos[(n+2)u_N] \Big|_{n>0}. \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

Podemos encontrar fórmulas más generales, similares a I_2 y I_3 , ecuaciones (C.3) y (C.4), respectivamente. Esto a través de los efectos de $k^{(1)}$ sobre las funciones propias del rotor,

ecuaciones (C.16) y (C.28). Entonces, para una función seno con doble argumento observamos lo siguiente

$$\begin{aligned}
 I_6 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(1)}(N; 1) e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \sin[nu_1 - mu_0] \\
 &= \left\{ t_{N1} e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin(nu_N) - \frac{t_{N1}}{2} e^{-\frac{t_{N1} + n^2 t_1}{4\gamma}} \sin(nu_N) \delta_{n,1} \right. \\
 &\quad - \frac{1}{2} F_1 \left[\frac{(n-1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin[(n-2)u_N] \Big|_{n>2} \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} F_1 \left[-\frac{(n+1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin[(n+2)u_N] \Big|_{n>0} \right\} e^{\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \cos mu_0 \\
 &\quad - \left\{ t_{N1} e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos(nu_N) + \frac{t_{N1}}{2} e^{-\frac{t_{N1} + n^2 t_1}{4\gamma}} \cos(nu_N) \delta_{n,1} \right. \\
 &\quad \left. - F_1 \left[-\frac{t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_1}{4\gamma}} \left[\cos(2u_N) \delta_{n,0} + \frac{1}{2} \delta_{n,2} \right] \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} F_1 \left[\frac{(n-1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos[(n-2)u_N] \Big|_{n>2} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} F_1 \left[-\frac{(n+1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos[(n+2)u_N] \Big|_{n>0} \right\} e^{\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \sin mu_0, \\
 &= t_{N1} e^{-\frac{n^2 t_{N0}}{4\gamma}} \sin[nu_N - mu_0] - \frac{t_{N1}}{2} e^{-\frac{t_{N1} + n^2 t_1}{4\gamma}} e^{\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \sin[nu_N + mu_0] \delta_{n,1} \\
 &\quad + F_1 \left[-\frac{t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \left[\cos(2u_N) \delta_{n,0} + \frac{1}{2} \delta_{n,2} \right] \sin mu_0 \\
 &\quad - \frac{1}{2} F_1 \left[\frac{(n-1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_{N0}}{4\gamma}} \sin[(n-2)u_N - mu_0] \Big|_{n>2} \\
 &\quad - \frac{1}{2} F_1 \left[-\frac{(n+1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_{N0}}{4\gamma}} \sin[(n+2)u_N - mu_0] \Big|_{n>0}. \tag{C.29}
 \end{aligned}$$

En la segunda igualdad fueron implementadas las fórmulas (C.16) y (C.28).

C.4. Caso $k^{(1)}$ y $\varphi = e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \cos(nu_1 - mu_0)$

De la misma forma, podemos deducir una fórmula para una función coseno con doble argumento

$$\begin{aligned}
 I_7 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} du_1 k^{(1)}(N; 1) e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \cos[nu_1 - mu_0] \\
 &= \left\{ t_{N1} e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos(nu_N) + \frac{t_{N1}}{2} e^{-\frac{t_{N1} + n^2 t_1}{4\gamma}} \cos(nu_N) \delta_{n,1} \right. \\
 &\quad - F_1 \left[-\frac{t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_1}{4\gamma}} \left[\cos(2u_N) \delta_{n,0} + \frac{1}{2} \delta_{n,2} \right] \\
 &\quad - \frac{1}{2} F_1 \left[\frac{(n-1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos[(n-2)u_N] \Big|_{n>2} \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} F_1 \left[-\frac{(n+1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \cos[(n+2)u_N] \Big|_{n>0} \right\} e^{\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \cos mu_0 \\
 &\quad + \left\{ t_{N1} e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin(nu_N) - \frac{t_{N1}}{2} e^{-\frac{t_{N1} + n^2 t_1}{4\gamma}} \sin(nu_N) \delta_{n,1} \right. \\
 &\quad - \frac{1}{2} F_1 \left[\frac{(n-1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin[(n-2)u_N] \Big|_{n>2} \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} F_1 \left[-\frac{(n+1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_N}{4\gamma}} \sin[(n+2)u_N] \Big|_{n>0} \right\} e^{\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \sin mu_0, \\
 &= t_{N1} e^{-\frac{n^2 t_{N0}}{4\gamma}} \cos[nu_N - mu_0] + \frac{t_{N1}}{2} e^{-\frac{t_{N1} + n^2 t_1}{4\gamma}} e^{\frac{n^2 t_0}{4\gamma}} \cos[nu_N + mu_0] \delta_{n,1} \\
 &\quad - F_1 \left[-\frac{t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_{10}}{4\gamma}} \left[\cos(2u_N) \delta_{n,0} + \frac{1}{2} \delta_{n,2} \right] \cos mu_0 \\
 &\quad - \frac{1}{2} F_1 \left[\frac{(n-1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_{N0}}{4\gamma}} \cos[(n-2)u_N - mu_0] \Big|_{n>2} \\
 &\quad - \frac{1}{2} F_1 \left[-\frac{(n+1)t_{N1}}{\gamma} \right] e^{-\frac{n^2 t_{N0}}{4\gamma}} \cos[(n+2)u_N - mu_0] \Big|_{n>0}. \tag{C.30}
 \end{aligned}$$

Las fórmulas que hemos conseguido en este apéndice, ecuaciones (C.1), (C.2), (C.3), (C.4), (C.16), (C.28), (C.29) y (C.30), son de utilidad en los cálculos de las contribuciones de $\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle$: de A_0 a A_5 , ecuaciones de (5.8) a (5.16), así como para las contribuciones de $\langle p_b, t_b | \hat{x}(t_s) \hat{x}(t_r) | p_a, t_a \rangle$: de B_0 a B_5 , ecuaciones de (5.24) a (5.32).

Bibliografía

- [1] Ernesto Flores-González and Hugo A. Morales-Técotl. Perturbative polymer quantum field theory and high energy scalar propagator. *Class. Quantum Grav.*, **36**(24), (2019).
- [2] R. M. Wald. *General Relativity*. (Chicago: University of Chicago Press, 1984).
- [3] L. H. Ryder. *Quantum Field Theory*. (Cambridge University Press, 1985).
- [4] J. Polchinski. *String Theory*, volume 1 and 2. (Cambridge University Press, 1998).
- [5] T. Thiemann. *Introduction to Modern Canonical Quantum General Relativity*. (Cambridge University Press, 2007).
- [6] C. Rovelli. *Quantum Gravity*. (Cambridge University Press, 2004).
- [7] Carlo Rovelli. Black Hole Entropy from Loop Quantum Gravity. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, (1996).
- [8] A. Ashtekar, J. Baez, A. Corichi, and K. Krasnov. Quantum Geometry and Black Hole Entropy. *Phys. Rev. Lett.*, **80**, (1998).
- [9] Martin Bojowald. Loop Quantum Cosmology. *Living Reviews in Relativity*, **11**, (2008).
- [10] Abhay Ashtekar and Parampreet Singh. Loop Quantum Cosmology: A Status Report. *Class. Quantum Grav.*, **28**, (2011).
- [11] Abhay Ashtekar and Martin Bojowald. Black hole evaporation: A paradigm. *Class. Quantum Grav.*, **22**(16), (2005).
- [12] Martin Bojowald. Absence of Singularity in Loop Quantum Cosmology. *Phys. Rev. Lett.*, **86**, (2001).
- [13] Golam Mortuza Hossain, Viqar Husain, and Sanjeev S. Seahra. Background independent quantization and wave propagation. *Phys. Rev. D*, **80**, (2009).
- [14] Golam Mortuza Hossain, Viqar Husain, and Sanjeev S. Seahra. Non-singular inflationary universe from polymer matter. *Phys. Rev. D*, **81**, (2010).
- [15] Golam Mortuza Hossain, Viqar Husain, and Sanjeev S. Seahra. The propagator in polymer quantum field theory. *Phys. Rev. D*, **82**(12), (2010).
- [16] Benjamin K. Tippett and Viqar Husain. Gravitational collapse of quantum matter. *Phys. Rev. D*, **84**, (2011).

- [17] Sanjeev S. Seahra, Iain A. Brown, Golam Mortuza Hossain, and Viqar Husain. Primordial polymer perturbations. *J. Cosmol. Astropart. Phys.*, JCAP10 (**2012**), 041, (2012).
- [18] Angel A. García-Chung and Hugo A. Morales-Técotl. Polymer Dirac field propagator: A model. *Phys. Rev. D*, **89**(6), (2014).
- [19] Abhay Ashtekar, Stephen Fairhurst, and Joshua L. Willis. Quantum gravity, shadow states, and quantum mechanics. *Class. Quantum Grav.*, **20**, (2003).
- [20] Dah-Wei Chiou. Galileo Symmetries in Polymer Particle Representation. *Class. Quantum Grav.*, **24**, (2007).
- [21] Viqar Husain, Jorma Louko, and Oliver Winkler. Quantum gravity and the Coulomb potential. *Phys. Rev. D*, **76**, (2007).
- [22] G. Kunstatter, J. Louko, and J. Ziprick. Polymer quantization, singularity resolution and the $1/r^2$ potential. *Phys. Rev. A*, **79**, (2009).
- [23] Alejandro Corichi, Tatjana Vukasinac, and Jose A. Zapata. Polymer Quantum Mechanics and its Continuum Limit. *Phys. Rev. D*, **76**, (2007).
- [24] Guillermo Chacón-Acosta, Elisa Manrique, Leonardo Dagdug, and Hugo A. Morales-Técotl. Statistical Thermodynamics of Polymer Quantum Systems. *SIGMA*, **7**, (2011).
- [25] Ernesto Flores-González, Hugo A. Morales-Técotl, and Juan D. Reyes. Propagators in Polymer Quantum Mechanics. *Annals of Physics*, **336**, (2013).
- [26] Alejandro Corichi, Tatjana Vukasinac, and Jose A. Zapata. Hamiltonian and physical Hilbert space in polymer quantum mechanics. *Class. Quantum Grav.*, (2007).
- [27] R. P. Feynman. Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, **20**, (1948).
- [28] Abhay Ashtekar, Miguel Campiglia, and Adam Henderson. Loop Quantum Cosmology and Spin Foams. *Phys. Lett. B*, **681**(4), (2009).
- [29] Abhay Ashtekar, Miguel Campiglia, and Adam Henderson. Casting Loop Quantum Cosmology in the Spin Foam Paradigm. *Class. Quantum Grav.*, **27**, (2010).
- [30] Abhay Ashtekar, Miguel Campiglia, and Adam Henderson. Path Integrals and the WKB approximation in Loop Quantum Cosmology. *Phys. Rev. D*, **82**, (2010).
- [31] Nirmalya Kajuri. Path Integral representation for Polymer Quantized Scalar Fields. *Int. J. Mod. Phys. A*, **30**(34), (2015).
- [32] L. Parra and J. D. Vergara. Polymer quantum mechanics some examples using path integrals. In *American Institute of Physics Conference Series*, volume **1577** of *American Institute of Physics Conference Series*, pages 269–280, January (2014).
- [33] Joan A. Austrich Olivares, Angel Garcia-Chung, and J. David Vergara. Instanton solutions on the polymer harmonic oscillator. *Class. Quantum Grav.*, **34**(11), (2017).

- [34] Hugo A. Morales-Técotl, Saeed Rastgoo, and Juan C. Ruelas. Path integral polymer propagator of relativistic and non-relativistic particles. *Phys. Rev. D*, **95**(6), (2017).
- [35] Hugo A. Morales-Técotl, Daniel H. Orozco-Borunda, and Saeed Rastgoo. Polymer quantization and the saddle point approximation of partition functions. *Phys. Rev. D*, **92**(10), (2015).
- [36] A. A. García-Chung and H. A. Morales-Técotl. On causality in polymer scalar field theory. In L. A. Ureña-López, H. Aurelio Morales-Técotl, R. Linares-Romero, E. Santos-Rodríguez, and S. Estrada-Jiménez, editors, *American Institute of Physics Conference Series*, volume 1396 of *American Institute of Physics Conference Series*, pages 104–108, October 2011.
- [37] Golam Mortuza Hossain and Gopal Sardar. Is there Unruh effect in polymer quantization? *Class. Quantum Grav.*, **33**(24), (2016).
- [38] Nirmalya Kajuri. Polymer Quantization predicts radiation in inertial frames. *Class. Quantum Grav.*, **33**(5), (2016).
- [39] Ángel Alejandro García Chung. *UN MODELO PARA EL PROPAGADOR POLIMÉRICO DEL CAMPO DE DIRAC LIBRE*. PhD thesis, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, (2014).
- [40] Walter Greiner and Joachim Reinhardt. *Field Quantization*. (Springer-Verlag, 1996).
- [41] M. E. Peskin and D. V. Schroeder. *An Introduction to Quantum Field Theory*. (Addison-Wesley, 1995).
- [42] Abhay Ashtekar, Wojciech Kaminski, and Jerzy Lewandowski. Quantum field theory on a cosmological, quantum space-time. *Phys. Rev. D*, **79**(6), (2009).
- [43] B. Diu C. Cohen-Tannoudji and F. Laloë. *QUANTUM MECHANICS*, volume 1. (New York: Wiley, 1977).
- [44] B. Hatfield. *Quantum Field Theory of Point Particles and Strings*. (Addison-Wesley, 1992).
- [45] R. Jackiw. *Analysis on infinite-dimensional manifolds: Schrödinger representation for quantized fields*. Field Theory and Particle Physics. (Singapore: World Scientific, 1990).
- [46] J. J. Sakurai. *Modern quantum mechanics*. (Addison-Wesley, 1993).
- [47] M. Creutz. *Quarks, Gluons and Lattices*. (Cambridge University Press, Cambridge, 1985).
- [48] M. Creutz and B. Freedman. A statistical approach to quantum mechanics. *Annals of Physics*, **132**:427–462, April (1981).
- [49] G. B. Arfken and H. J. Weber. *Mathematical Methods for Physicists Fifth Edition*. (San Diego, CA:Academic, 2001).
- [50] Abhay Ashtekar, Martin Bojowald, and Jerzy Lewandowski. Mathematical structure of loop quantum cosmology. *Adv. Theor. Math. Phys.*, **7**(2), (2003).

- [51] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics: Functional analysis*, volume 1. (Academic Press London, 1980).
- [52] T. Pradhan and A. V. Khare. Plane Pendulum in Quantum Mechanics. *Am. J. Phys.*, **41**(1), (1972).
- [53] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. (Dover, New York, 1972).
- [54] N. W. McLachlan. *Theory and Application of Mathieu Functions*. (Oxford: Clarendon, 1947).
- [55] J. Fernando Barbero G., Jorge Prieto, and Eduardo J. S. Villase nor. Band structure in the polymer quantization of the harmonic oscillator. *Class. Quantum Grav.*, **30**(16), (2013).
- [56] P. Morse and H. Feshbach. *Methods of Theoretical Physics*, volume 2. (McGraw-Hill, New York, 1953).
- [57] L. I. Schiff. *Quantum Mechanics*. (McGraw-Hill, New York, 2 edition, 1949).
- [58] Martin Bojowald, Hugo A. Morales-Técotl, and Hanno Sahlmann. On Loop Quantum Gravity Phenomenology and the Issue of Lorentz Invariance. *Phys. Rev. D*, **71**, (2005).
- [59] H. Kleinert. *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*. (World Scientific, Singapore, 1990).
- [60] S. A. Fulling and K. S. Güntürk. Exploring the propagator of a particle in a box. *American Journal of Physics*, **71**(1):55–63, January (2003).
- [61] L. S. Schulman. *Techniques and Applications of Path Integration*. (John Wiley and Sons, 1981).



Casa abierta al tiempo
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ACTA DE DISERTACIÓN PÚBLICA

No. 00052
Matrícula: 208280232

Teoría cuántica de campos
polimérica en el esquema
perturbativo y el propagador
del campo escalar en el
régimen de altas energías

En la Ciudad de México, se presentaron a las 16:00 horas
del día 29 del mes de enero del año 2020 en la Unidad
Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los
suscritos miembros del jurado:

- DR. ALEJANDRO CORICHI RODRIGUEZ GIL
- DR. NORBERTO AQUINO AQUINO
- DR. HUGO AURELIO MORALES TECOTL
- DR. JERONIMO ALONSO CORTEZ QUEZADA
- DR. ABEL CAMACHO QUINTANA



Ernesto Flores Gonzalez

ERNESTO FLORES GONZALEZ
ALUMNO

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de
Secretario el último, se reunieron a la presentación de la
Disertación Pública cuya denominación aparece al margen,
para la obtención del grado de:

DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)
DE: ERNESTO FLORES GONZALEZ

y de acuerdo con el artículo 78 fracción IV del Reglamento
de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma
Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

Aprobar

Acto continuo, el presidente del jurado comunico al
interesado el resultado de la evaluación y, en caso
aprobatorio, le fue tomada la protesta.

REVISÓ

MTRA. ROSALIA SERRANO DE LA PAZ
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISION DE CBI

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

PRESIDENTE

DR. ALEJANDRO CORICHI RODRIGUEZ GIL

VOCAL

DR. NORBERTO AQUINO AQUINO

VOCAL

DR. HUGO AURELIO MORALES TECOTL

VOCAL

DR. JERONIMO ALONSO CORTEZ QUEZADA

SECRETARIO

DR. ABEL CAMACHO QUINTANA