



Universidad de Valladolid

FACULTAD DE CIENCIAS

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

Integral de Caminos en Física Cuántica y Estadística

Autor: Gonzalo Sancho Garrido
Tutor: José María Muñoz Castañeda
Año 2023

Índice general

1. Integral de caminos en mecánica cuántica	3
1.1. Introducción histórica	3
1.2. Construcción de la integral de caminos	4
1.3. Equivalencia entre las formulaciones de Feynman y Schrödinger	6
1.4. Límite clásico	9
1.5. Aproximación WKB	10
1.6. La partícula libre	12
1.7. Oscilador armónico	14
1.8. Expansión perturbativa	16
2. Relación entre cuántica y estadística	21
2.1. Colectividad canónica	21
2.2. Matriz densidad	22
2.3. Función de partición cuántica	23
2.4. Integral de caminos en mecánica estadística	24
2.5. Aproximación clásica	26
2.6. Espectros de energía. Fórmula de Feynman-Kac	27
2.7. Aplicación de la integral de caminos euclídea: mercados financieros	28
3. Casos particulares	31
3.1. Ideas previas: topología y cuantización	31
3.2. Rotor rígido	32
3.3. Monopolo magnético	35
3.4. Modelo de Ising	37
4. Conclusiones	42
A. Aspectos matemáticos	45
A.1. Integrales gaussianas	45
A.2. Formas diferenciales	48

Capítulo 1

Integral de caminos en mecánica cuántica

1.1. Introducción histórica

La integral de caminos es una formulación de la mecánica cuántica que surge de manera natural al intentar averiguar cuál es el rol que juega el principio de mínima acción en el caso cuántico. La idea básica de este formalismo es que, si tenemos una partícula situada en un cierto punto x_a del espacio de coordenadas en el instante t_a , para calcular la probabilidad de que en un instante posterior t_b se encuentre en el punto x_b , se han de tener en cuenta todas las posibles trayectorias que conecten el primer punto con el segundo, o dicho de otra forma, todos los distintos caminos que puede recorrer la partícula, e integrar sobre ellos, de ahí el nombre. Más adelante se explicará qué quiere decir esto de una forma más detallada y rigurosa.

En las formulaciones tradicionales de la mecánica cuántica (Schrödinger y Heisenberg), es el hamiltoniano el que da la evolución temporal del sistema. La primera persona en proponer una descripción lagrangiana de la cuántica fue Dirac en su artículo de 1933 [2], en el cual demuestra que el operador de evolución es proporcional a la exponencial compleja de la acción (integral temporal del lagrangiano), pero no termina de dar una explicación completa y precisa del asunto. Años más tarde, Feynman [3] consigue desarrollar de manera satisfactoria las ideas de Dirac, dando luz a un nuevo formalismo. A la hora de describir la evolución temporal para tiempos finitos, se vio que era necesario integrar esta exponencial de la acción sobre todas las coordenadas espaciales en cada instante temporal, con lo que nació el concepto de integral sobre todos los caminos. Existen ciertos problemas matemáticos con este concepto, ya que, incluso a día de hoy, todavía no se ha conseguido definir de manera rigurosa una medida en el “espacio de caminos”, excepto para integrales de tipo gaussiano.

La integral de caminos no es un concepto exclusivo de la mecánica cuántica no relativista, sino que también sirve para estudiar teoría cuántica de campos, y de hecho es en ese ámbito donde se dieron los primeros éxitos de la teoría. En un principio Feynman intenta usarla para deshacerse de los infinitos debidos a la energía de autointeracción en la electrodinámica cuántica, aunque no consiguió un resultado completamente satisfactorio. Sin embargo, se vio en seguida que tenía muchas aplicaciones tanto en QED como otros campos. Su primer logro fue la explicación del efecto Lamb, ya que ahí la integral de caminos sí servía para manejar los infinitos. Posteriormente, ha seguido siendo bastante útil en el desarrollo de varias ramas de la física. Cabe destacar que el formalismo es muy apropiado para el estudio de sistemas cuánticos en el límite semi-clásico, como se verá posteriormente en este trabajo.

Merece la pena mencionar que la integral de caminos no es la única descripción de la cuántica mediante lagrangianos, ya que Schwinger encuentra un principio de mínima acción cuántico [4], pero de naturaleza diferencial en vez de integral. Al igual que Feynman, Schwinger también utilizó su principio de acción cuántico en el estudio de la QED. Mientras que el enfoque de Feynman era más intuitivo, usando diagramas para visualizar los procesos mediante interacciones entre partículas, Schwinger tenía una visión más matemática, olvidándose de las partículas y centrándose en el álgebra de los campos.

La noción de integral de caminos no es exclusiva de la mecánica cuántica, y de hecho, el primero en introducirla fue Wiener en el marco del movimiento browniano [1]. Se pueden formular otras ramas de la física en función de la integral de caminos, como veremos en el caso de la mecánica estadística.

1.2. Construcción de la integral de caminos

Hay distintas formas de hacer este desarrollo. En este trabajo lo haremos como en el libro de Feynman e Hibbs [6]. También se puede hacer partiendo desde la ecuación de Schrödinger, lo cual quizá pueda ser más intuitivo, pero hacerlo de esta forma resulta más bello, ya que se deduce toda la mecánica cuántica a partir de un único postulado. Posteriormente, se demostrará que ambas formulaciones son equivalentes, con lo cual da igual el camino que se tome ahora.

En este desarrollo y en los posteriores, se tratará el caso de una partícula no relativista, y por simplicidad en una dimensión. La extensión a más dimensiones no es excesivamente complicada.

Se parte del siguiente postulado, que se conoce con el nombre de **postulado de Feynman**: la amplitud de probabilidad de que una partícula evolucione desde la posición x_a en un tiempo t_a hasta la posición x_b en el instante t_b (con $t_b \geq t_a$) viene dada por:

$$\boxed{K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum \phi[x(t)]} \quad (1.1)$$

Donde $\phi[x(t)]$ es la contribución a la amplitud de cada posible camino que va desde x_a hasta x_b . Todas las contribuciones son de igual módulo, pero tienen fases distintas. Dicha fase está descrita por la siguiente ecuación:

$$\boxed{\phi[x(t)] = \text{const} e^{iS[x(t)]/\hbar}} \quad (1.2)$$

$S[x(t)]$ es la acción correspondiente a cada camino, definida en el sentido clásico, y la constante se usará para normalizar K .

Este postulado puede parecer bastante arbitrario, con lo cual interesante entender un poco el contexto de cómo se llegó a él, para comprenderlo mejor. Como ya se mencionó en la introducción, la búsqueda de una formulación de la mecánica cuántica a partir de un principio de mínima acción se remonta a Dirac, quien define una función S que cumple la siguiente ecuación:

$$\langle q(t_b) | q(t_a) \rangle = e^{iS/\hbar} \quad (1.3)$$

Aquí los $|q(t)\rangle$ son los vectores estado del sistema a tiempo t . Pues bien, Dirac demuestra que, en el límite clásico $\hbar \rightarrow 0$, esta función S coincide con la acción clásica, por lo que será su análogo

cuántico. Es esta analogía la que lleva a Dirac a escribir:

$$\langle q(t_b)|q(t_a)\rangle \text{ corresponde a } \exp\left\{i \int_{t_a}^{t_b} dt \mathcal{L}/\hbar\right\} \quad (1.4)$$

No quedaba muy claro lo que quería decir ese “corresponde a”, lo que intrigaba a Feynman, quien se empeñó en averiguar si se podía sustituir por un “es igual a”, y la respuesta fue afirmativa, ya que consiguió derivar la ecuación de Schrödinger a partir del postulado antes expuesto.

Volvamos a la construcción de la integral. Al realizar la suma de todos los caminos se presenta el problema de que el número de dichos caminos es infinito. Con el objetivo de solventarlo, se usa la misma idea que en la integral de Riemann, de dividir un intervalo en un número de subintervalos de una cierta longitud, y luego hacer esa longitud tender a 0. En este caso los intervalos serán temporales.

Para construir la suma se procede de la manera siguiente: dividimos $[t_a, t_b]$ en $n + 1$ subintervalos de longitud ϵ , de forma que $t_b = t_a + (n + 1)\epsilon$. Llamemos a los tiempos $t_0 = t_a$, $t_1 = t_a + \epsilon$, \dots , $t_k = t_a + k\epsilon$.

Definimos ahora el lagrangiano de la manera convencional, como diferencia entre la energía cinética y la potencial:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x, \dot{x}, t) \quad (1.5)$$

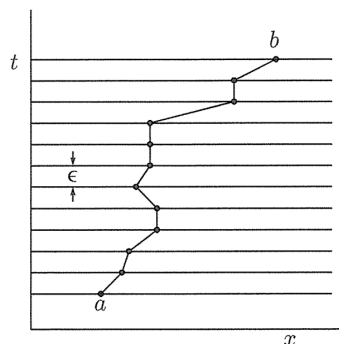
Si los intervalos temporales son muy pequeños, es buena aproximación decir que, entre dos puntos consecutivos, la trayectoria espacial que sigue la partícula es una recta. Con lo cual, se puede decir que la velocidad en el punto x_k es:

$$\dot{x}_k = \frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon}$$

Sabiendo esto ya podemos calcular la acción S , que será la integral temporal del lagrangiano desde t_a hasta t_b , que en este caso se escribirá como una suma (en el límite $\epsilon \rightarrow 0$ se podrá volver a poner como una integral):

$$S = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x, \dot{x}, t) \right] = \sum_{k=1}^{n+1} \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_k, \dot{x}_k, t_k) \right] \quad (1.6)$$

Figura 1.1: representación gráfica de la partición temporal.



Conociendo la posición x_k para cada tiempo t_k , se podrá calcular la acción. La elección de un camino consiste en asignar una x_k para cada t_k , teniendo en cuenta que $x(t_a) = x_a$, $x(t_b) = x_b$ son puntos fijos por las condiciones iniciales. (ver figura)

Para sumar todos los caminos, se ha de hacer la integral para todos los posibles valores de cada x_k , con lo cual tendremos una integral sobre todo el espacio para cada intervalo temporal. Esos intervalos temporales se harán tender a cero ($\epsilon \rightarrow 0$, o lo que es lo mismo, $n \rightarrow \infty$). Teniendo todo esto en cuenta, ya es posible calcular la amplitud de probabilidad, y su expresión es la siguiente:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N(\epsilon)} \right)^{n+1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n e^{iS/\hbar} \quad (1.7)$$

Donde S es la que se obtuvo en (1.6), y $N(\epsilon)$ es un factor de normalización que asegura que el límite exista. Posteriormente, veremos exactamente el valor de este factor.

Normalmente, para simplificar la notación, K se escribe de la siguiente manera:

$$K = \int D(x) e^{iS/\hbar} \quad (1.8)$$

Donde $D(x)$ incluye todos los dx_k y los $N(\epsilon)$.

1.3. Equivalencia entre las formulaciones de Feynman y Schrödinger

En esta sección primero se demostrará que el propagador de la ecuación de Schrödinger coincide precisamente con la amplitud de probabilidad K (que es el elemento de matriz del operador evolución temporal), y que conocido dicho propagador, la función de onda queda totalmente determinada. Posteriormente, se verá que la K obtenida a partir del postulado de Feynman cumple la ecuación de Schrödinger, con lo cual se habrá demostrado que ambos formalismos son totalmente equivalentes.

La ecuación de Schrödinger para un Hamiltoniano H , con la que el lector ya estará familiarizado, viene dada por la siguiente fórmula:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H\psi(x, t) \quad (1.9)$$

Suponemos que para un instante inicial t_a se conoce la función de onda ψ para todo x , es decir:

$$\psi(x, t_a) = f(x)$$

Se define el propagador (o núcleo) K de la ecuación a la función que cumple la siguiente fórmula:

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx K(x_b, t_b; x, t_a) f(x) \quad (1.10)$$

Es fácil ver que si conocemos K y $f(x)$, entonces conocemos la función de onda ψ .

Además, si ψ cumple (1.9), es inmediato ver que para K es válida la siguiente ecuación:

$$i\hbar \frac{\partial K(x_b, t_b; x, t_a)}{\partial t_b} = H_b K(x_b, t_b; x, t_a) \quad (1.11)$$

Donde el Hamiltoniano H_b actúa sobre las variables x_b y t_b . Como la integral de (1.10) no depende de las variables en b , se pueden hacer actuar los operadores en la integral sin problema.

Veamos ahora que el propagador así definido coincide con la amplitud de probabilidad. Para ello, trabajaremos por conveniencia en la notación de Dirac.

El operador evolución U nos indica, sabiendo cuál es el estado del sistema en un instante t_a , cómo será el estado en otro instante $t_b \geq t_a$:

$$|\psi(t_b)\rangle = U(t_b - t_a) |\psi(t_a)\rangle$$

Multiplicamos en ambos lados por $\langle x_b|$:

$$\langle x_b|\psi(t_b)\rangle = \psi(x_b, t_b) = \langle x_b|U(t_b - t_a)|\psi(t_a)\rangle$$

Introduciendo ahora la relación de cierre para $|x\rangle$ se obtiene:

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x_b|U(t_b - t_a)|x\rangle \langle x|\psi(t_a)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x_b|U(t_b - t_a)|x\rangle \psi(x, t_a)$$

Pero, por las condiciones de contorno, $\psi(x, t_a) = f(x)$, con lo cual:

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x_b|U(t_b - t_a)|x\rangle f(x)$$

De esta expresión y de (1.10) se obtiene que:

$$K(x_b, t_b; x, t_a) = \langle x_b|U(t_b - t_a)|x\rangle \quad (1.12)$$

$\langle x_b|U(t_b - t_a)|x\rangle$ no es más que la amplitud de probabilidad de que, en t_b , el sistema se encuentre en x_b , con lo cual, ya queda demostrado el resultado.

Queda por ver que la K que se obtuvo en (1.7) es en efecto la misma amplitud de probabilidad que la obtenida a partir de (1.9), o lo que es lo mismo, que satisface la ecuación (1.11).

Para ello se calculará el propagador en un instante ligeramente posterior a t_b , en concreto, $t_b + \epsilon$. Vemos que al hacer esto tendremos una integral extra en la variable x_{n+1} , que antes se había tomado como punto fijo x_b . Además, habrá que añadir otro factor $N(\epsilon)$, y en la acción aparecerá otro sumando, que tendrá la siguiente forma:

$$\epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{n+2} - x_{n+1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_{n+2}) \right]$$

El punto final ahora será x_{n+2} , al cual llamaremos x_f . La ecuación en este caso queda:

$$K(x_f, t_b + \epsilon; x_a, t_a) = \frac{1}{N(\epsilon)} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{n+1} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_f - x_{n+1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_f) \right] \right\} K(x_{n+1}, t_b; x_a, t_a)$$

Hacemos ahora el siguiente cambio de variable:

$$\eta = x_{n+1} - x_f \Rightarrow d\eta = dx_{n+1}$$

Y con eso se llega a:

$$K(x_f, t_b + \epsilon; x_a, t_a) = \frac{1}{N(\epsilon)} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left\{\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2 - \frac{i\epsilon V(x_f)}{\hbar}\right\} K(\eta + x_f, t_b; x_a, t_a)$$

En el primer factor del exponente, aparece un término η^2 . Si η^2 es muy grande, la exponencial oscilará muy rápidamente entre valores negativos y positivos, con lo que la integral sobre η dará un valor muy pequeño. Por eso, el propagador dentro del integrando se puede desarrollar en serie de potencias, ya que solo los términos de orden más bajo en η tendrán una contribución apreciable. La expansión tiene la forma siguiente (obviamos x_a y t_a para simplificar la notación):

$$K(\eta + x_f) = K(x_f) + \eta \frac{\partial K}{\partial x_f}(x_f) + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 K}{\partial x_f^2}(x_f) + \mathcal{O}(\eta^3)$$

Tras hacer el desarrollo hasta orden dos en η van a quedar tres integrales, cuyos valores van a ser los siguientes

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left\{\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right\} &= \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta \exp\left\{\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right\} &= 0 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta^2 \exp\left\{\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right\} &= \frac{i\hbar\epsilon}{m} \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}} \end{aligned}$$

De haber tomado términos en el desarrollo de orden η^3 o mayor, se hubiesen obtenido resultados por lo menos de orden ϵ^2 .

También se desarrolla, pero ahora en ϵ , la exponencial con el potencial, resultando en:

$$\exp\left\{-\frac{i\epsilon}{\hbar}V(x_f)\right\} = 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}V(x_f) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

Con todo esto, e ignorando términos de orden 2 o superior en ϵ , se llega a la expresión siguiente (ya no escribimos x_a y t_a para aligerar la notación):

$$K(x_f, t_b + \epsilon) = \frac{1}{N(\epsilon)} \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}} \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}V(x_f)\right) \left[K(x_f, t_b) + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \frac{\partial^2 K(x_f, t_b)}{\partial x_f^2}\right]$$

Para que no se anule toda la parte derecha de la igualdad al tomar el límite $\epsilon \rightarrow 0$, es necesario que $N(\epsilon)$ tome el siguiente valor:

$$N(\epsilon) = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}} \quad (1.13)$$

Esta constante que se acaba de hallar ahora es universal, no depende del potencial al que esté sometida la partícula, tan solo depende de su masa. Con lo cual, en todos los problemas vamos a tener la misma normalización.

Por último, se hace el desarrollo de $K(x_f, t_b + \epsilon)$ a primer orden:

$$K(x_f, t_b + \epsilon) = K(x_f, t_b) + \epsilon \frac{\partial K(x_f, t_b)}{\partial t_b}$$

Al hacer el límite $\epsilon \rightarrow 0$, se obtiene el siguiente resultado, que cabe resaltar que es exacto, ya que tomar $\epsilon \rightarrow 0$ es necesario.

$$i\hbar \frac{\partial K(x_f, t_b)}{\partial t_b} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_f^2} + V(x_f) \right] K(x_f, t_b) \quad (1.14)$$

El primer término de la parte derecha de la igualdad es justo la energía cinética en la representación de coordenadas. Por lo tanto, todo lo que está entre corchetes es el operador hamiltoniano, con lo cual se ve que el propagador cumple la ecuación (1.11).

Se puede encontrar una derivación más general de la ecuación de Schrödinger en [11], donde se considera un espacio de coordenadas curvo. En este caso, se observa que dicha curvatura afectará a los niveles de energía del sistema.

Queda por obtener en esta sección un último resultado, que ahora mismo no es necesario, pero será útil más adelante, y es la expresión de K en el espacio de coordenadas. Partiendo de (1.12), teniendo en cuenta que $U(t_b, t_a) = \exp\{-iH(t_b - t_a)/\hbar\}$, y usando la base propia del hamiltoniano $\{|\psi_n\rangle\}$:

$$K(x_b, t_b; x, t_a) = \langle x_b | e^{-iH(t_b - t_a)/\hbar} | x \rangle = \sum_n e^{-iE_n(t_b - t_a)/\hbar} \psi_n(x_b) \psi_n^*(x) \quad (1.15)$$

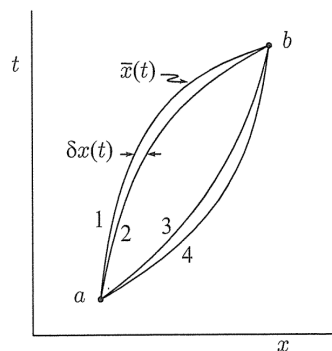
1.4. Límite clásico

Una de las ventajas que tiene la formulación de caminos de la mecánica cuántica sobre la formulación tradicional es que se ve mucho más claro cómo, al tomar el límite $\hbar \rightarrow 0$, se recupera el principio de mínima acción, y, por tanto, la mecánica clásica.

Pongámonos en el caso en el que S es muchísimo mayor que \hbar . Entonces, la contribución a la fase de la acción de cualquier camino (el término S/\hbar), como indica la ecuación (1.2), es un ángulo muy grande. Las partes real e imaginaria de ϕ son proporcionales al coseno y al seno de este ángulo respectivamente, y es tan probable que sean positivas como que sean negativas.

Si desplazamos la trayectoria por una cantidad δx como se indica en la figura 1.2, el cambio en S es varios órdenes de magnitud mayor que \hbar , aunque en la escala clásica pueda ser casi despreciable. Un cambio muy pequeño (en esta escala) provocará que la fase oscile multitud

Figura 1.2: en este gráfico el camino 1 representa la trayectoria clásica, y el 2 uno infinitesimalmente próximo.



de veces entre valores positivos y negativos, lo que hará que la contribución neta sea nula, ya que para cada camino que añada una contribución positiva, otro infinitesimalmente cercano lo compensará con una negativa, es decir, un fenómeno de interferencia destructiva.

Únicamente en el caso de la trayectoria clásica $\bar{x}(t)$, para la cual la acción es extrema, un cambio pequeño δx no produce ningún cambio en S a primer orden, ya que esta trayectoria cumple $\delta S = 0$. Todas las contribuciones de esta zona tienen fases parecidas, y no se cancelan. Por lo tanto, solo caminos próximos a $\bar{x}(t)$ aportarán contribuciones importantes, y en el límite clásico nos bastará con considerar esta trayectoria. De esta manera, las leyes clásicas de la dinámica surgen a partir de las leyes cuánticas.

1.5. Aproximación WKB

Hay muchos casos en los que nos interesa estudiar sistemas para los cuales la contribución principal a la acción es la de la trayectoria clásica, pero sin llegar al límite de la sección anterior, en la cual trayectoria clásica era la única que había que tener en cuenta. Introducimos, pues, la aproximación de la fase estacionaria o aproximación WKB (acrónimo de Wentzel-Cramer-Brillouin), la cual se puede interpretar como un límite semiclásico, en el cual se tienen en cuenta las pequeñas fluctuaciones cuánticas alrededor de la trayectoria clásica.

Supongamos que la acción del sistema viene dada por:

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right] \quad (1.16)$$

Donde se ha tomado un potencial $V(x)$ que no depende ni del tiempo ni de la velocidad, ya que esos son los potenciales más comunes, y en los que nos vamos a centrar en este trabajo. De todas formas, hacer la extensión a potenciales dependientes de \dot{x} , aunque un poco más laborioso, no es excesivamente difícil.

Como se vio en la sección del límite clásico, la contribución apreciable a la integral será la de los caminos con trayectorias próximas a la que minimiza la acción $\bar{x}(t)$. Eso nos indica que podemos poner:

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t) \quad (1.17)$$

Donde $y(t)$ es suficientemente pequeño, y cumple las condiciones:

$$y(t_a) = y(t_b) = 0$$

Entonces, realizando un desarrollo en serie de Taylor de la acción, tenemos:

$$\begin{aligned} S[x] &= S[\bar{x} + y] = S[\bar{x}] + \delta S \Big|_{\bar{x}} + \frac{1}{2} \delta^2 S \Big|_{\bar{x}} + \mathcal{O}(y^3) = \\ &= S[\bar{x}] + \frac{\partial S}{\partial x} \Big|_{\bar{x}} y + \frac{\partial S}{\partial \dot{x}} \Big|_{\bar{x}} \dot{y} + \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{\bar{x}} y^2 + \frac{\partial^2 S}{\partial x \partial \dot{x}} \Big|_{\bar{x}} y \dot{y} + \frac{\partial^2 S}{\partial \dot{x}^2} \Big|_{\bar{x}} \dot{y}^2 + \mathcal{O}(y^3) \end{aligned}$$

Pero, por el principio de Hamilton, sabemos que:

$$\delta S \Big|_{\bar{x}} = 0$$

Lo que nos permite escribir, a segundo orden en y :

$$S[x] \approx S[\bar{x}] + \frac{1}{2} \delta^2 S \Big|_{\bar{x}}$$

Para (1.16) tenemos que:

$$S[x] \approx S[\bar{x}] + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[m\dot{y}^2 - \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \Big|_{\bar{x}} y^2 \right]$$

El término en \dot{y}^2 lo podemos escribir de una forma distinta haciendo la integral por partes:

$$\int_{t_a}^{t_b} dt \dot{y}^2 = y\dot{y} \Big|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} dt y\ddot{y} = - \int_{t_a}^{t_b} dt y\ddot{y}$$

Ahora definimos el operador A de la manera siguiente:

$$A(t) \equiv -m\partial_t^2 - \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \Big|_{\bar{x}} \quad (1.18)$$

Esta definición nos permite obtener una expresión de la acción mucho más conveniente, que es:

$$S[x] \approx S[\bar{x}] + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt y [A(t)y]$$

Con esta expresión de la acción, nos proponemos calcular la amplitud de probabilidad. Introduciéndola en (1.8), tenemos:

$$K = \int D(x) e^{iS[\bar{x}]/\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \int dt y [A(t)y] \right\}$$

$S[\bar{x}]$ es una constante, con lo que puede salir de la integral. Además, usando (1.17), podemos pasar de integrar en las x a hacerlo en las y . Teniendo esto en cuenta, K queda:

$$K = e^{iS[\bar{x}]/\hbar} \int D(y) \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \int dt y [A(t)y] \right\}$$

La expresión anterior es la integral gaussiana de un operador. Tenemos que si \mathbf{A} es una matriz real simétrica $n \times n$, la fórmula para la integral gaussiana con exponentes complejos es (ver anexo):

$$\int d^n x \exp \left\{ \frac{i}{2} \sum_{i,j=1}^n x_i A_{ij} x_j \right\} = \sqrt{\frac{(2\pi i)^n}{\det(\mathbf{A})}} \quad (1.19)$$

Simplemente mirando la definición de $A(t)$ (1.18), podemos ver que, en efecto, la matriz va a ser real y simétrica. El problema que nos encontramos ahora es que $A(t)$ no tiene dimensión finita, sino que es un operador diferencial de dimensión infinita, con lo que no se puede definir el determinante de la manera convencional.

En estos casos lo que se hace es definir el determinante como el producto de los autovalores del operador, que vienen dados por la siguiente ecuación:

$$A(t)y_n(t) = \lambda_n y_n(t) ; \quad \text{con } y_n(t_a) = y_n(t_b) = 0 \quad (1.20)$$

Con esto llegaríamos a que el determinante de A será (lo denotamos como “Det” y no como “det” para indicar que no es un determinante al uso):

$$\text{Det}(A) = \prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n$$

Es fácil imaginarse que este productorio pueda divergir, y en efecto lo hace en muchos casos. Se puede comprobar fácilmente que de hecho lo hace en el caso de la partícula libre. Pero ya vimos que la constante $N(\epsilon)$ dada por (1.13) asegura la convergencia de la integral de caminos para cualquier potencial, con lo cual:

$$\begin{aligned} \int D(y) \exp\left\{\frac{i}{2\hbar} \int dt y [A(t)y]\right\} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N(\epsilon)}\right)^{(n+1)} (2\pi i \hbar)^{n/2} [\text{Det}(A)]^{-1/2} = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{1/2} \left(\frac{m}{\epsilon}\right)^{n/2} [\text{Det}(A)]^{-1/2} \quad (1.21) \end{aligned}$$

Aunque no se hayan estudiado potenciales que dependan de las velocidades, hay un aspecto del tratamiento de estos que merece la pena comentar. Después de discretizar el tiempo, al evaluar el lagrangiano en el instante t_k , es bastante evidente qué valor ha de tomarse para la velocidad. Sin embargo, para la posición se ha tomado x_k sin discutirlo mucho, lo cual ha sido una elección totalmente arbitraria, ya que también podía haberse escogido x_{k-1} o $x_{\bar{k}}$, con $x_{\bar{k}} \equiv (x_{k-1} + x_k)/2$. En el caso de los potenciales que hemos tratado hasta ahora, las tres opciones dan el mismo resultado. El problema surge cuando en el potencial aparecen productos de la forma $q^n p^m$ (q denota la coordenada generalizada y p su momento), ya que a la hora de cuantizar no se puede simplemente sustituir q y p por sus operadores cuánticos \hat{q} y \hat{p} , sino que hay que hacer que el producto sea simétrico, lo cual se consigue aplicando las reglas de ordenamiento de Weyl:

$$O(\hat{q}^n \hat{p}^m) = \frac{1}{2^n} \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} \hat{q}^{n-i} \hat{p}^m \hat{q}^i \quad (1.22)$$

El ejemplo más sencillo de un potencial en el que aparecen este tipo de productos es el de una partícula en un campo magnético, en el que aparece un término de la forma $\vec{v} \cdot \vec{A}$. Si consideramos el producto $q^n p^m$ (magnitudes clásicas) evaluado en el punto medio para q , se obtiene:

$$q^n(\bar{k}) p^m(k) = \frac{1}{2^n} \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} q^{n-i}(k) q^i(k-1) p^m(k)$$

Vemos que es compatible con el orden de Weyl, con lo cual para este tipo de potenciales, hay que evaluar en el punto medio.

Hay casos en los que la aproximación WKB no es ninguna aproximación, sino que da el resultado exacto, y será para aquellas situaciones en las que V tenga como mucho términos de orden 2 en posiciones y momentos, ya que entonces $\delta^n S = 0 \forall n \geq 3$. Los ejemplos más relevantes de este tipo de potenciales son la partícula libre y el oscilador armónico, los cuales se resolverán a continuación.

1.6. La partícula libre

Hasta ahora hemos realizado un desarrollo completamente teórico de la integral de caminos, discutiendo sus propiedades y viendo que es una formulación tan válida como la de Schrödinger, pero en ningún momento hemos hablado de su utilidad a la hora de resolver problemas. Por muy interesante que sea el formalismo desde un punto de vista conceptual, es necesario que tenga alguna aplicación práctica para que merezca la pena usarlo.

Comenzaremos con el problema más sencillo: la partícula libre. Tiene interés resolverlo no solo por el resultado en sí (que puede ser de ayuda en casos más complicados, como en teoría de

perturbaciones), sino también porque las técnicas utilizadas para resolverlo se usan en muchos otros problemas.

Partimos del Lagrangiano de la partícula libre, cuya expresión bien conocida es:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 \quad (1.23)$$

Haciendo uso de (1.6), (1.7) y (1.13), podemos escribir la amplitud de probabilidad como:

$$K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{(n+1)/2} \int dx_1 \dots \int dx_n \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} \sum_{i=1}^{n+1} (x_i - x_{i-1})^2 \right\}$$

Tenemos un producto de integrales gaussianas, es decir, integrales de la forma $\int \exp\{-ax^2 + bx\}dx$. Como la integral de una gaussiana es otra gaussiana, haremos las integrales en una variable tras otra, de manera recursiva, y ya una vez realizadas todas las integrales, se tomará el límite.

Antes de empezar, vamos a recordar la fórmula para una integral gaussiana en \mathbb{R} con exponentes complejos, cuya deducción viene en el anexo:

$$\int dx e^{-iax^2 + ibx} = \sqrt{\frac{\pi}{ia}} e^{ib^2/4a} \quad (1.24)$$

Primero se realizará la integral en x_1 . Tenemos que:

$$\begin{aligned} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{2/2} \int dx_1 \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} [(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2] \right\} &= \\ &= \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \int dx_1 \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} [x_2^2 + 2x_1^2 - 2(x_2 + x_0)x_1 + x_0^2] \right\} \end{aligned}$$

La parte que no depende de x_1 se puede sacar de la integral. Luego, identificamos $a = -m/\hbar\epsilon$, $b = -m(x_2 + x_0)/\hbar\epsilon$ según indica (1.24). Tras operar, encontramos que la integral anterior es igual a:

$$\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \cdot 2\epsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \cdot 2\epsilon} (x_2 - x_0)^2 \right\}$$

Ahora toca hacer la integral en x_2 . Para ello, multiplicamos el resultado que acabamos de deducir por el siguiente factor que aparece en la integral, el cual es:

$$\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} (x_3 - x_2)^2 \right\}$$

Y repetimos las mismas operaciones, obteniendo:

$$\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \cdot 3\epsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \cdot 3\epsilon} (x_3 - x_0)^2 \right\}$$

Se puede notar fácilmente que, al repetir este proceso n veces, llegaremos al resultado, que es:

$$K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (n+1)\epsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar (n+1)\epsilon} (x_{n+1} - x_0)^2 \right\}$$

Pero, por la definición de ϵ , sabemos que $(n+1)\epsilon = t_b - t_a$, con lo cual, no va a haber ningún problema a la hora de tomar el límite, y finalmente se llega a:

$$K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) = \left[\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right]^{1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a} \right\} \quad (1.25)$$

La ecuación anterior es correcta, pero al estar escrita de esa forma no se ve muy claro su significado físico. Por ello, es conveniente hacer la transformada de Fourier para escribirla en el espacio de momentos. Llamamos x a $x_b - x_a$ y t a $t_b - t_a$. La transformada de Fourier de K_0 viene dada por:

$$\tilde{K}_0(p, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx K_0(x, t) e^{-ipx/\hbar} \quad (1.26)$$

Introduciendo (1.25) en (1.26), y definiendo $\alpha = \frac{m}{2t}$ por conveniencia, resulta:

$$\tilde{K}_0(p, t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i(\alpha x^2 - px)/\hbar}$$

Integrando llegamos a:

$$\tilde{K}_0(p, t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \left(\frac{i\pi \hbar}{\alpha} \right)^{1/2} e^{-ip^2/4\alpha \hbar} = e^{-ip^2/4\alpha \hbar}$$

Realizando ahora la transformada inversa de Fourier:

$$K_0(x, t) = \frac{\theta(t)}{2\pi \hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{K}_0(p, t) e^{ipx/\hbar} = \frac{\theta(t)}{2\pi \hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{i(px - p^2/4\alpha)/\hbar}$$

$\theta(t)$ es la función de Heaviside, que se ha incluido porque la amplitud de probabilidad es nula para $t < 0$.

$$\theta(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0 \\ 1 & \text{si } t \geq 0 \end{cases}$$

La función de Heaviside también se puede escribir como:

$$\theta(t) = \frac{1}{2\pi \hbar i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \frac{e^{it\tau/\hbar}}{\tau - i\epsilon}$$

Usando esto, y sustituyendo el valor de α , el núcleo resulta:

$$K_0(x, t) = \frac{1}{(2\pi \hbar)^2 i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{\exp\{i(px - p^2 t/2m + t\tau)/\hbar\}}{\tau - i\epsilon}$$

Por último, hacemos el cambio de variable $E = p^2/2m - \tau$ (E será la energía), resultando finalmente:

$$K_0(x, t) = \frac{1}{(2\pi \hbar)^2 i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\exp\{i(px - Et)/\hbar\}}{p^2/2m - E - i\epsilon} \quad (1.27)$$

Esta fórmula es prácticamente igual a la del propagador del campo de Klein-Gordon en teoría cuántica de campos (ver por ejemplo [14]). Observamos que, al tomar el límite $\epsilon \rightarrow 0$, K_0 tiene un polo cuando la energía cumple la relación de dispersión $E = p^2/2m$, que es la que cumple una partícula libre clásica, y se dice que el sistema es “on shell”.

1.7. Oscilador armónico

El potencial del oscilador armónico es uno de los más importantes en física, si no el que más, ya que cualquier potencial que tenga un mínimo se puede aproximar a orden más bajo en ese punto por un oscilador armónico. La expresión matemática de este potencial es bien conocida:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (1.28)$$

De las ecuaciones de Euler-Lagrange, es fácil deducir la ecuación de movimiento clásica, la cual es:

$$\ddot{\bar{x}}(t) - \omega^2 \bar{x}(t) = 0$$

Escogemos sin pérdida de generalidad $t_a = 0$, $t_b = T$. Si imponemos las condiciones de contorno $\bar{x}(0) = x_a$ y $\bar{x}(T) = x_b$, la solución de la ecuación de movimiento vendrá dada por:

$$\bar{x}(t) = x_a \cos(\omega t) + \frac{x_b - x_a \cos(\omega T)}{\sin(\omega T)} \sin(\omega t)$$

Para calcular $S[\bar{x}(T)]$, simplemente se sustituye esta expresión (y la de la velocidad, que no es más que la derivada temporal) en el lagrangiano, y se integra con respecto al tiempo desde 0 hasta T . Tras hacer los cálculos, y manipulando un poco las expresiones, se llega a:

$$S[\bar{x}(T)] = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} [(x_a^2 + x_b^2) \cos(\omega T) - 2x_b x_a]$$

Una vez calculada la acción en la trayectoria clásica, procedemos a computar el valor del determinante del operador A de (1.18), que en este caso es:

$$A = -m\partial_t^2 - m\omega^2$$

Tenemos que resolver la ecuación (1.20) para este potencial, que resulta muy sencillo, y la solución es:

$$y_n(t) = cte \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right)$$

$$\lambda_n = \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2$$

El determinante entonces será:

$$\text{Det}(A) = \prod_n \left[\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2 \right] = \prod_n \left[\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 \right] \times \prod_n \left[1 - \left(\frac{\omega T}{n\pi}\right)^2 \right]$$

El productorio de la izquierda no depende de ω , es decir, no depende del potencial. Podemos juntar este factor con el de normalización que aparece delante del determinante en (1.21), con lo que quedará un factor al que llamaremos C , el cual podrá depender de T y de m , pero nunca de ω :

$$C \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{1/2} \left(\frac{m}{\epsilon}\right)^{n/2} \times \prod_n \left[\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 \right]^{-1/2}$$

No es estrictamente necesario definir C para resolver el problema, pero nos va a ahorrar muchas cuentas. En cuanto al otro productorio, se puede demostrar, haciendo los productos y escribiéndolo como una serie de potencias que:

$$\prod_n \left[1 - \left(\frac{\omega T}{n\pi}\right)^2 \right] = \text{sinc}(\omega T) = \frac{\sin(\omega T)}{\omega T}$$

Ya tenemos todo lo necesario para poder escribir el propagador, y nos queda:

$$K(b; a) = C \left[\frac{\omega T}{\sin(\omega T)} \right]^{1/2} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega T)} [(x_a^2 + x_b^2) \cos(\omega T) - 2x_b x_a] \right\}$$

Queda por determinar C , pero eso lo podemos hacer fácilmente, sin más que imponer que, en el límite $\omega \rightarrow 0$, se recupere la expresión del propagador libre dada por (1.25). Haciendo esto resulta:

$$C = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2}$$

Y la expresión final del propagador es:

$$K(b; a) = \left[\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)} \right]^{1/2} \exp \left\{ \frac{i m \omega}{2 \hbar \sin(\omega T)} [(x_a^2 + x_b^2) \cos(\omega T) - 2x_b x_a] \right\} \quad (1.29)$$

Es posible calcular el espectro del oscilador armónico a partir del propagador anterior, y ver que se recupera la expresión conocida para los niveles de energía.

Tomamos la ecuación (1.15), hacemos $x_b = x$, $t_a = 0$, $t_b = T$, e integramos en x , resultando tras tener en cuenta la normalización de las ψ_n :

$$\int dx K(x, T; x, 0) = \sum_n \exp\{-iE_n T/\hbar\} \int dx |\psi_n(x)|^2 = \sum_n \exp\{-iE_n T/\hbar\}$$

Esta fórmula nos relaciona el propagador con información más “tradicional” en la mecánica cuántica, como son los niveles de energía. Por otra parte, el núcleo para $x_a = x_b = x$ es:

$$K(x, T; x, 0) = \left[\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)} \right]^{1/2} \exp \left\{ \frac{2im\omega}{\hbar \sin(\omega T)} \sin^2 \left(\frac{\omega T}{2} \right) x^2 \right\}$$

Haciendo la integral en x , que es simplemente una gaussiana, tenemos:

$$\int dx K(x, T; x, 0) = \left[\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)} \right]^{1/2} \left[\frac{\pi \hbar \sin(\omega T)}{2im\omega \sin^2 \left(\frac{\omega T}{2} \right)} \right]^{1/2} = \frac{1}{2i \sin \left(\frac{\omega T}{2} \right)} = \frac{e^{-i\omega T/2}}{1 - e^{-i\omega T}}$$

Expandiendo el denominador en serie de potencias:

$$\frac{e^{-i\omega T/2}}{1 - e^{-i\omega T}} = e^{-i\omega T/2} \sum_n e^{-in\omega T} = \sum_n e^{-i\omega T(n+1/2)}$$

Al comparar las expresiones se llega a:

$$\sum_n \exp\{-iE_n T/\hbar\} = \sum_n e^{-i\omega T(n+1/2)}$$

Con lo cual las E_n valen:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (1.30)$$

Que es precisamente el espectro del oscilador armónico.

1.8. Expansión perturbativa

La aproximación de fase estacionaria se usa para describir fluctuaciones cuánticas alrededor de las soluciones clásicas. Sin embargo, no siempre es posible describir el problema de turno en esos términos, con lo cual es necesario desarrollar técnicas diferentes que nos permitan resolver otros tipos de problemas. Es por eso que se introduce la expansión perturbativa, la cual será especialmente útil en los casos donde el potencial sea relativamente débil comparado con la energía

cinética del sistema, como por ejemplo en los problemas de scattering. Podría pensar uno de primeras que la aproximación de fase estacionaria ya es una aproximación perturbativa, pero ambas teorías se basan en nociones distintas, como se explicará más adelante.

Tomamos como punto de partida el propagador de un sistema al moverse en un potencial $V(x, t)$ (nótese que aquí, a diferencia de en otras secciones, V sí depende de t).

$$K(b, a) = \int_a^b D(x) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t)\right]\right\} \quad (1.31)$$

Ahora se desarrolla en serie la parte de la exponencial que depende del potencial:

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V(x, t)\right\} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V(x, t) - \frac{1}{2! \hbar^2} \left[\int_{t_a}^{t_b} dt V(x, t)\right]^2 + \dots \quad (1.32)$$

Esta ecuación ilustra muy bien cuál es la diferencia conceptual entre la expansión perturbativa y la aproximación WKB. Aquí lo que se hace es expandir la exponencial en potencias de V , por lo que convergerá rápido cuando este sea débil. Es la misma idea que se usa en la teoría del scattering en la formulación estándar de la mecánica cuántica. Por el otro lado, en WKB se expande la acción en términos de las fluctuaciones alrededor de la trayectoria clásica, lo cual es una situación completamente distinta.

Usando el desarrollo (1.32), podemos escribir (1.31) como:

$$K(b, a) = K_0(b, a) + K_1(b, a) + K_2(b, a) + \dots \quad (1.33)$$

Donde:

$$\begin{aligned} K_0(b, a) &\equiv \int_a^b D(x) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2\right\} \\ K_1(b, a) &\equiv -\frac{i}{\hbar} \int_a^b D(x) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2\right\} \int_{t_a}^{t_b} ds V(x, s) \\ &\vdots \end{aligned} \quad (1.34)$$

Esto no es más que la expansión en serie de Born ya conocida de la teoría del scattering. Observamos que K_0 es precisamente el propagador de la partícula libre, cuya solución ya conocemos. También podemos ver claramente por qué este método es útil para potenciales débiles, ya que convergerá muy rápido.

Procedemos a calcular K_1 . Para ello, lo vamos a escribir de la forma:

$$K_1(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} ds F(s)$$

Con:

$$F(s) \equiv \int_a^b D(x) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_0[x]\right\} V[x(s), s]$$

$F(s)$ es una integral de camino, con lo cual podemos elegir una partición temporal de tal forma que el punto s coincida con un cierto t_j . Podemos escribirlo entonces como:

$$F(s) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N(\epsilon)}\right)^{n+1} \int dx_1 \dots \int dx_n \exp\left\{\frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{i=1}^{n+1} (x_i - x_{i-1})^2\right\} V(x_j, t_j)$$

Podemos separar la suma del exponente en dos, una desde 1 hasta j y otra desde $j + 1$ hasta n . Además, separamos la integral en x_j . Con todo esto se llega a:

$$F(s) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dx_j V(x_j, t_j) \times \left(\frac{1}{N(\epsilon)} \right)^j \int dx_1 \dots \int dx_{j-1} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{i=1}^j (x_i - x_{i-1})^2 \right\} \times \\ \times \left(\frac{1}{N(\epsilon)} \right)^{n-j+1} \int dx_{j+1} \dots \int dx_n \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{i=j+1}^{n+1} (x_i - x_{i-1})^2 \right\}$$

Notamos que la primera sucesión de integrales se corresponde con $K_0(j, a)$ y la segunda con $K_0(b, j)$. Si renombramos x_j como x , resulta finalmente:

$$F(s) = \int dx K_0(b; x, s) V(x, s) K_0(x, s; a)$$

Con esto K_1 queda como:

$$K_1(b; a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} ds \int dx K_0(b; x, s) V(x, s) K_0(x, s; a)$$

Recordando que, por definición, $K(b; a) = 0$ si $t_b < t_a$, podemos extender la integral en tiempos hasta infinito, con lo que la expresión se escribe de una forma más elegante.

$$K_1(b; a) = -\frac{i}{\hbar} \int ds \int dx K_0(b; x, s) V(x, s) K_0(x, s; a) \quad (1.35)$$

Se puede operar de la misma forma para encontrar K_2 . Llegamos a:

$$K_2(b; a) = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int ds' \int dx' \int ds \int dx K_0(b; x', s') V(x', s') K_0(x', s'; x, s) V(x, s) K_0(x, s; a) = \\ = -\frac{i}{\hbar} \int ds \int dx K_1(b; x, s) V(x, s) K_0(x, s; a)$$

Cabe resaltar que el factor $1/2!$ ha desaparecido, y esto se debe a que si $s' < s$, $K(x', s'; x, s) = 0$, con lo cual:

$$\int ds' \int ds V(s') V(s) = 2 \int \theta(s' - s) V(s') V(s)$$

Este resultado se puede generalizar fácilmente para K_n , obteniendo la fórmula:

$$K_n(b; a) = -\frac{i}{\hbar} \int ds \int dx K_{n-1}(b; x, s) V(x, s) K_0(x, s; a) \quad (1.36)$$

La expresión total del propagador será:

$$K(b; a) = \sum_{n=0}^{\infty} K_n(b; a) = K_0(b; a) - \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \int ds \int dx K_n(b; x, s) V(x, s) K_0(x, s; a)$$

Metiendo el sumatorio dentro de la integral, llegamos a una ecuación integral para K del tipo Bethe-Salpeter:

$$K(b; a) = K_0(b; a) - \frac{i}{\hbar} \int ds \int dx K(b; x, s) V(x, s) K_0(x, s; a) \quad (1.37)$$

Los K_n , que hasta ahora son simplemente resultados matemáticos obtenidos de hacer un desarrollo en serie, tienen una interpretación física muy interesante. Para verla, fijémonos en la ecuación (1.35) que define a K_1 . Ignorando en un principio la integral en tiempos (es decir, analizando lo que sería $F(s)$), vemos que se correspondería con una partícula que evoluciona libremente desde t_a hasta s , justo en el instante s actúa el potencial sobre la partícula, y desde s hasta t_b sigue evolucionando de manera libre.

Al hacer la integral en s , estamos teniendo en cuenta todos los posibles instantes en los que la partícula puede interactuar con el potencial, con lo cual K_1 será la amplitud de probabilidad de que la partícula interactúe con el potencial 1 vez. No es difícil ver que esto es cierto para todos los n : K_0 es la amplitud de que no interactúe (partícula libre), K_2 la de que lo haga 2 veces, ...

Esto se puede visualizar muy fácilmente con unos dibujos como los de la figura 1.3. Las representaciones gráficas de la trayectoria de la partícula presentes en la figura se suelen denominar como diagramas de Feynman, y para poder interpretarlos se les asocian unas reglas, conocidas como reglas de Feynman, y son las siguientes:

1. Una línea recta entre los puntos x_a y x_b se asocia con el propagador libre $K_0(b, a)$.
2. Un vértice representa una interacción con el potencial. Si hay un vértice en (x, t) , entonces eso se corresponde con un factor $-iV(x, t)/\hbar$, el cual hay que integrar en x y en t .

Se pueden hallar reglas similares para el espacio de momentos, y para encontrarlas hacemos uso de la transformada de Fourier. Para el potencial $V(x, t)$, si transformada de Fourier será $\tilde{V}(q, Q)$:

$$V(x, t) = \int dq \int dQ \tilde{V}(q, Q) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(qx - Qt)\right\} \quad (1.38)$$

Para encontrar las reglas, van a ser necesarias las siguientes identidades:

$$\begin{aligned} \int dx \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(k - p - q)x\right\} &= 2\pi\hbar\delta(k - p - q) \\ \int dt \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(F - E - Q)t\right\} &= 2\pi\hbar\delta(F - E - Q) \end{aligned} \quad (1.39)$$

$K_0(b; x, s)$ y $K_0(x, s; a)$ se pueden escribir en el espacio de momentos utilizando (1.27). Sabiendo esto, podemos usar (1.38) y (1.39) para reescribir K_1 como:

$$\begin{aligned} K_1(b; a) = \frac{i}{(2\pi\hbar)^4\hbar} \iiint dp \, dE \, dq \, dQ \frac{\exp\{i/\hbar[(p+q)x_b - (E+Q)t_b]\}}{-E+Q + (p+q)^2/2m - i\epsilon} \times \\ \times \tilde{V}(q, Q) \frac{\exp\{i/\hbar(px_a - Et_a)\}}{-E + p^2/2m - i\epsilon} \end{aligned} \quad (1.40)$$

A partir de esta ecuación, y de la conservación de la energía y el momento, podemos ver cuál es el significado de q y Q : son el momento y la energía (respectivamente) transmitidos por el potencial a la partícula, de forma que al final esta posee un momento $p' = p + q$ y una energía $E' = E + Q$. Sabiendo esto ya podemos escribir las reglas de Feynman, que serán:

1. Una línea recta (p, E) se corresponde con un factor:

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^2 i} \frac{1}{-E + p^2/2m - i\epsilon}$$

2. Un vértice (q, Q) se corresponde con un factor $-i\tilde{V}(q, Q)/\hbar$, y hay que integrar en q y Q . Además, ha de asegurarse la conservación de energía y momento en cada vértice.

Las reglas de Feynman para la mecánica cuántica ordinaria son tan sencillas que realmente no son necesarias en la mayoría de los casos. Sí que cobran una gran importancia es en la teoría cuántica de campos, donde la expansión perturbativa es fundamental, y los procesos por lo general pueden ser mucho más complicados. Las reglas de Feynman sirven en este caso como una receta bastante conveniente para poder calcular la amplitud de probabilidad de cada proceso. Estas reglas en QFT son muy similares a las que se han estudiado aquí para el espacio de momentos, con algunas diferencias debidas principalmente a la naturaleza relativista de la teoría.



Figura 1.3: Izquierda: diagramas de Feynman en el espacio de coordenadas, arriba el correspondiente a una partícula libre, y abajo el correspondiente a una interacción con el potencial. Derecha: diagramas equivalentes en el espacio de momentos.

Capítulo 2

Relación entre cuántica y estadística

En las tres primeras secciones de este capítulo, se recordarán conceptos de la física estadística, viendo que muchas de las expresiones obtenidas son sospechosamente similares a las que hemos visto para la mecánica cuántica. Esto nos permitirá establecer una conexión entre ambas ramas de la física, pudiendo incluso formular la mecánica estadística en términos de una integral de caminos, tal y como se ha hecho para la cuántica.

2.1. Colectividad canónica

En física estadística, una colectividad es una manera idealizada de representar un sistema físico. Consiste de un gran número de copias de un protosistema, idénticas, pero con una configuración diferente en el espacio de fases, cada una de ellas representando un posible microestado en el que se encuentra el sistema. Las propiedades macroscópicas del sistema serán el promedio sobre los distintos microestados. Este concepto fue introducido por J.W. Gibbs en 1902 [15].

El concepto de colectividad es tremendamente útil a la hora de tratar con sistemas en equilibrio termodinámico. En estos casos, aunque el sistema evolucione con el tiempo en el sentido mecánico (o microscópico), sus propiedades macroscópicas permanecerán fijas. Se dice que estos sistemas son estacionarios.

En función de las magnitudes macroscópicas que sean fijas en el sistema, se describirá con una colectividad u otra. En nuestro caso, nos vamos a centrar en la colectividad canónica, que es aquella para la que el número de partículas N , el volumen V y la temperatura T son constantes. Realmente no se deja fijo solo el volumen, sino que todos los parámetros externos que dan cuenta del trabajo intercambiado. Por ejemplo, en el caso de un sólido paramagnético, ese parámetro sería el momento magnético M .

Fijadas las magnitudes macroscópicas que se han fijado, se puede llegar a que la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado j con energía E_j viene dado por:

$$p_j = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_j} \quad (2.1)$$

Donde β se define de la manera siguiente (k es la constante de Boltzmann):

$$\beta \equiv \frac{1}{kT} \quad (2.2)$$

Y Z es la suma a todos los estados, conocida comúnmente con el nombre de función de partición, y cuya expresión es:

$$Z \equiv \sum_j e^{-\beta E_j} \quad (2.3)$$

La función de partición es una herramienta muy potente, ya que es posible escribir todas las magnitudes termodinámicas en función de Z . En efecto, si la entropía viene dada por la fórmula de Boltzmann, se tendrá en el caso de la colectividad canónica:

$$S = -k \sum_j p_j \ln(p_j) = k\beta \sum_j p_j E_j + k \ln(Z) \sum_j p_j = k\beta E + k \ln(Z) \quad (2.4)$$

La energía libre de Helmholtz F será en este caso:

$$F = E - TS = -\frac{1}{\beta} \ln(Z) \quad (2.5)$$

Con esto se pueden usar las relaciones termodinámicas (que se pueden consultar en cualquier libro sobre el tema, por ejemplo [17]) para obtener las magnitudes macroscópicas (U es la energía interna, P la presión y μ el potencial químico):

$$U = -\frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} \quad P = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} \quad \mu = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} \quad (2.6)$$

Se puede obtener aún más información a partir de Z haciendo las derivadas de mayor orden. Por ejemplo, con la segunda derivada se obtienen expresiones para la capacidad calorífica o el coeficiente de compresibilidad adiabático. Pero no es necesario entrar en más detalle con las propiedades termodinámicas de Z .

2.2. Matriz densidad

Al trabajar en mecánica cuántica con los vectores de estado, uno conoce toda la información posible del sistema, es decir, está perfectamente determinado. Obviamente, este no es siempre el caso, por lo que es necesario introducir una herramienta con la que sea posible tratar sistemas de cuyo estado tenemos una información incompleta, como por ejemplo, los estados macroscópicos. Esa herramienta será la matriz densidad.

Supongamos que tenemos una mezcla estadística de estados $|\psi_j\rangle$ en los que se puede encontrar el sistema, y la probabilidad de que se encuentre en cada uno de ellos es p_j , con $\sum_j p_j = 1$. Entonces, el sistema se puede describir por la siguiente matriz:

$$\rho = \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \quad (2.7)$$

El valor esperado de un observable A viene dado por:

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) \quad (2.8)$$

La evolución temporal de ρ , por su parte, sigue la siguiente fórmula:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)] \quad (2.9)$$

Los elementos de matriz de ρ tienen significado físico, y dicho significado será distinto dependiendo de si son elementos de la diagonal o no. Sea $\{|u_n\rangle\}$ una base ortonormal del espacio de Hilbert. Entonces, los elementos de la diagonal vendrán dados por:

$$\rho_{nn} = \langle u_n | \rho | u_n \rangle = \sum_j p_j |\langle u_n | \psi_j \rangle|^2 \quad (2.10)$$

Esta fórmula nos dice que ρ_{nn} es la probabilidad media de encontrar al sistema en el estado $|u_n\rangle$. Por eso a los elementos de la diagonal se les llama poblaciones. Obviamente $\sum_n \rho_{nn} = 1$.

Por otra parte, los elementos de fuera de la diagonal son:

$$\rho_{nn'} = \langle u_n | \rho | u_{n'} \rangle = \sum_j p_j \langle u_n | \psi_j \rangle \langle \psi_j | u_{n'} \rangle \quad (2.11)$$

$\langle u_n | \psi_j \rangle \langle \psi_j | u_{n'} \rangle$ representa los efectos de interferencia entre $|u_n\rangle$ y $|u_{n'}\rangle$ que pueden aparecer en el estado $|\psi_j\rangle$, con lo cual $\rho_{nn'}$ es la media de todas estas interferencias en el sistema. A estos elementos se les denomina coherencias, ya que si son distintos de 0, entonces hay efectos de coherencia entre los estados.

Una propiedad interesante de ρ es que cuando es función de la energía, $\rho = f(H)$, entonces se deduce fácilmente de (2.9) que ρ no depende del tiempo, con lo cual el sistema que describe será estacionario.

En esos casos, ρ será diagonal en la base que diagonaliza H . Con lo cual, $\rho_{nn'} = 0 \quad \forall n \neq n'$, y no existirán coherencias entre esos estados.

Por último, es interesante tener la expresión de los elementos de matriz de ρ en el espacio de coordenadas, la cual es muy fácil de obtener:

$$\rho(x, x') = \langle x' | \rho | x \rangle = \sum_j p_j \psi_j(x') \psi_j^*(x) \quad (2.12)$$

2.3. Función de partición cuántica

Se define el operador densidad normalizado de una colectividad canónica de la siguiente manera:

$$\rho_N \equiv \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \quad (2.13)$$

Con Z la función de partición definida en (2.3), y H el hamiltoniano del sistema.

Un detalle que cabe resaltar es que Z se puede ver en principio como simplemente un factor de normalización para que $\text{Tr}(\rho_N) = 1$, pero es fácil ver que ese factor coincide con (2.3), ya que, si $\{|\psi_j\rangle\}$ es la base de autoestados del hamiltoniano:

$$Z = \text{Tr} \left(e^{-\beta H} \right) = \sum_j \langle \psi_j | e^{-\beta H} | \psi_j \rangle = \sum_j e^{-\beta E_j} \quad (2.14)$$

Es bastante común trabajar usando una matriz densidad sin normalizar, ya que ciertas expresiones son más cómodas de manejar. En este trabajo vamos a hacer eso, con lo cual definiremos ρ como:

$$\rho \equiv e^{-\beta H} \quad (2.15)$$

Ahora, en vez de tener $\text{Tr}(\rho) = 1$, tenemos que $\text{Tr}(\rho) = Z$.

Nos interesa ver cómo son los elementos de matriz de ρ . En la base propia de H tenemos:

$$\rho_{ij} = \langle \psi_j | e^{-\beta H} | \psi_i \rangle = e^{-\beta E_i} \delta_{ij} \quad (2.16)$$

Vemos que solamente los elementos de la diagonal son no nulos, con lo cual ρ describe un sistema estacionario, como cabría esperar, ya que estamos tratando un sistema en equilibrio térmico.

Por otra parte, en el espacio de coordenadas:

$$\rho(x, x') = \sum_j \psi_j(x') e^{-\beta H} \psi_j^*(x) = \sum_j e^{-\beta E_j} \psi_j(x') \psi_j^*(x) \quad (2.17)$$

Usando esto, podremos escribir Z de la manera siguiente:

$$Z = \text{Tr}(\rho) = \int dx \rho(x, x) \quad (2.18)$$

Consideremos ahora la matriz densidad como función de β , y veamos cómo evoluciona en función de ese parámetro. Derivando (2.16):

$$\frac{\partial \rho_{ij}}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_i} \delta_{ij} = -E_i \rho_{ij}$$

Con lo cual la ecuación diferencial para ρ es:

$$H\rho = -\frac{\partial \rho}{\partial \beta} \quad (2.19)$$

A esta ecuación se la conoce con el nombre de ecuación de Bloch, y no es más que un caso particular de la ecuación del calor, cuya forma más general tiene la expresión siguiente:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - F \right) f(x, t) = 0 \quad (2.20)$$

Donde F es un operador diferencial elíptico, que actúa sobre las variables x . Los operadores elípticos están definidos por la condición de que no presenta direcciones características reales. Pueden verse como una especie de generalización del operador laplaciano, y de hecho, si F coincide justo con el laplaciano, entonces la ecuación del calor toma su forma más conocida:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \nabla^2 \right) f(x, t) = 0$$

La ecuación del calor general es de gran relevancia en teoría cuántica de campos y gravedad cuántica, donde se utiliza la expansión asintótica del núcleo de (2.20) para calcular la acción efectiva, como puede verse en [20].

2.4. Integral de caminos en mecánica estadística

Como ya se había adelantado, algunas de las fórmulas obtenidas en este capítulo son muy parecidas a otras del capítulo 1. El primer ejemplo que salta a la vista es que la ecuación de Bloch (2.19) es prácticamente igual a la de Schrödinger (1.9) (1.11), con la salvedad de un factor $-i\hbar$. Por otra parte, la expresión del núcleo en el espacio de coordenadas (1.15) es tremendamente

similar a la de la matriz densidad (2.17), y lo mismo pasa con la función de onda (1.10) y la función de partición (2.18). De hecho, todas las expresiones de la parte cuántica se convierten en las de física estadística al hacer el siguiente cambio:

$$t \rightarrow -i\hbar\beta \quad (2.21)$$

Este nuevo parámetro $-i\hbar\beta$ tiene unidades de tiempo, pero no representa nada que físicamente tenga que ver con un tiempo. Además, es imaginario puro, lo cual podría parecer a primera vista un inconveniente, pero en muchos aspectos es una ventaja, como veremos más adelante.

La ecuación (2.21) se podría ver en principio como un simple cambio de variable, pasando de una variable real a una compleja, lo que suele denominarse como rotación de Wick. Sin embargo, tiene una interpretación mucho más interesante, y es que se puede entender la mecánica estadística como la continuación analítica de la cuántica (o al revés), una definida en el eje imaginario y la otra en el real. Desde este punto de vista, cuántica y estadística son dos partes de lo mismo.

Viendo cómo están relacionadas la cuántica y la mecánica estadística, vamos a formular la matriz densidad como integral de caminos. Para ello, haremos un desarrollo totalmente análogo al que se hizo en la sección 1.2.

En el caso cuántico considerábamos una partícula que inicialmente (escogemos $t_a = 0$ por conveniencia) se encontraba en x_a , y al cabo de un tiempo t se encuentra en x_b . Al hacer el cambio de variable, nuestro sistema estará en x_a a “tiempo imaginario” 0 (temperatura infinita), y en x_b a $-i\hbar\beta$. Si antes dividíamos t en $n + 1$ subintervalos de longitud ϵ , podemos hacer algo análogo con $\hbar\beta$, dividiéndola también en $n + 1$ subintervalos, pero ahora llamamos a esta longitud infinitesimal η , de manera que tenemos:

$$t_k = k\epsilon, \quad k = 0, \dots, n + 1$$

$$\hbar\beta_k = k\eta, \quad k = 0, \dots, n + 1$$

Al aplicar (2.21), nos queda para los intervalos infinitesimales:

$$\epsilon \rightarrow -i\eta \quad (2.22)$$

Tomemos la acción (1.6). Consideremos un potencial que no dependa ni de la velocidad ni del tiempo. Al hacer el cambio a tiempo imaginario, resulta:

$$\begin{aligned} S &= \sum_{k=1}^{n+1} \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_k) \right] \rightarrow \\ &\rightarrow \tilde{S} = i \sum_{k=1}^{n+1} \eta \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{i\eta} \right)^2 - V(x_k) \right] = -i \sum_{k=1}^{n+1} \eta \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\eta} \right)^2 + V(x_k) \right] \end{aligned}$$

Basándose en esta expresión, se define la acción euclídea S_E como:

$$S_E \equiv \sum_{k=1}^{n+1} \eta \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\eta} \right)^2 + V(x_k) \right] \quad (2.23)$$

Vemos que el término entre corchetes ya no tiene la forma de un lagrangiano, sino la de un hamiltoniano, lo cual indica que vamos por el buen camino, ya que en las expresiones de la física

estadística lo que aparecen son hamiltonianos. En realidad sería el “lagrangiano euclídeo”, y sería el análogo del lagrangiano tradicional en tiempo imaginario. A estos objetos se les pone el sobrenombre “euclídeos” porque realizar la continuación analítica a tiempos imaginarios es equivalente a transformar la métrica de Minkowski en la métrica euclídea.

Igualmente, el término $\left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\eta}\right)$ no sería una velocidad real en el sentido físico, pero sí que tiene las dimensiones correctas. En verdad, lo que estamos haciendo es buscarle un análogo físico a estas expresiones matemáticas. A pesar de todo eso, lo denominaremos como \dot{x} .

Tomando el límite $n \rightarrow \infty$, podemos escribir S_E en la forma integral:

$$S_E = \hbar \int_0^\beta d\beta' \left\{ \frac{1}{2} m \dot{x}^2(\beta') + V[x(\beta')] \right\} \quad (2.24)$$

En el capítulo 1 obtuvimos K integrando $e^{iS/\hbar}$ a todos los valores posibles de todos los x_k . También hemos visto que con el cambio de variable pasamos de K a ρ , con lo cual para ρ la integral sería:

$$\rho(x_b, x_a; \beta) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N(\eta)} \right)^{n+1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n e^{-S_E/\hbar} \quad (2.25)$$

Donde ahora el factor de normalización $N(\eta)$ tiene la siguiente expresión:

$$N(\eta) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\eta}{m}} \quad (2.26)$$

En la notación simplificada, ρ queda como:

$$\rho(x_b, x_a; \beta) = \int D(x) e^{-S_E/\hbar} \quad (2.27)$$

Vemos que la forma de ρ es muy parecida a la de su definición (2.15), ya que pasamos de tener un término $\exp\{-\beta H\}$ a uno $\exp\{-\int d\beta H\}$.

Trabajar en tiempo imaginario tiene interés no solo porque refleja la relación que existe entre la mecánica cuántica y la mecánica estadística, sino también porque es útil desde el punto de vista matemático. En primer lugar, existen situaciones en las que es más fácil definir la integral de caminos correspondiente a la acción euclídea que la de la acción tradicional, sobre todo cuando el hamiltoniano es más complicado. Por otro lado, al estar tratando con exponenciales reales en vez de exponenciales complejas, a la hora de hacer un cálculo numérico, las integrales convergen mucho más rápido.

2.5. Aproximación clásica

En el caso de la integral de caminos de la mecánica estadística, el límite clásico es aún más sencillo de visualizar. En dicho límite, tenemos que $\hbar \rightarrow 0$, con lo cual, si la temperatura no es muy baja, también será cierto que $\beta\hbar \rightarrow 0$.

A la hora de calcular la función de partición Z , solo nos interesan las trayectorias que empiezan y acaban en el mismo punto x_a . Como el “tiempo” de evolución $\beta\hbar$ es muy corto, los caminos que se alejen mucho de x_a tendrán unas “energías cinéticas” muy altas, con lo cual la

exponencial que aparece en (2.25) tenderá a 0, y ese camino no tendrá una contribución apreciable. Por lo tanto, podemos considerar que contribuyen principalmente los caminos en los que $V[x(\beta)] \approx V(x_a)$. Si hacemos esta aproximación, $V \neq V(\beta)$, y se puede sacar de la integral.

$$\rho(x_a, x_a) = e^{-\beta V(x_a)} \int_{x_a}^{x_a} D[x(\beta)] \exp\left\{\frac{1}{2}m\dot{x}^2(\beta)\right\}$$

Esta integral es la de la partícula libre, y se resuelve exactamente de la misma forma que en el primer capítulo. Solamente hay que hacer el cambio de tiempo real a tiempo imaginario en la solución (1.25), obteniendo:

$$\rho(x_a, x_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} e^{-\beta V(x_a)}$$

La función de partición se obtiene sin más que integrar a todos los valores de x_a , resultando:

$$Z(\beta) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} \int dx_a e^{-\beta V(x_a)} \quad (2.28)$$

Esta es una fórmula de la función de partición válida en el límite clásico. De hecho, es igual a la fórmula que dedujo Boltzmann en el marco de la teoría clásica, pero en su caso había un factor multiplicativo indeterminado, ya que por entonces no se conocía cómo estaba celdificado el espacio de fases (\hbar). A la integral que aparece en la fórmula se la suele denominar como integral de configuración.

El caso que hemos considerado es muy simple, ya que solo hay una variable (x_a), pero en casos más complicados obtendríamos un resultado equivalente: la integral de caminos de todas las partículas libres, multiplicada por la integral de configuración, donde V dependerá de todas las variables.

Esta aproximación deja de ser válida cuando la temperatura es muy baja, o cuando el potencial varía muy rápidamente con x , y en esos casos, empiezan a aparecer efectos cuánticos. Ejemplos de sistemas en los que el límite clásico no se puede aplicar son el helio líquido y los electrones en un metal.

2.6. Espectros de energía. Fórmula de Feynman-Kac

Una de las grandes ventajas de trabajar usando tiempo imaginario es que el cálculo de la energía del estado fundamental es muy sencillo. Veamos cómo hacerlo.

Tomemos como punto de partida la función de partición. En el límite $\beta \rightarrow \infty$, que se correspondería con el límite de temperaturas bajas, podemos escribir:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} Z(\beta) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \sum_j e^{-\beta E_j} \rightarrow e^{-\beta E_0}$$

Ya que los términos con $E_j > E_0$ se hacen despreciables. Tomando el logaritmo de la expresión anterior (no va a haber ningún inconveniente con las ramas del logaritmo, ya que solamente hay números reales positivos) llegamos a:

$$E_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta} \ln Z(\beta) \quad (2.29)$$

La ecuación anterior se conoce a veces con el nombre de fórmula de Feynman-Kac, y es extremadamente útil para obtener la energía del estado fundamental, ya que no es necesario conocer

completamente la función de partición, sino que basta con conocer el comportamiento asintótico. Cabe resaltar que muchos autores al hablar de la fórmula de Feynman-Kac no se refieren a (2.29), sino a la fórmula general del propagador para una acción euclídea.

Históricamente, Feynman y Kac llegaron a la misma fórmula trabajando en campos en principio completamente distintos. Feynman lo hizo estudiando la integral de caminos, mientras que Kac llegó a ella en el estudio de procesos estocásticos [22], basándose de hecho en los ya mencionados trabajos de Wiener sobre el movimiento browniano.

Otro aspecto que merece la pena comentar es que la función de partición no solo sirve para obtener información del estado fundamental, sino de todo el espectro. Consideremos la matriz densidad dada por (2.17). Su transformada de Laplace $\tilde{\rho}$ es:

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}(x, x'; E) &= \int_0^\infty d\beta e^{\beta E} \rho(x, x'; \beta) = \int_0^\infty d\beta e^{\beta E} \sum_j e^{-\beta E_j} \psi_j(x') \psi_j^*(x) = \\ &= \int_0^\infty d\beta \sum_j e^{\beta(E-E_j)} \psi_j(x') \psi_j^*(x) = \sum_j \frac{\psi_j(x') \psi_j^*(x)}{E - E_j}\end{aligned}$$

La traza de $\tilde{\rho}$ será precisamente la transformada de Laplace de Z , y la denotaremos como G .

$$G(E) = \int dx \tilde{\rho}(x, x; E) = \int dx \sum_j \frac{\psi_j(x) \psi_j^*(x)}{E - E_j} = \sum_j \frac{1}{E - E_j} \quad (2.30)$$

Vemos que esta función, en el caso de un espectro discreto, tiene polos para las energías de los estados ligados, y si tenemos un intervalo con espectro continuo, G no estará definida en esa zona.

2.7. Aplicación de la integral de caminos euclídea: mercados financieros

Hemos visto cómo la metodología de la integral de caminos, original de la mecánica cuántica, se puede utilizar en otra rama de la física como es la mecánica estadística. Pero el rango de usos no acaba ahí, ya que, como ya hemos visto, Kac usó estas mismas ideas para tratar procesos estocásticos. De ahí surge una aplicación bastante sorprendente y que a primera vista no guarda relación alguna con la física: el estudio de los mercados financieros a partir de un modelo de integral de caminos. Intentemos entender cuáles son las ideas principales de este modelo.

El principio fundamental en el campo de las finanzas es la ausencia de arbitraje, que en esencia asegura que los distintos mercados se hallan en equilibrio, es decir, no es posible comprar un activo financiero (por ejemplo acciones) en un mercado y venderlo inmediatamente después en otro mercado por un precio más alto. Este principio juega el mismo rol que el de mínima acción en física. Gracias a esto, se pueden definir funciones que juegan el mismo rol que el lagrangiano, y funcionales equivalentes a la acción.

Una opción financiera es un instrumento financiero que da a su adquirente el derecho de comprar o vender un activo a un cierto precio determinado (precio de strike) hasta una fecha de vencimiento. El valor de una opción no es exactamente su precio de strike, sino que también dependerá del precio del activo y del tiempo. Este valor satisface una ecuación diferencial conceptualmente

equivalente a la de Schrödinger, que es la ecuación de Black-Scholes:

$$\frac{\sigma^2}{2} S^2 \frac{\partial^2 \mathcal{O}_F}{\partial S^2} + rS \frac{\partial \mathcal{O}_F}{\partial S} - r\mathcal{O}_F = -\frac{\partial \mathcal{O}_F}{\partial t} \quad (2.31)$$

Donde \mathcal{O}_F es el valor de la opción como función del precio del activo S y el tiempo t , σ da cuenta de la volatilidad del activo, y r es la tasa de interés libre de riesgo. Esta ecuación se deduce de la ausencia de arbitraje, suponiendo que S sigue un comportamiento browniano. Obviamente, los principios en los que se basa esta ecuación no son principios universales como los de la física, y de hecho, no son ciertos en situaciones extremas, como en cracs financieros.

Introduciendo la variable $x = \ln S$, la ecuación (2.31) adquiere la siguiente forma:

$$\frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{O}_F}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial \mathcal{O}_F}{\partial x} - r\mathcal{O}_F = -\frac{\partial \mathcal{O}_F}{\partial t} \quad (2.32)$$

Con $\mu \equiv r - \sigma^2/2$. Vemos que tiene forma de ecuación del calor (2.20), cuya solución sabemos que se puede expresar como una integral de caminos, al igual que para la ecuación de Bloch. La condición de contorno que nos permitirá resolver esta ecuación es su valor en el instante en el que expira la opción (al que llamamos T). Vamos a considerar el caso más sencillo (y el que más se parece a los casos físicos que ya hemos visto), que es en el que dicho valor solo depende de S en el instante T , y no de su valor en tiempos anteriores. Escrito en forma de ecuación:

$$\mathcal{O}_F(S_T, T) = F(S_T) \quad (2.33)$$

Donde F es una cierta función de S_T . En general, la solución de (2.32) con la condición (2.33) se podrá expresar como una integral de caminos, de manera muy similar a como se hacía con la función de onda o con la función de partición:

$$\mathcal{O}_F(S, t) = e^{-r(T-t)} \int_{-\infty}^{\infty} dx_T \left\{ \int_{x(t)=x}^{x(T)=x_T} D[x(t')] F(e^{x_T}) e^{-A_{BS}[x(t')]} \right\} \quad (2.34)$$

A_{BS} es la acción de Black-Scholes, que, al igual que para la acción convencional, es la integral temporal de un lagrangiano, que en este caso será el lagrangiano de Black-Scholes, el cual se define como:

$$\mathcal{L}_{BS}(t') = \frac{1}{2\sigma^2} (\dot{x}(t') - \mu)^2 \quad (2.35)$$

La acción no será más que:

$$A_{BS} = \int_t^T dt' \mathcal{L}_{BS}(t') \quad (2.36)$$

Nótese que en (2.34) aparece un factor $e^{-r(T-t)}$, el cual no aparecía en las otras integrales de caminos, pero esto es simplemente por cómo se define el lagrangiano. El término r puede verse como un factor constante del “potencial” que actúa sobre \mathcal{O}_F , y se podía haber incluido en la definición de \mathcal{L}_{BS} , de forma que ya no aparezca explícitamente esa exponencial.

Atendiendo a la expresión de \mathcal{L}_{BS} , es fácil ver que A_{BS} puede reescribirse como:

$$A_{BS} = \frac{\mu^2}{2\sigma^2} (T-t) - \frac{\mu}{\sigma^2} (x_T - x) + \int_t^T dt' \frac{1}{2\sigma^2} \dot{x}(t')^2$$

Donde el último término sería la acción correspondiente a un proceso sin deriva, o para entenderlo en términos físicos, una “partícula libre”, que no nota ningún “potencial”.

Con la acción así escrita, vemos que el único término en (2.34) que depende de t' es justo la “acción de la partícula libre”, y se puede escribir como:

$$\mathcal{O}_F(S, t) = e^{-r(T-t)} \int_{-\infty}^{\infty} dx_T F(e^{x_T}) e^{-\mu^2/2\sigma^2(T-t) + \mu/\sigma^2(x_T-x)} \mathcal{K}(x_T, T; x, t)$$

\mathcal{K} es la función de Green del proceso sin deriva, que será análoga al propagador de la partícula libre. Como ya sabemos, viene dada por:

$$\mathcal{K}(x_T, T; x, t) = \int_{x(t)=x}^{x(T)=x_T} D[x(t')] \exp\left\{ \int_t^T dt' \frac{1}{2\sigma^2} \dot{x}(t')^2 \right\} \quad (2.37)$$

Ya sabemos cuál es la solución del propagador libre, con lo cual no hace falta más que tomar (1.25) y ajustar las constantes, obteniéndose:

$$\mathcal{K}(x_T, T; x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(T-t)}} \exp\left\{ -\frac{(x_T - x)^2}{2\sigma^2(T-t)} \right\}$$

Sustituyendo el valor de \mathcal{K} , llegamos finalmente a la expresión para $\mathcal{O}_F(S, t)$:

$$\mathcal{O}_F(S, t) = e^{-r(T-t)} \int_{-\infty}^{\infty} dx_T F(e^{x_T}) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(T-t)}} \exp\left\{ -\frac{[x_T - x - \mu(T-t)]^2}{2\sigma^2(T-t)} \right\} \quad (2.38)$$

Esta integral será más fácil o más difícil de calcular dependiendo de cómo de complicado sea F .

Capítulo 3

Casos particulares

En este capítulo se van a aplicar las ideas desarrolladas en los anteriores para la resolución de distintos problemas, tanto de mecánica cuántica como estadística. Además, se estudiará el efecto que tiene la topología del espacio de fases de un sistema sobre la cuantización. Resaltar que a partir de este momento se va a utilizar el sistema de unidades naturales, con lo cual $\hbar = 1$.

3.1. Ideas previas: topología y cuantización

Hasta ahora hemos trabajado, en el caso de los sistemas cuánticos, exclusivamente en el formalismo lagrangiano. Sin embargo, para ciertos casos más complicados es recomendable usar el formalismo hamiltoniano. Una situación muy común donde es necesario hacer esto es cuando el hamiltoniano que describe la evolución del sistema no se puede separar de la forma $\mathcal{H} = p^2/2m + V(q)$. Recordemos brevemente cómo están relacionados lagrangiano y hamiltoniano a partir de la transformación de Legendre:

$$H(p, q; t) = \dot{q}(t)p(t) - \mathcal{L}(q, \dot{q}; t) \quad (3.1)$$

Donde

$$p(t) = \frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q}; t)}{\partial \dot{q}} \quad (3.2)$$

Sustituyendo (3.1) en $S = \int dt \mathcal{L}$ resulta:

$$S(q, p) = \int_{t_a}^{t_b} dt [\dot{q}(t)p(t) - H(q, p; t)] \quad (3.3)$$

El primer término del integrando, $\int dt \dot{q}p$, representa el área entre la trayectoria clásica y el eje $p = 0$. Usando la notación del producto exterior, se puede escribir como:

$$\int_{\partial D} dt \dot{q}(t)p(t) = \int_D dp \wedge dq \quad (3.4)$$

Donde ∂D , además de ser el contorno de D , contiene la trayectoria clásica y una curva fija de referencia. Si ahora parametrizamos el espacio de fases de una forma diferente, introduciendo unas nuevas coordenadas u_α , tenemos:

$$\int_D dp \wedge dq = \int_D \sum_{\alpha\beta} \omega_{\alpha,\beta}(u) du_\alpha \wedge du_\beta \quad (3.5)$$

Usando la terminología de las formas diferenciales (consultar el anexo para más información), $\omega \equiv \sum_{\alpha\beta} \omega_{\alpha,\beta}(u) du_\alpha \wedge du_\beta$ es una 2-forma, que por construcción, se obtiene de diferenciar una 1-forma. En este caso:

$$\begin{aligned} \omega &= \mathcal{D}\omega' \\ \omega' &= p(u) \sum_{\alpha} \frac{dq}{u_\alpha} du_\alpha = \sum_{\alpha} \omega_\alpha du_\alpha \end{aligned} \quad (3.6)$$

A ω se le denomina con el nombre de forma simpléctica. Como viene indicado en el anexo, \mathcal{D}^2 aplicado sobre formas diferenciales se anula, tenemos que:

$$\mathcal{D}\omega = 0 \quad (3.7)$$

Lo que implica esta condición es que las ecuaciones del movimiento dependen del contorno del dominio de integración ∂D , pero no del interior, lo cual se veía intuitivamente en la parametrización original.

Localmente, la ecuación (3.7) se puede integrar de la misma manera que $dp \wedge dq$ se puede integrar en pdq . Sin embargo, si el espacio de fase tiene propiedades topológicas no triviales, puede que no sea posible integrarla globalmente, y se dice que la forma simpléctica ω no es exacta. En este caso, la acción S no está bien definida, y pueden existir varios valores de S que sean solución. Esta propiedad es de crucial importancia en mecánica cuántica, ya que en la integral de caminos aparece explícitamente la acción, concretamente lo hace como e^{iS} . Para que la integral de caminos tenga sentido, el factor de fase tiene que ser independiente de la elección concreta del valor de la acción. Como veremos en los ejemplos posteriores, esto tiene como consecuencia que ciertas magnitudes estén cuantizadas.

Este mismo desarrollo se puede realizar de manera análoga trabajando con tiempos imaginarios. Aplicando (2.21) en (3.3), resulta para la acción euclídea:

$$S_E(q, p) = \int_{\beta_a}^{\beta_b} d\beta [-i\dot{q}(\beta)p(\beta) + H(q, p; \beta)] \quad (3.8)$$

En este caso, en vez de integrar $dp \wedge dq$ hay que integrar $-idp \wedge dq$, pero como ahora lo que aparece en la integral de caminos es e^{-S_E} , la condición de que el factor fase no pueda depender de la elección de la acción es exactamente la misma.

3.2. Rotor rígido

Como primer ejemplo ilustrativo vamos a calcular al espectro del rotor rígido bidimensional, el cual es un sistema invariante bajo el grupo $O(2)$ (rotaciones y reflexiones en el plano). Realizamos este caso y no uno de dimensionalidad más alta porque este es el único con solución analítica exacta.

El lagrangiano del rotor, si se parametriza la circunferencia por un único ángulo θ , viene dado por:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m R^2 \dot{\theta}^2 \quad (3.9)$$

Ya que lo que nos interesa es el comportamiento cualitativo del sistema, tomamos $m = R = 1$, de forma que así queden expresiones más sencillas. Por ejemplo, tendríamos ahora para el lagrangiano:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{\theta}^2$$

Este lagrangiano es muy similar al de la partícula libre, con la diferencia de que θ es una variable angular, lo que hace que el espacio de fases tenga propiedades topológicas no triviales, que veremos más adelante. La acción derivada de este lagrangiano es, en el intervalo $(0, t)$:

$$S = \int_0^t dt' \frac{1}{2} \dot{\theta}(t')^2 \quad (3.10)$$

Se vio en el capítulo anterior que el sistema se puede interpretar desde el punto de vista cuántico o desde el estadístico, siendo ambas descripciones totalmente equivalentes. Vamos a resolver el sistema estadístico, para ver que en efecto se obtienen las mismas soluciones que en el ya conocido caso cuántico. Haciendo la continuación analítica a tiempos imaginarios, queda que la acción euclídea tiene esencialmente la misma expresión (aquí t no denota el tiempo, es una variable muda):

$$S_E = \int_0^\beta dt \frac{1}{2} \dot{\theta}(t)^2 \quad (3.11)$$

Usando esto, podemos calcular los elementos de matriz del operador densidad a partir de la integral de caminos:

$$\rho(\theta'', \theta'; \beta) = \int D(\theta) \exp \left\{ - \int_0^\beta dt \frac{1}{2} \dot{\theta}(t)^2 \right\} \quad (3.12)$$

Donde $\theta' = \theta(0)$, $\theta'' = \theta(\beta)$. A la hora de evaluar esta integral, hay que tener en cuenta el carácter cíclico de la variable angular. Debido a la simetría del problema, (3.12) deberá de dar lo mismo si se hace una traslación de θ' y θ'' , es decir, únicamente puede depender de la diferencia $\theta'' - \theta'$. Además, es periódica en ambos ángulos. Gracias a estas propiedades, podemos expandir ρ en serie de Fourier:

$$\rho(\theta'', \theta'; \beta) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{i(\theta'' - \theta')l} f_l = \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{i(\theta'' - \theta')l} e^{-\beta E_l} \quad (3.13)$$

Hemos identificado los coeficientes de Fourier f_l con los autovalores de $e^{-\beta H}$ (el operador densidad) porque las funciones $e^{il\theta}$ forman una base ortogonal, y debido a su simetría rotacional, $e^{-\beta H}$ es diagonal en esta base. Escribimos esta relación de la forma inversa, es decir, los $e^{-\beta E_l}$ en función de ρ , usando la fórmula para los coeficientes de Fourier:

$$e^{-\beta E_l} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d(\theta'' - \theta') e^{i(\theta' - \theta'')l} \rho(\theta'', \theta'; \beta) \quad (3.14)$$

Si resolvemos las ecuaciones clásicas del movimiento¹, llegamos a que existe un número infinito de trayectorias que parten de θ' y llegan a θ'' , y son las siguientes:

$$\bar{\theta}_q(t) = \theta' + (\theta'' - \theta' + 2\pi q)t/\beta \quad (3.15)$$

Donde $q \in \mathbb{Z}$ es el índice de la trayectoria, es decir, el número de vueltas que describe (contando como positivo el sentido antihorario y negativo el horario). Trayectorias con distinto índice son topológicamente diferentes, ya que no se pueden deformar de manera continua unas en otras, con lo cual, si integramos sobre las fluctuaciones alrededor una trayectoria con un cierto q , no puede haber contribuciones de trayectorias con q distinto. Por esta razón hay que hacer una suma para todos los posibles valores de q .

¹Recordar siempre que la t que aparece en las ecuaciones juega un rol similar al del tiempo, pero no es realmente un tiempo propiamente dicho. Es una variable que sirve para describir la evolución del sistema.

Podemos operar ahora de una manera similar a como se hacía en la aproximación WKB, y escribir las trayectorias como:

$$\theta(t) = \bar{\theta}_q(t) + u(t)$$

Donde, al igual que entonces, $u(t)$ es nulo en los puntos inicial y final. Con todo esto, tenemos que²:

$$\dot{\theta}(t) = (\theta'' - \theta' + 2\pi q)/\beta + \dot{u}(t)$$

El operador densidad se escribirá, partiendo de (3.12), como:

$$\rho(\theta'', \theta'; \beta) = \mathcal{N}(\beta) \sum_{q=-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2\beta}(\theta'' - \theta' + 2\pi q)^2\right\}$$

Donde:

$$\mathcal{N}(\beta) = \int_{u(0)=0}^{u(\beta)=0} D(u) \exp\left\{-\int_0^\beta dt \frac{1}{2}\dot{u}(t)^2\right\}$$

$\mathcal{N}(\beta)$ no depende de θ' , θ'' o q . Al representar $u(t)$ las fluctuaciones sobre la trayectoria clásica, es de esperar que en este caso su naturaleza angular no afecte a los cálculos, ya que las trayectorias que se desvíen mucho de la clásica tendrán una contribución despreciable. Por lo tanto, la integral será sencillamente la de la partícula libre:

$$\mathcal{N}(\beta) = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}$$

Volviendo a la ecuación (3.14), tenemos que para $e^{-\beta E_l}$,

$$e^{-\beta E_l} = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \frac{1}{2\pi} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} d(\theta'' - \theta') \exp\left\{-\frac{1}{2\beta}(\theta'' - \theta' + 2\pi q)^2 + i(\theta' - \theta'')l\right\}$$

Para evaluar la integral, hacemos el siguiente cambio de variable:

$$\varphi = \theta'' - \theta' + 2\pi q$$

Sustituyendo queda:

$$e^{-\beta E_l} = \sqrt{\frac{1}{2\pi\beta}} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \int_{2\pi q}^{2\pi(q+1)} d\varphi \exp\left\{-\frac{1}{2\beta}\varphi^2 - i\varphi l\right\}$$

Haciendo la suma en q , resulta la integral gaussiana:

$$e^{-\beta E_l} = \sqrt{\frac{1}{2\pi\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi \exp\left\{-\frac{1}{2\beta}\varphi^2 - i\varphi l\right\}$$

El cálculo se puede realizar fácilmente, usando las fórmulas del anexo, y se obtiene:

$$e^{-\beta E_l} = e^{-\beta l^2/2} \tag{3.16}$$

Vemos que se recupera el espectro de energías correcto, cuyo resultado conocido es (recuperando las constantes que hemos tomado iguales a 1):

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2mR^2} l^2$$

²El punto denota derivada con respecto a t , aunque no sea estrictamente la derivada temporal.

3.3. Monopolo magnético

Otro sistema de interés donde las propiedades topológicas del espacio afectan a la cuantización es el monopolo magnético. Cualquier persona con un cierto conocimiento en física sabe que no hay ninguna evidencia experimental de la existencia de monopolos magnéticos. Sin embargo, existen razones que justifican su estudio. Dirac demostró en 1931 [26] que, de existir algún monopolo en el universo (aunque fuese solo uno), entonces la carga eléctrica estará cuantizada, y la relación de cuantización será³:

$$2eg \in \mathbb{N} \quad (3.17)$$

Donde g denota la carga magnética, y e la carga eléctrica fundamental. Es totalmente cierto que en nuestro universo, la carga eléctrica está cuantizada, pero eso no implica necesariamente la existencia de monopolos. A pesar de ello, no se ha encontrado todavía otra teoría globalmente aceptada que explique por qué las cargas eléctricas toman valores discretos.

Otra razón para creer en los monopolos, que probablemente sea más sólida, es que aparecen de forma inevitable en las teorías de la gran unificación, las cuales creemos a día de hoy que describen la naturaleza.

No hace falta entretenerse más en buscar excusas para estudiar el monopolo, y podemos pasar a abordar el problema. Consideremos una carga magnética puntual localizada en el origen de coordenadas. Por analogía con el caso electrostático, el campo magnético vendrá dado por:

$$\vec{B} = g \frac{\vec{r}}{r^3} \quad (3.18)$$

Obviamente, la divergencia de este campo no es nula en $\vec{r} = \vec{0}$, lo que significa que no cumple la ley de Gauss para el campo magnético, sino que cumplirá una análoga a la del campo eléctrico, pero con cargas magnéticas en vez de eléctricas, que será de la forma:

$$\oint_{\sigma} \vec{B} \cdot d\vec{\sigma} = 4\pi g$$

Si tratamos de encontrar el potencial vector \vec{A} tal que su rotacional sea \vec{B} , nos damos cuenta en seguida de que no es posible, ya que el rotacional de cualquier vector siempre tiene divergencia nula. Sin embargo, siempre podemos definir un \vec{A} que sí que nos de el campo, y su dominio de definición es todo el espacio, excepto una línea que va desde el origen hasta el infinito, la cual se denomina como “cuerda de Dirac”. Se puede entender esto de manera física si consideramos un sistema ideal equivalente a un monopolo magnético: un solenoide infinitamente estrecho e infinitamente largo, del cual solo podemos ver un extremo. En este caso, se seguiría cumpliendo la ley de Gauss originaria para el campo magnético $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$, ya que el flujo magnético que veríamos salir de nuestro “monopolo” se compensaría con el que entra por el solenoide, aunque no sea posible detectar este último.

Escogemos que la cuerda de Dirac esté situada en la parte negativa del eje de las z . En ese caso, el potencial vector que nos da el campo es:

$$\vec{A} = \frac{g(1 - \cos \theta)}{r \sin \theta} \vec{u}_{\varphi} \quad (3.19)$$

Con θ el ángulo polar y φ el azimutal. El vector \vec{u}_{φ} no está definido en ningún punto del eje z , pero como para $\theta = 0$ (es decir, $z > 0$) $\vec{A} = \vec{0}$, entonces sí está definido en la parte positiva del eje.

³Se toma el convenio de que 0 pertenece a los números naturales.

Pasemos ahora a ver cómo se calcularía la acción para un sistema de estas características. Normalmente, el lagrangiano de una partícula de carga e moviéndose en un campo electromagnético se escribe en función de los potenciales ϕ y \vec{A} de la forma siguiente:

$$\mathcal{L} = T - e\phi + e\vec{A} \cdot \dot{\vec{r}} \quad (3.20)$$

Donde T denota la energía cinética. En el caso que estamos tratando, $\phi = 0$. La acción derivada de este lagrangiano será, para una cierta trayectoria γ :

$$S = \int_{\gamma} dt \left(T + e\vec{A} \cdot \dot{\vec{r}} \right) = \int_{\gamma} dt T + e \int_{\gamma} \vec{A} \cdot d\vec{r} = S_0 + S_{mag} \quad (3.21)$$

En el caso del monopolo magnético, esta integral puede ser problemática, ya que si la trayectoria de la partícula pasa por la cuerda de Dirac, la contribución magnética a la acción no estará bien definida. Para arreglar este problema, escribimos esta contribución de una manera diferente, como la integral de la 2-forma (ver anexo) $\sum_{i,j} F_{ij}(x) dx_i \wedge dx_j$, con $F_{ij} = \sum_k \epsilon_{ijk} B_k(x)$:

$$S_{mag} = e \int \sum_{i,j} F_{ij}(x) dx_i \wedge dx_j = e \int \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} B_k(x) dx_i \wedge dx_j \quad (3.22)$$

Escrita así esta ecuación resulta bastante oscura. Por ello, vamos a ver un ejemplo que nos ayude a visualizarla. El producto $dx_i \wedge dx_j$ es en esencia un elemento de superficie, con lo cual (3.22) puede representar la integral del campo magnético sobre una cierta superficie σ . En ese caso, S_{mag} se escribiría como:

$$S_{mag} = e \int_{\sigma} \vec{B} \cdot d\vec{\sigma}$$

Pongámonos en el caso de que σ es una superficie abierta, y supongamos también que \vec{A} se puede definir sin problemas en todo el espacio. Entonces, podemos poner S_{mag} de la manera siguiente usando el teorema de Stokes:

$$S_{mag} = e \int_{\sigma} \vec{B} \cdot d\vec{\sigma} = e \oint_{\partial\sigma} \vec{A} \cdot d\vec{r}$$

Y recuperamos la ya conocida expresión dada por (3.21) para una partícula describiendo una trayectoria cerrada. En general, si no existen problemas para definir \vec{A} , se podrá escribir:

$$\int \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} B_k(x) dx_i \wedge dx_j = \int \sum_i A_i dx_i$$

Pero para lo que nos incumbe, este no es el caso.

Volviendo al monopolo magnético, se puede verificar muy fácilmente que, para una superficie cerrada cualquiera σ' que contenga en su interior al monopolo, la acción (3.22) para el campo magnético (3.18) vale lo siguiente:

$$e \int_{\sigma'} \vec{B} \cdot d\vec{\sigma}' = e \int \frac{g}{r^2} r^2 d \cos \theta d\varphi = 4\pi eg$$

Hemos integrado sobre la superficie de una esfera de radio r porque es la más sencilla de todas las posibles elecciones. Si ignoramos la e , esta integral coincide justo con el flujo magnético que sale de la superficie σ' , que es no nulo. Ahora bien, si retomamos el modelo del solenoide infinitamente estrecho, realmente hay un punto de la superficie en el cual el flujo magnético no es

el que acabamos de calcular: la intersección de la superficie con el solenoide, donde el flujo sería justamente $-4\pi g$, lo que hace que el flujo total sea nulo.

El modelo del solenoide llevado al límite tiene que dar necesariamente el monopolo de Dirac. Sin embargo, el flujo sobre una superficie cerrada de (3.18) es claramente no nulo. La única forma para que ambos resultados se puedan conciliar es que el factor de fase debido al monopolo, es decir, $e^{iS_{mag}}$ sea 1, de forma que la física del problema no se vea alterada. Esto es equivalente a decir que la cuerda de Dirac es indetectable. Para que esto sea cierto, ha de cumplirse lo siguiente:

$$\frac{4\pi eg}{2\pi} \in \mathbb{N} \implies 2eg \in \mathbb{N} \quad (3.23)$$

Que es justo la condición de cuantización de Dirac (3.17).

3.4. Modelo de Ising

Procedemos ahora a estudiar uno de los ejemplos que mejor ilustra la conexión entre cuántica y estadística: el modelo de Ising. En este modelo, el único grado de libertad solamente puede tomar dos valores, por ejemplo “up” o “down” en el caso de una partícula de espín $1/2$. El caso más sencillo sería el de una única partícula cuántica, con su espín evolucionando en el tiempo. Como se ha hecho en capítulos anteriores, el tiempo se va a discretizar, con lo cual vamos a tener un grado de libertad propagándose en una “red” temporal, siendo la separación entre los puntos de esta “red” un intervalo temporal ϵ , que puede ser arbitrariamente pequeño.

Este mismo problema se puede interpretar como un sistema estadístico en equilibrio térmico, con los espines (o grados de libertad) ocupando una red espacial unidimensional. Este es un caso particular de una relación más general, entre los sistemas de la física estadística clásica en D dimensiones y los cuánticos en $D - 1$ dimensiones. Vamos a centrarnos más en la visión estadística, ya que es la más estándar para este problema, pero no hay que perder nunca de vista la otra interpretación.

Para el modelo de Ising general (es decir, sin especificar todavía la dimensionalidad), el Hamiltoniano viene dado por:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \quad (3.24)$$

Donde σ_i puede tomar los valores 1 y -1, dependiendo de cuál sea el valor del espín en la posición i de la red. B denota la interacción de los espines con el campo magnético externo, y J_{ij} es la constante de acople entre espines, que vamos a asumir no nula únicamente para primeros vecinos:

$$J_{ij} = \begin{cases} J, & \text{si } i \text{ y } j \text{ son primeros vecinos} \\ 0, & \text{en el resto de casos} \end{cases} \quad (3.25)$$

Para encontrar las propiedades de esta red, debemos de calcular la función de partición, que no será más que la suma a todas las posibles configuraciones de espín:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H(\sigma)} \quad (3.26)$$

El sumatorio $\sum_{\{\sigma\}}$ no es más que el producto de todos los sumatorios en los dos posibles valores de cada σ_i , es decir:

$$\sum_{\{\sigma\}} = \prod_{i=1}^N \sum_{\sigma_i=\pm 1}$$

El cálculo de Z será más o menos complicado dependiendo de cómo sea la red con la que estemos trabajando. Consideremos primero el caso de una cadena unidimensional con N puntos en la red, y con condiciones de contorno cíclicas, es decir, $\sigma_1 = \sigma_{N+1}$. En este caso el hamiltoniano de (3.24) se puede escribir de la siguiente forma:

$$H = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sum_i \sigma_i \quad (3.27)$$

Con el hamiltoniano así expresado, nos damos cuenta de que es posible escribir la función de partición (3.26) como producto de términos que solo involucren puntos contiguos de la red. Definiendo:

$$T(\sigma, \sigma') = \exp \left\{ K \sigma \sigma' + \frac{1}{2} h (\sigma + \sigma') \right\} \quad (3.28)$$

Donde $K = \beta J$, $h = \beta B$. Haciendo esto Z queda:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_{N-1}, \sigma_N) T(\sigma_N, \sigma_1) \quad (3.29)$$

Podemos ver a los T como elementos de una matriz 2×2 , la cual vamos a llamar matriz de transferencia \mathbf{T} :

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T(+, +) & T(+, -) \\ T(-, +) & T(-, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

Esta matriz de transferencia no es más que el operador $e^{-\beta H(\sigma_i, \sigma_{j+1})}$, con:

$$H(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = -J \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sigma_i$$

En el caso de una partícula cuántica, la matriz de transferencia se correspondería con $e^{i\epsilon H(\sigma_i, \sigma_{j+1})}$. Vemos que aquí la magnitud análoga con la temperatura no es el tiempo total, sino que el intervalo en el que se discretiza el tiempo. En este caso, el tiempo total $N\epsilon$ también guarda relación con la longitud de la cadena.

En (3.29), podemos ver las sumas en $\sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N$ como sucesivas multiplicaciones de matrices, y la suma en σ_1 como tomar la traza, con lo que se obtiene una expresión muy sencilla para Z :

$$Z = \text{Tr}(\mathbf{T}^N) \quad (3.31)$$

El cálculo de esta traza, y, por tanto, la función de partición, se reduce a diagonalizar la matriz de transferencia. La diagonalización es sencilla, resultando los siguientes autovalores λ_1 y λ_2 :

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= e^K \cosh h + (e^{2K} \sinh^2 h + e^{-2K})^{1/2} \\ \lambda_2 &= e^K \cosh h - (e^{2K} \sinh^2 h + e^{-2K})^{1/2} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Con estos autovalores se corresponderán los siguientes autovectores:

$$\begin{aligned} |\phi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1+a^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ a \end{pmatrix} \\ |\phi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1+a^2}} \begin{pmatrix} a \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Donde $a = e^K(\lambda_1 - e^{K+h})$. Teniendo esto en cuenta, queda para la función de partición:

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (3.34)$$

Este resultado tiene una expresión bastante fea si se pone en términos de K y h . Sin embargo, en el caso de que el campo magnético externo sea nulo, es decir, $h = 0$, Z tiene una forma más estética, en concreto:

$$Z = 2^N (\cosh^N K + \sinh^N K) = 2^N \cosh^N K (1 + \tanh^N K)$$

Una propiedad interesante que se puede calcular en este modelo es la magnetización del sistema, que no es más que el momento magnético promedio en los puntos de la red. Será proporcional al valor esperado de la orientación de los espines. Recordando las relaciones termodinámicas, la magnetización viene dada por:

$$\mathcal{M} = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial \ln(Z)}{\partial H} = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln(Z)}{\partial h} \quad (3.35)$$

Haciendo este cálculo con la Z dada por (3.34) resulta:

$$\mathcal{M} = \frac{\partial}{\partial h} \ln(\lambda_1) + \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial h} \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right]$$

Estamos trabajando en el límite termodinámico, con lo cual $N \rightarrow \infty$. Además, $\lambda_1 > \lambda_2$, con lo cual:

$$\mathcal{M} = \frac{\partial}{\partial h} \ln(\lambda_1) + \mathcal{O}(e^{-N})$$

Tras operar, obtenemos la siguiente magnetización:

$$\mathcal{M} = \frac{e^K \sinh h}{(e^{2K} \sinh^2 h + e^{-2K})^{1/2}} = \frac{1 - a^2}{1 + a^2} \quad (3.36)$$

Vemos que es nula si $h = 0$, como cabría esperar. Si $K > 0$, tendremos un material ferromagnético, y si $K < 0$ será antiferromagnético.

Otra cantidad de interés es la función de correlación de orden 2 entre los espines. Conocer esta magnitud nos dará posteriormente la posibilidad de definir una longitud de correlación. La función de correlación se define como:

$$\langle \sigma_{k+r} \sigma_k \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H} \sigma_{k+r} \sigma_k \quad (3.37)$$

Como la red es cíclica, no importa cuáles sean en concreto los puntos inicial y final, por lo tanto:

$$\langle \sigma_{k+r} \sigma_k \rangle = \langle \sigma_r \sigma_0 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H} \sigma_r \sigma_0$$

La suma en sí no presenta ninguna dificultad especial, pero los cálculos son bastante largos. El resultado final es:

$$\langle \sigma_r \sigma_0 \rangle = \frac{1}{(1 + a^2)^2} \left[(1 - a^2)^2 + 4a^2 \frac{\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^r + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{N-r}}{1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N} \right] \quad (3.38)$$

Ya que $\lambda_1 > \lambda_2$, podemos definir la longitud de correlación ξ tal que cumpla:

$$\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^r \equiv e^{-r/\xi} \Rightarrow \frac{\lambda_2}{\lambda_1} = e^{-1/\xi} \quad (3.39)$$

Esto nos permite escribir, recordando (3.36), y en el límite $N \rightarrow \infty$, la función de correlación de la forma siguiente:

$$\langle \sigma_r \sigma_0 \rangle = \mathcal{M}^2 + \frac{4a^2}{(1+a^2)^2} e^{-r/\xi} + \mathcal{O}(e^{-N}) \quad (3.40)$$

En el caso de $h = 0$, se reduce sencillamente a:

$$\langle \sigma_r \sigma_0 \rangle = \frac{1}{1 + \tanh^N K} [\tanh^r K + \tanh^{N-r} K] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \tanh^r K = e^{-r/\xi}$$

El valor de ξ dependerá de K (de hecho, crece con K), pero por muy grande que sea la longitud de correlación, $\langle \sigma_r \sigma_0 \rangle$ va a decaer siempre exponencialmente con r . Por lo tanto, en el caso unidimensional, no va a existir nunca correlación a larga distancia en ausencia de campo magnético.

Veamos ahora cómo cambian las cosas si en vez de una cadena cerrada consideramos una cadena abierta. Ahora no podemos hacer la descomposición de (3.29), porque ya no vale para los extremos. Es posible escribir Z de una manera relativamente similar, pero el último término va a ser distinto, ya que ahora σ_1 y σ_N no están acoplados, por lo que no aparece el factor $\exp\{K\sigma_1\sigma_N\}$.

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_{N-1}, \sigma_N) \exp\left\{\frac{1}{2}h(\sigma_1 + \sigma_N)\right\}$$

Escribiendo $T(\sigma, \sigma') = \langle \sigma | \mathbf{T} | \sigma' \rangle$, y teniendo en cuenta que $\sum_{\{\sigma\}} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1}$, podemos manipular esta expresión para obtener:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1} \dots \sum_{\sigma_N} \left[\prod_{i=1}^{N-1} \langle \sigma_i | \mathbf{T} | \sigma_{i+1} \rangle \right] \exp\left\{\frac{1}{2}h(\sigma_1 + \sigma_N)\right\} = \\ &= \sum_{\sigma_1} \dots \sum_{\sigma_N} \langle \sigma_1 | \left[\prod_{i=2}^{N-1} \mathbf{T} | \sigma_i \right] \langle \sigma_i | \mathbf{T} | \sigma_N \rangle \exp\left\{\frac{1}{2}h(\sigma_1 + \sigma_N)\right\} = \\ &= \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_N} \langle \sigma_1 | \mathbf{T}^{N-1} | \sigma_N \rangle \exp\left\{\frac{1}{2}h(\sigma_1 + \sigma_N)\right\} = \\ &= \text{Tr} \left[\sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_N} \mathbf{T}^{N-1} | \sigma_N \rangle \langle \sigma_1 | \exp\left\{\frac{1}{2}h(\sigma_1 + \sigma_N)\right\} \right] \end{aligned}$$

Se define la matriz \mathcal{B} como:

$$\mathcal{B} = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_N} | \sigma_N \rangle \langle \sigma_1 | \exp\left\{\frac{1}{2}h(\sigma_1 + \sigma_N)\right\} \quad (3.41)$$

Esta matriz determinará las condiciones de contorno del problema. En términos de \mathcal{B} , la función de partición es:

$$Z = \text{Tr}(\mathbf{T}^{N-1} \mathcal{B})$$

Podemos calcular esta traza en la base que diagonaliza \mathbf{T} , y obtenemos:

$$\begin{aligned} Z &= \lambda_1^{N-1} \langle \phi_1 | \mathcal{B} | \phi_1 \rangle + \lambda_2^{N-1} \langle \phi_2 | \mathcal{B} | \phi_2 \rangle = \\ &= \lambda_1^{N-1} \frac{(e^{h/2} + ae^{-h/2})^2}{1+a^2} + \lambda_2^{N-1} \frac{(e^{-h/2} - ae^{h/2})^2}{1+a^2} \quad (3.42) \end{aligned}$$

Para el caso $h = 0$:

$$Z = 2^N \cosh^{N-1} K$$

Que es diferente al resultado del caso cíclico incluso en el límite $N \rightarrow \infty$.

Es posible encontrar también una solución analítica al problema bidimensional. La primera persona en resolverlo fue Onsager [30], usando variables fermiónicas. Posteriormente, se han inventado otros métodos, pero todos tienen una cosa en común: realizar la suma de todas las posibles contribuciones requiere un desarrollo bastante extenso, y no hay espacio suficiente como abordarlo en detalle en este trabajo.

También es posible afrontar el problema, en vez de como una red bidimensional de espines que siguen una descripción clásica, como una cadena lineal de espines cuánticos, con su evolución temporal. En este caso, en el hamiltoniano (3.27) se sustituyen los σ_i por las matrices de Pauli $\hat{\sigma}_i$. Por ejemplo, si tenemos un campo transversal, el nuevo hamiltoniano será:

$$H = -J \sum_i \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z - B \sum_i \hat{\sigma}_i^x \quad (3.43)$$

La función de partición que se obtiene en ambos casos (tras hacer la continuación analítica) tiene que ser equivalente, salvo una constante de acople, que se puede ajustar para que sean exactamente iguales.

Un aspecto muy interesante que sí que merece la pena comentar es que aparece una transición de fase, de un estado con orden ferromagnético a uno desordenado. Obviamente, a temperaturas altas (β pequeñas) el sistema tenderá al desorden, pero lo que no es tan obvio es que a temperaturas bajas sí que hay un orden ferromagnético, ya que en el caso unidimensional esto no es cierto.

Para ver que existe una temperatura de transición sin necesidad de hacer de manera exacta todos los cálculos, se usa un argumento cualitativo concebido originalmente por Peierls, y la idea es la siguiente: consideremos una red de Ising que inicialmente se encuentra con todos sus espines en estado “up”. Imaginemos ahora que una pequeña agrupación de espines, mucho menor que el tamaño total del sistema, se invierte su espín para pasar al estado “down”. Si el perímetro que engloba a este conjunto de espines es de longitud L , entonces el factor de energía de Boltzmann para esta configuración será $e^{-2\beta L}$. Por otra parte, el número de caminos cerrados de longitud L que se pueden trazar en la red es de la forma C^L , donde C es una cierta constante. Esto implica que si $\beta > 1/2 \ln C$, la creación de estos agrupamientos de espines invertidos es muy poco probable, y persiste el orden ferromagnético en el sistema.

El cálculo riguroso se hace viendo para qué temperatura aparece una discontinuidad en la energía libre de Helmholtz, y se obtiene que es a la siguiente temperatura crítica:

$$\beta_c = \frac{1}{2J} \ln(1 + \sqrt{2}) \quad (3.44)$$

Para temperaturas próximas a la de transición, la longitud de correlación es extremadamente grande, lo que hace que el sistema se asemeje a un continuo. Debido a esto, el sistema posee notables propiedades de universalidad, y de hecho puede demostrarse que, dada una teoría cuántica de campos con una densidad lagrangiana de la forma:

$$\mathcal{L}(\varphi) = \frac{1}{2}(\partial_\mu \varphi)^2 - V(\varphi), \quad \text{con } V(\varphi) = V(-\varphi)$$

el límite del continuo de esta teoría podrá describirse por el límite del continuo de un modelo de Ising.

Capítulo 4

Conclusiones

La integral de caminos es una herramienta que provee de una nueva manera de entender una variedad de conceptos en física. En el ámbito de la mecánica cuántica, permite una comprensión bastante intuitiva de sus principios fundamentales, ya que surge de una generalización del principio de mínima acción de la mecánica clásica. Las formulaciones tradicionales están basadas en postulados que, aunque sean relativamente simples desde un punto de vista matemático, invalidan todas las ideas clásicas a la hora de intentar comprender el significado físico. Bien es cierto que en el formalismo de Schrödinger, la resolución de los problemas más básicos es considerablemente más sencilla, pero como se ha mostrado en el trabajo, también es posible resolverlos mediante el uso de la integral de caminos. Ya que ambas formulaciones son equivalentes, se podrá usar una u otra dependiendo de cuál sea más conveniente en el caso concreto que se esté tratando. El formalismo de Feynman se adapta muy bien a problemas de scattering, o los que involucren sistemas en el límite semi-clásico, pero se complica para problemas de estados ligados.

Por otra parte, muchas de las ecuaciones que gobiernan la física estadística son muy semejantes a otras de la cuántica, lo cual hace sospechar que pueda existir algún tipo de relación entre ambas. Haciendo uso de la integral de caminos y del análisis en variable compleja, es posible crear una teoría unificada, en la que cuántica y estadística están conectadas mediante la continuación analítica. Esto permite que un mismo problema se pueda abordar desde una perspectiva cuántica o desde una estadística, como se ilustra de manera muy clara en el caso del modelo de Ising. Asimismo, la continuación analítica también es útil para deshacerse de la unidad imaginaria i que tanto aparece en la mecánica cuántica, lo cual puede servir por ejemplo para calcular energías de estados fundamentales.

También cabe mencionar que la topología juega un rol fundamental al estudiar sistemas mediante la integral de caminos, ya que las propiedades topológicas no triviales del espacio de fases, que clásicamente son irrelevantes, son responsables de la cuantización de ciertas magnitudes en sistemas como el rotor rígido o el monopol magnético.

Por último, merece la pena destacar cómo en tiempos recientes se han aplicado las técnicas de integral de caminos en ramas del conocimiento muy lejanas en principio de la física, destacando en particular el caso del estudio de los mercados financieros que se ha abordado en este trabajo, ya que las ecuaciones que se usan para modelar los mercados son formalmente equivalentes a las de la física estadística, lo cual permite tratarlas de la misma manera.

Bibliografía

- [1] N. Wiener, *Differential-Space*, J. of Math, and Phys. 2 (1923) 131
- [2] P.A.M. Dirac, *The Lagrangian in Quantum Mechanics*, Physik. Z. Sowjetunion 3 (1933) 64
- [3] R.P. Feynman, *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics*, Rev. Mod. Phys. 367 (1948) 20
- [4] J. Schwinger, *A note on the quantum dynamical principle*, Phil. Mag. 44:357 (1953) 1171
- [5] P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics: Fourth Edition* (Oxford Univ. Press, 1958)
- [6] R.P. Feynman, A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, 1965)
- [7] W. Dittrich, *The Development of the Action Principle: A Didactic History from Euler-Lagrange to Schwinger* (Springer, 2021)
- [8] M.Veltman, *Path Integrals, Feynman Rules, Gauge Theories*, Lectures given at the International School of Elementary Particle Physics, Basko-Polje, (1974)
- [9] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena: Fifth Edition* (Oxford Univ. Press, 2021)
- [10] J. Zinn-Justin, *Path integrals in Quantum Mechanics* (Oxford Univ. Press, 2005)
- [11] K.S. Cheng, *Quantization of a General Dynamical System by Feynman's Path Integration Formulation*, Journal of Mathematical Physics 13 (1972), 1723
- [12] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics, Volume One* (Wiley, 1977)
- [13] M. Sato, *Operator Ordering and Perturbation Expansion in the Path Integration Formalism*, Prog. Theor. Phys. 58 (1977) 1262
- [14] C. Itzykson, J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory* (McGraw-Hill, New York 1980)
- [15] J.W. Gibbs, *Elementary Principles in Statistical Mechanics* (Charles Scribner's Sons, 1902)
- [16] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Física Estadística* (Reverté, 1969)
- [17] A.F. Tejerina, *Termodinámica* (Paraninfo, 1976)
- [18] M. Toda, R.Kubo, N.Saitô, *Statistical Physics I: Equilibrium Statistical Mechanics* (Springer, 1992)
- [19] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics: A Set of Lectures* (Benjamin Cummings, 1972)

- [20] I.G. Avramidi, *Heat Kernel Approach in Quantum Field Theory*, lectures at the Conference "Quantum Gravity and Spectral Geometry", Nápoles, Italia (2001)
- [21] L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, 1981)
- [22] M. Kac, *On Distributions of Certain Wiener Functionals*, Trans. Amer. Math. Soc. 65 (1949) 1
- [23] V. Linetsky, *The Path Integral Approach to Financial Modeling and Options Pricing*, Computational Economics 11 (1998), 129
- [24] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, (Addison-Wesley, 1959)
- [25] S. Coleman, *The Magnetic Monopole Fifty Years Later*, lectures given at Lyman Laboratory of Physics, Harvard University (1983)
- [26] P.A.M. Dirac, *Quantised Singularities in the Electromagnetic Field*, Proc. Roy. Soc., Vol. 133, No. 821 (1931) 60
- [27] B.E. Baaquie, *Path Integrals and Hamiltonians: Principles and Methods* (Cambridge Univ. Press, 2014)
- [28] R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, 1982)
- [29] J.S. Caux, *From Path Integrals to Field Theory*, lectures given at the Theoretical Chemistry and Spectroscopy Winter School, Domaine des Masures, Han-sur-Lesse, Belgium (2019)
- [30] L. Onsager, *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*, Phys. Review 65 (1944) 117
- [31] A.M. Polyakov, *Gauge Fields and Strings* (Harwood Academic Publisher 1987)
- [32] S.Lang, *Complex Analysis: Fourth Edition* (Springer, 1999)
- [33] Rowland, Todd and Weisstein, Eric W. *Differential k-Form*, de MathWorld–A Wolfram Web Resource, <https://mathworld.wolfram.com/Differentialk-Form.html> (consultado a 27 de junio de 2023)

Anexo A

Aspectos matemáticos

A.1. Integrales gaussianas

Se conoce con el nombre de integrales gaussianas a las integrales sobre todo el espacio de funciones de tipo gaussiano, es decir, de la forma $f(x) \sim e^{-x^2}$. Estas funciones por lo general carecen de primitiva, pero existen métodos para poder evaluarlas. Como primer paso calculemos la siguiente integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2}$$

Donde $a > 0$. Para hacer el cálculo, se puede hacer considerando que, en coordenadas polares:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-a(x^2+y^2)} = 2\pi \int_0^{+\infty} r dr e^{-ar^2} = \pi \int_0^{+\infty} d\xi e^{-a\xi} = \frac{\pi}{a}$$

Pero:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-a(x^2+y^2)} = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2} \right)^2$$

Con lo cual:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (\text{A.1})$$

Si introducimos un término lineal en el exponente, se podrá evaluar la integral sin más que completar cuadrados:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2+bx} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-a(x+b/2a)^2+b^2/4a} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a} \quad (\text{A.2})$$

El concepto se puede generalizar a dimensiones mayores. Por lo general, una función gaussiana de dimensión n , con un término lineal, será de la forma:

$$-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^n b_i x_i \quad (\text{A.3})$$

Donde los A_{ij} son los elementos de una matriz $n \times n$ simétrica y real, a la que denominamos \mathbf{A} , y que cumple $\det(\mathbf{A}) > 0$. Por su parte, los b_i no son más que las componentes del vector \vec{b} , que tiene dimensión n . Esencialmente, es una forma cuadrática real positiva.

Queremos calcular:

$$\int d^n x \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^n b_i x_i \right\} \quad (\text{A.4})$$

Para hacerlo, ignoremos en un principio el término lineal, centrándonos en el cuadrático. Ya que la matriz \mathbf{A} es estrictamente positiva, puede diagonalizarse mediante una matriz de cambio de base ortonormal \mathbf{O} , y tendrá autovalores positivos a_i . Haciendo el cambio de variable:

$$x_i \rightarrow x'_i, \quad \text{donde} \quad x'_i = \sum_j O_{ij} x_j$$

Resulta un producto de n integrales independientes en cada x'_i , y podemos determinar el valor de cada una de ellas usando (A.2), que va a ser $\sqrt{2\pi/a_i}$. El producto de todos los autovalores será el determinante, con lo que finalmente queda:

$$\int d^n x \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n x_i A_{ij} x_j \right\} = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det(\mathbf{A})}}$$

Veamos ahora cómo integrar el término lineal. Para ello, busquemos el mínimo de (A.3), que vendrá dado por:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^n b_i x_i \right] = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_j A_{ij} x_j = b_i$$

La solución de esto es:

$$x_i = \sum_j (\mathbf{A}^{-1})_{ij} b_j$$

Hacemos otro cambio de variable:

$$y_i = x_i + \sum_j (\mathbf{A}^{-1})_{ij} b_j$$

Con este cambio (A.3) se transforma a:

$$-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n y_i A_{ij} y_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n b_i (\mathbf{A}^{-1})_{ij} b_j$$

El segundo término no depende de las variables, con lo que sale fuera de la integral en (A.4), que resulta:

$$\begin{aligned} & \int d^n x \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^n b_i x_i \right\} = \\ & = \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n b_i (\mathbf{A}^{-1})_{ij} b_j \right\} \int d^n y \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n y_i A_{ij} y_j \right\} = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det(\mathbf{A})}} e^{\frac{1}{2} \vec{b}^T \mathbf{A}^{-1} \vec{b}} \quad (\text{A.5}) \end{aligned}$$

En muchas ocasiones tenemos que lidiar con integrales gaussianas en las que los números que aparecen en los exponentes no son reales, sino complejos, sobre todo cuando estemos trabajando en tiempo real como en el primer capítulo del trabajo. Por ello, es necesario usar la técnica de la continuación analítica, que nos permitirá extender los resultados obtenidos a números complejos.

Sea f una función analítica definida en un subconjunto abierto y conexo $U \subseteq \mathbb{C}$, y sea g también una función analítica definida en $V \subseteq \mathbb{C}$, siendo V también abierto y conexo. Supóngase que

$U \cap V$ es no nula, y que $f(z) = g(z) \forall z \in U \cap V$. Entonces, g es la única posible función analítica en V que cumple esa propiedad, y se dice que g es la continuación analítica de f en V .

Ya que en (A.2) y (A.5), tanto los términos que aparecen la integral inicial como los que lo hacen en el resultado final son funciones analíticas de los coeficientes de \mathbf{A} y \vec{b} , no hay ningún problema en realizar la continuación analítica.

Para ver cuáles son los resultados para números complejos, resolvemos el ejemplo más sencillo posible, y a partir de ahí deducimos el resto de los resultados. Consideremos la integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-iax^2}$$

Donde al igual que antes $a > 0$ es un número real. La exponencial e^{-iaz^2} es una función analítica en todo \mathbb{C} , y según el teorema integral de Cauchy-Goursat, toda función $f(z)$ que sea analítica dentro de un cierto contorno C cumple la igualdad siguiente:

$$\oint_C dz f(z) = 0 \quad (\text{A.6})$$

Consideremos $f(z) = e^{-iaz^2}$, y escogemos como contorno C un triángulo que vamos a recorrer de la siguiente manera:

- Paso 1: $z = x$, con $x = 0 \rightarrow \infty$.
- Paso 2: $z = \lim_{x \rightarrow \infty} (x + iy)$, con $y = 0 \rightarrow \infty$.
- Paso 3: $z = r(1 - i)$, con $r = \infty \rightarrow 0$

La integral total será:

$$\begin{aligned} 0 &= \oint_C dz e^{-iaz^2} = \int_0^\infty dx e^{-iax^2} + i \lim_{x \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^0 e^{-ia(x^2 - y^2) + 2axy} + (1 - i) \int_\infty^0 dr e^{-2ar^2} \\ &\Rightarrow \int_0^\infty dx e^{-iax^2} = (1 - i) \int_0^\infty dr e^{-2ar^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{ia}} \end{aligned}$$

Como la función e^{-iax^2} es par, la integral en todo \mathbb{R} será el doble de eso:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{ia}} \quad (\text{A.7})$$

Incluir el término lineal b es muy sencillo, y no hace falta más que completar cuadrados:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iax^2 + ibx} = e^{ib^2/4a} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ia(x+b^2/4a)} = \sqrt{\frac{\pi}{ia}} e^{ib^2/4a} \quad (\text{A.8})$$

Para extender el resultado a dimensiones más altas, los razonamientos que se usaron antes siguen siendo completamente válidos, por lo menos en el caso de multiplicar todo por la constante i , que es el que nos interesa, así que la continuación de la integral da:

$$\int d^n x \exp \left\{ -\frac{i}{2} \sum_{j,k=1}^n x_j A_{jk} x_k + i \sum_{j=1}^n b_j x_j \right\} = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{(i)^n \det(\mathbf{A})}} e^{i \vec{b}^T \mathbf{A}^{-1} \vec{b}} \quad (\text{A.9})$$

Observamos que todos los resultados de la continuación analítica no son más que multiplicar por i los parámetros de la gaussiana, que es lo que uno esperaría intuitivamente. No obstante, es necesario demostrar que en efecto eso es lo que se obtiene.

A.2. Formas diferenciales

Se define una k -forma diferencial como un tensor de rango k que es antisimétrico bajo el intercambio de cualquier par de índices. Intuitivamente, se pueden entender como una manera de definir los integrandos en distintas variedades, siendo una variedad el objeto matemático que generaliza la noción de curva (en 1D) o superficie (en 2D) a cualquier dimensión. Por ejemplo, un elemento de longitud será una 1-forma, un elemento de superficie una 2-forma, ...

Sea un espacio de dimensión n , cuyas coordenadas vienen dadas por x_i , $i = 1, \dots, n$. Entonces, podemos escribir una k -forma diferencial ω (con $k \leq n$) como:

$$\omega = \sum_{i_1 < \dots < i_k} a_{i_1, \dots, i_k}(\vec{x}) dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_k} \quad (\text{A.10})$$

Donde \wedge denota el producto exterior, que es el producto en un álgebra de Grassmann o anti-conmutativa, por lo que $dx \wedge dy = -dy \wedge dx$. Las a no son más que funciones.

Se define el operador diferencial \mathcal{D} actuando sobre las formas como:

$$\mathcal{D} \equiv \sum_i dx_i \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (\text{A.11})$$

Vemos que, si ω es una k -forma, $\mathcal{D}\omega$ es una $k+1$ -forma. Si uno intenta ver lo que le ocurre al operador \mathcal{D}^2 :

$$\mathcal{D}^2 = \sum_{i,j} dx_i \frac{\partial}{\partial x_i} \wedge dx_j \frac{\partial}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{A.12})$$

Es nulo debido a la asimetría del producto.

Si la forma ω satisface que $\mathcal{D}\omega = 0$, se dice que es una forma cerrada, y si ω se puede escribir como $\omega = \mathcal{D}\omega'$, entonces se dice que es una forma exacta. Por (A.12), se puede deducir que cualquier forma exacta es cerrada