



Universidad de Valladolid

FACULTAD DE CIENCIAS

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

Formulación de la Física Cuántica mediante la Integral de Caminos

Autor: Alonso Rodríguez Calleja
Tutor: José María Muñoz Castañeda
Año 2025

Índice general

Introducción y objetivos	2
1 La Integral de Caminos	3
1.1. Definición y propiedades	3
1.2. Deducción de la ecuación de Schrödinger	6
1.3. Teoría de perturbaciones y diagramas de Feynman	11
1.4. Aproximación WKB	16
2 Física Estadística y la Integral de Caminos	20
2.1. Repaso fundamental de Física Estadística	20
2.2. Física Cuántica como continuación analítica de la Física Estadística	21
2.3. Fórmula de Feynman-Kac y espectros de energía	22
3 QFT en 0+1 dimensiones	24
3.1. Introducción	24
3.2. Cálculos perturbativos en temperaturas	24
3.3. Cálculos perturbativos en tiempos	28
4 Ruptura espontánea de simetría	33
4.1. Introducción	33
4.2. Ruptura de la simetría $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$	34
4.3. Ruptura de la simetría $U(1)$	36
4.4. Teorema de Goldstone	37
Conclusiones	39
A Fundamentos matemáticos	41
A.1. Continuación analítica de funciones holomorfas	41
A.2. Integrales gaussianas	42
A.3. Expansión perturbativa y contribuciones conexas	44
A.4. Integrales gaussianas en dimensión infinita	46
Bibliografía	48

Resumen

Tomando como punto de partida las prolongaciones analíticas de las integrales gaussianas en espacios de dimensión finita, se realiza una construcción rigurosa de la Integral de Caminos en el caso de la Mecánica Cuántica no relativista en una dimensión. Después, se reproducen ejemplos bien conocidos y estudiados durante el grado, como son la aproximación WKB, la partícula libre, el oscilador armónico y la teoría de perturbaciones, permitiendo introducir las reglas y diagramas de Feynman. A continuación, se desarrollan casos no triviales con la metodología presentada previamente: primero, se establece una equivalencia Física Cuántica-Estadística mediante la rotación de Wick, posteriormente se realiza una introducción al formalismo de la Integral de Caminos en teorías de campos mediante el estudio de una teoría $\lambda\phi^4$ y, finalmente, se aborda el concepto de la ruptura espontánea de la simetría.

Abstract

Taking as a starting point the analytic extensions of finite-dimensional gaussian integrals, a rigorous construction of the Path Integral is made for Quantum Mechanics in 1+1 dimensions. Next, well-known examples studied during the degree are reproduced, such as the WKB approximation, the free particle, the harmonic oscillator and perturbation theory which allows the introduction of Feynman rules and diagrams. After that, using the methodology presented previously, nontrivial cases are developed: firstly, a relationship between Quantum Physics and Statistical Physics is established via Wick rotation, then an introduction of the Path Integral formalism for field theories is provided through the treatment of a $\lambda\phi^4$ theory, and finally, the concept of spontaneous symmetry breaking is presented.

Introducción y objetivos

El presente texto consiste en una introducción rigurosa y detallada del formalismo de la Integral de Caminos en el contexto de la Mecánica Cuántica no relativista para partículas sin espín. Su construcción, así como la metodología que se presenta, permite su generalización para otras ramas de la Física Teórica, como la Teoría Cuántica de Campos [1] o la Física de Partículas [2], donde la Integral de Caminos resulta una herramienta esencial. Si bien el trabajo es principalmente bibliográfico, algunos conceptos han sido reformulados con un enfoque más algebraico con respecto a la literatura usual, con el objetivo de obtener una notación más sencilla que permita llegar a conclusiones satisfactorias evitando cálculos extensos. Para ello, el estudio de las integrales gaussianas en espacios de dimensión finita, realizado en el apéndice A, ha resultado crucial.

El primer capítulo comienza introduciendo la Integral de Caminos mediante un enfoque histórico, apoyado en los textos de Dirac [3, 4, 5] y Feynman [6, 7], a menudo olvidados en la literatura más moderna. Posteriormente, se construye de manera rigurosa la Integral de Caminos, desprendiéndose de manera natural su relación con la Mecánica Cuántica matricial de Heisenberg, así como el límite clásico de la Mecánica Cuántica, íntimamente relacionado con el Principio de Acción Estacionaria. Después, se realiza la deducción de la ecuación de Schrödinger, conectando así las tres formulaciones históricas de la Mecánica Cuántica. Finalmente, se tratan ejemplos ya abordados a lo largo del grado, como son la partícula libre, la aproximación WKB, el oscilador armónico y la teoría de perturbaciones, la cual permite obtener las reglas y diagramas de Feynman.

En el segundo capítulo se demuestra con total rigor la equivalencia entre una colectividad canónica y un sistema cuántico no relativista en una dimensión mediante la continuación analítica de la Integral de Caminos, lo que permite unificar la Física Estadística y la Mecánica Cuántica mediante un único formalismo.

El tercer capítulo tiene como objetivo introducir la metodología construida en los anteriores capítulos a una Teoría Cuántica de Campos, en particular, a una teoría $\lambda\phi^4$ [8]. Para ello, se comienza identificando una QFT en 0+1 dimensiones con la Mecánica Cuántica en una dimensión, para después realizar cálculos perturbativos equivalentes a la teoría de perturbaciones independientes del tiempo. La inclusión de este capítulo ha sido posible debido al estudio de las integrales gaussianas, que ha permitido obtener los resultados necesarios, como el teorema de Wick, de una manera algebraica muy intuitiva.

El último capítulo presenta el concepto de la ruptura espontánea de simetría [9], una manera alternativa en la que se manifiestan las simetrías de un sistema físico. En particular, se revisita el concepto de efecto túnel y se analiza el papel del número de dimensiones sobre este, lo que permite introducir los conceptos de instantón y de paredes de dominio. Finalmente se presenta el Teorema de Goldstone, que recoge las ideas expuestas previamente de manera rigurosa.

Debido a todo esto, este trabajo completa la formación del estudiante principalmente por dos motivos: el primero, introduce la Integral de Caminos y su metodología, imprescindible si se pretende continuar una formación en Física Teórica, y el segundo, permite realizar conexiones con una gran cantidad de asignaturas del grado, como son las asignaturas de Física Cuántica, Mecánica Teórica, los cuatro Métodos Matemáticos, Física Estadística y Simetrías, Campos y Partículas.

1. La Integral de Caminos

La manera convencional de formular una teoría cuántica no relativista consiste en, tal y como dice Dirac en [3], suponer que los estados cuánticos son elementos de cierto espacio vectorial $\mathcal{H}$ (que, por ejemplo, en la representación de posiciones $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$) y después convertir mediante unas reglas de cuantización, los observables clásicos en operadores autoadjuntos que actúan sobre los estados cuánticos. Debido a este enfoque, resulta muy conveniente partir directamente de la formulación Hamiltoniana de la Mecánica Clásica, pues la analogía es clara. Por lo tanto, conceptos como el de funcional acción, Lagrangiano, ó incluso el de ligadura no holónoma [4], pese a estar presentes, se encuentran muy escondidos en esta formulación. Motivado por encontrar el papel de la acción en la Mecánica Cuántica, Dirac define en [5] una función compleja S que depende únicamente del tiempo y escribe:

$$\langle q(t)|q(t_0)\rangle \text{ corresponde a } e^{iS/\hbar} \quad (1.1)$$

y, utilizando argumentos basados en transformaciones canónicas, termina deduciendo que S debe ser el análogo cuántico del funcional acción de la Mecánica Clásica, derivando además el análogo del Principio de Acción Estacionaria en la Mecánica Cuántica. Debido a esto, la constante $\hbar$ adquiere un significado más profundo, pues resulta ser el cuanto fundamental de acción.

Feynman en su tesis doctoral [6] y posteriormente en [7], retoma la idea de Dirac e interpreta el “corresponde a” como “es igual” y, a diferencia de la Mecánica Cuántica ondulatoria o matricial, decide establecer una relación directa entre las amplitudes de probabilidad y el funcional acción. De esta manera, postula que:

Postulado de Feynman

- (i) A todo camino que va desde el punto del espacio-tiempo (x_a, t_a) a (x_b, t_b) se le asocia la función compleja $e^{iS[x(t)]/\hbar}$, donde $S[x(t)]$ es la acción evaluada en dicho camino.
- (ii) La probabilidad de que una partícula vaya desde (x_a, t_a) a (x_b, t_b) viene dada por el módulo al cuadrado de la suma a todos los posibles caminos:

$$P(a, b) \equiv |K(x_b, t_b; x_a, t_a)|^2 \quad \text{con} \quad K(x_b, t_b; x_a, t_a) \equiv \sum_{\text{caminos}} e^{iS[x(t)]/\hbar} \quad (1.2)$$

1.1. Definición y propiedades

Aunque la idea de sumar todos los caminos posibles es clara, debemos dar una definición matemática más precisa. Supongamos un sistema cuántico de una partícula puntual no relativista moviéndose en la recta sometida, por simplicidad, a un potencial que depende únicamente de su posición $V(x)$, de manera que su acción es:

$$S = \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right) \quad (1.3)$$

Para la construcción de la Integral de Caminos, seguiremos la idea de las sumas de Riemann para la construcción de la integral de Riemann. Por tanto, empecemos discretizando el tiempo

tomando la siguiente partición del intervalo $[t_a, t_b]$:

$$t_a < t_a + \epsilon < t_a + 2\epsilon < \dots < t_a + (n+1)\epsilon \equiv t_b \quad (1.4)$$

de esta manera, la acción (1.3) puede sustituirse aproximadamente por la siguiente suma:

$$S = \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right) \approx \sum_{k=1}^{n+1} \epsilon \left[\frac{m}{2\epsilon^2} (x_k - x_{k-1})^2 - V(x_k) \right] \quad (1.5)$$

Dándose la igualdad en el caso $\epsilon \rightarrow 0$. Escoger un camino consiste en tomar para cada t_k (salvo en t_a y t_b , que son fijos) un valor de x_k de todos los posibles, tal y como se esquematiza en la Figura (1.1). Como los valores x_k se encuentran repartidos por toda la recta real, la suma se convierte en una integral, pero como dicha integral puede tender a infinito al deshacer la discretización del tiempo, dividimos dicha integral por un factor independiente del potencial $A(\epsilon)$. Repitiendo los mismos argumentos para cada x_k , definimos la Integral de Caminos como:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{A(\epsilon)} \right)^{n+1} \int_{\mathbb{R}^n} \prod_{k=1}^n dx_k e^{iS[x(t)]/\hbar} \quad \text{si } t_b > t_a \quad (1.6)$$

y $K(x_b, t_b; x_a, t_a) = 0$ si $t_b < t_a$. Nótese que hacer $n \rightarrow \infty$ es equivalente a $\epsilon \rightarrow 0$. Siguiendo la analogía de las integrales de Riemann y Lebesgue, se introduce la siguiente notación:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) \equiv \int \mathcal{D}x e^{iS[x(t)]/\hbar} \quad (1.7)$$

Para dimensiones superiores, si seguimos con la simplificación que supone considerar un potencial que depende únicamente de la posición de la partícula, entonces los argumentos para la construcción de la Integral de Caminos son completamente análogos. Sin embargo, también pueden aparecer potenciales de carácter vectorial (por ejemplo, el potencial $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ de la Electrodinámica), en estos casos, tal y como dicen [7, 10], el potencial al discretizarse el tiempo debe evaluarse en $(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)/2$.

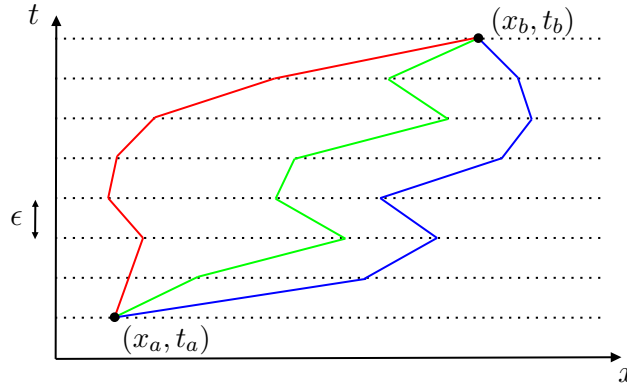


Figura 1.1: Discretización de tres diferentes caminos.

1.1.1. Composición de caminos

Debido al hecho de que la acción viene definida a través de una integral, ocurre que $S(t_b, t_a) = S(t_b, t_c) + S(t_c, t_a)$ para $t_b > t_c > t_a$ independientemente del camino tomado, entonces se puede escribir:

$$e^{iS(t_b, t_a)/\hbar} = e^{iS(t_b, t_c)/\hbar} e^{iS(t_c, t_a)/\hbar} \quad (1.8)$$

por tanto, si denotamos como Γ_1 a todos los caminos posibles en $[t_a, t_c]$ y Γ_2 a los caminos posibles en $[t_c, t_b]$, se tiene que:

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \sum_{\text{caminos}} e^{iS[x(t)]/\hbar} = \int dx_c \sum_{x \in (\Gamma_1 \cup \Gamma_2)} e^{i/\hbar [S(t_b, t_c) + S(t_c, t_a)]} \\ &= \int dx_c K(x_b, t_b; x_c, t_c) K(x_c, t_c; x_a, t_a) \end{aligned} \quad (1.9)$$

es decir, la amplitud de probabilidad para ir de (x_a, t_a) a (x_b, t_b) es la suma sobre todos los valores de x_c del producto de amplitudes. Nótese, por tanto, que el integrando de (1.9) da la amplitud de probabilidad de ir de x_a a x_b pasando por x_c . Cabe destacar también que esto no se puede trasladar a las probabilidades, pues no se daría cuenta de los términos cruzados.

Análogamente, si se divide el intervalo $[t_a, t_b]$ en $N + 1$ subintervalos no necesariamente equiespaciados, (1.9) se puede escribir de una forma más general:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int \prod_{i=1}^N dx_i K(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i) \quad (1.10)$$

donde hemos denotado $x_{N+1} \equiv x_b$ y $x_1 \equiv x_a$.

1.1.2. Elementos de matriz del operador evolución

Las propiedades que acabamos de ver acerca de la amplitud de probabilidad son precisamente las que satisface al operador evolución [11], por lo tanto, la formulación de Feynman debe poder relacionarse con la Mecánica Cuántica matricial a través dicho operador. En efecto, sea un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ en el que actúa el operador evolución sobre un estado en la imagen de Schrödinger $|\psi(t_a)\rangle$, entonces:

$$|\psi(t_b)\rangle = \mathbf{U}(t_b, t_a) |\psi(t_a)\rangle \quad (1.11)$$

proyectando ahora sobre un estado $|x_b\rangle$ de la representación de posiciones, e introduciendo la relación de cierre, podemos escribir:

$$\langle x_b | \psi(t_b) \rangle = \int dx \langle x_b | \mathbf{U}(t_b, t_a) | x \rangle \langle x | \psi(t_a) \rangle \quad (1.12)$$

que es precisamente la expresión (1.9). Es común encontrar en la bibliografía [12, 13] (1.12) como punto inicial para deducir la Integral de Caminos y el postulado de Feynman (1.2). Sin embargo, de esa manera no se llega a ver de la idea fundamental a partir de la cual se puede describir una teoría cuántica no relativista con un único postulado.

1.1.3. Límite clásico

Como en el postulado de Feynman (1.2) aparece la acción, resulta natural preguntarse por el papel que juega el Principio de Acción Estacionaria en (1.2) y (1.7), así como qué ocurre en el *límite clásico*, es decir, cuando $S[x(t)] \gg \hbar$ para todos los caminos. Como $e^{iS/\hbar}$ es una función oscilatoria, en el límite clásico la fase oscilará rápidamente para aquellos caminos que cumplan $\delta S \neq 0$. En ese caso, existirá un camino $x'(t)$ en un entorno de $x(t)$ tal que $e^{iS[x'(t)]}$ anule la contribución de $e^{iS[x(t)]}$ a la Integral de Caminos, sucediendo así para todos los caminos, luego la contribución a (1.2) es nula.

Sin embargo, los caminos que cumplan $\delta S = 0$, tendrán una fase que permanece constante a primer orden, por lo que no existe ningún camino en un entorno de la trayectoria clásica que anule la contribución de $e^{iS[x_{\text{cl.}}(t)]/\hbar}$ a (1.2). En conclusión, en el límite clásico y como consecuencia del Principio de Acción Estacionaria, a la amplitud de probabilidad $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ sólo contribuyen aquellos caminos que se encuentren en un entorno de la trayectoria clásica $x_{\text{cl.}}(t)$. Esta idea resulta crucial de cara a desarrollar un método de cálculo aproximado de las amplitudes de probabilidad, como veremos más adelante.

1.2. Deducción de la ecuación de Schrödinger

Partiendo del postulado de Feynman y de la Integral de Caminos, debe ser posible establecer una equivalencia entre las tres formulaciones históricas de la Mecánica Cuántica. Ya hemos visto que a través del operador evolución podemos relacionar la formulación de Feynman con la Mecánica Cuántica matricial. Por tanto, basta demostrar que, a partir de la Integral de Caminos, es posible deducir la ecuación de Schrödinger. Usando las propiedades que hemos visto anteriormente, denotemos $K(x_b, t_b; x_a, t_a) \equiv \psi(x_b, t_b)$ y $K(x_b, t_b; x, t_a) \equiv \psi(x, t_a)$, de manera que podemos escribir:

$$\psi(x_b, t_b) = \int dx K(x_b, t_b; x, t_a) \psi(x, t_a) \quad , \quad t_b > t_a \quad (1.13)$$

Consideremos ahora la acción (1.3) y calculemos $\psi(x_b, t_b + \epsilon)$ con ϵ infinitesimal, por lo tanto, es claro que en los cálculos se ha de añadir una nueva integral, así como un nuevo término en la acción de la forma¹:

$$\epsilon \exp \left\{ \frac{m}{2\epsilon^2} (x_{n+2} - x_{n+1})^2 - V(x_{n+2}) \right\} \quad (1.14)$$

nótese que entonces $x_{n+2} = x_b$, luego se tiene que:

$$\psi(x_b, t_b + \epsilon) = \frac{1}{A(\epsilon)} \int dx_{n+1} e^{i\epsilon \left\{ \frac{m}{2\epsilon^2} (x_b - x_{n+1})^2 - V(x_b) \right\}} \psi(x_{n+1}, t_b) \quad (1.15)$$

Observando el término $(x - x_{n+1})^2$, vemos que si la diferencia es muy grande, la exponencial oscilará mucho y el valor de la integral, por lo tanto, sería muy pequeño. Esto motiva a definir el siguiente cambio de variables:

$$\eta \equiv x_{n+1} - x_b \Leftrightarrow x_{n+1} = x_b + \eta \quad (1.16)$$

y quedarnos únicamente a segundo orden alrededor de $\eta = 0$ (pues la expresión se encuentra dentro de una integral). Obtenemos así que:

$$\begin{aligned} \psi(x_b, t_b + \epsilon) &= \frac{1}{A(\epsilon)} \int d\eta e^{i\epsilon \left\{ \frac{m}{2\epsilon^2} \eta^2 - V(x_b) \right\}} \left(1 + \eta \partial_{x_b} + \frac{\eta^2}{2} \partial_{x_b}^2 \right) \psi(x_b, t_b) \\ &= \frac{1}{A(\epsilon)} \sqrt{\frac{i2\pi\epsilon}{m}} \left[\psi(x_b, t_b) + \frac{i\epsilon}{2m} \partial_{x_b}^2 \psi(x_b, t_b) \right] (1 - i\epsilon V(x_b)) + \mathcal{O}(\eta^2, \epsilon^2) \end{aligned} \quad (1.17)$$

donde la integración de las gaussianas se ha realizado de acuerdo a los resultados deducidos en el Apéndice A. Ahora desarrollamos en serie el miembro de la izquierda hasta términos de orden ϵ^2 :

$$(1 + \epsilon \partial_{t_b}) \psi(x_b, t_b) = \frac{1}{A(\epsilon)} \sqrt{\frac{i2\pi\epsilon}{m}} \left[\psi(x_b, t_b) + \frac{i\epsilon}{2m} \partial_{x_b}^2 \psi(x_b, t_b) \right] (1 - i\epsilon V(x_b)) + \mathcal{O}(\eta^2, \epsilon^2) \quad (1.18)$$

¹A partir de este momento, y hasta el final del capítulo, se fijarán unidades naturales, es decir, $\hbar = c = 1$.

para evitar que la expresión se anule cuando ϵ tienda a cero, debemos fijar convenientemente $A(\epsilon)$, pero hemos de tener en cuenta que, como ya hemos justificado previamente, debe tender a cero al deshacer la discretización del tiempo. Nuestra elección es $A(\epsilon) = \sqrt{2i\pi\epsilon/m}$, teniéndose así que:

$$i\partial_{t_b}\psi(x_b, t_b) = \left[-\frac{1}{2m}\partial_{x_b}^2 + V(x_b) \right] \psi(x_b, t_b) \quad (1.19)$$

que es precisamente la ecuación de Schrödinger. Llegados a este punto, tal y como hace Feynman en [7], es posible seguir utilizando la Integral de Caminos para tratar otros conceptos como los de valores esperados, operadores o estados estacionarios. En este texto no tomaremos ese enfoque, pues si bien resulta muy ilustrativo, entorpece la presentación de algunos conceptos, por lo tanto, nos apoyaremos cuando sea necesario de lo que ya conocemos de Mecánica Cuántica.

1.2.1. Ecuación de Schrödinger para el núcleo

Si tomamos $t_a = t_b$ en (1.12), el resultado de realizar la integral debe ser $\psi(x_a, t_a)$, por lo tanto, la amplitud de probabilidad debe cumplir que:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a)|_{t_a=t_b} = \delta(x_b - x_a) \quad (1.20)$$

Por otro lado, la amplitud de probabilidad debe ser nula en $t_b < t_a$, entonces tiene un salto en $t_b = t_a$, escribiendo así que:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \theta(t_b - t_a) f(x_b, t_b; x_a, t_a) \quad (1.21)$$

teniendo en cuenta que f debe satisfacer la ecuación de Schrödinger y que la derivada de una función escalón es una delta de Dirac, se tiene que:

$$\left(\partial_{t_b} + iV(x_b) - i\frac{1}{2m}\partial_{x_b}^2 \right) K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \delta(t_b - t_a) f(x_b, t_b; x_a, t_a) \quad (1.22)$$

el miembro de la derecha es no nulo sólo cuando $t_b = t_a$, pero en ese caso el núcleo es $\delta(x_b - x_a)$, por lo que se obtiene:

$$\left(\partial_{t_b} + iV(x_b) - i\frac{1}{2m}\partial_{x_b}^2 \right) K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \delta(t_b - t_a) \delta(x_b - x_a) \quad (1.23)$$

Por lo tanto, la amplitud de probabilidad $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ es una función de Green (o núcleo) del operador diferencial dado por la ecuación de Schrödinger. La ecuación (1.23) junto a la condición de contorno:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = 0 \quad \text{si } t_b < t_a \quad (1.24)$$

nos dice que en realidad la Integral de Caminos (1.7) no define a la función de onda, sino a el núcleo de la ecuación de Schrödinger, que es el que determina cómo evoluciona la función de onda a lo largo del tiempo, de ahí que reciba también el nombre de *propagador* (de Feynman).

1.2.2. Potenciales dependientes de las velocidades

Al establecer la equivalencia entre la formulación de Schrödinger y de Feynman, hemos tomado la simplificación de que el potencial involucrado dependa únicamente de las

posiciones. Una rápida inspección a las expresiones involucradas hace ver que si el potencial fuese dependiente de las velocidades, entonces el problema resulta inabordable si se pretende continuar de la misma manera.

Este problema está íntimamente ligado con el hecho de un Hamiltoniano clásico no determina completamente un Hamiltoniano cuántico. Por este motivo, conviene trasladar nuestro estudio al espacio de fases. En [12, 13] se encuentra que el propagador para un sistema cuántico de una partícula no relativista de masa m moviéndose en la recta sometida a un potencial $V(x)$ se escribe como:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p e^{iS(p, x)} \quad \text{con} \quad S(p, x) = \int_{t_a}^{t_b} dt (p\dot{x} - H(p, x))$$

si ahora consideramos un intervalo temporal (t', t'') siendo $\tau \equiv t'' - t'$ infinitesimal, entonces, denotando como $\bar{x}$ al valor medio de x'' y x' , ocurre que²:

$$\begin{aligned} \langle x'' | \mathbf{U}(t' + \tau, t') | x' \rangle &\approx \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x'' - x')} (1 - i\tau H(p, \bar{x})) \\ &= (1 - \tau H(-\partial_x, \bar{x})) \delta(x'' - x') = \langle x'' | \mathbf{1} - i\tau \tilde{\mathbf{H}} | x' \rangle \end{aligned}$$

donde $\tilde{\mathbf{H}}$ puede ser cualquier operador cuántico que tienda al Hamiltoniano H al tomar el límite clásico. Vemos así el problema que surge al tomar el límite del continuo: hay información del operador Hamiltoniano que se pierde en dicho proceso y que no aparece en el Hamiltoniano clásico presente en la Integral de Caminos. Por tanto, para asegurar que dicha información no se pierde, hemos de dotar a la Integral de Caminos con cierta información adicional, que se denominan *reglas de ordenación* [14]. Nótese la analogía que existe con la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo, pues en ese caso el Hamiltoniano no conmuta consigo mismo en diferentes tiempos, lo que implica que los integrandos de los términos de la serie de Dyson cumplan cierto ordenamiento temporal.

Veamos que todo esto está relacionado con los potenciales dependientes de las velocidades. Para fijar ideas, empecemos considerando el siguiente Hamiltoniano clásico:

$$H(p, x) = xp = px = \frac{xp + px}{2} \quad (1.25)$$

es claro que la segunda y tercera igualdad son ciertas debido a que en la Mecánica Clásica los observables físicos conmutan entre sí. Ahora bien, en Mecánica Cuántica el operador Hamiltoniano debe ser autoadjunto, luego debe conservar la simetría presente en (1.25). Por lo tanto, como $\hat{x}\hat{p} \neq \hat{p}\hat{x}$, el operador Hamiltoniano sólo puede ser:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \quad (1.26)$$

Extendamos estas ideas para un caso más general. Para ello, consideremos el siguiente Hamiltoniano clásico:

$$H(p, x) = \sum_{m,r} a_{mr} x^m p^r$$

siendo a_{mr} coeficientes de expansión arbitrarios (nótese que resulta lógico que en un potencial dependiente de las velocidades, las posiciones y los momentos se encuentren acoplados). Definamos también el siguiente operador Hamiltoniano:

$$\mathbf{H}_W \equiv \sum_{m,r} a_{mr} (\hat{x}^m \hat{p}^r)_W \quad \text{con} \quad (\hat{x}^m \hat{p}^r)_W \equiv \frac{1}{2^m} \sum_{\ell=0}^m \frac{m!}{\ell!(m-\ell)!} \hat{x}^{m-\ell} \hat{p}^r \hat{x}^\ell$$

²Pues si τ es infinitesimal, entonces $S(x, p) \approx p(x'' - x') - \tau H(p, \bar{x})$.

entonces no sólo se tendrá que el operador $\mathbf{H}_W$ es autoadjunto (pues es, por definición, simétrico), sino que además se satisface que:

$$\langle x'' | e^{-i(t''-t')\mathbf{H}_W} | x' \rangle = \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p \, e^{i \int dt (p\dot{x} - H)}$$

es decir, las reglas de ordenación nos permiten asignar un operador $\mathbf{H}_W$ a un Hamiltoniano clásico H . En efecto, empecemos notando que, usando las propiedades elementales de los operadores posición y momento, así como la definición del binomio de Newton, se tiene que:

$$\langle x' | (\hat{x}^m \hat{p}^r)_W | x \rangle = \frac{1}{2^m} \sum_{\ell=0}^m \frac{m!}{\ell!(m-\ell)!} (x')^{m-\ell} \langle x' | \hat{p}^r | x \rangle x^\ell = \int \frac{dp}{2\pi} p^r e^{ip(x'-x)} \left(\frac{x' + x}{2} \right)^m$$

A partir de esta expresión, considerando que $t' - t$ es infinitesimal, se puede escribir:

$$\langle x' | e^{-i(t'-t)\mathbf{H}_W} | x \rangle = \delta(x' - x) - i(t' - t) \sum_{m,r} a_{mr} \int \frac{dp}{2\pi} p^r e^{ip(x'-x)} \left(\frac{x' + x}{2} \right)^m + \mathcal{O}((t' - t)^2)$$

donde ya se identifica el Hamiltoniano clásico H evaluado en $\bar{x}$, quedando así:

$$\langle x' | e^{-i(t'-t)\mathbf{H}_W} | x \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x'-x)} [1 - i(t - t')H(p, \bar{x})] + \mathcal{O}((t' - t)^2)$$

nótese que al tomar el límite $(t' - t) \rightarrow 0$, dentro de la integral aparece el término $e^{iS(x,p)}$. Por último, se sustituye esta expresión en:

$$\langle x'' | e^{-i(t'-t)\mathbf{H}_W} | x \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^N dx_n \langle x'' | e^{-i\epsilon \mathbf{H}_W} | x_N \rangle \langle x_N | e^{-i\epsilon \mathbf{H}_W} | x_{N-1} \rangle \dots \langle x_2 | e^{-i\epsilon \mathbf{H}_W} | x_1 \rangle$$

demostrándose así lo que queríamos. Vemos también que este resultado nos dice que al discretizar el tiempo, el Hamiltoniano clásico debe evaluarse en los puntos medios $\bar{x}_n$, tal como dijimos al principio del texto. De esta manera, solucionamos el problema de los potenciales dependientes de las velocidades o, dicho de otra manera, para Hamiltonianos en los que los momentos y las coordenadas están acoplados, pues podemos asignar a un Hamiltoniano clásico H un Hamiltoniano cuántico $\mathbf{H}_W$ que rijan la evolución temporal del sistema (aunque no es necesariamente único). Por lo tanto, asumiendo conocida la función de onda en un instante t , se tiene que:

$$\psi(x', t') = \int dx \langle x' | e^{-i(t'-t)\mathbf{H}_W} | x \rangle \psi(x, t)$$

1.2.3. Cuantización y ordenamiento de Weyl

En el apartado anterior se ha establecido una relación entre un Hamiltoniano clásico H y un Hamiltoniano cuántico $\mathbf{H}_W$, es decir, a un observable clásico se le ha asignado un operador cuántico, por lo que se ha “cuantizado” el sistema clásico. Analicemos en profundidad qué se entiende por cuantizar un sistema y el por qué de la elección de dicho operador Hamiltoniano. Consideremos un espacio de fases $T^*Q \simeq \mathbb{R}^{2n}$ y denotemos como $\mathcal{C}^\infty(T^*Q)$ al conjunto de observables clásicos, se entiende por cuantización de un sistema clásico a una aplicación:

$$\mathcal{Q} : \mathcal{C}^\infty(T^*Q) \rightarrow \{\text{operadores autoadjuntos en } \mathcal{H}\}$$

que satisface idealmente:

- (i) $\mathcal{Q}$ es una aplicación lineal.
- (ii) La identidad de T^*Q va a la identidad de $\mathcal{H}$, es decir, $\mathcal{Q}(\text{id}_{T^*Q}) = \text{id}_{\mathcal{H}}$.
- (iii) Para las coordenadas x_i y p_j de T^*Q , $\mathcal{Q}(x_i) = \hat{x}_i$ y $\mathcal{Q}(p_j) = \hat{p}_j$.
- (iv) Para los corchetes de Poisson definidos en T^*Q , $[\mathcal{Q}(f), \mathcal{Q}(p)] = i\hbar\mathcal{Q}(\{f, g\})$, siendo f, g dos funciones definidas en el espacio de fases.
- (v) Sea f una función definida en el espacio de fases y $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, entonces $\mathcal{Q}(\phi \circ f) = \phi(\mathcal{Q}(f))$.

El problema reside en que (i) y (v) no son compatibles entre sí (basta analizar el caso $f(x, p) = p^2 x^2$), es más, incluso seleccionando tres propiedades entre (i), (iii), (iv) y (v), se sigue llegando a una inconsistencia [15]. Para solucionar este problema se pueden optar por dos caminos: el primero sería restringir el dominio de $\mathcal{Q}$, mientras que el segundo (que es por el que vamos a optar) consiste en quedarnos con (i), (ii) y (iii) y exigir “asintóticamente” (iv), es decir:

$$[\mathcal{Q}(f), \mathcal{Q}(g)] = i\hbar\mathcal{Q}(\{f, g\}) + \mathcal{O}(\hbar^2)$$

Una manera de obtener esto se obtiene precisamente con el *ordenamiento de Weyl*, donde, para el caso $T^*Q \simeq \mathbb{R}^2$, a cualquier producto de la forma $x^m p^r$ se le hace corresponder el operador cuántico [16]:

$$\mathcal{Q}_{\text{Weyl}}(x^m p^r) \equiv (\hat{x}^m \hat{p}^r)_W = \frac{1}{2^m} \sum_{\ell=0}^m \frac{m!}{\ell!(m-\ell)!} \hat{x}^{m-\ell} \hat{p}^r \hat{x}^\ell$$

También cabe destacar que, para cualquier función $f \in T^*Q \simeq \mathbb{R}^{2n}$ lo suficientemente suave, se podría demostrar que la aplicación $\mathcal{Q}_{\text{Weyl}} : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ da lugar a una correspondencia uno a uno [17].

1.2.4. Convergencia de la Integral de Caminos

Al construir la Integral de Caminos hemos definido el objeto $\mathcal{D}x$, motivados por compactar la notación en analogía a las integrales de Riemann y Lebesgue, como:

$$\mathcal{D}x \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{n+1}{2}} \prod_{j=1}^n dx_j \quad (1.27)$$

Sin embargo, hemos evitado llamarla medida, pues la medida de una integral en un espacio de dimensión infinita, tal y como se expone en [18], no puede ser de la forma $dx_1 dx_2 \dots dx_n$ (obsérvese también que el prefactor tiende a infinito). De hecho, lo que sí tiene sentido considerarse como medida en espacios de funciones continuas en el intervalo $[0, t]$ es:

$$d\mu \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \prod_{i=1}^N \left(\frac{m}{2\pi \epsilon} \right)^{n/2} \exp \left[-\frac{m\epsilon}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon} \right)^2 \right] dx_i \right\} \quad (1.28)$$

que se denomina *medida de Wiener* y cuyos orígenes se remontan al estudio del movimiento browniano [19]. Es más, siempre que el potencial sea suave y acotado inferiormente, se puede demostrar [18] que:

$$(e^{-T\mathbf{H}}\psi)(x_0) = \int d\mu \exp \left[-\int_0^T ds V(x(s)) \right] \psi(x(T)) \quad (1.29)$$

Ahora bien, notemos que se recupera la Integral de Caminos definiendo el cambio de variable $t \rightarrow -i\tau$, en ese sentido, podemos considerar las integrales de caminos como continuaciones analíticas de las integrales sobre la medida de Wiener para funcionales de la forma (1.29) cuando el tiempo es imaginario puro. Profundizaremos en dicho cambio de variable en el segundo capítulo.

1.3. Teoría de perturbaciones y diagramas de Feynman

Unos de los mayores puntos fuertes del formalismo de la Integral de Caminos es que permite desarrollar la teoría de perturbaciones de una manera más natural. Para exponer esto, vamos suponer un sistema cuántico dado por una partícula no relativista moviéndose sobre la recta y sometida a un potencial $V(x, t)$. Como en el propagador aparece una exponencial, entonces tiene sentido considerar la serie formal:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{i=0}^{\infty} K_i(x_b, t_b; x_a, t_a) = K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) + K_1(x_b, t_b; x_a, t_a) + \dots \quad (1.30)$$

1.3.1. Propagador de la partícula libre

El propagador de la partícula libre corresponde al término K_0 de la suma en (1.30), es decir:

$$K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int \mathcal{D}x \, e^{iS_0[x(t)]} \quad \text{con } t_b > t_a \text{ y } S_0[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt \, \frac{m}{2} \dot{x}^2 \quad (1.31)$$

Su estudio resulta crucial pues, como veremos, los términos K_1 en adelante dependen de K_0 . Esta integral permite ser resuelta directamente mediante la definición (1.6), se empieza integrando la gaussiana para x_1 , después se introduce dicho resultado en la integral de x_2 y se sigue este procedimiento para todas las x_k (ver Apéndice A). De esta manera, es sencillo llegar a la siguiente expresión:

$$K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m}{2i\pi\epsilon(n+1)}} e^{\frac{im}{2\epsilon(n+1)}(x_a - x_b)^2} = \sqrt{\frac{m}{2i\pi t}} e^{\frac{im}{2t}(x_a - x_b)^2} \quad (1.32)$$

siendo $t \equiv t_b - t_a > 0$. Resulta muy conveniente expresar K_0 en términos de momentos y no de posiciones, para ello, calculamos la transformada de Fourier de (1.32) en el espacio de posiciones y posteriormente hacemos su transformada inversa, todo esto nos permite escribir³:

$$K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) = \frac{1}{2\pi} \int dp \, e^{i(p x - \frac{p^2}{2m} t)} \quad \text{con } t \equiv t_b - t_a > 0 \text{ y } x \equiv x_b - x_a \quad (1.33)$$

podemos incluir directamente la causalidad (es decir, que el propagador se anula si $t_b < t_a$) si multiplicamos (1.33) por una función escalón centrada en $t = 0$, pero vamos a usar directamente su transformada de Fourier⁴:

$$\theta(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int d\tau \frac{e^{i\tau t}}{\tau - i\epsilon} \quad (1.34)$$

³Hemos tomado el convenio de que en la transformada de Fourier, la exponencial que aparece es e^{-ipx} , mientras que en la transformada inversa aparece $(2\pi)^{-1} e^{ipx}$ si x es una variable espacial. Si es temporal, los signos se ven invertidos.

⁴Resulta importante recalcar que ϵ ha de tender a 0^+ independientemente del convenio tomado en las transformadas de Fourier. No confundir el ϵ con el ϵ de la Integral de Caminos en su forma discreta.

quedando así:

$$K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{(2\pi)^2 i} \int dp \int d\tau \frac{e^{i(px - \frac{p^2}{2m}t + \tau t)}}{\tau - i\varepsilon} \quad (1.35)$$

introduciendo el cambio de variables $E \equiv -\tau + p^2/2m$, (1.35) toma la forma:

$$K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{(2\pi)^2 i} \int dp dE \frac{e^{i(px - Et)}}{-E + p^2/2m - i\varepsilon} \quad (1.36)$$

Nótese que después de tomar el límite, la integral tiene un polo si la partícula satisface las ecuaciones del movimiento, es decir, satisface que $E = p^2/2m$, diciendo entonces que la partícula está sobre la capa de masas (*on-shell*).

1.3.2. Propagador de primer orden

Pasemos a estudiar el segundo sumando de la serie de (1.30), por lo que se debe calcular:

$$K_1(x_b, t_b; x_a, t_a) = -i \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \int \mathcal{D}x e^{iS_0[x(t)]} \right\} V(x, t) \quad \text{con} \quad S_0[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{1}{2} m \dot{x}^2 \quad (1.37)$$

para ello, usemos la definición (1.6), pero dividiendo la suma en dos: una que va de $k = 1$ a $k = j$ y otra que va de $j + 1$ hasta $n + 1$. De esta manera, (1.37) resulta en:

$$\begin{aligned} K_1(x_b, t_b; x_a, t_a) = & -i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{j=1}^{n+1} \epsilon \int dx_j \left(\frac{1}{A(\epsilon)} \right)^{n-j+1} \int dx_{j+1} \dots dx_n \exp \left\{ i \sum_{k=j+1}^{n+1} \frac{m}{2\epsilon} (x_k - x_{k-1})^2 \right\} \\ & \times V(x_j, t_j) \left(\frac{1}{A(\epsilon)} \right)^j \int dx_1 \dots dx_{j-1} \exp \left\{ i \sum_{k=1}^j \frac{m}{2\epsilon} (x_k - x_{k-1})^2 \right\} \end{aligned} \quad (1.38)$$

donde se identifican $K_0(x_b, t_b; x_j, t_j)$ y $K_0(x_j, t_j; x_a, t_a)$. Si además denotamos a x_j simplemente como x , podemos escribir que:

$$K_1(x_b, t_b; x_a, t_a) = -i \int_{t_a}^{t_b} dt \int dx K_0(x_b, t_b; x, t) V(x, t) K_0(x, t; x_a, t_a) \quad (1.39)$$

Debido a la causalidad del propagador K_0 , podemos extender el intervalo de integración a toda la recta real, quedando así:

$$K_1(x_b, t_b; x_a, t_a) = -i \int dt dx K_0(x_b, t_b; x, t) V(x, t) K_0(x, t; x_a, t_a) \quad (1.40)$$

Este propagador permite ser interpretado de dos maneras, la primera, que presentaremos ahora, es en términos de teoría de *scattering*, mientras que la otra se dará en la sección 1.3.4. Supongamos que en $t_a \rightarrow -\infty$ la función de onda $\psi_0(x_a, t_a)$ es una onda plana. Tenemos entonces:

$$\begin{aligned} \psi(x_b, t_b) = & \int dx K_0(x_b, t_b; x, t_a) \psi_0(x, t_a) \\ & + \int dx \left[\int dt \int dx' K_0(x_b, t_b; x', t) (-iV(x', t)) K_0(x', t; x, t_a) \right] \psi_0(x, t_a) \end{aligned} \quad (1.41)$$

Por tanto, la función de onda por tanto es interferencia de dos términos. El primer sumando corresponde a una onda que no ve el potencial $V(x, t)$, el segundo, al ser ψ_0 una onda plana, puede ser interpretado de manera análoga al principio de Huygens de la óptica ondulatoria: cada punto de la región donde está definido el potencial $V(x, t)$ actúa como un emisor secundario de ondas planas que contribuye con una amplitud por unidad de tiempo y de volumen proporcional a $-iV(x, t)$, pero las ondas dispersadas por los emisores secundarios no pueden excitar a su vez a otros emisores. Por lo tanto, (1.41) corresponde a la *primera aproximación de Born*, luego K_1 es la amplitud de *scattering* en la primera aproximación de Born. Resultaría muy ilustrativo calcular la amplitud de transición entre $\psi(x_b, t_b)$ y una onda plana de momento definido $\psi_{\text{out}}(x_b, t_b)$, pues se obtendrían los elementos de matriz de la matriz de *scattering* $\mathcal{S}$. Una discusión acerca de esto se encuentra en [20].

1.3.3. Propagadores de orden superior

Un cálculo completamente análogo a (1.37) permite escribir K_2 como:

$$K_2(x_b, t_b; x_a, t_a) = (-i)^2 \int dt_1 dt_2 dx_1 dx_2 K_0(x_b, t_b; x_2, t_2) V(x_2, t_2) \times K_0(x_2, t_2; x_1, t_1) V(x_1, t_1) K_0(x_1, t_1; x_a, t_a) \quad (1.42)$$

nótese que ha desaparecido el factor $1/2!$, esto se debe a que:

$$\begin{aligned} \int dt' dt'' V(t') V(t'') &= \int dt' dt'' \{ \theta(t' - t'') V(t') V(t'') + \theta(t'' - t') V(t'') V(t') \} \\ &= 2 \int dt_1 dt_2 \theta(t_1 - t_2) V(t_1) V(t_2) \end{aligned} \quad (1.43)$$

la segunda igualdad se debe a que t' y t'' pueden manipularse como variables mudas, pues los límites de integración de t_1 y t_2 son los mismos. En (1.42) se puede identificar K_1 , por lo que podremos escribir:

$$K_2(x_b, t_b; x_a, t_a) = -i \int dt_2 dx_2 K_1(x_b, t_b; x_2, t_2) V(x_2, t_2) K_0(x_2, t_2; x_a, t_a) \quad (1.44)$$

Siguiendo argumentos análogos a los dados para la interpretación de K_1 , K_2 se interpreta como la amplitud de *scattering* debida a que los emisores secundarios, excitados por la incidencia de la onda plana, pueden excitar otros emisores dentro de la región en la que está definido el potencial, pero estos últimos emisores no pueden excitar a otros. El resto de K_n permiten una interpretación similar, de modo que la suma (1.30) tiene en cuenta todas las dispersiones dentro de la zona del potencial, tal y como se esquematiza en la Figura (1.2). Para un propagador de orden arbitrario, (1.37) y (1.42) permiten demostrar por inducción que:

$$K_n(x_b, t_b; x_a, t_a) = -i \int dt dx K_{n-1}(x_b, t_b; x, t) V(x, t) K_0(x, t; x_a, t_a) \quad \forall n \in \mathbb{N}_0 \quad (1.45)$$

nótese que los factores $1/n!$ se eliminan argumentando de manera similar a como hemos hecho con el $1/2$ de K_2 . Combinando esta integral con (1.30), se obtiene que el propagador completo es:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) - i \sum_{n=0}^{\infty} \int dt dx K_n(x_b, t_b; x, t) V(x, t) K_0(x, t; x_a, t_a) \quad (1.46)$$

pero como el sumatorio se puede introducir dentro de la integral, si se conoce K_0 , entonces se puede obtener K a partir de la siguiente ecuación integral:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) - i \int dt dx K(x_b, t_b; x, t) V(x, t) K_0(x, t; x_a, t_a) \quad (1.47)$$

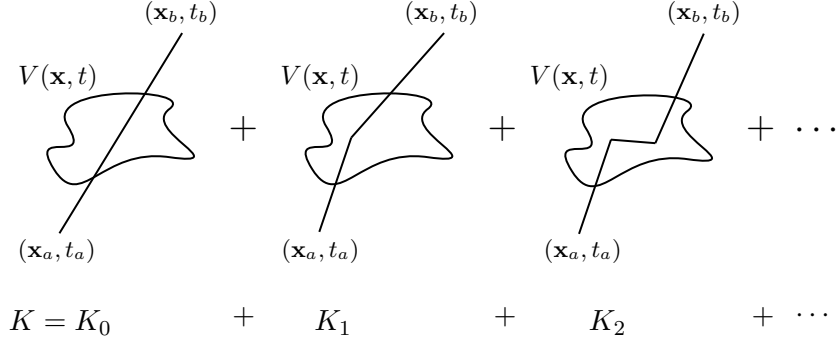


Figura 1.2: Representación gráfica de la serie de Born y sus propagadores [20].

1.3.4. Reglas de Feynman

Es posible dar otra interpretación a los propagadores K_ℓ sin necesidad de atender a la función de onda. Empecemos analizando:

$$K_0(x_b, t_b; x, t_a) [-iV(x, t)] K_0(x, t; x_a, t_a) \quad (1.48)$$

leyendo esta expresión de derecha a izquierda, la partícula empieza en el punto (x_a, t_a) y se mueve como una partícula libre hasta (x, t) , donde es dispersada por el potencial $V(x, t)$ para posteriormente continuar moviéndose como una partícula libre desde (x, t) hasta (x_b, t_b) . Como la dispersión puede ocurrir en cualquier punto (x, t) en los que está definido el potencial, se debe integrar sobre dicha región, de manera que se recupera el K_1 de (1.40). Por lo tanto, K_1 representa las maneras que tiene la partícula de ir desde (x_a, t_a) hasta (x_b, t_b) dispersándose sólo una vez. Análogamente, K_ℓ representaría las maneras que tiene la partícula de ir desde el punto inicial al final dispersándose ℓ veces. Debido a todo esto, (1.30) representa la suma a todas las posibles alternativas, organizándolas por el número de dispersiones que sufre la partícula, concluyendo así que las dos interpretaciones que hemos dado son equivalentes.

En particular, esta última interpretación presenta la enorme ventaja de que permite compactar la física del proceso de *scattering* con las expresiones matemáticas a través de los *diagramas de Feynman*. Para K_1 , el diagrama correspondiente se presenta en la Figura (1.3):

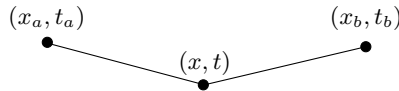


Figura 1.3: Diagrama de Feynman del propagador a primer orden $K_1(x_b, t_b; x_a, t_a)$.

A cada línea se le asocia un propagador K_0 cuyas variables corresponden a los vértices que unen, donde la variable temporal evoluciona de izquierda a derecha. Por otro lado, a cada vértice interior que une dos líneas rectas se le asocia un factor $-iV$. Finalmente, se integra para todos los x y t pertenecientes a cada vértice interior. Estas son las llamadas

reglas de Feynman, nótese que con estas reglas, la Figura (1.3) contiene la información de (1.48), pero representando explícitamente que la partícula se dispersa una vez. Para K_2 , el diagrama correspondiente es el de la Figura (1.4):

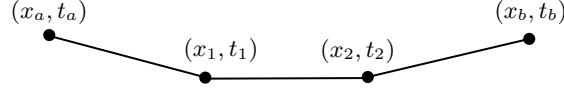


Figura 1.4: Diagrama de Feynman del propagador a segundo orden $K_2(x_b, t_b; x_a, t_a)$.

Si quisiésemos escribir la amplitud de *scattering*, entonces bastaría incluir las funciones de onda ψ_{out}^* y ψ_{in} , así como la integración a las variables relevantes.

En la Mecánica Cuántica no relativista, los diagramas de Feynman, debido a la sencillez de las expresiones obtenidas, no presentan una ventaja de cálculo significativa. Es en la Teoría Cuántica de Campos donde dichos diagramas cobran mayor importancia, debido a los efectos físicos a los que dan lugar.

Si se traslada este estudio al espacio de momentos se pone de manifiesto la conservación de la energía y el momento. Denotemos como $\tilde{V}(q, Q)$ a la transformada de Fourier del potencial, es decir:

$$V(x, t) \equiv \int dq dQ e^{i(qx - iQt)} \tilde{V}(q, Q) \quad (1.49)$$

utilizando las propiedades elementales de la delta de Dirac, así como K_0 en términos de su transformada de Fourier (1.36), (1.40) se puede reescribir como:

$$K_1(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{(2\pi)^2} \int dp dq dE dQ \frac{e^{i(p+q)x_b} e^{-i(E+Q)t_b}}{-(E+Q) + (p+q)^2/2m - i\varepsilon} \times \tilde{V}(q, Q) \frac{e^{-ipx_a} e^{iEt_a}}{-E + p^2/2m - i\varepsilon} \quad (1.50)$$

En este caso el dibujo es análogo al del propagador a primer orden en el espacio de posiciones:

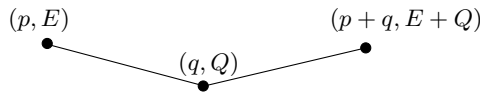


Figura 1.5: Diagrama de Feynman del propagador $K_1(x_b, t_b; x_a, t_a)$ en el espacio de momentos.

salvo que las reglas son diferentes y se esquematizan en la Figura (1.6). Ahora, además de tomar el límite para ε , se debe integrar para los dos momentos y energías. Por lo tanto, la integración en x y en t de (1.40) se ha convertido, al pasar al espacio de momentos, en la conservación de la energía y el momento y que es presente, tanto en los denominadores (por estar en la capa de masas), así como en las exponenciales. Para obtener las amplitudes de *scattering*, debemos incluir las funciones de onda ψ_{out}^* y ψ_{in} , así como la integración a las variables relevantes.

$$\begin{aligned}
& \text{Diagram: } (p, E) \text{ --- } (q, Q) \quad \equiv \quad \frac{1}{(2\pi)^2 i} \left(\frac{1}{-E + p^2/2m - i\varepsilon} \right) \\
& \text{Diagram: } \text{V-shape with } (p, E) \text{ at the vertex} \quad \equiv \quad -i(2\pi)^2 \tilde{V}(p, E) \text{ y conservación de la energía y momento}
\end{aligned}$$

Figura 1.6: Reglas de Feynman para el espacio de momentos.

1.4. Aproximación WKB

1.4.1. Introducción del problema y aproximación semiclásica

A la hora de calcular un propagador para un Lagrangiano genérico $L(x, \dot{x}, t)$, la definición (1.6) no proporciona un método de cálculo muy eficiente, ya que dicho procedimiento involucraría realizar numerosas cuentas, por lo que buscamos calcular los propagadores por una vía diferente.

Empecemos simplificando el problema a través del cambio de variable $x(t) \equiv x_{\text{cl.}}(t) + y(t)$, siendo $x_{\text{cl.}}(t)$ la solución clásica (i.e. satisface las ecuaciones de Euler-Lagrange). Como al ser el jacobiano de la transformación trivial, $\mathcal{D}x$ pasa a ser $\mathcal{D}y$, la simplificación aparece en los caminos que hay que integrar, pues ahora satisfacen que $y(t_b) = y(t_a) = 0$. Para calcular $S[x_{\text{cl.}}(t) + y(t)]$, se actúa de manera análoga a cuando se buscan encontrar las ecuaciones de Euler-Lagrange[21]:

$$\begin{aligned}
L(x + \epsilon\eta, \dot{x} + \epsilon\dot{\eta}, t) &= L(x, \dot{x}, t) + \epsilon \left(\frac{\partial L}{\partial x} \eta + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{\eta} \right) \\
&\quad + \frac{\epsilon^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \eta^2 + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{\eta}^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \eta \dot{\eta} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^3)
\end{aligned} \tag{1.51}$$

siendo $\eta(t)$ una función de prueba que satisface $\eta(t_b) = \eta(t_a) = 0$, por lo tanto, la acción toma la forma:

$$\begin{aligned}
S[x(t) + \epsilon\eta(t)] &= S[x(t)] + \epsilon \int dt \left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \right) \eta \\
&\quad + \frac{\epsilon^2}{2!} \int dt \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \eta^2 + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{\eta}^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \eta \dot{\eta} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^3)
\end{aligned} \tag{1.52}$$

como la primera variación debe anularse debido al Principio de Acción Estacionaria, compactando la notación, (1.52) queda como:

$$S[x(t) + \epsilon\eta(t)] = S[x(t)] + \frac{\epsilon^2}{2!} \delta^2 S[x(t)] + \mathcal{O}(\epsilon^3) \tag{1.53}$$

En vez de considerar el cambio de variables $x(t) \equiv x_{\text{cl.}}(t) + y(t)$, resulta más conveniente reescalar la variable $y(t)$ a través de $y(t) \equiv \sqrt{\hbar} \tilde{y}$, pues $\sqrt{\hbar}$ actuará como infinitesimal cerca del límite clásico. Esta transformación dará un jacobiano constante que llamaremos C , por lo que el propagador se podrá escribir como:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = C e^{i/\hbar S[x_{\text{cl.}}(t)]} \int \mathcal{D}\tilde{y} e^{i\frac{1}{2}\delta^2 S + \mathcal{O}(\hbar)} \tag{1.54}$$

Como $y \sim \mathcal{O}(\sqrt{\hbar})$, diremos entonces que $y(t)$ son *fluctuaciones cuánticas alrededor de la solución clásica*. Al tomar el límite $\hbar \rightarrow 0$, se tendrá que:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) \approx C e^{i/\hbar S[x_{\text{cl.}}(t)]} \int \mathcal{D}\tilde{y} e^{i\frac{1}{2}\delta^2 S} \quad (1.55)$$

pues la exponencial de $\delta^2 S$ sobrevive debido a que $\sqrt{\hbar}$ tiende más lentamente a cero que los otros términos. A los efectos que surgen debido a este hecho les llamaremos *semiclásicos*, por lo que se identifica este tratamiento con la aproximación WKB que se realiza sobre las funciones de onda [22].

Es muy importante notar que, si el Lagrangiano satisface que $\delta^n S = 0$ para $n > 2$, entonces la expresión (1.55) deja de ser aproximada y es exacta, este tipo de Lagrangianos merecen un estudio particular que dedicaremos a continuación.

1.4.2. Lagrangianos cuadráticos. Integrales de camino como determinantes

Como ya se ha mencionado previamente, los resultados de la sección anterior dejan de ser aproximados a ser exactos si para cierta acción S , la serie (1.53) se trunca a segundo orden, es decir, $\delta^n S[x(t)] = 0$ para todo $n > 2$. Aquellos Lagrangianos que satisfagan la dicha propiedad les denominaremos como *Lagrangianos cuadráticos*. En 1+1 dimensiones, estos toman la forma:

$$L(x, \dot{x}, t) = a(t)\dot{x}^2 + b(t)\dot{x}x + c(t)x^2 + d(t)\dot{x} + e(t)x + f(t) \quad (1.56)$$

En efecto, inspeccionando el tercer sumando de (1.52), se observa que a tercer orden deben aparecer terceras derivadas, pero en el Lagrangiano cuadrático que acabamos de definir ocurre que:

$$\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} = 2c(t) \quad , \quad \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} = 2a(t) \quad , \quad \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} = b(t) \quad (1.57)$$

luego las terceras derivadas serán nulas y, por lo tanto, también la tercera variación de la acción. Por otro lado, integrando por partes, se puede escribir la segunda variación del Lagrangiano como:

$$\delta^2 S = \int dt (2c(t)\eta^2 + 2a(t)\dot{\eta}^2 + 2b(t)\eta\dot{\eta}) = \int dt [(2c(t) - \dot{b})\eta^2 + 2a(t)\dot{\eta}^2] \quad (1.58)$$

Esta expresión puede acomodarse convenientemente para que quede como una forma cuadrática. En efecto, notando que en:

$$\int dt a(t)\dot{\eta}^2 = \int dt \left[\frac{d}{dt} (a\dot{\eta}) - a(t)\ddot{\eta} - \dot{a}(t)\dot{\eta} \right] \quad (1.59)$$

el primer sumando se anula al tenerse que $\eta(t_a) = \eta(t_b) = 0$, luego (1.58) se lee:

$$\delta^2 S = \int dt \eta \left(2c(t) - \dot{b}(t) - 2a(t)\partial_t^2 - 2\dot{a}(t)\partial_t \right) \eta \equiv \langle \eta, \mathcal{A}(t)\eta \rangle \quad (1.60)$$

De esta manera, el propagador del sistema toma la misma forma que las integrales gaussianas que estudiamos en el Apéndice A⁵:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = C e^{iS[x_{\text{cl.}}(t)]} \int \mathcal{D}\eta e^{i\frac{1}{2}\langle \eta, \mathcal{A}\eta \rangle} \sim (\text{Det}(\mathcal{A}))^{-1/2} \quad (1.61)$$

⁵Utilizaremos “Det” en vez de “det” para recalcar que no es un determinante de una matriz de dimension finita, tal como se expone en [19], donde se usa una notación similar.

Por lo tanto, en este tipo de Lagrangianos, el problema de hallar el propagador del sistema es, en esencia, el de calcular un determinante. Dicho determinante, tal y como se menciona en el apéndice A, debe interpretarse como el producto de todos los autovalores del problema de autovalores:

$$\left(2c(t) - \dot{b}(t) - 2a(t)\partial_t^2 - 2\dot{a}(t)\partial_t\right)\eta(t) = \lambda\eta(t) \quad \text{con} \quad \eta(t_a) = \eta(t_b) = 0 \quad (1.62)$$

1.4.3. Ejemplo de aplicación: oscilador armónico en 1+1-dimensiones

El Lagrangiano para un oscilador unidimensional, que es el ejemplo más claro de Lagrangiano cuadrático, se lee:

$$L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (1.63)$$

luego el problema de autovalores a resolver es el siguiente:

$$(-m\omega^2 - m\partial_t^2)\eta(t) = \lambda\eta(t) \quad \text{con} \quad \eta(t_a) = \eta(t_b) = 0 \quad (1.64)$$

Sin pérdida de generalidad, fijemos $t_a = 0$ y $t_b = T$, de esta manera, las soluciones de (1.64) son la siguiente familia de funciones:

$$\left\{ \eta_k(t) = \mathcal{C} \sin\left(\frac{k\pi t}{T}\right) \right\}_{\mathcal{C} \in \mathbb{R}, k \in \mathbb{N}} \quad (1.65)$$

nótese que los casos $k \in \mathbb{Z}^-$, así como $k = 0$, se encuentran absorbidos dentro de $\mathcal{C} \in \mathbb{R}$. Para los autovalores se tiene que:

$$\left\{ \lambda_k = \left(\frac{k\pi}{T}\right)^2 - \omega^2 \right\}_{k \in \mathbb{N}} \quad (1.66)$$

El determinante toma entonces la forma:

$$\text{Det}(\mathcal{A}) = \prod_{k=1}^{\infty} \lambda_k = \prod_{k=1}^{\infty} \left(\frac{k\pi}{T}\right)^2 - \omega^2 \quad (1.67)$$

reorganizando dicho productorio, se identifica la expansión del seno cardinal como producto infinito:

$$\text{Det}(\mathcal{A}) = \prod_{k=1}^{\infty} \left(\frac{k\pi}{T}\right)^2 \prod_{j=1}^{\infty} \left[1 - \left(\frac{\omega T}{j\pi}\right)^2\right] = \frac{\sin(\omega T)}{\omega T} \prod_{k=1}^{\infty} \left(\frac{k\pi}{T}\right)^2 \quad (1.68)$$

el productorio restante en (1.68), así como el resto factores diferentes al determinante que aparecen al resolver la integral gaussiana, pueden absorberse en el término C de (1.54). Entonces, por ahora se tiene que:

$$K(x_b, T; x_a, 0) = C e^{iS[x_{\text{cl}}]} \sqrt{\frac{\omega T}{\sin(\omega T)}} \quad (1.69)$$

Pasemos ahora a evaluar la acción sobre la trayectoria clásica, como es bien conocida la ecuación del movimiento de un oscilador armónico, vamos a introducir directamente las condiciones iniciales $x(0) = x_a$ y $x(T) = x_b$ a dicha ecuación, resultando en:

$$x_{\text{cl.}}(t) = x_a \cos(\omega t) + \frac{x_b - x_a \cos(\omega T)}{\sin(\omega T)} \sin(\omega t) \quad (1.70)$$

por tanto, la acción vale:

$$S[x_{\text{cl.}}(t)] = \int_0^T dt L(x_{\text{cl.}}, \dot{x}_{\text{cl.}}, t) = \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)} [(x_b^2 + x_a^2) \cos(\omega T) - 2x_b x_a] \quad (1.71)$$

Por último, queda hallar C , para ello, debemos notar que un oscilador armónico debe degenerar al caso de una partícula libre al tomar $\omega = 0$, por lo que en dicho límite, el propagador (1.69) debe coincidir con el propagador de la partícula libre (1.32), luego $C = 1/A(\epsilon = T) = \sqrt{m/2i\pi T}$ y finalmente se tiene que:

$$K(x_b, T; x_a, 0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \sin(\omega T)}} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\sin(\omega T)} [(x_b^2 + x_a^2) \cos(\omega T) - 2x_b x_a] \right\} \quad (1.72)$$

Veamos ahora cómo se recuperan las funciones de onda y el espectro de energías del oscilador armónico partiendo directamente del propagador (1.72). Sea $\{|\varphi_n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}_0}$ la base de estados estacionarios del oscilador armónico, entonces utilizando la expresión (1.12), junto a la relación de cierre, se obtiene:

$$K(x_b, T; x_a, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n^*(x_a) \varphi_n(x_b) e^{-iE_n T} \quad (1.73)$$

pues al ser el Hamiltoniano del oscilador armónico independiente del tiempo, el operador evolución toma la forma $\mathbf{U}(t_b, t_a) = e^{i\mathbf{H}(t_b - t_a)}$ [11]. Por otro lado, sustituyendo las funciones seno y coseno con sus correspondientes expresiones complejas en (1.72), esta toma la forma:

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\pi}} e^{-i\omega T/2} (1 - e^{-i2\omega T})^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2} \left[(x_b + x_a)^2 \frac{1 + e^{-2i\omega T}}{1 - e^{-2i\omega T}} - \frac{4x_b x_a e^{-i\omega T}}{1 - e^{-2i\omega T}} \right] \right\} \quad (1.74)$$

Ahora usamos la fórmula (12) del tercer volumen de [23] (página 272):

$$e^{-(x^2 + y^2)/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{z}{2}\right)^n H_n(x) H_n(y) = \frac{1}{\sqrt{1 - z^2}} \exp \left[\frac{4xyz - (x^2 + y^2)(1 + z^2)}{2(1 - z^2)} \right] \quad (1.75)$$

donde H_n denota al n -ésimo polinomio de Hermite. Identificando $x \equiv \sqrt{m\omega} x_b$, $y \equiv \sqrt{m\omega} x_a$ y $z \equiv e^{-i\omega T}$, (1.74) se puede reescribir como:

$$K(x_b, T; x_a, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega(n+1/2)T} \frac{\sqrt{m\omega}}{\sqrt{\pi 2^n n!}} H_n(\sqrt{m\omega} x_a) H_n(\sqrt{m\omega} x_b) e^{-\frac{m\omega}{2} x_b^2} e^{-\frac{m\omega}{2} x_a^2} \quad (1.76)$$

por lo que, en virtud de (1.73), se desprende que:

$$\begin{aligned} E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N}_0 \\ \varphi_n(x) &= \left(\frac{m\omega}{2^{2n} n!^2 \pi \hbar} \right)^{1/4} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right), \quad n \in \mathbb{N}_0 \end{aligned} \quad (1.77)$$

donde se han recuperado los $\hbar$ recordando que la aproximación WKB es, en esencia, un desarrollo de potencias en $\hbar$.

2. Física Estadística y la Integral de Caminos

2.1. Repaso fundamental de Física Estadística

En este capítulo se pretende establecer una relación entre la Mecánica Cuántica no relativista y la Física Estadística. Con el objetivo de hacer este texto lo más autocontenido posible, comenzaremos recordando algunos conceptos de esta última. Vamos a seguir un enfoque similar a [24], es decir, vamos a postular que existe una función continua y diferenciable sobre la variedad de los estados de equilibrio (cuyos puntos vienen dados por las magnitudes extensivas) llamada *entropía*, que además es aditiva y monótona creciente con respecto a la energía. Es más, vamos a postular que dicha entropía puede escribirse como función de la distribución de probabilidad de los microestados $\{p_i\}_{i \in I}$ del sistema según la expresión de la entropía de información de Shannon [25]:

$$\mathcal{S}[p_i] = -k_B \left(\sum_{i \in I} p_i \log(p_i) \right) \quad (2.1)$$

Si nuestro sistema macroscópico viene determinado por N partículas confinadas en un volumen V , tal que toda su superficie está en contacto con un termostato a temperatura T (lo que se conoce como una *colectividad canónica*), entonces las probabilidades deben satisfacer que:

$$\sum_{i \in I} p_i = 1 \quad , \quad \langle E \rangle = \sum_{i \in I} p_i E_i \quad (2.2)$$

donde E_i denota la energía del i -ésimo microestado. Tal y como postula Callen, dicho funcional debe maximizarse sobre la variedad de los estados de equilibrio, por lo que el problema se convierte en uno de extremos condicionados a las ligaduras (2.2). El proceso de maximización resulta en:

$$p_i(\beta) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i} \quad \text{con} \quad Z \equiv \sum_{i \in I} e^{-\beta E_i} \quad (2.3)$$

siendo Z lo que se denomina como *función de partición* y $\beta \equiv 1/k_B T$. La entropía, por otro lado, toma la forma:

$$\mathcal{S} = k_B \beta \langle E \rangle + k_B \log(Z) \quad (2.4)$$

Cuando nuestro sistema físico se encuentra en contacto con un termostato a temperatura fija, el potencial termodinámico energético más conveniente con el que trabajar es el *potencial de Helmholtz*, definido a través de la transformada de Legendre de la energía interna $\langle E \rangle$ con respecto a la entropía:

$$F(\beta, V, N) \equiv \langle E \rangle - T\mathcal{S} = -\beta^{-1} \log(Z) \quad (2.5)$$

de esta manera, se construye un potencial termodinámico cuyas variables son las que hemos fijado por hipótesis. Las primeras derivadas de dicho potencial relacionan las magnitudes macroscópicas (i.e. medibles experimentalmente) con la función estructura Z a través de las expresiones:

$$\langle E \rangle = - \left(\frac{\partial \log(Z)}{\partial \beta} \right)_{V, N} \quad , \quad P = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \log(Z)}{\partial V} \right)_{\beta, N} \quad , \quad \mu = -\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \log(Z)}{\partial N} \right)_{V, \beta} \quad (2.6)$$

2.2. Física Cuántica como continuación analítica de la Física Estadística

2.2.1. Función de partición y matriz densidad

En el anterior capítulo vimos que el operador evolución para un Hamiltoniano independiente del tiempo estaba relacionado con la Integral de Caminos a través de la expresión:

$$K(x', t; x, 0) = \langle x' | e^{-i\mathbf{H}t/\hbar} | x \rangle \quad (2.7)$$

a continuación supongamos que, por alguna razón de peso, la variable temporal permite tomar valores sobre todo el plano complejo y, en particular, que es imaginario puro. De esta manera, tiene sentido considerar el cambio de variable $t \rightarrow -i\tau, \tau \in \mathbb{R}$. Entonces, (2.7) pasa a tomar la forma:

$$K(x', -i\tau; x, 0) = \langle x'(-i\tau) | e^{-\mathbf{H}\tau/\hbar} | x(0) \rangle \quad (2.8)$$

si ahora suponemos que los caminos son tales que $x'(-i\tau) = x(0)$ e integramos sobre todos los valores de x , tenemos que:

$$\int dx K(x, -i\tau; x, 0) = \int dx \langle x | e^{-\mathbf{H}\tau/\hbar} | x \rangle = \text{Tr}(e^{-\mathbf{H}\tau/\hbar}) \quad (2.9)$$

Sin pérdida de generalidad, se puede fijar τ de manera que $\tau/\hbar = 1/k_B T$, por lo que finalmente se tiene que:

$$\int dx K(x, -i\tau; x, 0) = \text{Tr}(e^{-\mathbf{H}/k_B T}) = \text{Tr}(e^{-\beta\mathbf{H}}) \quad (2.10)$$

Ahora bien, como la traza es un invariante algebraico, entonces su valor no depende de la base escogida. Por tanto, podemos calcular (2.10) tomando la base de estados propios del Hamiltoniano $\{|\varphi_i\rangle\}_{i \in I}$ (supuesta por simplicidad como discreta), obteniéndose:

$$\int dx K(x, -i\tau; x, 0) = \text{Tr}(e^{-\beta\mathbf{H}}) = \sum_{i \in I} e^{-\beta E_i} \quad (2.11)$$

Vemos así que se recupera la función de partición para una colectividad canónica. Si además escribimos el propagador (2.8) en términos de los estados propios del operador Hamiltoniano a través de la relación de cierre, entonces:

$$K(x, -i\tau; x, 0) = \sum_{i \in I} \varphi_i(x) \varphi_i^*(x) e^{-\beta E_i} \equiv \sum_{i \in I} \langle x | [e^{-\beta\mathbf{H}} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|] | x \rangle \quad (2.12)$$

esta expresión toma una forma más familiar si multiplicamos ambos lados por Z^{-1} , pues se identifica el operador densidad ρ de la mezcla estadística $\{(p_i, |\varphi_i\rangle)\}_{i \in I}$. En efecto:

$$Z^{-1} K(x, -i\tau; x, 0) = \sum_{i \in I} \langle x | \frac{e^{-\beta\mathbf{H}}}{Z} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| x \rangle = \langle x | \rho | x \rangle \quad (2.13)$$

siendo evidente entonces que $\text{Tr}(\rho) = 1$. De esta manera, se desprende que los elementos de matriz del operador densidad toman la forma:

$$\rho(x', x) \equiv \frac{1}{Z} K(x', -i\tau; x, 0) \quad (2.14)$$

Concluimos entonces que el cambio de variable $t \rightarrow i\tau$ establece una equivalencia un sistema cuántico unidimensional no relativista y una colectividad canónica.

2.2.2. Rotación de Wick

Tal y como hemos visto, acabamos de demostrar que existe una relación biunívoca entre un sistema cuántico formado por una partícula no relativista en una dimensión y una colectividad canónica, pues es posible relacionar ambos a través de la *rotación de Wick* $t \rightarrow -i\tau$ (pues equivale a una rotación de $\pi/2$ en sentido horario en el plano complejo). Además, presenta varias ventajosas implicaciones que mencionamos a continuación.

Para una partícula no relativista de masa m que se mueve en una dimensión y que está sometida a un potencial $V(x)$, sabemos que su dinámica viene determinada por la acción:

$$S[x(t)] = \int dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) - V(x) \right) \quad (2.15)$$

pero si realizamos la rotación de Wick, entonces la acción (2.15) se transforma en:

$$S[x(\tau)] \equiv iS_E = i \int d\tau \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2(\tau) + V(x) \right) = i \int d\tau H(\tau) \quad (2.16)$$

donde se ha cometido el abuso de notación de denotar a las derivadas de t y τ igual. La acción (2.16) recibe el nombre de *acción euclídea* y presenta la enorme ventaja computacional de que, al entrar en la Integral de Caminos, elimina el factor imaginario de la exponencial, resultando en:

$$K(x_b, \tau_b; x_a, \tau_a) = \int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S_E(\tau)/\hbar} = \int \mathcal{D}x(\tau) e^{-\int d\tau H(\tau)/\hbar} \quad (2.17)$$

luego la analogía con la medida de Wiener es total. Por otro lado, la rotación de Wick convierte la ecuación de Schrödinger en una ecuación del calor, pues como $\partial_t = i\partial_\tau$, entonces:

$$\left[\partial_\tau - \frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x) \right] K(x, \tau, x_0, \tau_0) = [\partial_\tau + \mathbf{H}(\partial_x^2, x)] K(x, \tau, x_0, \tau_0) = 0 \quad (2.18)$$

En virtud de los resultados obtenidos en el Apéndice A, identificamos que la dinámica de una partícula cuántica no relativista en una dimensión es la continuación analítica de una colectividad canónica y viceversa. De manera más general, se puede demostrar que una Teoría Cuántica de Campos en d dimensiones es la continuación analítica de una colectividad grancanónica en $d + 1$ dimensiones, pues se permite la creación y aniquilación de partículas.

2.3. Fórmula de Feynman-Kac y espectros de energía

La rotación de Wick nos permite eliminar el factor complejo de la Integral de Caminos, por lo tanto, dado cierto sistema cuántico unidimensional, podemos aprovechar la relación biunívoca existente con una colectividad canónica para obtener la máxima información acerca del espectro energético de nuestro sistema. Supongamos un sistema cuántico donde los estados propios del operador Hamiltoniano forman una base discreta. Entonces el estado fundamental se puede escribir como:

$$e^{-\beta E_0} = \text{Tr}(e^{-\beta \mathbf{H}}) - \sum_{i \neq 0} e^{-\beta E_i} \quad (2.19)$$

si ahora tomamos logaritmos a ambos lados y consideramos el límite $\beta \rightarrow \infty$, conseguimos expresar la energía del estado fundamental en función de la traza del operador estadístico:

$$E_0 = - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\beta} \log(\text{Tr}(e^{-\beta \mathbf{H}})) \right] \quad (2.20)$$

esta expresión recibe el nombre de *Fórmula de Feynman-Kac*, que veremos en el siguiente capítulo que resulta una herramienta de extrema utilidad para calcular el estado fundamental de un sistema. Es más, también cobra mucha importancia en el contexto de los mercados financieros, pues permite aplicar una metodología basada en la Integral de Caminos [26].

Para el caso de un potencial separable en dos términos de la forma $V(x) = V_0 + \lambda V_1(x)$ con $\lambda \ll 1$, si conocemos la función de partición para el potencial V_0 , entonces podemos escribir:

$$Z[\beta] = Z_0[\beta] \left(1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{-\lambda}{\hbar} \right)^k \int_0^{\beta\hbar} d\tau \langle V_1^k(x) \rangle \right) \quad (2.21)$$

Por tanto, para obtener la función de partición, habría que calcular las contribuciones $\langle V_1^k(x) \rangle$ usando las técnicas expuestas en el Apéndice A. En particular, este tratamiento resulta muy útil cuando $V_0(x)$ es el potencial de un oscilador armónico, pues en ese caso se puede escribir que:

$$Z[\beta] \approx Z_0[\beta] \left(1 - \frac{\lambda}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \langle V_1(x) \rangle \right) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega} (1 - \beta\delta E_n) \quad (2.22)$$

Otro enfoque alternativo consiste en tomar la transformada de Laplace de la función de partición:

$$\mathfrak{L}Z(E) = \int_{\mathbb{R}^+} d\beta e^{\beta E} Z(\beta) = \sum_{i \in I} \int_{\mathbb{R}^+} d\beta e^{\beta(E-E_i)} = \sum_{i \in I} \frac{1}{E_i - E} = \text{Tr} \left(\frac{1}{\mathbf{H} - E} \right) \quad (2.23)$$

por lo que los polos de la transformada de Laplace de la función de partición son precisamente el espectro del operador Hamiltoniano [12]. En cualquier caso, nos centraremos en el primer método, pues veremos que dicho método, junto a la fórmula de Feynman-Kac, reproducen los resultados obtenidos mediante la teoría usual de perturbaciones independientes del tiempo [11, 22].

3. QFT en 0+1 dimensiones

3.1. Introducción

Como ya hemos mencionado previamente, el formalismo de la Integral de Caminos si bien enriquece la teoría de la Mecánica Cuántica, no presenta ventajas computacionales que motiven su uso para el estudio de los sistemas físicos. Sin embargo, dicho formalismo cobra mucha más importancia en la Teoría Cuántica de Campos (ó QFT, para abreviar), teniendo como ejemplo más claro la derivación de las *Reglas de Feynman* en la QED.

Trasladar todo el estudio que hemos ido realizando a lo largo del presente texto a una teoría de campos no es posible, al menos, completamente, por falta de tiempo y papel. Sin embargo, podemos elaborar lo que se conoce en Física Teórica como un *toy model* [27], esto consiste en simplificar considerablemente dicha teoría (usualmente reduciendo el número de dimensiones), con el objetivo de extraer el mayor número de conclusiones a través de cálculos que pueden ser realizados de manera exacta. En el caso que nos ocupa, recordemos que un campo es, en esencia, una aplicación $\phi : \mathcal{M} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$, donde $\mathcal{M}$ es una variedad lo suficientemente suave. Si fijamos $\dim(\mathcal{M}) = 0$, entonces los campos se convierten en trayectorias $\phi(t)$ y, por tanto, podemos utilizar la Mecánica Cuántica como un *toy model* de una QFT. En particular, nos vamos a centrar en una teoría $\lambda\phi^4$, ocurriendo entonces que:

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\dot{\phi}^2 - \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 - m^2\phi^2 - \frac{\lambda}{4!}\phi^4 \longrightarrow L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m}{2}\omega^2 x^2 - \frac{\lambda}{4!}x^4 \quad (3.1)$$

donde λ recibe el nombre de *constante de acoplamiento*¹. La introducción de una potencia x^4 se debe a que es la siguiente potencia después de x^2 que mantiene la energía como definida positiva. Además, el Lagrangiano es invariante bajo la transformación $x \rightarrow -x$, que resulta crucial para comprender el fenómeno de la *ruptura espontánea de la simetría* (ó SSB), que veremos más adelante. En este capítulo se usarán unas unidades en las que $\hbar = c = k_B = 1$.

3.2. Cálculos perturbativos en temperaturas

3.2.1. Corrección a $\mathcal{O}(\lambda^2)$

Vamos a centrarnos primeramente en tiempos imaginarios (ó temperaturas), pues no sólo la simplicidad matemática nos permite fijar las ideas para más adelante, sino que también nos permite obtener las correcciones a los niveles energéticos. En este caso, hemos de notar que el caso del oscilador armónico ya ha sido estudiado previamente, por lo que a dicho Lagrangiano le denominaremos como *Lagrangiano libre*, pues realizaremos las perturbaciones sobre este, mientras que el sumando restante, que va con λx^4 , lo llamaremos *Lagrangiano de interacción*. Tal y como vimos en el capítulo anterior, lo que debemos calcular es la siguiente función de partición:

$$Z[\beta] = Z_0 \left(1 - \frac{\lambda}{4!} \int_0^\beta d\tau \langle x^4(\tau) \rangle \right) + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (3.2)$$

¹Podemos hacer, sin pérdida de generalidad, que ambas expresiones de (3.1) tengan las mismas unidades, para ello, basta multiplicar la acción por una constante que absorba todas las unidades.

siendo Z_0 la función de partición del oscilador armónico. En este capítulo aparecerán integrales que serán resueltas mediante las técnicas expuestas en el Apéndice A. En particular, en virtud del teorema de Wick (A.4.1), podemos escribir que:

$$Z[\beta] \approx Z_0 \left(1 - 3 \frac{\lambda}{4!} \int_0^\beta d\tau \Delta^2(\tau, \tau) \right) \quad (3.3)$$

donde $\Delta(\tau, \tau')$ es la función de Green correspondiente a los elementos de matriz de la inversa de la forma cuadrática de la acción sin perturbar, que era:

$$S_E^0 = \int d\tau d\tau' \left[x(\tau) \frac{m}{2} (-\partial_\tau \partial_{\tau'} + \omega^2) \delta(\tau - \tau') x(\tau') \right] \quad , \quad S_E = S_E^0 - \int d\tau \frac{\lambda}{4!} x^4(\tau) \quad (3.4)$$

El factor 3 aparece al evaluar Δ en el mismo instante τ , pues el teorema de Wick (A.4.1) establece que el valor medio $\langle x(\tau_1)x(\tau_2)x(\tau_3)x(\tau_4) \rangle$ se puede calcular a través de las posibles maneras de conectar en parejas cuatro puntos:

$$\langle x(\tau_1)x(\tau_2)x(\tau_3)x(\tau_4) \rangle = \begin{array}{c} x(\tau_1) \\ | \\ x(\tau_2) \end{array} \begin{array}{c} x(\tau_3) \\ | \\ x(\tau_4) \end{array} + \begin{array}{c} x(\tau_1) \text{ --- } x(\tau_3) \\ x(\tau_2) \text{ --- } x(\tau_4) \end{array} + \begin{array}{c} x(\tau_1) \text{ --- } x(\tau_4) \\ x(\tau_3) \text{ --- } x(\tau_2) \end{array}$$

Figura 3.1: Descomposición del valor medio en función de los posibles emparejamientos.

Por otro lado, previamente exigimos que la función de partición satisficiera condiciones de contorno periódicas en el tiempo, de manera que la acción ha de satisfacerlas también y, por tanto, también $\Delta(\tau, \tau')$, luego los elementos de matriz deben satisfacer el problema:

$$\begin{cases} m(-\partial_\tau^2 + \omega^2)\Delta(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau') \\ \Delta(\pm\beta/2, \tau') = \Delta(\tau, \pm\beta/2) \quad , \quad \dot{\Delta}(\pm\beta/2, \tau') = \dot{\Delta}(\tau, \pm\beta/2) \end{cases} \quad (3.5)$$

notemos que las condiciones de contorno hacen idénticamente nula la solución homogénea, por lo tanto, basta buscar una solución particular. La solución es:

$$\Delta(\tau, \tau') = \frac{1}{2\omega m \sinh(\omega\beta/2)} \cosh[\omega(\beta/2 - |\tau - \tau'|)] \quad (3.6)$$

pudiéndose comprobar fácilmente teniendo en cuenta que, en el sentido de las distribuciones, ocurría que²:

$$\frac{d}{d\tau} |\tau| = \text{sgn}(\tau) \quad , \quad \frac{d}{d\tau} \text{sgn}(\tau) = 2\delta(\tau) \quad (3.7)$$

la integración restante es trivial, obteniendo así que:

$$Z[\beta] = Z_0 \left[1 - \frac{\lambda\beta}{32\omega^2 m^2} \coth^2 \left(\frac{\omega\beta}{2} \right) \right] + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (3.8)$$

A continuación, podemos usar la fórmula de Feynman-Kac para obtener la energía del estado fundamental. En efecto, por las propiedades elementales de los logaritmos, junto con que el hecho de que:

$$\coth^2 \left(\frac{\omega\beta}{2} \right) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} 1 \quad , \quad \log \left(1 - \frac{\lambda\beta}{32\omega^2 m^2} \right) \approx -\frac{\lambda\beta}{32\omega^2 m^2} \quad (3.9)$$

la energía del estado fundamental es:

$$E_0 = \frac{\omega}{2} \left(1 + \frac{\lambda}{16\omega^3 m^2} \right) + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (3.10)$$

²Recuérdese que la función signo estaba definida de manera que $\text{sgn}(\tau > 0) = 1$ y $\text{sgn}(\tau < 0) = -1$.

3.2.2. Corrección a $\mathcal{O}(\lambda^3)$

La función de partición a este orden se lee:

$$Z[\beta] \approx Z_0 \left(1 - \frac{\lambda}{4!} \int_0^\beta d\tau \langle x^4(\tau) \rangle + \frac{\lambda^2}{(4!)^2 2} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle x^4(\tau_1) x^4(\tau_2) \rangle \right) \quad (3.11)$$

actuando de manera análoga al caso anterior, si queremos usar el teorema de Wick (A.4.1), entonces tenemos que calcular el número de maneras conectar ocho puntos de dos en dos. Un cálculo combinatorio elemental nos dice que esto puede suceder de 105 maneras³. Ahora bien, que aparezca una doble integral nos exige examinar las maneras en las que se pueden conectar los ocho puntos. Para ello, consideremos la siguiente figura:

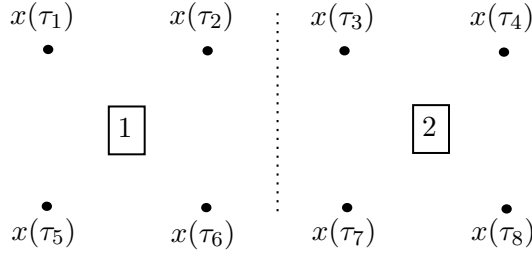


Figura 3.2: Disposición sobre la cual se calculan los posibles emparejamientos.

como debemos utilizar exclusivamente cuatro líneas para realizar todas las parejas, podemos hacerlo de las siguientes formas:

- Usamos dos líneas para unir en 1 y las otras dos en 2, esto se puede hacer de 9 maneras diferentes.
- Usamos las cuatro líneas para unir elementos de 1 con elementos de 2, esto se puede realizar de 24 maneras diferentes.
- Usamos una línea para unir dos puntos de 1, otra línea para unir dos elementos de 2, y las otras dos restantes para unir elementos de 1 con los de 2. Esto se puede realizar de $105 - 24 - 9 = 72$ maneras diferentes.

De esta manera, la integral doble del segundo sumando de (3.11) puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle x^4(\tau_1) x^4(\tau_2) \rangle &= 9 \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \Delta^2(\tau_1, \tau_1) \Delta^2(\tau_2, \tau_2) \\ &+ 24 \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \Delta^4(\tau_1, \tau_2) + 72 \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \Delta^2(\tau_1, \tau_2) \Delta(\tau_2, \tau_2) \Delta(\tau_1, \tau_1) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Observamos así que el primer tipo de emparejamientos da lugar a contribuciones desconexas, pues son las de dos $\langle x^4 \rangle$ evaluados en tiempos diferentes, mientras que las otras dos son contribuciones conexas. Por otro lado, notemos que no hace falta volver a calcular los elementos de matriz $\Delta(\tau, \tau')$ pues deben seguir satisfaciendo (3.5). Las integrales de (3.12) no son especialmente complicadas, pero sí tediosas, resultando así que:

$$9 \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \Delta^2(\tau_1, \tau_1) \Delta^2(\tau_2, \tau_2) = \frac{9\beta^2}{16\omega^4 m^4} \coth^4 \left(\frac{\omega\beta}{2} \right) \quad (3.13)$$

³En particular, no es complicado demostrar que el número de maneras de conectar $2n$ puntos en parejas es $(2n)!/2^n n!$.

$$24 \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \Delta^4(\tau_1, \tau_2) \approx \left(\frac{1}{2m\omega} \right)^4 \frac{1 - e^{-4\beta\omega}}{4\omega} \quad (3.14)$$

$$72 \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \Delta^2(\tau_1, \tau_2) \Delta(\tau_2, \tau_2) \Delta(\tau_1, \tau_1) = \left[\frac{9}{4} \frac{\beta}{m^4 \omega^6} \frac{\cosh^2(\beta\omega/2)}{\sinh^4(\beta\omega/2)} \cdot (\beta\omega + \sinh(\beta\omega)) \right] \quad (3.15)$$

⁴A la hora de calcular la energía del estado fundamental, hemos de tener en cuenta que el primer sumando de (3.12) no va a contribuir debido a que es proporcional a β^2 , pues se cancela en el logaritmo, mientras que los otros dos términos sobreviven, por lo que actuando de manera completamente análoga al apartado anterior, el estado fundamental se ve corregido a:

$$E_0 = \frac{\omega}{2} \left(1 + \frac{\lambda}{16\omega^3 m^2} - \frac{\lambda^2}{128m^4 \omega^7} \right) + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (3.16)$$

Observamos entonces que este procedimiento dentro de la Mecánica Cuántica es muy poco práctico, pues para este tipo de potencial, el cálculo mediante teoría de perturbaciones independientes del tiempo es más inmediato, pero entendiendo la Mecánica Cuántica como un *toy model* de una QFT, el método que acabamos de exponer se extiende inmediatamente y de forma natural al estudio de los campos, mientras que la teoría de perturbaciones independientes del tiempo no.

3.2.3. Diagramas de Feynman y contribuciones conexas

En el primer capítulo vimos que a los términos de un cálculo perturbativo se les puede asociar un diagrama de Feynman, que compacta de manera gráfica el cálculo a realizar, luego nuestra tarea ahora es encontrar dichos diagramas de Feynman para nuestro *toy model* de la teoría $\lambda\phi^4$.

Por tanto, debemos especificar qué significan las líneas y qué significan los vértices. Definimos una línea que une dos puntos τ y τ' como la función de Green $\Delta(\tau, \tau')$, y definiremos un vértice situado en el punto τ como la multiplicación de un factor $\lambda/(4!)$ y la integración de la variable τ sobre el intervalo $(0, \beta)$. Una vez establecidas estas reglas, notamos la primera diferencia con respecto a los diagramas de Feynman definidos en el primer capítulo: nuestros nuevos diagramas son composiciones de lazos (ó *loops*), por otro lado, también notamos que ahora nuestros diagramas tienen multiplicidades⁵, cuya aparición se debe al teorema de Wick.

Los diagramas de Feynman a $\mathcal{O}(\lambda^3)$ se esquematizan en la Figura (3.3), donde se pone de manifiesto la conectividad de las funciones de Green. Al aumentar el orden de λ , no es complicado plantear la forma de los diagramas, pero sí contarlos, como además los elementos de matriz $\Delta(\tau, \tau')$ sólo hace falta calcularlos una vez, las contribuciones de mayor orden se suelen calcular mediante rutinas computacionales.

En el caso de $\mathcal{O}(\lambda^3)$ hemos visto que la contribución desconexa no produce ningún cambio en la energía del estado fundamental, queremos ver si esto es cierto para cualquier contribución

⁴Para la resolución de (3.14) se ha utilizado la expresión de (3.6) cuando $|\tau - \tau'| \rightarrow \infty$ [12].

⁵Es usual encontrar en la literatura las multiplicidades tanto fuera como dentro de los diagramas, para fijar ideas, en la Figura (3.3), las dejaremos fuera.

$$Z/Z_0 = 1 + 3 \text{ (diagrama)} + 9 \text{ (diagrama)} + 24 \text{ (diagrama)} + 72 \text{ (diagrama)} + \dots$$

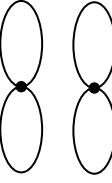
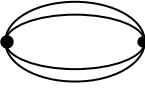




Figura 3.3: Z/Z_0 como suma de diagramas de Feynman.

disconexa. Para ello, recurrimos a la sección A.3 del Apéndice A, como hemos visto que se generalizan automáticamente al caso infinito-dimensional a través de la medida de Wiener, concluimos que:

$$F \sim \log \left(\frac{Z}{Z_0} \right) = \sum \text{contribuciones conexas} \quad (3.17)$$

por tanto, en ese sentido, los diagramas conexos se pueden entender como los momentos centrales del potencial $\lambda x^4/4!$.

3.3. Cálculos perturbativos en tiempos

Con la vista puesta en la Teoría Cuántica de Campos, vamos a introducir algunos cambios en la notación con el objetivo de que sea más sencillo establecer las analogías. A diferencia de la sección anterior, la magnitud en la que nos vamos a centrar es en la *función de correlación de n puntos*⁶:

$$G^{(n)}(x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)) \equiv \frac{1}{\int \mathcal{D}x \exp \left[i \int_{\mathbb{R}} dt L \right]} \int \mathcal{D}x \prod_{k=1}^n x(t_k) \exp \left[i \int_{\mathbb{R}} dt L \right] \quad (3.18)$$

donde se ha adoptado una notación similar a [27, 28]. También hemos permitido que la variable temporal recorra toda la recta real, pues el interés de estas magnitudes está relacionado con el *scattering* de partículas.

En el formalismo canónico, donde los campos han de ser tratados como operadores, la obtención de las funciones de Green no es tan inmediata, precisando de la introducción de conceptos como la imagen de interacción o el símbolo de ordenamiento temporal. En ese sentido, el formalismo de la integral de caminos presenta cierta ventaja, pues en este los campos se tratan como funciones.

En esta sección vamos a realizar un desarrollo perturbativo de (3.18) para nuestro *toy model* de la teoría $\lambda\phi^4$ aprovechando las técnicas expuestas en el Apéndice A, donde obtendremos de manera natural los diagramas de Feynman para nuestra teoría. Posteriormente, inspeccionaremos más detenidamente los diagramas de Feynman obtenidos, discutiendo sus simetrías y su conectividad. Finalmente, realizaremos unos someros comentarios acerca de la evaluación de las integrales surgidas.

3.3.1. Propagador de la teoría libre

Como acabamos de mencionar, buscamos realizar un cálculo perturbativo de la función de correlación (3.18). Vamos a actuar de manera análoga a la sección anterior y desarrollar

⁶También se suelen denominar, motivadas por lo que veremos en la siguiente sección, como funciones de Green.

en serie el término de interacción, por lo tanto, debido a esto y a la propia definición de la función de correlación, nos vemos obligados a calcular valores medios. Es claro entonces que lo primero que debemos calcular es la función de Green de nuestra teoría libre $\Delta(t, t')$, que en este caso la ecuación que ha de satisfacer se lee⁷:

$$m(\partial_t^2 + \omega^2)\Delta(t, t') = -i\delta(t - t') \quad (3.19)$$

y no precisa de condiciones de contorno siempre que la variable temporal recorra toda la recta real [29]. Pasando (3.19) al espacio de momentos, la ecuación diferencial se convierte en una ecuación algebraica, que da como resultado⁸:

$$\Delta(t, t') = \frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}} \frac{dE}{2\pi} \frac{ie^{-iE(t-t')}}{E^2 - \omega^2} = \frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}} \frac{dE}{2\pi} \frac{ie^{-iE(t-t')}}{(E - \omega)(E + \omega)} \quad (3.20)$$

cuyo integrando tiene dos polos que ocurren cuando la partícula está sobre la capa de masas. Para evaluar la integral, notemos que debemos distinguir los casos $t - t' > 0$ y $t - t' < 0$, así como que hemos de recurrir a técnicas de variable compleja [30, 31].

Empecemos analizando el caso $t - t' > 0$. Para ello, consideremos la siguiente figura:

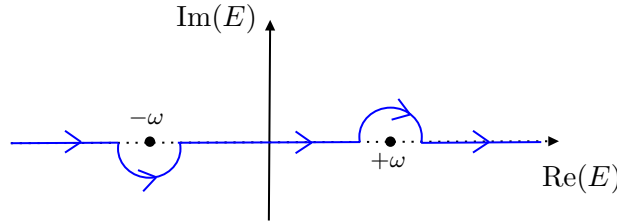


Figura 3.4: Contorno de integración para el caso $t > t'$.

cuyo contorno vamos a cerrar mediante una semicircunferencia en $\text{Im}(E) < 0$, pues así se hace tender $E \rightarrow -i\infty$ y la exponencial se anula. Como el integrando de (3.20) se puede descomponer en fracciones simples, los valores de los residuos son:

$$\text{Res}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{ie^{-iE(t-t')}}{2\pi(E + \omega)} \Big|_{E=\omega}, \quad \text{Res}(-\omega) = \frac{1}{m} \frac{ie^{-iE(t-t')}}{2\pi(E - \omega)} \Big|_{E=-\omega} \quad (3.21)$$

por tanto, el propagador toma la forma:

$$\Delta(t - t') = \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{2m\omega}, \quad \text{si } t > t' \quad (3.22)$$

donde se ha tenido en cuenta el hecho de que la semicircunferencia se recorre en sentido horario. Para el caso $t - t' < 0$, se sigue considerando el contorno de la Figura (3.4), pero ahora se cierra con una semicircunferencia en $\text{Im}(E) > 0$, para así anular la exponencial al hacer tender su radio a infinito, quedando así:

$$\Delta(t' - t) = \frac{e^{-i\omega(t'-t)}}{2m\omega}, \quad \text{si } t' > t \quad (3.23)$$

nótese que el signo global no cambia, pues el signo negativo que se obtiene del residuo (3.21), se compensa con el factor $-2\pi i$ del recorrido horario. Es más, podemos combinar ambos resultados en una única expresión utilizando la función escalón:

$$\Delta_F(t - t') \equiv \frac{1}{2m\omega} \left[e^{-i\omega(t-t')} \theta(t - t') + e^{i\omega(t-t')} \theta(t' - t) \right] \quad (3.24)$$

⁷Nótese que aparece un factor m debido a la ecuación del oscilador armónico. En 3+1 dimensiones se usaría la ecuación de Klein-Gordon, que no tiene dicho factor global.

⁸A partir de esta expresión, se puede intuir que su generalización a 3+1 dimensiones es invariante Lorentz.

Obteniendo así el propagador de la teoría libre nuestro modelo, que se suele denominar también como *propagador de Feynman* [1]. Nótese la analogía con los potenciales de Liénard-Wierchert de la Electrodinámica Clásica, donde la elección del sentido del contorno alrededor de los polos daba lugar a los potenciales retardados y avanzados [32].

3.3.2. Funciones de correlación y diagramas de Feynman

Vamos a empezar centrándonos en el numerador de (3.18), ignorando el denominador hasta la siguiente sección. Por simplicidad, comenzaremos analizando la función de correlación a dos puntos que, en virtud del desarrollo de potencias del término de interacción, podremos escribir como:

$$G^{(2)}(x(t_1), x(t_2)) = \frac{1}{D} \sum_{p=0}^{\infty} G_p^{(2)} \quad (3.25)$$

de esta manera, los subíndices coinciden con la potencia de λ . Tal como hemos visto, $G_0^{(2)}$ sólo puede ser el propagador de Feynman $\Delta_F(t_1 - t_2)$, veamos ahora el siguiente término de la serie, el cual toma la forma:

$$G_1^{(2)}(x(t_1), x(t_2)) = -\frac{i\lambda}{4!} \int_{\mathbb{R}} dt \int \mathcal{D}x \, x(t_1)x(t_2)x(t)^4 e^{iS_0} \quad (3.26)$$

que podemos simplificar con el teorema de Wick. En efecto, como hay que unir 6 puntos diferentes en parejas, existen 15 emparejamientos diferentes, pero como 4 puntos son equivalentes, sólo sobreviven dos tipos de emparejamientos:

$$G_1^{(2)}(x(t_1), x(t_2)) = -i\lambda \left[\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} dt \, \Delta_F(t_2 - t) \Delta_F(t - t) \Delta_F(t - t_1) + \frac{1}{8} \Delta_F(t_1 - t_2) \int_{\mathbb{R}} dt \, \Delta_F^2(t - t) \right] \quad (3.27)$$

se identifica entonces un lazo en el primer sumando y dos en el segundo. Siendo consistentes con el criterio de lectura que dimos acerca de los diagramas de Feynman en el primer capítulo, tenemos que esta expresión se puede representar gráficamente como⁹:

$$G_1^{(2)}(x(t_1), x(t_2)) = \text{---} \bigcirc \text{---} + \text{---} \bigcirc \bigcirc \text{---}$$

Figura 3.5: Función de correlación $G_1^{(2)}$ escrita en función de diagramas de Feynman.

donde hemos absorbido los factores numéricos dentro de los diagramas. Esto se debe a que son inherentes a los propios diagramas, pues provienen de sus simetrías, en efecto:

- Un lazo es simétrico respecto del sentido en el que se recorra, lo único que importa es que la flecha de entrada y de salida no cambie. Por tanto, posee un grupo de simetría $G \simeq \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$, que es un grupo cíclico de $|G| = 2$ ¹⁰. Nótese que esta simetría es exclusiva de los campos bosónicos, para los campos fermiónicos, cabe esperar que el lazo sea antisimétrico frente a dicha transformación.

⁹Se entiende, según se ha escrito en (3.27), que el punto de la izquierda es $x(t_1)$ y el de la derecha $x(t_2)$, no se ha escrito explícitamente en la figura para no sobrecargarla.

¹⁰Conviene no confundir la notación de un grupo finito [33], con la de las funciones de correlación.

- Dos lazos son simétricos respecto al cambio de sentido en el que se recorra cada lazo por separado, y es simétrico respecto al cambio de sentido de los dos lazos como un todo, por tanto, presenta un grupo de simetría $G \simeq \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$, que es de orden $|G| = 8$.

Por tanto, se obtienen lo que se conocen como *factores de simetría*. Uno ve entonces que de manera general, cada diagrama de Feynman lleva un factor $1/|G|$ como consecuencia del 4! en el denominador. Ahora bien, para diagramas más complicados, el grupo de simetría incluye más grupos, pues si hay k vértices equivalentes en un diagrama, entonces el grupo de simetría debe incluir el grupo de permutaciones S_k , por lo que debe aparecer un factor $|S_k| = k!$, y si el diagrama contiene p diagramas internos (i.e, que se deben integrar) idénticos que no correspondan a lazos, entonces debe incluir otro grupo de permutaciones S_p . En conclusión, el factor de simetría es de la forma [8]:

$$\frac{1}{|\mathcal{G}(k, p)|} \equiv \frac{1}{|G||S_k||S_p|} \quad (3.28)$$

Debido a esto, extraemos una importante conclusión: podemos calcular las funciones de correlación dibujando primero los diagramas usando sólo las reglas que hemos ido estableciendo a lo largo del texto, y después asignarles sus correspondientes factores de simetría. Aplicando todo esto, obtenemos la función de correlación de segundo orden:

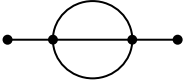
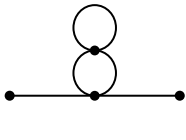
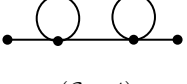
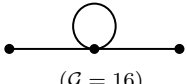
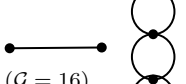
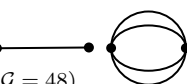
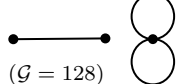
$$G_2^{(2)}(x(t_1), x(t_2)) =$$

 $(\mathcal{G} = 6)$
 $+$

 $(\mathcal{G} = 4)$
 $+$

 $(\mathcal{G} = 4)$
 $+$

 $(\mathcal{G} = 16)$
 $+$

 $(\mathcal{G} = 16)$
 $+$

 $(\mathcal{G} = 48)$
 $+$

 $(\mathcal{G} = 128)$

Figura 3.6: Diagramas de Feynman con sus correspondientes factores de simetría para la función de correlación de segundo orden.

Las funciones de correlación para órdenes superiores se calcularían de manera completamente análoga. Sin embargo, el número de diagramas a considerar, así como sus factores de simetría, van aumentando considerablemente en dificultad, por lo que es usual calcularlos, si son necesarios, con rutinas computacionales.

La siguiente función de correlación sería la de tres puntos, pero es nula, pues el teorema de Wick (A.4.1) establece que el promedio de un número impar mayor que uno debe dar cero. Por tanto, la siguiente función de correlación que deberíamos considerar es la de cuatro puntos. Lo interesante de esta función de correlación es que puede dar cuenta del *scattering* de dos partículas. Razonando de manera completamente análoga a como hemos hecho anteriormente, esperamos que la función de correlación sea de la forma representada en la Figura (3.7).

El significado del primer diagrama es claro, partimos de una situación en la que hay dos partículas en los puntos del espacio tiempo $x(t_1)$ y $x(t_2)$, que colisionan en el punto $x(t)$ conservando la energía y el momento (como vimos en el primer capítulo), con una amplitud

$$D \cdot G^{(4)}(x(t_1), x(t_2), x(t_3), x(t_4)) = \dots + \begin{array}{c} \text{diagram 1} \\ (G=1) \end{array} + \begin{array}{c} \text{diagram 2} \\ (G=2) \end{array} + \begin{array}{c} \text{diagram 3} \\ (G=2) \end{array} + \dots$$

Figura 3.7: Algunos términos de la función de correlación de cuatro puntos.

$-i\lambda$ y que después se propagan libremente hasta los puntos $x(t_3)$ y $x(t_4)$. La integración en t denota que la colisión puede suceder en cualquier instante. Cabe destacar que para los otros dos diagramas considerados, se han de sumar también las posibles permutaciones no equivalentes de los extremos.

3.3.3. Diagramas conexos y divergencias

Como hemos visto, el diagrama para $G_p^{(n)}$ consiste en todos los posibles diagramas de Feynman con n puntos externos y p vértices, conteniendo tanto diagramas conexos (es decir, que involucran los puntos iniciales y finales) y diagramas desconexos, los cuales sólo contiene diagramas de vacío. Por tanto, si denotamos a los diagramas de vacío como D_k , podemos escribir que:

$$G_p^{(n)}(x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)) = \sum_{k=0}^p G_{p-k, \text{ext}}^{(n)}(x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)) D_k \quad (3.29)$$

por lo que el numerador de (3.18) toma la forma:

$$\begin{aligned} \sum_{p=0}^{\infty} G_p^{(n)}(x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)) &= \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{k=0}^p G_{p-k, \text{ext}}^{(n)}(x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)) D_k \\ &= \sum_{p'=0}^{\infty} G_{p', \text{ext}}^{(n)}(x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)) \sum_{k=0}^{\infty} D_k \end{aligned} \quad (3.30)$$

pero identificamos, en virtud del estudio que realizamos en temperaturas, que el denominador de (3.18) es precisamente la suma sobre los D_k , concluyendo así que:

$$G^{(n)}(x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)) = \sum_{p'=0}^{\infty} G_{p', \text{ext}}^{(n)}(x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)) \quad (3.31)$$

es decir, en realidad en la Figuras (3.6) y (3.7), a la función de correlación sólo contribuyen los diagramas conexos.

Ahora bien, todavía nos faltarían evaluar dichas integrales, pues sabemos que dependen del propagador libre el cual conocemos. Centrémonos, por ejemplo, en el segundo diagrama de la Figura (3.7), en virtud de las reglas de Feynman, hemos de calcular una integral de la forma:

$$\frac{1}{2}(-i\lambda)^2 \int dE \frac{i}{E^2 - \omega^2} \frac{i}{(E_1 + E_2 - E)^2 - \omega^2} \quad (3.32)$$

que, en altas energías (ó equivalentemente, en el ultravioleta) diverge, pues el integrando va con E^{-4} . La aparición de estas divergencias fue uno de los primeros problemas históricos de la Teoría Cuántica de Campos, pues se requiere de lo que se conoce como *renormalizar* la teoría. Dichas técnicas incluyen sutilezas y aspectos técnicos que no pueden ser abordados en este texto [12, 1].

4. Ruptura espontánea de simetría

4.1. Introducción

Es bien conocido que las simetrías juegan un papel muy importante en la Física. Cuando una teoría es invariante frente a un grupo continuo de simetría, entonces aparecen cargas y corrientes conservadas en virtud del teorema de Noether [21], mientras que, por otro lado, la simetría de un sistema también puede manifestarse mediante degeneraciones en los espectros energéticos (véase el momento angular en la Mecánica Cuántica) [11, 22]. Sin embargo, las simetrías pueden afectar a la dinámica de la teoría de una tercera manera cuando la acción es invariante bajo cierta transformación de simetría, pero no así el estado fundamental, en ese caso, se dice que hay *una ruptura espontánea de simetría*. Afortunadamente, las ideas más fundamentales de dicho concepto pueden ser comprendidas a través de la Integral de Caminos [2], y permite explicar una gran cantidad de fenómenos, como pueden ser los fonones en un cristal como consecuencia de la ruptura espontánea de la simetría translacional [9], ó el mecanismo que dota a las partículas de masa en el Modelo Estándar.

Consideremos de nuevo el modelo del capítulo anterior, pero fijando de manera diferente las constantes con el objetivo de simplificar cálculos futuros:

$$S = \int dt \left(\frac{1}{2} |\dot{x}|^2 - \frac{1}{2} \omega^2 |x|^2 - \frac{\lambda}{4} |x|^4 - \frac{\omega^2}{4\lambda} \right) \quad (4.1)$$

Se observa entonces una simetría discreta $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ dada por $x \rightarrow -x$. Si además entendemos dicha acción como la de un campo complejo en $0+1$ dimensiones, entonces también presenta una simetría global $U(1)$ dada por $x \rightarrow e^{i\alpha} x$ con $\alpha \in \mathbb{R}$. En particular, nos interesa el caso en el que $\omega^2 < 0$ y $\lambda > 0$ con $-\omega^2 \gg \lambda$, pues en ese caso el potencial toma la siguiente forma:

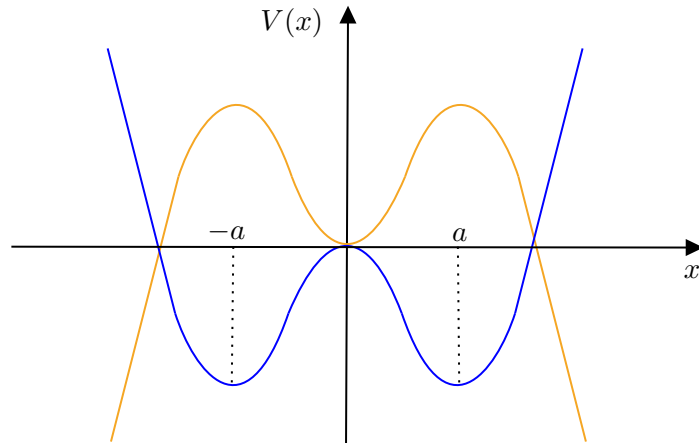


Figura 4.1: Potencial de la acción (4.1) en tiempos (azul) y en amarillo (temperaturas).

Los mínimos se encuentran en $\pm a = \pm \sqrt{-\omega^2/\lambda}$, a diferencia del caso $\omega > 0$, que daría un único mínimo en $x = 0$. Por tanto, el sistema tiene, clásicamente hablando, dos estados fundamentales doblemente degenerados. El objetivo de este capítulo es entonces analizar la ruptura de ambas simetrías, para posteriormente formalizar las ideas obtenidas de dichos estudios.

4.2. Ruptura de la simetría $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$

4.2.1. Efecto túnel

Si expandimos la acción alrededor de, por ejemplo, $-a$, obtendríamos de manera aproximada oscilaciones armónicas alrededor de dicho mínimo, rompiendo la simetría $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$. Por otro lado, podemos obtener de forma aproximada las funciones de onda alrededor de dichos mínimos, pues debe ser la función de onda del estado fundamental de un oscilador armónico:

$$\psi_{\pm}(x) = \langle x | \pm a \rangle \sim \exp[-\Omega(x \mp a)^2/2] \quad (4.2)$$

donde Ω denota la frecuencia de las pequeñas oscilaciones alrededor del mínimo. Esta función de onda no es invariante frente a $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ y ni siquiera es función propia del Hamiltoniano. En realidad, el estado fundamental debería ser una combinación lineal de ambas funciones de onda, de manera que:

$$\langle x | 0 \rangle \sim \psi_+(x) + \psi_-(x) \quad (4.3)$$

pues no presenta nodos a diferencia de $\psi_+ - \psi_-$, que presenta uno. La forma de la función de onda implica que existe una probabilidad no nula de que la partícula pueda partir de $-a$ y, atravesando la barrera de potencial, llegar a a . Como además la función de onda es par, la simetría se ve recuperada. Dicha probabilidad de transición viene dada, ya en temperaturas, según:

$$\langle \pm a | e^{-\tau \mathbf{H}} | a \rangle = \int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S_E[x(\tau)]} \quad (4.4)$$

nótese que el signo $\pm$ se incluye mediante argumentos de simetría del potencial. En temperaturas, el potencial que ve la partícula es el dibujado en amarillo en la Figura (4.1), por lo que ahora cobra más sentido (desde una perspectiva clásica) que la partícula pueda ir de un máximo a otro al otro. Conocemos también del primer capítulo que dicha amplitud de transición viene dominada por la acción evaluada en la trayectoria clásica, que en este caso toma la forma:

$$\ddot{x}(\tau) - \omega^2 x(\tau) - \lambda x^3(\tau) = 0 \quad (4.5)$$

y tiene como solución analítica, tomando τ_0 como una constante arbitraria:

$$x(\tau)_{\text{cl.}} = a \tanh \left(\sqrt{\frac{a^2 \lambda}{2}} (\tau - \tau_0) \right) \quad (4.6)$$

Este tipo de solución es bien conocida en la Física Matemática y se denomina *instantón*, pues es un solitón cuya localización se da en el tiempo. Debido a la forma de la solución, que se presenta la Figura (4.2), se dice que el instantón es una configuración que interpola el mínimo local $-a$ en $\tau = -\infty$ con el mínimo local a en $\tau = \infty$, y viene a decir que salvo en un periodo muy corto de tiempo, la partícula se encuentra en uno de los pozos. Notemos también que (4.5) también admite como solución una configuración que interpole a con $-a$, que se denomina *anti-instantón*.

Tomando (4.6), podemos calcular la acción evaluada en dicha trayectoria:

$$S_E^{\text{inst}} = \int d\tau \left(\frac{1}{2} (\dot{x}(\tau)_{\text{cl.}})^2 + \frac{\lambda}{4} (x(\tau)_{\text{cl.}}^2 - a^2)^2 \right) = \frac{1}{2} a^4 \lambda \int d\tau \text{sech}^4 \left(\frac{a^2 \lambda (\tau - \tau_0)}{\sqrt{2}} \right) \quad (4.7)$$

cuya integral se resuelve mediante el cambio de variable $u \equiv \tanh(\tau)$, resultando en:

$$S_E^{\text{inst}} = \frac{2\sqrt{2}\lambda a^3}{3} \quad (4.8)$$

Para calcular la amplitud de transición, hemos de tener en cuenta que se tiene una familia uniparamétrica de soluciones de parámetro τ_0 , de manera que cualitativamente toma la forma:

$$\langle \pm a | e^{-\tau \mathbf{H}} | a \rangle \sim \exp \left\{ -\frac{2\sqrt{2\lambda}a^3}{3} \right\} \int d\tau_0 \quad (4.9)$$

siendo entonces igual de probable que la partícula se quede en a a que viaje a $-a$. Por tanto, se elimina la degeneración del estado fundamental y se recupera la simetría $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$. Un análisis más cuantitativo de la expresión (4.9) se puede encontrar en [34], llegando a la misma conclusión.

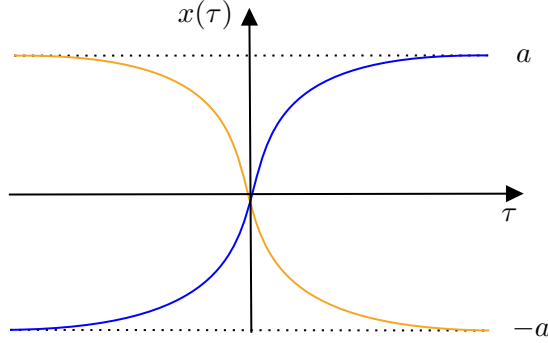


Figura 4.2: Perfil de un instantón (azul) y un anti-instantón (amarillo).

4.2.2. Ruptura de la simetría en una QFT. Paredes de dominio

Hemos visto a través de nuestro modelo que la simetría se ve restaurada debido a la presencia de los instantones y anti-instantones. Sin embargo, no queda muy claro si dicha restauración se debe exclusivamente a la simplificación de la teoría (es decir, al número de dimensiones). Para ver esto, consideremos una QFT descrita por la siguiente acción:

$$S_E[\phi] = \int d\tau d^3x \left(\partial_\mu \phi \partial^\mu \phi + \frac{1}{2} \omega^2 \phi^2 + \frac{\lambda}{4} \phi^4 + \frac{\omega^2}{4\lambda} \right) \quad (4.10)$$

si llamamos $\partial^2 \equiv \partial_\tau^2 + \nabla^2$, entonces dicha acción tiene como ecuación de campo:

$$\partial^2 \phi - \omega^2 \phi - \lambda \phi^3 = 0 \quad (4.11)$$

cuya forma funcional es exactamente la misma a (4.5), por lo que es claro que admite como solución:

$$\phi(\tau)_{\text{cl.}} = a \tanh \left(\sqrt{\frac{a^2 \lambda}{2}} (\tau - \tau_0) \right) \quad , \quad S_E^{\text{cl.}} = \mathcal{V} \frac{2\sqrt{2\lambda}a^3}{3} \quad (4.12)$$

donde $\mathcal{V}$ denota cierto volumen de $\mathbb{R}^4$. Por tanto, ahora las probabilidades dependen del factor de volumen en el que está definida nuestra teoría. Por ejemplo, si tomamos todo el espacio de Minkowski, es decir, todo $\mathbb{R}^4$, entonces (4.9) tiende a cero, luego existe una ruptura espontánea de la simetría. Por otro lado, si nuestra teoría está definida en un volumen compacto de $\mathbb{R}^4$ entonces la exponencial de (4.9) no tiende a cero, por lo que reaparece el efecto túnel y la simetría no se rompe. Notemos entonces que cuando la simetría se ve rota, el campo $\phi(x)$ nos permite diferenciar los dos vacíos, pues:

$$\langle \pm a | \phi(x) | \pm a \rangle = \pm a \quad \text{y} \quad \langle \pm a | \phi(x) | \mp a \rangle = 0 \quad (4.13)$$

Ahora bien, La acción (4.10) presenta otras tres configuraciones que interpolan ambos vacíos, pues también son soluciones de las ecuaciones de campo:

$$\phi(x_i) = a \tanh \left(\sqrt{\frac{a^2 \lambda}{2}} (x_i - x_i^0) \right) , \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.14)$$

dichas configuraciones describen una excitación localizada alrededor de $x_i = 0$, pero extendidas en las otras dos direcciones del espacio, lo que provoca una división del espacio en dos regiones, y por ese motivo recibe el nombre de *paredes de dominio*. Estas configuraciones tiene una energía dada por $S_E[\phi]$ que puede ser infinita (debido al factor $\mathcal{V}$), pero cuya densidad de energía es siempre finita.

Las paredes de dominio, así como los solitones, se encuentran dentro de lo que se denominan como *objetos extensos* [35], y son de gran importancia en la Física Matemática, pues como acabamos de ver, aparecen de forma natural como soluciones particulares de ecuaciones diferenciales. Sin embargo, merecen un estudio más detallado que no puede ser realizado en este texto.

4.3. Ruptura de la simetría $U(1)$

Como hemos comentado previamente, si consideramos la acción (4.1) como la de un campo escalar complejo, la teoría tiene una simetría continua $U(1)$. Tal y como hemos fijado las constantes, el potencial toma la forma descrita en la Figura (4.3), que se asemeja a la forma de un sombrero mexicano.

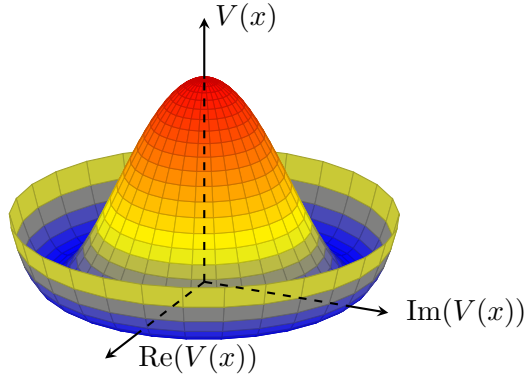


Figura 4.3: Potencial de sombrero mexicano.

A diferencia del caso anterior, ahora los mínimos del potencial definen una variedad de vacío que coincide con el círculo unidad en el plano complejo:

$$\mathcal{M}_0 = \{x_0 : V(x_0) \leq V(x) , \forall x \in I \subset \mathbb{R}\} \simeq \mathbb{S}^1 \quad (4.15)$$

sobre dichos mínimos la acción de $U(1)$ se traduce en $\theta(t) \rightarrow \theta(t) + \alpha$, por lo que la simetría se ve rota salvo en el que caso en el que el ángulo de giro sea un número entero de 2π , diciendo entonces que cada vacío tiene un estabilizador $2\pi\mathbb{Z}$. En ese sentido, se dice que la simetría $U(1)$ se ha roto espontáneamente en $2\pi\mathbb{Z}$. Nótese, por tanto, que es posible establecer una relación biunívoca como conjuntos entre $\mathcal{M}_0$ y el grupo cociente $U(1)/2\pi\mathbb{Z}$ [33].

Con estas ideas en mente, consideremos la siguiente parametrización de las trayectorias:

$$x(t) = a + r(t)e^{i\theta(t)} \quad \text{con} \quad r \in \mathbb{R}^+ , \quad \theta(t) = \theta(t) \bmod 2\pi \quad (4.16)$$

entonces es claro que la acción (4.1) toma la forma:

$$S[r(t), \theta(t)] = \int dt \left(\dot{r}^2 + (r+a)^2 \dot{\theta}^2 - \frac{\lambda}{2} r^2 (r+2a)^2 \right) \quad (4.17)$$

Para sacar conclusiones satisfactorias en el contexto de las Teorías de Campos, debemos de tener en cuenta la relación establecida en (3.1), de esta manera, vemos que aparecen dos campos escalares $\theta(x)$ y $r(x)$. El campo $\theta(x)$, pese a interactuar con el campo $r(x)$, no tiene masa, pues no tiene ningún término potencial. Por otro lado, el campo $r(x)$ sí posee un término potencial cuadrático, lo que le dota de una masa $-2\omega^2$. Por lo tanto, la aparición del campo escalar sin masa $\theta(x)$ es una consecuencia directa de la ruptura de la simetría continua $U(1)$, a diferencia de cuando la simetría es discreta, donde no sucede nada análogo. Por último, cabe destacar que estos resultados son independientes de la parametrización, como veremos a continuación.

Las ideas que acabamos de presentar constituyen el pilar fundamental de lo que se conoce como el *mecanismo de Higgs*, el cual dota a las partículas de masa en el Modelo Estándar. En realidad, quedaría pendiente matizar algunos aspectos sobre las simetrías gauge, que no podemos realizar en este texto. En cualquier caso, los aspectos restantes no distorsionan la idea fundamental de la ruptura espontánea de simetría.

4.4. Teorema de Goldstone

Sea G un grupo de Lie de parámetros $\{\alpha^a\}^1$, que actúa sobre un campo de componentes $\{\phi_i\}_{i=1}^n$ a través de una representación de dimensión n de parámetros $\{(T^a)_{ij}\}$. En virtud del truco de Weyl [36], dicha representación puede fijarse como unitaria sin ninguna pérdida de generalidad, por lo que para una transformación infinitesimal podemos escribir²:

$$\phi_i(x) \rightarrow \phi'_i(x) = (\delta_{ij} + \alpha^a (T^a)_{ij}) \phi_j(x) \equiv \phi_i(x) + \alpha^a \Lambda_i^a \quad (4.18)$$

Si G es una simetría de nuestra teoría, entonces en particular $V(\phi_i + \alpha^a \Lambda_i^a) = V(\phi_i)$, lo que implica que:

$$\frac{\partial V}{\partial \phi_j} \Lambda_j^a = 0, \quad \forall a = 1, 2, \dots, \dim(G) \quad (4.19)$$

derivando esta expresión con respecto a ϕ_i y evaluando sobre el estado fundamental $\langle \phi \rangle$, se tiene que:

$$\left. \frac{\partial V}{\partial \phi_j} \frac{\partial \Lambda_j^a}{\partial \phi_i} \right|_{\langle \phi \rangle} + \left. \frac{\partial^2 V}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \Lambda_j^a \right|_{\langle \phi \rangle} = 0 \quad (4.20)$$

donde el primer sumando es nulo ya que corresponde a un mínimo de potencial. Por otro lado, se identifica la segunda derivada con la matriz (ω_{ij}^2) de nuestra teoría, por lo que en realidad (4.20) es la siguiente ecuación de autovalores:

$$\omega_{ij}^2(\langle \phi \rangle) \Lambda_j^a(\langle \phi \rangle) = 0, \quad \forall a = 1, 2, \dots, \dim(G) \quad (4.21)$$

De esta expresión se desprenden dos posibilidades:

¹Notemos, por tanto, que $U(1)$ tiene dimensión 2, pues los $e^{i\alpha}$ son puntos de $\mathbb{S}^1$, mientras que $2\pi\mathbb{Z}$ tiene dimensión 1.

²En esta sección se va a usar el convenio de sumación de Einstein: cada vez que se vean dos índices repetidos, se debe entender una suma entre estos.

- $\Lambda^a(\langle\phi\rangle)$ es un vector nulo, luego (4.21) se cumple siempre independientemente de la forma de la matriz (ω_{ij}^2) . Por tanto, según (4.18), el a -ésimo generador de la simetría deja el vacío invariante. Dicho de otra manera, sobre el campo está actuando la representación del estabilizador de ϕ , que llamaremos H .
- $\Lambda^a(\langle\phi\rangle)$ es un vector no nulo, luego le corresponde un autovalor 0. Por tanto, según (4.18), el a -ésimo generador de la simetría modifica el vacío, apareciendo así una excitación de un campo no masivo, es decir, un *bosón de Goldstone*.

Debido a estas dos posibilidades, podemos reorganizar los generadores de la representación de G de que actúan sobre ϕ de la siguiente manera:

$$\{T^a\}_{a=1}^{\dim(G)} \equiv \{\{T_H^a\}_{a=1}^{\dim(H)}, \{T_{G/H}^a\}_{a=\dim(H)}^{\dim(G)}\} \quad (4.22)$$

Por tanto, los $\{T_H^a\}$ son aquellos generadores que dejan el vacío invariante, mientras que los $\{T_{G/H}^a\}$ son los que sí modifican el vacío. De esta manera, se observa que existe una correspondencia unívoca entre los generadores $T_{G/H}^a$ y los bosones de Goldstone, en particular, nos dice que el número de bosones de Goldstone que aparecen cuando la simetría G se ve rota en H , cumplen que:

$$n^0 \text{ bosones de Goldstone} = \dim(G/H) = \dim(G) - \dim(H) \quad (4.23)$$

Se podría esperar que en Teoría Cuántica de Campos dicho resultado no fuese cierto, pues como hemos comentado, al renormalizar la teoría, los bosones de Goldstone podrían adquirir masa. Sin embargo, tal y como se expone en [2, 37], esto sólo sucede para $d+1$ dimensiones con $d < 2$. En cierto sentido, es lo que ocurriría con la simetría discreta $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$, pues precisaba que el volumen $\mathcal{V}$ tendiese a infinito para que la simetría se rompiese.

Conclusiones

La introducción de la Integral de Caminos en el contexto de la Mecánica Cuántica no relativista pone explícitamente de manifiesto el papel que tiene la acción y el Lagrangiano en la teoría cuántica, difícilmente observable mediante las formulaciones convencionales de esta. Es más, el postulado de Feynman exhibe la posibilidad de construir una Mecánica Cuántica a partir de un único postulado, y que resulta totalmente equivalente al resto de formulaciones históricas, tal y como se ha demostrado. Dicho postulado también permite relacionar directamente el límite clásico de la Mecánica Cuántica con el Principio de Acción Estacionaria sin precisar ningún cálculo, simplemente utilizando argumentos elementales de Mecánica Clásica. Por otro lado, la inspección de lo que eran, a priori, ciertos problemas formales de la Integral de Caminos han permitido la introducción de las reglas de ordenación, que establecen una relación de simetría entre el Hamiltoniano clásico y cuántico de un sistema físico, cuyas ideas han sido formalizadas con total rigor. El tratamiento de los ejemplos iniciales ha permitido observar el enriquecimiento en la teoría que supone la introducción de la Integral de Caminos, pues se ha obtenido una teoría de perturbaciones de una manera conceptualmente muy sencilla, y que no sólo se ha conseguido relacionar con la teoría de *scattering* tratada en el grado, sino que también ha hecho aparecer de manera completamente natural las reglas y diagramas de Feynman. La aproximación WKB también se ha tratado en el contexto de la Integral de Caminos, donde se ha observado la importancia de las sucesivas variaciones de la acción. El enfoque algebraico del texto, junto con las técnicas de integración expuestas en el apéndice, han reducido el problema a la resolución de un determinante, culminándose el estudio con el ejemplo del oscilador armónico, donde se ha observado que la aproximación WKB es, en realidad, exacta y se han obtenido los bien conocidos resultados.

A través de la Rotación de Wick se ha demostrado la equivalencia entre una colectividad canónica y un sistema cuántico unidimensional no relativista a través de la continuación analítica de la Integral de Caminos, recuperándose conceptos como la matriz densidad o la función de partición mediante un único formalismo. También se han expuesto varios métodos a través de los cuales se pueden obtener los espectros energéticos, en particular, se ha demostrado la fórmula de Feynman-Kac, que permite la obtención de la energía del estado fundamental a través de una expresión formalmente muy sencilla. Este capítulo, por tanto, exhibe la gran importancia de la variable compleja en la Física Teórica.

El estudio perturbativo de una teoría $\lambda\phi^4$ ha permitido obtener los mismos resultados que la teoría de perturbaciones independientes del tiempo a través de un formalismo que admite una generalización inmediata a teorías más complicadas. Gran parte de los problemas computacionales han podido ser evitados gracias al teorema de Wick, que reduce parte del problema en uno de combinatoria, además de permitir la introducción de unos nuevos diagramas de Feynman: los diagramas de vacío. La teoría de grupos finitos también ha conseguido de manera muy satisfactoria simplificar ciertos cálculos, pues permite la obtención de los factores de simetría mediante argumentos cualitativos. Por otro lado, también se han aplicado técnicas de resolución de ecuaciones diferenciales, así como la teoría de funciones de Green y de cálculo de residuos.

El concepto de ruptura espontánea de simetría ha permitido introducir una manera alternativa en la que se manifiestan las simetrías de un sistema físico, más allá del Teorema de Noether o la degeneración de los niveles energéticos, que se han estudiado a lo largo del grado. De esta manera, se establece una estrecha relación entre el efecto túnel, el número de

dimensiones del sistema y sus simetrías. En particular, en una dimensión, se ha demostrado que el efecto túnel se produce gracias a la presencia de instantones y anti-instantones, que son configuraciones específicas del sistema. Sin embargo, al aumentar el número de dimensiones, el efecto túnel sólo aparece si la teoría está definida en un conjunto compacto del espacio, además de que el sistema admite diversas configuraciones alternativas, como son las paredes de dominio. Finalmente, se ha observado que la ruptura espontánea de simetría provoca la aparición de nuevas excitaciones de los campos, llamados bosones de Goldstone, cuyo número se puede predecir a través del Teorema de Goldstone, como se ha demostrado. En este capítulo, tanto la teoría de grupos finitos como la teoría de grupos de Lie han resultado esenciales, poniendo de manifiesto el papel fundamental que juega la teoría de grupos en la Física Teórica.

Debido a todo esto, la principal virtud de la Integral de Caminos, más allá de enriquecer la teoría cuántica, reside en la teoría de *scattering*, pues las reglas y diagramas de Feynman permiten obtener de manera casi inmediata las expresiones concretas a calcular. Sin embargo, no resulta tan útil en problemas de estados ligados, como se ha podido comprobar en la corrección de niveles energéticos del tercer capítulo. Es más, la implicación explícita de la acción hace que el estudio de la Integral de Caminos en dominios acotados se complique significativamente, pues la naturaleza de la teoría cuántica permite una gran cantidad de condiciones de contorno, la mayoría sin análogos clásicos [38].

Por último, el limitado espacio del texto ha impedido tratar diversos conceptos de especial importancia, que mencionaremos a continuación. Primero, han aparecido divergencias en las expresiones obtenidas al final del tercer capítulo, cuyo tratamiento requiere de la teoría de la renormalización [12]. Segundo, no se ha abordado el caso fermiónico, donde se precisa la introducción de las variables de Grassman [12]. Finalmente, en los cálculos realizados que involucran integrales gaussianas, se han supuesto formas bilineales no degeneradas, relajar dicha condición permite que existan órbitas críticas, apareciendo así los campos fantasmas, como los de Faddeev-Popov [34], cuyo estudio puede ser realizado con un enfoque algebraico similar al utilizado a lo largo de este texto [39]. Todos los conceptos aquí mencionados serán estudiados en un futuro.

A. Fundamentos matemáticos

A.1. Continuación analítica de funciones holomorfas

Sea U un abierto conexo de $\mathbb{C}$ y sea $f : U \rightarrow \mathbb{C}$ una función holomorfa. Nos preguntamos si es posible extender el dominio de definición de f a un abierto conexo V tal que $U \cap V \neq \emptyset$ y que dicha extensión siga siendo una función holomorfa, es decir, encontrar una función $g : V \rightarrow \mathbb{C}$ holomorfa que cumpla que $f = g$ en $U \cap V$. Si logramos dicho cometido, entonces diremos que g es la *continuación analítica* de f en V [30, 31].

Teorema A.1.1. Sea f una función holomorfa en un abierto conexo U de $\mathbb{C}$, y sea $z_0 \in U$. Entonces las siguientes afirmaciones son equivalentes:

- (a) $f^{(n)}(z_0) = 0$ para todo $n \geq 0$.
- (b) f es idénticamente nula en un entorno de z_0 .
- (c) f es idénticamente nula en U .

Demostración. Empecemos notando que (c) $\Rightarrow$ (a) es trivial. Veamos (a) $\Rightarrow$ (b), como en un entorno de z_0 se tiene que:

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(z_0) (z - z_0)^n$$

pero por (a) se tiene que $f^{(n)}(z_0) = 0$ para todo $n \geq 0$, por lo que $f(z) = 0$ alrededor de z_0 . Falta ver (b) $\Rightarrow$ (c), basta ver que el conjunto $S \equiv \{z \in U : f(z) = 0\}$ es cerrado y abierto, pues S es no vacío por hipótesis. S es abierto por construcción, para ver que es cerrado, sea $z_1 \in U$ un punto arbitrariamente cercano a S , entonces localmente $f(z_1) = 0$, luego $z_1 \in S$, por lo que S es cerrado, pues coincide con su adherencia. $\square$

De este teorema se desprenden trivialmente los siguientes corolarios:

Corolario A.1.1 (Principio de los ceros aislados). Sea U un abierto conexo de $\mathbb{C}$ y sea $f : U \rightarrow \mathbb{C}$ una función holomorfa. Si f no es idénticamente nula, entonces S es discreto.

Corolario A.1.2 (Principio de identidad). Sea U un abierto conexo de $\mathbb{C}$ y sean $f, g : U \rightarrow \mathbb{C}$ dos funciones holomorfas. Si $f = g$ en un entorno de $z_0 \in U$, entonces $f = g$ en U .

Entonces, volviendo a nuestra pregunta inicial, hemos encontrado que si g existe, entonces es la única función que satisface que $g = f$ en $U \cap V$.

Ejemplo A.1.1. Consideremos la siguiente integral en una dimensión:

$$\int_{\mathbb{R}} dx e^{-ix^2} = \sqrt{\frac{\pi}{i}}$$

si en vez de i consideramos cierto $a \in \mathbb{R}^+$, tenemos una integral gaussiana usual. Por tanto, las integrales gaussianas pueden ser extendidas analíticamente a los números imaginarios con parte imaginaria positiva.

A.2. Integrales gaussianas

A.2.1. Evaluación de integrales gaussianas

Es bien conocido el siguiente resultado para la integral gaussiana:

$$\int_{\mathbb{R}} dx e^{-\frac{1}{2}ax^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}}$$

siendo $a \in \mathbb{R}^+$. También hemos visto que es posible extender analíticamente esta integral para a imaginarios con $\text{Im}(a) > 0$. Buscamos, por tanto, generalizar la noción de integral gaussiana a $\mathbb{R}^n$ y estudiar sus propiedades.

Sea $\mathbf{S}$ una matriz $n \times n$ simétrica y definida positiva, definimos una integral gaussiana en $\mathbb{R}^n$ como:

$$\mathcal{Z}(\mathbf{S}) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n x e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, \mathbf{S} \mathbf{x} \rangle} \quad (\text{A.1})$$

donde $\langle, \rangle$ denota el producto escalar usual de $\mathbb{R}^n$. Nótese que $\langle \mathbf{x}, \mathbf{S} \mathbf{x} \rangle$ es una forma cuadrática no negativa. Como toda matriz simétrica es diagonalizable mediante una transformación ortogonal, y los autovalores $\{s_i\}_{i=1, \dots, n}$ de una matriz definida positiva son estrictamente positivos, haciendo el cambio de variables $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{O} \mathbf{x}$ se tiene que:

$$\mathcal{Z}(\mathbf{S}) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n x e^{-\frac{1}{2}\mathbf{O} \mathbf{S} \mathbf{O}^T \mathbf{x}}$$

donde ya hemos usado que $\mathbf{O}^{-1} = \mathbf{O}^T$ y que $|\det(\mathbf{O})| = 1$. Al ser $\mathbf{O} \mathbf{S} \mathbf{O}^T$ diagonal, entonces (A.1) toma la siguiente forma:

$$\mathcal{Z}(\mathbf{S}) = \prod_{i=1}^n \int_{\mathbb{R}} dx e^{\frac{1}{2}s_i x^2} = \prod_{i=1}^n \sqrt{\frac{2\pi}{s_i}} = (2\pi)^{n/2} (\det(\mathbf{S}))^{-1/2}$$

De manera completamente análoga a la gaussiana unidimensional, es posible extender analíticamente $\mathcal{Z}(\mathbf{S})$ a matrices $\mathbf{S} \equiv i\tilde{\mathbf{S}}$, siendo $\tilde{\mathbf{S}}$ una matriz simétrica y con autovalores no nulos¹, teniéndose así:

$$\mathcal{Z}(\mathbf{S}) = (2\pi i)^{n/2} (\det \tilde{\mathbf{S}})^{-1/2}$$

Generalicemos (A.1) aún más añadiendo un término lineal $\langle \mathbf{b}, \mathbf{x} \rangle$ con $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, definiendo así la siguiente integral:

$$\mathcal{Z}(\mathbf{S}, \mathbf{b}) \equiv \int_{\mathbb{R}^n} d^n x e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, \mathbf{S} \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{b}, \mathbf{x} \rangle} \quad (\text{A.2})$$

Para calcular dicha integral, empecemos buscando un extremo de $\langle \mathbf{x}, \mathbf{S} \mathbf{x} \rangle$:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\frac{1}{2} \langle \mathbf{x}, \mathbf{S} \mathbf{x} \rangle + \sum_{i=1}^n b_i x_i \right) = 0 \Rightarrow x'_j = \sum_{i=1}^n \Delta_{ij} b_i$$

siendo Δ la matriz inversa de $\mathbf{S}$ ². A continuación, definamos las variables y_i como la diferencia de x_i respecto del valor que toma en el extremo, entonces en las nuevas coordenadas se tiene:

$$-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n x_i S_{ij} x_j + \sum_{i=1}^n b_i x_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n b_i \Delta_{ij} b_j - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n y_i S_{ij} y_j = \frac{1}{2} \langle \mathbf{b}, \Delta \mathbf{b} \rangle - \frac{1}{2} \langle \mathbf{x}, \mathbf{S} \mathbf{x} \rangle$$

¹No es necesario que $\tilde{\mathbf{S}}$ sea definida positiva debido a las ramas de la raíz cuadrada.

²Nótese que el factor $1/2$ desaparece al ser S_{ij} simétrica.

de esta manera, la integral resulta en:

$$\mathcal{Z}(\mathbf{S}, \mathbf{b}) = e^{\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \mathbf{\Delta b} \rangle} \int_{\mathbb{R}^n} d^n y e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{y}, \mathbf{S y} \rangle} = e^{\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \mathbf{\Delta b} \rangle} (2\pi)^{n/2} (\det(\mathbf{S}))^{-1/2}$$

A.2.2. Valores medios y Teorema de Wick

Se define el valor medio $\langle x_{k_1} x_{k_2} \cdots x_{k_\ell} \rangle$ de la manera usual:

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} \cdots x_{k_\ell} \rangle \equiv \mathcal{Z}^{-1}(\mathbf{S}, \mathbf{0}) \int_{\mathbb{R}^n} d^n x (x_{k_1} x_{k_2} \cdots x_{k_\ell}) e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, \mathbf{S x} \rangle} \quad (\text{A.3})$$

luego la gaussiana $e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, \mathbf{S x} \rangle}$ actúa como función peso. De esta expresión, vemos que:

$$\frac{\partial}{\partial b_k} \mathcal{Z}(\mathbf{S}, \mathbf{b}) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n x x_k e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, \mathbf{S x} \rangle + \langle \mathbf{b}, \mathbf{x} \rangle}$$

por lo que el valor medio de un x_k arbitrario se puede escribir como:

$$\langle x_k \rangle = \mathcal{Z}^{-1}(\mathbf{S}, \mathbf{0}) \left[\frac{\partial}{\partial b_k} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, \mathbf{S x} \rangle + \langle \mathbf{b}, \mathbf{x} \rangle} \right]_{\mathbf{b}=\mathbf{0}} = \left(\frac{\partial}{\partial b_k} e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \mathbf{\Delta b} \rangle} \right)_{\mathbf{b}=\mathbf{0}}$$

Por tanto, repitiendo este mismo argumento para cada x_{k_j} que introduzcamos al valor medio, obtendremos que, de manera general, ocurre que:

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} \cdots x_{k_\ell} \rangle = \left[\left(\prod_{i=1}^{\ell} \frac{\partial}{\partial b_{k_i}} \right) e^{\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \mathbf{\Delta b} \rangle} \right]_{\mathbf{b}=\mathbf{0}}$$

Podemos generalizar este resultado para una serie formal $F(x_k)$. En efecto, supongamos que los coeficientes de dicha serie son $\{a_i\}_{i \in \mathbb{N}}$, entonces derivando término a término, con cada x_k se obtiene un $\partial/\partial b_k$, y como el valor esperado es, por definición lineal, acabamos teniendo:

$$\langle F(x_k) \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \left(\frac{\partial}{\partial b_k} \right)^j e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \mathbf{\Delta b} \rangle} \Big|_{\mathbf{b}=\mathbf{0}} = F \left(\frac{\partial}{\partial b_k} \right) e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \mathbf{\Delta b} \rangle} \Big|_{\mathbf{b}=\mathbf{0}} \quad (\text{A.4})$$

Ahora bien, las integrales involucradas en el cálculo de valores medios no parecen, a priori, fáciles de resolver. La dificultad de su resolución se puede reducir considerablemente transformando gran parte del problema en un problema de combinatoria a través del teorema de Wick.

Teorema A.2.1 (de Wick). Sea el valor medio $\langle x_{k_1} x_{k_2} \cdots x_{k_\ell} \rangle$. Entonces si ℓ es par, se tiene que:

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} \cdots x_{k_\ell} \rangle = \left[\left(\prod_{i=1}^{\ell} \frac{\partial}{\partial b_{k_i}} \right) e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \mathbf{\Delta b} \rangle} \right]_{\mathbf{b}=\mathbf{0}} = \sum_{\substack{\text{Emparejamientos} \\ P \text{ de } \{k_1, \dots, k_\ell\}}} \Delta_{k_{P_1} k_{P_2}} \cdots \Delta_{k_{P_{\ell-1}} k_{P_\ell}}$$

Mientras que si ℓ es impar, entonces $\langle x_{k_1} x_{k_2} \cdots x_{k_\ell} \rangle = 0$.

Demostración. Empecemos notando que antes de hacer $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, tenemos una expresión de la forma $\mathcal{P}(\mathbf{b})e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \Delta \mathbf{b} \rangle}$, siendo $\mathcal{P}(\mathbf{b})$ un polinomio, por lo que si derivamos esta expresión, se tiene que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial b_j} \mathcal{P}(\mathbf{b})e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \Delta \mathbf{b} \rangle} &= \left(\frac{\partial}{\partial b_j} \mathcal{P}(\mathbf{b}) \right) e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \Delta \mathbf{b} \rangle} + \mathcal{P}(\mathbf{b}) \left(\sum_i \Delta_{ij} b_i \right) e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \Delta \mathbf{b} \rangle} \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial b_j} + \sum_i \Delta_{ij} b_i \right) \mathcal{P}(\mathbf{b})e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \Delta \mathbf{b} \rangle} \end{aligned}$$

donde se identifica una relación de recurrencia que resulta en:

$$\mathcal{P}(\mathbf{b}) = \prod_{i=1}^{\ell} \left(\frac{\partial}{\partial b_{k_i}} + \sum_n \Delta_{k_i n} b_n \right) \cdot 1$$

por tanto, sólo sobreviven a $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ los términos:

$$\frac{\partial}{\partial b_{k_m}} \left(\sum_i \Delta_{k_n i} b_i \right), \quad m < \ell \text{ y } n > m$$

y entonces:

- Si ℓ es impar, los términos supervivientes $\Delta_{k_m k_n}$ acompañan a algo que se anula cuando $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, luego $\mathcal{P}(\mathbf{0}) = 0$ y el valor esperado se anula.
- Si ℓ es par, los términos supervivientes se multiplican entre sí, dando lugar a la suma de posibles parejas.

□

A.3. Expansión perturbativa y contribuciones conexas

A.3.1. Teoría de perturbaciones

Vamos a perturbar nuestra forma cuadrática añadiendo un término $\lambda V(\mathbf{x})$. De esta manera, definimos la siguiente integral:

$$\mathcal{Z}(\mathbf{S}, \lambda) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n x e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, \mathbf{S} \mathbf{x} \rangle + \lambda V(\mathbf{x})}$$

Nótese que, salvo en casos muy concretos, añadir el término $V(\mathbf{x})$ hace que la integral diverja, por lo que normalmente λ se tratará de un parámetro pequeño. Formalmente, si desarrollamos en serie $e^{\lambda V(\mathbf{x})}$, podemos escribir la integral como:

$$\mathcal{Z}(\mathbf{S}, \lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k}{k!} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, \mathbf{S} \mathbf{x} \rangle} V^k(\mathbf{x}) = \mathcal{Z}(\mathbf{S}, 0) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k}{k!} \langle V^k(\mathbf{x}) \rangle$$

si además $V(\mathbf{x})$ es un polinomio, podemos calcular los términos $\langle V^k(\mathbf{x}) \rangle$ usando el teorema de Wick. Otra expresión formal equivalente de la integral $\mathcal{Z}(\mathbf{S}, \lambda)$ puede obtenerse mediante (A.4). En efecto, llamando $F = e^{\lambda V}$, entonces:

$$\mathcal{Z}(\mathbf{S}, \lambda) = \mathcal{Z}(\mathbf{S}, 0) \left[\exp \left(-\lambda V \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{b}} \right) \right) e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{b}, \Delta \mathbf{b} \rangle} \right] \Big|_{\mathbf{b}=\mathbf{0}} \quad (\text{A.5})$$

A.3.2. Contribuciones conexas

Analicemos en profundidad los coeficientes $\langle V^k(\mathbf{x}) \rangle$ para el caso en el que $V(\mathbf{x})$ es un polinomio, pues en ese caso los términos pueden ser calculados con el teorema de Wick. Cuando $k = 2$, al calcular las posibles parejas, aparece un término que coincide con $\langle V(\mathbf{x}) \rangle^2$. Al sumando restante le denominaremos *contribución conexas*. De esta manera, usaremos la siguiente notación:

$$\langle V^2(\mathbf{x}) \rangle = (\langle V(\mathbf{x}) \rangle_c)^2 + \langle V^2(\mathbf{x}) \rangle_c$$

siendo $\langle V(\mathbf{x}) \rangle \equiv \langle V(\mathbf{x}) \rangle_c$. Para el caso de k arbitrario, la contribución conexas es $\langle V^k(\mathbf{x}) \rangle_c$ y aparecen contribuciones desconexas de la forma:

$$\langle V^{k_1}(\mathbf{x}) \rangle_c \langle V^{k_2}(\mathbf{x}) \rangle_c \cdots \langle V^{k_p}(\mathbf{x}) \rangle_c \quad , \quad k_1 + k_2 + \dots + k_p = k$$

Si todos los k_i son diferentes, entonces hay que multiplicar esta última expresión por un factor combinatorio que corresponde a las diferentes formas de agrupar k elementos en subconjuntos de k_i elementos, es decir:

$$\frac{k!}{k_1! k_2! \cdots k_p!} \langle V^{k_1}(\mathbf{x}) \rangle_c \langle V^{k_2}(\mathbf{x}) \rangle_c \cdots \langle V^{k_p}(\mathbf{x}) \rangle_c$$

Si se da el caso en el que m valores k_i son iguales, a la expresión anterior hay que multiplicarle un factor $1/m!$, pues si no se estaría contando la misma contribución $m!$ veces. Para fijar ideas, vemos que:

$$\begin{aligned} \langle V^3(\mathbf{x}) \rangle &= (\langle V(\mathbf{x}) \rangle_c)^3 + 3 \langle V^2(\mathbf{x}) \rangle_c \langle V(\mathbf{x}) \rangle_c + \langle V^3(\mathbf{x}) \rangle_c \\ \langle V^4(\mathbf{x}) \rangle &= (\langle V(\mathbf{x}) \rangle_c)^4 + 4 \langle V^3(\mathbf{x}) \rangle_c \langle V(\mathbf{x}) \rangle_c + 6 \langle V^2(\mathbf{x}) \rangle_c (\langle V(\mathbf{x}) \rangle_c)^2 + \\ &\quad + 3 (\langle V^2(\mathbf{x}) \rangle_c)^2 + \langle V^4(\mathbf{x}) \rangle_c \end{aligned}$$

Las contribuciones conexas están relacionadas con los momentos centrales de $V(\mathbf{x})$. Para ver esto, empecemos tomando el logaritmo de $\mathcal{Z}(\lambda)$:

$$\log(\mathcal{Z}(\lambda)) = \log(\mathcal{Z}(0)) + \log \left(1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k}{k!} \langle V^k(\mathbf{x}) \rangle \right)$$

desarrollando en serie el segundo sumando alrededor de $\langle V(\mathbf{x}) \rangle = 0$, se tiene que:

$$\log(\mathcal{Z}(\lambda)) = \log(\mathcal{Z}(0)) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k}{k!} \langle V^k(\mathbf{x}) \rangle \right)^n$$

los primeros términos de esta serie son:

$$\begin{aligned} \log(\mathcal{Z}(\lambda)) &= \log(\mathcal{Z}(0)) - \lambda \langle V(\mathbf{x}) \rangle + \frac{1}{2} \lambda^2 (\langle V^2(\mathbf{x}) \rangle - \langle V(\mathbf{x}) \rangle^2) + \\ &\quad - \frac{1}{6} \lambda^3 (\langle V^3(\mathbf{x}) \rangle - 3 \langle V(\mathbf{x}) \rangle \langle V^2(\mathbf{x}) \rangle + 2 \langle V(\mathbf{x}) \rangle^3) + \mathcal{O}(\lambda^4) \end{aligned}$$

donde ya vemos que aparecen los momentos centrales de $V(\mathbf{x})$. Denotemos al k -ésimo momento central como $\langle V^k(\mathbf{x}) \rangle_c$, entonces tenemos la siguiente serie formal:

$$\mathcal{W}(\lambda) \equiv \log \left(\frac{\mathcal{Z}(\lambda)}{\mathcal{Z}(0)} \right) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k}{k!} \langle V^k(\mathbf{x}) \rangle_c$$

si ahora invertimos la relación y damos los valores medios $\langle V^k(\mathbf{x}) \rangle$ en función de los momentos centrales, obtenemos para los cuatro primeros valores de k :

$$\begin{aligned}\langle V(\mathbf{x}) \rangle &= \langle V(\mathbf{x}) \rangle_c \\ \langle V^2(\mathbf{x}) \rangle &= (\langle V(\mathbf{x}) \rangle_c)^2 + \langle V^2(\mathbf{x}) \rangle_c \\ \langle V^3(\mathbf{x}) \rangle &= (\langle V(\mathbf{x}) \rangle_c)^3 + 3 \langle V^2(\mathbf{x}) \rangle_c \langle V(\mathbf{x}) \rangle_c + \langle V^3(\mathbf{x}) \rangle_c \\ \langle V^4(\mathbf{x}) \rangle &= (\langle V(\mathbf{x}) \rangle_c)^4 + 4 \langle V^3(\mathbf{x}) \rangle_c \langle V(\mathbf{x}) \rangle_c + 6 \langle V^2(\mathbf{x}) \rangle_c (\langle V(\mathbf{x}) \rangle_c)^2 + \\ &\quad + 3 (\langle V^2(\mathbf{x}) \rangle_c)^2 + \langle V^4(\mathbf{x}) \rangle_c\end{aligned}$$

por tanto, la contribución conexas $\langle V^k(\mathbf{x}) \rangle_c$ es el k -ésimo momento central de $V(\mathbf{x})$.

A.4. Integrales gaussianas en dimensión infinita

Buscamos ahora traducir todos los conceptos que hemos ido desarrollando al lenguaje de los espacios de dimensión infinita. Empecemos revisando el ejemplo de las ondas planas $\{e^{ikx}\}_{k \in \mathbb{R}}$ en $\mathcal{L}^2(\mathbb{C}; \mathbb{R})$, sabemos que el operador ∂_x^2 es un endomorfismo de dicho espacio y, en particular, ocurre que:

$$e^{-ikx} \partial_x^2 e^{ikx} = k^2$$

tiene la misma estructura que $\langle \mathbf{x}, \mathbf{S} \mathbf{x} \rangle$: vector traspuesto multiplicado a un endomorfismo actuando sobre un vector, salvo que ahora la matriz es infinita. Por lo tanto, el índice $i = 1, 2, \dots, n$ pasa a ser un índice continuo y los vectores $\mathbf{x}$ pasan a ser campos $\phi(x)$. La matriz simétrica $\mathbf{S}$ pasa a ser un operador autoadjunto $S(x, x')$, donde ahora se tiene que:

$$\langle \phi, S \phi \rangle = \langle S \phi, \phi \rangle = \int dx dx' \phi^*(x') S(x', x) \phi(x)$$

Respecto a Δ , ocurre que:

$$\sum_j S_{ij} \Delta_{jk} = \delta_{ik} \rightarrow \int dx'' S(x, x'') \Delta(x'', x') = \delta(x - x')$$

es decir, $\Delta(x, x')$ es la función de Green del operador $S(x, x')$. De esta manera, la gaussiana (A.2) se transforma en:

$$\mathcal{Z}_B = \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{2} \langle \phi, S \phi \rangle + \langle B, \phi \rangle} \quad (\text{A.6})$$

donde la medida $\mathcal{D}\phi$ denota que estamos integrando un funcional sobre el conjunto de funciones $\phi(x)$. A partir de aquí, la generalización es inmediata, pues podemos reescribir (A.6) como:

$$\mathcal{Z}_B = \mathcal{Z}_0 e^{\frac{1}{2} \langle B, \Delta B \rangle}$$

siendo $\mathcal{Z}_0$ la traducción de (A.1) al caso de dimensión infinita. Respecto a $\mathcal{Z}_0$ debemos notar lo siguiente. Primero, debe aparecer un factor de la forma $(2\pi)^{N/2}$ con $N \rightarrow \infty$. Por último, debe aparecer algo análogo a $\det(S)$, como ahora S es un operador autoadjunto con un conjunto infinito de autovalores, este término debe entenderse como el producto de todos sus autovalores. Ambos factores hacen que las integrales diverjan, pero aparecen incluso cuando añadimos una perturbación, por lo que juegan el papel de una constante de normalización.

La fórmula del valor medio (A.3) se convierte en:

$$\langle \phi(x_{k_1})\phi(x_{k_2}) \cdot \dots \cdot \phi(x_{k_\ell}) \rangle = \mathcal{Z}_0^{-1} \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{2}\langle \phi, S\phi \rangle} (\phi(x_{k_1})\phi(x_{k_2}) \cdot \dots \cdot \phi(x_{k_\ell}))$$

Para trasladar el teorema de Wick, debemos convertir las derivadas parciales en derivadas funcionales. Una derivada funcional $\delta/\delta B(x)$ se define haciendo cumplir a dicho operador las propiedades fundamentales de la derivada para funciones continuas, esto es:

$$\frac{\delta}{\delta B(x)} B(x') = \delta(x - x') \quad \text{ó} \quad \frac{\delta}{\delta B(x)} \int dx' B(x') \phi(x') = \phi(x)$$

nótese que esto es equivalente a:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} x_j = \delta_{ij} \quad \text{ó} \quad \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j x_j k_j = k_i$$

Por lo tanto, de manera similar al caso de dimensión finita, se tiene que:

$$\Delta(x, x') = \langle \phi(x)\phi(x') \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \frac{\delta}{\delta B(x)} \frac{\delta}{\delta B(x')} \mathcal{Z}_B \Big|_{B=0}$$

Teorema A.4.1 (de Wick, dimensión infinita). Sea el valor medio $\langle \phi(x_{k_1}) \cdot \dots \cdot \phi(x_{k_\ell}) \rangle$. Entonces, si ℓ es par, se tiene que:

$$\langle \phi(x_{k_1}) \cdot \dots \cdot \phi(x_{k_\ell}) \rangle = \sum_{\substack{\text{Emparejamientos} \\ P \text{ de } \{k_1, \dots, k_\ell\}}} \Delta(x_{k_{P_1}}, x_{k_{P_2}}) \cdot \dots \cdot \Delta(x_{k_{P_{\ell/2-1}}}, x_{k_{P_{\ell/2}}})$$

Mientras que si ℓ es impar, entonces $\langle \phi(x_{k_1}) \cdot \dots \cdot \phi(x_{k_\ell}) \rangle = 0$.

La demostración es, en esencia la misma, con la sutileza de que hay que sustituir las derivadas parciales por derivadas funcionales. Por último, si una perturbación $\lambda V(\phi)$ a $\mathcal{Z}_0$, tenemos la siguiente integral:

$$\mathcal{Z}_V = \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{2}\langle \phi, S\phi \rangle + \lambda V(\phi)}$$

así que, de manera completamente similar a (A.5), ocurre que:

$$\mathcal{Z}_V = \mathcal{Z}_0 \left[\exp \left(-\lambda V \left(\frac{\delta}{\delta B} \right) \right) e^{-\frac{1}{2}\langle B, \Delta B \rangle} \right]_{B=0}$$

Bibliografía

- [1] D. Tong. *Lectures on Quantum Field Theory*. URL: <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/qft.html>. (visitado en: 6-4-2025).
- [2] D. Tong. *Lectures on the Standard Model*. URL: <https://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/standardmodel.html>. (visitado en: 6-4-2025).
- [3] P. A. M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. 4.^a ed. Oxford University Press, 1988. ISBN: 9780198520115.
- [4] P. A. M. Dirac. *Lectures on Quantum Mechanics*. 1.^a ed. Dover Publications, 2001. ISBN: 9780486417134.
- [5] P. A. M. Dirac. «The Lagrangian in Quantum Mechanics». En: *Phys.Z.Sowjetunion* 3 (1933), págs. 64-72. DOI: [10.1142/9789812567635_0003](https://doi.org/10.1142/9789812567635_0003).
- [6] M. L. Brown. *Feynman's Thesis — A New Approach to Quantum Theory*. World Scientific, 2005.
- [7] R. P. Feynman y A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. Emended Edition. Dover Publications, 2005. ISBN: 9780486477220.
- [8] H. Kleinert y V. Schulte-Frohlinde. *Critical Properties of Φ^4 -Theories*. 1.^a ed. World Scientific, 2001. ISBN: 9789810246587.
- [9] A. J. Beekman, L. Rademaker y J. Wezel. *An introduction to Spontaneous Symmetry Breaking*. URL: <https://arxiv.org/abs/1909.01820>. (visitado en: 15-6-2025).
- [10] L. Schulman. *Techniques and Applications of Path Integration*. 1.^a ed. Dover Publications, 2005. ISBN: 9780486445283.
- [11] A. Messiah. *Quantum Mechanics, Volume II*. Revised Edition. North-Holland Publishing Company, 1981. ISBN: 9780720400458.
- [12] J. Zinn-Justin. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. 5.^a ed. Oxford Science Publications, 2021. ISBN: 9780198834625.
- [13] R. MacKenzie. *Path Integral Methods and Applications*. URL: <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0004090v1>. (visitado en: 4-2-2025).
- [14] T. D. Lee. *Particle Physics and Introduction to Field Theory*. 1.^a ed. CRS Press, 2004. ISBN: 9781482287196.
- [15] S. T. Ali y M. Engliš. *Quantization Methods: A guide for Physicists and Analysts*. URL: <https://arxiv.org/abs/math-ph/0405065>. (visitado en: 4-2-2025).
- [16] G. Esposito, G. Marmo y G. Sudarshan. *From Classical to Quantum Mechanics*. 1.^a ed. Cambridge University Press, 2004. ISBN: 9780521833240.
- [17] N. Moshayedi. *Quantum Field Theory and Functional Integrals*. URL: <https://arxiv.org/abs/1902.08652>. (visitado en: 4-2-2025).
- [18] B. C. Hall. *Quantum Theory for Mathematicians*. 1.^a ed. Springer, 2013. ISBN: 9781461471158.
- [19] I. M. Gel'fand y A. M. Yaglom. «Integration in Functional Spaces and its Applications in Quantum Physics». En: *J. Math. Phys* 1.1 (1960), págs. 48-69. DOI: [10.1063/1.1703636](https://doi.org/10.1063/1.1703636).
- [20] L. W. Ryder. *Quantum Field Theory*. 2.^a ed. Cambridge University Press, 1996. ISBN: 9780521478144.

- [21] H. Goldstein. *Mecánica Clásica*. 1.^a ed. Reverté, 1987. ISBN: 9788429143065.
- [22] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. 3.^a ed. Cambridge University Press, 2021. ISBN: 9781108473224.
- [23] A. Erdélyi et al. *Higher Transcendental Functions, Vol. I-III*. 1.^a ed. McGraw Hill, 1955.
- [24] H. B. Callen. *Termodinámica*. 1.^a ed. Alfa Centauro, 1985. ISBN: 9788472880429.
- [25] C. Shannon. «A Mathematical Theory of Communication». En: *The Bell System Technical Journal* 27 (1948), págs. 379-423.
- [26] V. Linetsky. «The Path Integral Approach to Financial Modeling and Options Pricing». En: *Computational Economics* 11 (1998), págs. 129-163.
- [27] R. E. Borcherds y A. Barnard. *Lectures on Quantum Field Theory*. 2002. URL: <https://arxiv.org/abs/math-ph/0204014>. (visitado en: 29-3-2025).
- [28] A. Zee. *Quantum field theory in a nutshell*. 2.^a ed. Princeton University Press, 2010. ISBN: 9780691140346.
- [29] H. Kleinert. *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, and Polymer Physics*. 5.^a ed. World Scientific, 2009. ISBN: 9789814273558.
- [30] S. Lang. *Complex Analysis*. 4.^a ed. Springer, 1999. ISBN: 9781475730838.
- [31] H. Cartan. *Elementary Theory of Analytic Functions of One or Several Complex Variables*. 1.^a ed. Dover Books on Mathematics, 1995. ISBN: 9780486685434.
- [32] J. Jackson. *Classical Electrodynamics*. 3.^a ed. Wiley, 1999. ISBN: 9780471309321.
- [33] R. G. Kempf. *Algebraic structures*. 2.^a ed. Vieweg, 1995. ISBN: 9783528065836.
- [34] A. M. Polyakov. *Gauge Fields and Strings*. 1.^a ed. Routledge, 1987. ISBN: 9780203755082.
- [35] E. J. Weinberg. *Classical Solutions in Quantum Field Theory*. 1.^a ed. Cambridge University Press, 2012. ISBN: 9781139017787.
- [36] B. C. . Hall. *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations*. 2.^a ed. Graduate Texts in Mathematics. Springer, 2015. ISBN: 9783319134666.
- [37] S. Coleman. «There are no Goldstone bosons in two dimensions». En: *Commun.Math. Phys.* (1973). DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01646487>.
- [38] M. Asorey, J. Clemente-Gallardo y J. Muñoz-Castañeda. «Boundary conditions: The path integral approach». En: *Journal of Physics: Conference Series* 87.1 (2007). DOI: [10.1088/1742-6596/87/1/012004](https://doi.org/10.1088/1742-6596/87/1/012004).
- [39] M. Polyak. *Feynman diagrams for pedestrians and mathematicians*. URL: <https://arxiv.org/abs/math/0406251>. (visitado en: 15-6-2025).