

MECÁNICA CUÁNTICA II

L. L. Salcedo
Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear,
Universidad de Granada, E-18071 Granada, Spain
E-mail: salcedo@ugr.es

8 de mayo de 2020

Resumen

Apuntes incompletos de la asignatura. Versión v1.7, 2010-2016.
Se ruega comunicar los errores o imprecisiones que puedan encontrarse a salcedo@ugr.es
<http://www.ugr.es/local/salcedo/public/mc2/curso.pdf>

Índice

1. Simetrías	5
1.1. Simetrías en mecánica cuántica. Grupos de Lie y representaciones.	5
2. Integral de caminos de Feynman	7
2.1. Ecuación de Hamilton-Jacobi	7
2.2. Operador de evolución	10
2.2.1. Operador cronológico y expresión explícita del operador de evolución	10

2.2.2.	Propagador de la partícula libre	12
2.2.3.	Relación con el propagador y la integral de caminos	14
2.3.	Integral de caminos	15
2.3.1.	Integral de caminos en el espacio de las fases	16
2.3.2.	Integral de caminos en el espacio de configuración	17
2.3.3.	Integral de caminos para A partículas	18
2.3.4.	Integral de caminos en teorías de campos cuánticos	18
2.3.5.	Integral de caminos en tiempo imaginario	20
2.4.	Desarrollo semiclásico	23
2.4.1.	Principio de Hamilton	23
2.5.	La ecuación de Schrödinger	26
2.6.	Partícula en un campo electromagnético	28
2.6.1.	Invariancia gauge	29
2.6.2.	Partícula cargada cuántica	29
2.6.3.	Ordenación de operadores	31
2.7.	Efecto Aharonov-Bohm	33
2.8.	Acciones cuadráticas	34
2.8.1.	Propagador de acciones cuadráticas	34
2.8.2.	Lagrangianos cuadráticos	36
2.8.3.	Oscilador armónico	38
2.8.4.	Determinante de operadores diferenciales	39

2.9.	Propiedades espectrales del propagador	40
2.9.1.	Propagador retardado	40
2.9.2.	Oscilador armónico	41
2.9.3.	Partícula en una semirrecta	42
2.9.4.	Propagador euclídeo	43
2.9.5.	Dominancia del estado fundamental	43
2.10.	Caminos brownianos	45
2.10.1.	Movimiento browniano y ecuación de difusión	45
2.10.2.	Relación con la integral de caminos de una partícula libre	49
2.10.3.	Fórmula de Feynman-Kac	52
2.10.4.	Cálculo de $It\bar{o}$	56
2.10.5.	Principio de incertidumbre	58
2.11.	Inserción de operadores y valores esperados	58
2.11.1.	Inserción de operadores	58
2.11.2.	Cálculo con integral de caminos	59
2.11.3.	Valores esperados en el estado fundamental	61
2.12.	Método Monte Carlo	65
2.12.1.	Método Monte Carlo	65
2.12.2.	Muestreo de distribuciones	66
2.12.3.	Métodos markovianos	68
2.12.4.	Algoritmo de Metropolis	71

2.12.5. Aplicación a la integral de caminos	73
2.13. Cuantización estocástica	74
2.13.1. Ecuación de Langevin	75
2.13.2. Ecuación de Fokker-Planck	76
2.13.3. Diagramas estocásticos	79

1. Simetrías

1.1. Simetrías en mecánica cuántica. Grupos de Lie y representaciones.

En mecánica cuántica un sistema físico tiene asociado un espacio de Hilbert complejo separable \mathcal{H} con vectores $|\psi\rangle$. Cada estado viene representado por un rayo $\hat{\psi}$ (subespacio de dimensión 1 de \mathcal{H})

$$\hat{\psi} = \{\lambda|\psi\rangle, \lambda \in \mathbb{C}\}. \quad (1.1)$$

El conjunto de rayos forma el espacio proyectivo $\hat{\mathcal{H}}$. El vector $|\psi\rangle$ es un representante de $\hat{\psi}$ (es decir $|\psi\rangle \in \hat{\psi}$) que a menudo se elige normalizado, quedando entonces la ambigüedad de una fase (número complejo de módulo 1).

Se denomina *transformación* del sistema a toda biyección g de $\hat{\mathcal{H}}$ en $\hat{\mathcal{H}}$

$$\begin{aligned} g : \hat{\mathcal{H}} &\rightarrow \hat{\mathcal{H}} \\ \hat{\psi} &\mapsto \hat{\psi}^g \end{aligned} \quad (1.2)$$

El conjunto de transformaciones forma un grupo.

La *probabilidad de transición* entre los estados $\hat{\psi}$ y $\hat{\phi}$, es decir, la probabilidad de encontrar el estado $\hat{\phi}$ cuando se mide el sistema en estado $\hat{\psi}$, es

$$T_{\hat{\phi}, \hat{\psi}} = \frac{|\langle \phi | \psi \rangle|^2}{\|\phi\|^2 \|\psi\|^2}. \quad (1.3)$$

Por ejemplo, $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar}$ proporciona la *amplitud de probabilidad* de encontrar una partícula con momento \mathbf{p} en el punto \mathbf{x} .

Una transformación g es de *simetría* cuando deja invariante las probabilidades de transición, es decir,

$$\forall \hat{\psi}, \hat{\phi} \quad T_{\hat{\phi}, \hat{\psi}} = T_{\hat{\phi}^g, \hat{\psi}^g} \quad (\text{simetría}). \quad (1.4)$$

Las transformaciones de simetría forman el *grupo de simetría* del sistema.¹

Si la transformación g se realiza en \mathcal{H} mediante un *operador unitario* U , se deduce automáticamente que g define una simetría. Esto es así tanto si U es lineal como si es antilineal. Recordemos

¹Dado un conjunto cualquiera A , el conjunto de biyecciones de A en A que deja invariante una propiedad obviamente siempre forma un subgrupo del grupo de todas las biyecciones.

que, para un operador A

$$A(\lambda|\psi\rangle + \mu|\phi\rangle) = \begin{cases} \lambda A|\psi\rangle + \mu A|\phi\rangle, & \text{(lineal)} \\ \lambda^* A|\psi\rangle + \mu^* A|\phi\rangle, & \text{(antilineal)} \end{cases} \quad (1.5)$$

y también

$$\langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle = \begin{cases} \langle A\psi|\phi\rangle = \langle\phi|A|\psi\rangle^*, & \text{(lineal)} \\ \langle A\psi|\phi\rangle^* = \langle\phi|A|\psi\rangle, & \text{(antilineal)} \end{cases} \quad (1.6)$$

Por otro lado U unitario significa

$$U^{-1} = U^\dagger \quad \text{(unitario)}. \quad (1.7)$$

Lo cual implica

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1, \quad (1.8)$$

donde 1 denota el operador identidad en \mathcal{H} .

Si g se representa por un operador unitario U ,

$$|\psi\rangle \mapsto U|\psi\rangle = |\psi^g\rangle, \quad |\psi\rangle \in \hat{\psi}, \quad |\psi^g\rangle \in \hat{\psi}^g, \quad (1.9)$$

e induce una transformación bien definida a nivel de rayos. Además es inmediato que

$$\langle\phi^g|\psi^g\rangle = \langle U\phi|U\psi\rangle = \begin{cases} \langle\phi|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle, & \text{(lineal)} \\ \langle\phi|U^\dagger U|\psi\rangle^* = \langle\phi|\psi\rangle^*, & \text{(antilineal)} \end{cases} \quad (1.10)$$

y en ambos casos la relación (1.4) se satisface.

Por tanto, los operadores unitarios en \mathcal{H} inducen transformaciones de simetría en $\hat{\mathcal{H}}$. De acuerdo con el *teorema de Wigner* también se cumple el recíproco: todas las transformaciones de simetría se realizan mediante operadores unitarios en \mathcal{H} [1].² Además, el teorema establece que dada una simetría g el operador unitario U asociado es *único salvo a lo sumo una fase*.³ En efecto, los operadores U y $U' = wU$ producen vectores estado transformados que difieren en una fase y son por tanto equivalentes.

En la práctica lo más usual es que la simetría se realice mediante un operador lineal. Sólo se requieren operadores unitarios antilineales (o también, antiunitarios) cuando la transformación involucra inversión temporal. De modo que mientras no se diga lo contrario supondremos que los operadores requeridos son lineales.

²Es notable que la noción de linealidad o antilinealidad no aparece en la definición de transformación de simetría. Sin embargo, de acuerdo con el teorema, el requerimiento de simetría resulta ser extraordinariamente restrictivo.

³Una fase se refiere a un número $w \in \mathbb{C}$, $|w| = 1$.

2. Integral de caminos de Feynman

2.1. Ecuación de Hamilton-Jacobi

Veamos un argumento semiclásico. Partimos de la ecuación de Schrödinger de una partícula en un potencial

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(\mathbf{x}, t)\right)\psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.1)$$

Nos interesa el límite $\hbar \rightarrow 0$ pero ψ no se comporta bien en ese límite (no tiene un comportamiento analítico en \hbar). Definimos la nueva variable ϕ mediante la relación

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{i\phi(\mathbf{x}, t)/\hbar}. \quad (2.2)$$

La ec. de Schrödinger toma la siguiente forma

$$0 = \partial_t\phi + \frac{1}{2M}(\nabla\phi)^2 - \frac{i\hbar}{2M}(\nabla^2\phi) + V(\mathbf{x}, t). \quad (2.3)$$

Esta ecuación es no lineal, pero es mejor comportada con \hbar . En el límite clásico $\hbar \rightarrow 0$

$$0 = \partial_t\phi + \frac{1}{2M}(\nabla\phi)^2 + V(\mathbf{x}, t), \quad (2.4)$$

que es la ec. de Hamilton-Jacobi de la mecánica clásica. Para un hamiltoniano clásico más general, $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$, la ecuación es

$$0 = \partial_t\phi + H(\mathbf{x}, \nabla\phi, t). \quad (2.5)$$

Obsérvese que aquí $\mathbf{p} = \nabla\phi = \nabla(-i\hbar \log \psi) = -i\hbar \frac{\nabla\psi}{\psi}$ ó $\mathbf{p}\psi = -i\hbar\nabla\psi$.

Una solución de la ecuación es la llamada *función principal de Hamilton*, que es la *acción* evaluada sobre el *camino clásico*. Más concretamente, sea $L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t)$ el lagrangiano asociado a $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{p} - L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t), \quad \mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}}. \quad (2.6)$$

Sea $W[\mathbf{x}(t)]$ la acción asociada a un camino $\mathbf{x}(t)$ que empieza en (\mathbf{x}_i, t_i) y acaba en (\mathbf{x}_f, t_f) ⁴

$$W[\mathbf{x}(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt L(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), t). \quad (2.7)$$

⁴Estrictamente hablando, se denomina *camino* a la aplicación $t \in [t_i, t_f] \mapsto \mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^3$. La *trayectoria* de ese camino es la imagen de la aplicación, es decir el conjunto de los puntos por donde pasa la partícula. El camino depende además de a qué velocidad se recorre la trayectoria en cada instante. Sin embargo, también es frecuente usar “trayectoria” para referirse a un camino.

(Nótese que $W[\mathbf{x}(t)]$ en realidad no depende de “ t ” sino que es un funcional del camino completo.) Y sea $\mathbf{x}_{cl}(t)$ el *camino clásico* que une (\mathbf{x}_i, t_i) con (\mathbf{x}_f, t_f) , es decir, el que satisface las ecuaciones de movimiento (Euler-Lagrange)

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}}, \quad (2.8)$$

o equivalentemente, satisface el principio de Hamilton

$$\delta W[\mathbf{x}(t)] = 0, \quad \text{con} \quad \delta \mathbf{x}(t_i) = \delta \mathbf{x}(t_f) = 0. \quad (2.9)$$

Si denominamos a

$$W_{cl}(\mathbf{x}_f, t_f; \mathbf{x}_i, t_i) = W[\mathbf{x}_{cl}(t)], \quad (2.10)$$

la *acción clásica* entre (\mathbf{x}_i, t_i) y (\mathbf{x}_f, t_f) , la función principal de Hamilton es

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}_0, t_0) + W_{cl}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0). \quad (2.11)$$

Es inmediato que ésta es una solución de la ec. de Hamilton-Jacobi debido a las relaciones

$$\nabla_{\mathbf{x}} W_{cl}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \mathbf{p}_{cl}(\mathbf{x}, t), \quad \partial_t W_{cl}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = -H(\mathbf{x}, \mathbf{p}_{cl}(\mathbf{x}, t), t). \quad (2.12)$$

Demostración:

En efecto, si en $W_{cl}(\mathbf{x}_f, t_f; \mathbf{x}_i, t_i)$ movemos (\mathbf{x}_f, t_f) a $(\mathbf{x}_f + \delta \mathbf{x}_f, t_f)$ (sin cambiar \mathbf{x}_i, t_i, t_f) el camino clásico se modifica

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{x}_f} W_{cl}(\mathbf{x}_f, t_f; \mathbf{x}_i, t_i) &= \int_{t_i}^{t_f} dt \delta L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} \delta \mathbf{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \delta \dot{\mathbf{x}} \right) \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right) \delta \mathbf{x} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \delta \mathbf{x} \right) \right] = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \delta \mathbf{x} \Big|_{t_f} = \mathbf{p}_{cl} \cdot \delta \mathbf{x}_f. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Esto demuestra la primera relación. Igualmente para la segunda relación, cambiamos (\mathbf{x}_f, t_f) a $(\mathbf{x}_f, t_f + \delta t_f)$

$$\delta_{t_f} W_{cl}(\mathbf{x}_f, t_f) = (W_{cl}(\mathbf{x}_f + \delta \mathbf{x}_f, t_f + \delta t_f) - W_{cl}(\mathbf{x}_f, t_f)) - (W_{cl}(\mathbf{x}_f + \delta \mathbf{x}_f, t_f + \delta t_f) - W_{cl}(\mathbf{x}_f, t_f + \delta t_f)) \quad (2.14)$$

y tomamos $\delta \mathbf{x}_f$ sobre \mathbf{x}_{cl} , es decir, $\delta \mathbf{x}_f = \dot{\mathbf{x}}_{cl} \delta t_f$. Por tanto la primera variación es la derivada *total* de la acción respecto de t_f y la segunda la hemos calculado ya antes:

$$\delta_{t_f} W_{cl}(\mathbf{x}_f, t_f) = L \delta t_f - \mathbf{p}_{cl} \cdot \dot{\mathbf{x}}_{cl} \delta t_f = -H \delta t_f. \quad (2.15)$$

Esto demuestra la segunda relación.

Lo que se deduce es que, en la *aproximación clásica*,

$$\psi(\mathbf{x}, t) \underset{\hbar \rightarrow 0}{\sim} e^{iW_{\text{cl}}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_0, t_0)/\hbar} \psi(\mathbf{x}_0, t_0) \quad (2.16)$$

Es decir, cuando una partícula en el límite clásico se mueve sobre la trayectoria clásica de (\mathbf{x}_0, t_0) a (\mathbf{x}, t) , la *fase* de su función de onda cambia de acuerdo con $\exp(\frac{i}{\hbar} W_{\text{cl}})$.

Lo que encuentra Feynman [10] es que la función de onda $\psi(\mathbf{x}_f, t_f)$ de una partícula que estaba en \mathbf{x}_i en t_i puede expresarse como

$$\psi(\mathbf{x}_f, t_f) = \sum_{\mathbf{x}(t), i \rightarrow f} e^{iW[\mathbf{x}(t)]/\hbar}, \quad (2.17)$$

donde la suma es sobre *todos* los caminos $\mathbf{x}(t)$ (clásicos o no) tales que $\mathbf{x}(t_i) = \mathbf{x}_i$ y $\mathbf{x}(t_f) = \mathbf{x}_f$. Nótese que $W[\mathbf{x}(t)]$ es la acción y es exactamente el mismo funcional que aparece en mecánica clásica. A pesar de esto, este resultado es *exacto* (no semiclásico).⁵ Cada camino produce una fase y su suma coherente es la que produce una mayor o menor amplitud de probabilidad de hallar la partícula en un punto \mathbf{x}_f en t_f . Sin embargo, comparado con una integral ordinaria sobre \mathbb{R}^n , la suma sobre caminos equivale a una integral en un espacio de dimensión infinita, una *integral funcional* y requiere una definición precisa.

La relación (2.17) describe la amplitud de probabilidad (o función de onda) de que la partícula se propague hasta \mathbf{x}_f en t_f sabiendo que está con seguridad en \mathbf{x}_i en t_i . Denotaremos $\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle$ a la *amplitud de probabilidad de propagación* o *propagador* desde (\mathbf{x}_i, t_i) hasta (\mathbf{x}_f, t_f) . Es decir, la fórmula de Feynman expresa la relación

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \sum_{\mathbf{x}(t), i \rightarrow f} e^{iW[\mathbf{x}(t)]/\hbar}. \quad (2.18)$$

Más generalmente, para un t_i dado la partícula tendrá una cierta amplitud de probabilidad $\psi(\mathbf{x}_i, t_i)$ de hallarse en \mathbf{x}_i . Entonces la amplitud de probabilidad de hallarla en \mathbf{x}_f en t_f sigue las mismas reglas que la probabilidad condicionada

$$P(A) = \sum_i P(A|B_i)P(B_i), \quad \cup_i B_i = \Omega, \quad B_i \cap B_j = \emptyset \quad (i \neq j), \quad (2.19)$$

⁵La demostración de la fórmula a partir del formalismo canónico usual requiere que el hamiltoniano sea cuadrático en \mathbf{p} .

y para la amplitud

$$\psi(\mathbf{x}_f, t_f) = \int d^3x_i \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle \psi(\mathbf{x}_i, t_i). \quad (2.20)$$

Nótese, sin embargo que hay importantes diferencias entre probabilidad y amplitud de probabilidad, aparte de que la primera es real y no negativa y la segunda es compleja en general. La probabilidad está definida para cualquier proposición del álgebra de Boole de proposiciones, mientras que la amplitud de probabilidad sólo está definida para estados completamente bien definidos. Así, por ejemplo, para un t dado existe $P(\|\mathbf{x}\| < R)$ pero no $\psi(\|\mathbf{x}\| < R)$. Si la partícula tiene espín $1/2$ existe la amplitud de probabilidad de estar en \mathbf{x} con espín $+1/2$ según el eje z , pero no la de estar en \mathbf{x} con espín arbitrario.

2.2. Operador de evolución

La suma sobre caminos es en realidad muy natural en mecánica cuántica. Sea $|\psi(t)\rangle$ el estado evolucionando en el tiempo en la representación de Schrödinger, de acuerdo con la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle. \quad (2.21)$$

Por ser esta ecuación lineal y de primer orden en t (el estado en un tiempo t_i determina completamente el estado en cualquier otro tiempo) define un *operador de evolución* $U(t_f, t_i)$ que es lineal e invertible y tal que

$$|\psi(t_f)\rangle = U(t_f, t_i)|\psi(t_i)\rangle. \quad (2.22)$$

Por ser $H(t)$ hermítico, la norma del estado se conserva, de modo que el operador de evolución es unitario

$$U(t_f, t_i)^{-1} = U(t_f, t_i)^\dagger. \quad (2.23)$$

Además, por su definición cumple

$$U(t_c, t_b)U(t_b, t_a) = U(t_c, t_a), \quad U(t, t) = 1, \quad U(t_f, t_i) = U(t_i, t_f)^{-1}, \quad (2.24)$$

así como la ecuación de Schrödinger por ambos lados

$$i\hbar\partial_t U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0), \quad i\hbar\partial_t U(t_0, t) = -U(t_0, t)H(t). \quad (2.25)$$

2.2.1. Operador cronológico y expresión explícita del operador de evolución

Cuando H no depende del tiempo (hamiltoniano conservativo) la ecuación se puede integrar trivialmente:

$$U(t_f, t_i) = e^{-i(t_f-t_i)H/\hbar}. \quad (2.26)$$

Para estudiar el caso más general de $H(t)$ no conservativo, consideremos primero el caso infinitesimal. Para $\Delta t = \epsilon$ pequeño,

$$|\psi(t + \epsilon)\rangle = |\psi(t)\rangle + \epsilon \partial_t |\psi(t)\rangle + O(\epsilon^2). \quad (2.27)$$

Usando la ecuación de Schrödinger

$$|\psi(t + \epsilon)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} H(t) dt\right) |\psi(t)\rangle + O(\epsilon^2) = e^{-i\epsilon H(t)/\hbar} |\psi(t)\rangle + O(\epsilon^2), \quad (2.28)$$

que implica

$$U(t + \epsilon, t) = e^{-i\epsilon H(t)/\hbar} + O(\epsilon^2). \quad (2.29)$$

Para el caso finito, supondremos $t_f \geq t_i$ (el caso $t_f < t_i$ se sigue de éste por $U(t_f, t_i) = U(t_i, t_f)^{-1}$) y dividimos el intervalo $[t_i, t_f]$ en N subintervalos

$$t_j = t_i + \epsilon j, \quad j = 0, 1, 2, \dots, N, \quad t_0 = t_i, \quad t_N = t_f, \quad \epsilon = \frac{t_f - t_i}{N}. \quad (2.30)$$

Por tanto,

$$U(t_f, t_i) = U(t_N, t_{N-1}) U(t_{N-1}, t_{N-2}) \cdots U(t_2, t_1) U(t_1, t_0), \quad (2.31)$$

y vamos a considerar el límite $N \rightarrow \infty$ ($\epsilon \rightarrow 0$)

$$U(t_f, t_i) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} e^{-i\epsilon H(t_{N-1})/\hbar} e^{-i\epsilon H(t_{N-2})/\hbar} \cdots e^{-i\epsilon H(t_1)/\hbar} e^{-i\epsilon H(t_0)/\hbar} \quad (N \text{ factores}). \quad (2.32)$$

Los N factores introducen un factor corrector $(1 + O(\epsilon^2))^N = 1 + O(N\epsilon^2) = 1 + O(\epsilon)$ que desaparece en el límite $N \rightarrow \infty$.

En este punto es conveniente introducir el *operador de ordenación temporal* u *operador cronológico*, T . En realidad se trata no de un operador sino de una notación, tal que, independientemente del orden en que es escrito un producto de operadores con etiquetas temporales, se entienden ordenados de modo que actúan antes como operadores (están más a la derecha) los que están antes en el tiempo (de acuerdo con su etiqueta temporal). Así por ejemplo

$$T[A(t_1)B(t_2)] = \begin{cases} AB & \text{si } t_1 > t_2 \\ BA & \text{si } t_2 > t_1 \end{cases} = \Theta(t_1 - t_2)AB + \Theta(t_2 - t_1)BA. \quad (2.33)$$

(Aquí $\Theta(x)$ es la función escalón o de Heaviside, 1 para $x > 0$ y 0 si $x < 0$.) Más generalmente⁶

$$T[A_1(t_1) \cdots A_n(t_n)] = A_{p1} A_{p2} \cdots A_{pn} \quad (2.34)$$

siendo $p \in S_n$ la permutación tal que $t_{p1} > t_{p2} > \cdots > t_{pn}$.

⁶La definición debe completarse adecuadamente cuando hay tiempos iguales. A menudo los operadores conmutan en ese caso y no hay ambigüedad. También hay que tener introducidos signos menos cuando hay operadores fermiónicos. Ninguno de estos problemas aparece en nuestro caso.

El operador cronológico aparece de forma natural en aplicaciones (operadores actuando sucesivamente como operadores representan acciones actuando sucesivamente en el tiempo). Una importante propiedad práctica del operador cronológico es que *dentro de T los operadores conmutan*.⁷ Por ejemplo, es evidente que

$$T[A(t_1)B(t_2)] = T[B(t_2)A(t_1)]. \quad (2.35)$$

El orden lo dicta la etiqueta temporal y no el orden en que están escritos. Como consecuencia directa se tiene también $T[e^A e^B] = T[e^{A+B}]$. Esta propiedad permite reescribir el operador de evolución como⁸

$$U(t_f, t_i) = T \left[\exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt H(t) \right) \right] \quad (t_f \geq t_i). \quad (2.36)$$

Evidentemente, cuando H es conservativo, esta expresión se reduce a la usual. El significado de la ec. (2.36) es multiplicar ordenadamente cada exponencial infinitesimal. Pero dado que los operadores conmutan también se puede proceder a desarrollar en serie la exponencial

$$U(t_f, t_i) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_i}^{t_f} dt_1 \cdots \int_{t_i}^{t_f} dt_n T[H(t_1) \cdots H(t_n)] \quad (t_f \geq t_i). \quad (2.37)$$

El concepto de producto ordenado de operadores se puede extender a operadores $A(s)$ que dependen de un parámetro s cualquiera, no necesariamente el tiempo.

2.2.2. Propagador de la partícula libre

Usando el operador de evolución podemos expresar el propagador como

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \langle \mathbf{x}_f | U(t_f, t_i) | \mathbf{x}_i \rangle. \quad (2.38)$$

Calculemos el propagador para una partícula libre con hamiltoniano $H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2M}$

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle_0 = \langle \mathbf{x}_f | e^{-i(t_f-t_i)H_0/\hbar} | \mathbf{x}_i \rangle. \quad (2.39)$$

Nótese que aquí no suponemos $t_f \geq t_i$ (supondremos $t_f \neq t_i$).

⁷Que los operadores conmuten dentro de T no es exactamente equivalente a que “todo” conmuta. Así si por ejemplo tenemos matrices cuyos elementos de matriz son operadores, estos conmutan, como lo hacen los c -números, pero el producto de matrices sigue siendo no conmutativo como siempre.

⁸Para el caso $t_f < t_i$ se puede usar $U(t_i, t_f)$, o bien introducir un operador *anticronológico* T' .

En lo que sigue vamos a trabajar en $L^2(\mathbb{R}^n)$ ya que cuesta lo mismo. Y vamos a utilizar las siguientes normalizaciones

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2 \rangle &= \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2), & \langle \mathbf{p}_1 | \mathbf{p}_2 \rangle &= (2\pi\hbar)^n \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2), \\ 1 &= \int d^n x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = \int \frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|, & \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle &= e^{i\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Como el propagador libre sólo depende de $t_f - t_i$, y $\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_i$, tomamos

$$\langle \mathbf{x}, t | \mathbf{0}, 0 \rangle_0 = \langle \mathbf{x} | e^{-itH_0/\hbar} | \mathbf{0} \rangle. \quad (2.41)$$

Insertamos la identidad en espacio de momentos

$$\langle \mathbf{x}, t | \mathbf{0}, 0 \rangle_0 = \int \frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle e^{-it\mathbf{p}^2/(2M\hbar)} \langle \mathbf{p} | \mathbf{0} \rangle = \int \frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} e^{-it\mathbf{p}^2/(2M\hbar) + i\mathbf{x}\mathbf{p}/\hbar}. \quad (2.42)$$

Completando cuadrados en la forma cuadrática en la exponencial,

$$\frac{t\mathbf{p}^2}{2M} - \mathbf{x}\mathbf{p} = \frac{t(\mathbf{p} - M\mathbf{x}/t)^2}{2M} - \frac{M\mathbf{x}^2}{2t}, \quad (2.43)$$

la expresión puede reescribirse como

$$\langle \mathbf{x}, t | \mathbf{0}, 0 \rangle_0 = e^{iM\mathbf{x}^2/(2\hbar t)} \int \frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} e^{-it(\mathbf{p} - M\mathbf{x}/t)^2/(2M\hbar)}. \quad (2.44)$$

Introducimos el cambio de variable (para futura referencia)

$$\mathbf{p} = \mathbf{q} + \frac{M\mathbf{x}}{t} \quad (2.45)$$

de modo que, usando que cada dimensión cartesiana da el mismo resultado al integrar,

$$\langle \mathbf{x}, t | \mathbf{0}, 0 \rangle_0 = e^{iM\mathbf{x}^2/(2\hbar t)} \int \frac{d^n q}{(2\pi\hbar)^n} e^{-it\mathbf{q}^2/(2M\hbar)} = e^{iM\mathbf{x}^2/(2\hbar t)} I(t)^n, \quad (2.46)$$

donde⁹

$$I(t) = \int \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{-itx^2/(2M\hbar)} = \left(\frac{M}{2\pi\hbar|t|} \right)^{1/2} e^{-i\epsilon(t)\pi/4}, \quad \epsilon(t) = \frac{t}{|t|}. \quad (2.47)$$

⁹Se trata de una integral de Fresnel. Es condicionalmente convergente. Para $t > 0$, partiendo de $\int dx e^{-tx^2} = \sqrt{\pi/t}$, definimos los nuevos caminos de integración $z(s) = e^{\pm i\pi/4}s$, $s \in \mathbb{R}$. $\sqrt{\pi/t} = \int ds e^{\pm i\pi/4} e^{\mp its^2}$, es decir $\int dx e^{\mp itx^2} = e^{\mp i\pi/4} \sqrt{\pi/t}$. Se deduce, $\int dx e^{-itx^2} = e^{-i\epsilon(t)\pi/4} \sqrt{\pi/|t|}$ para t real no nulo.

Usamos $\epsilon(x)$ para denotar el signo de x . El resultado se suele escribir simplemente

$$\langle \mathbf{x}, t | \mathbf{0}, 0 \rangle_0 = \left(\frac{M}{2\pi i \hbar t} \right)^{n/2} e^{iM\mathbf{x}^2/(2\hbar t)}, \quad (2.48)$$

donde se sobreentiende que $\sqrt{\frac{1}{it}} := e^{-i\epsilon(t)\pi/4}/\sqrt{|t|}$, (es decir, $\text{Re}(\sqrt{1/it}) > 0$).

Nótese que el factor dependiente de \mathbf{x} , $e^{iM\mathbf{x}^2/(2\hbar t)}$, no es más que $e^{iW_{cl}(\mathbf{x}, t; \mathbf{0}, 0)/\hbar}$.

2.2.3. Relación con el propagador y la integral de caminos

Usando (2.38) podemos demostrar fácilmente la ec. (2.20):

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}_f, t_f) &= \langle \mathbf{x}_f | \psi(t_f) \rangle = \langle \mathbf{x}_f | U(t_f, t_i) | \psi(t_i) \rangle = \int d^n x_i \langle \mathbf{x}_f | U(t_f, t_i) | \mathbf{x}_i \rangle \langle \mathbf{x}_i | \psi(t_i) \rangle \\ &= \int d^n x_i \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle \psi(\mathbf{x}_i, t_i). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Por otro lado la representación de Feynman del propagador como suma sobre caminos satisface trivialmente la importante propiedad de consistencia del operador de evolución

$$U(t_c, t_a) = U(t_c, t_b)U(t_b, t_a). \quad (2.50)$$

En efecto, tomando elementos de matriz e insertando la identidad $1 = \int d^n x_b | \mathbf{x}_b \rangle \langle \mathbf{x}_b |$, esta propiedad se puede reescribir en términos del propagador

$$\langle \mathbf{x}_c, t_c | \mathbf{x}_a, t_a \rangle = \int d^n x_b \langle \mathbf{x}_c, t_c | \mathbf{x}_b, t_b \rangle \langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle. \quad (2.51)$$

A la derecha de la ecuación, en $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ se suma sobre todos los caminos $\mathbf{x}_a \rightarrow \mathbf{x}_b$ y en $\langle \mathbf{x}_c, t_c | \mathbf{x}_b, t_b \rangle$ sobre todos los caminos $\mathbf{x}_b \rightarrow \mathbf{x}_c$, cuando se suma sobre todos los posibles \mathbf{x}_b esto produce todos los caminos $\mathbf{x}_a \rightarrow \mathbf{x}_c$. Además, la acción es aditiva:

$$W[a \rightarrow b] + W[b \rightarrow c] = W[a \rightarrow c], \quad (2.52)$$

por lo que las fases se multiplican. Por tanto se reproduce el resultado $\langle \mathbf{x}_c, t_c | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ del lado izquierdo.

También se ve que iterando la ec. (2.51), con la división en subintervalos de antes, ec. (2.30),

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle &= \int d^n x_{N-1} \cdots \int d^n x_j \cdots \int d^n x_1 \\ &\times \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_{N-1}, t_{N-1} \rangle \cdots \langle \mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1} | \mathbf{x}_j, t_j \rangle \cdots \langle \mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_i, t_i \rangle. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Esta expresión es válida para N finito y se puede representar por caminos poligonales entre (\mathbf{x}_i, t_i) y (\mathbf{x}_f, t_f) . En el límite $N \rightarrow \infty$ produce una integral sobre caminos $\mathbf{x}(t)$. La condición $U(t, t) = 1$ implica $\langle \mathbf{x}_f, t | \mathbf{x}_i, t \rangle = \delta(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_i)$ lo cual indica que en ese límite los caminos son continuos (la amplitud de probabilidad de un salto finito $\mathbf{x}_j \rightarrow \mathbf{x}_{j+1}$ tiende a cero con $\epsilon = \Delta t \rightarrow 0$).

2.3. Integral de caminos

Para obtener la integral de caminos partiendo del formalismo canónico, empezamos con la ec. (2.53)

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \int \prod_{j=1}^{N-1} d^n x_j \prod_{j=0}^{N-1} \langle \mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1} | \mathbf{x}_j, t_j \rangle, \quad \text{donde } 0 = i, N = f. \quad (2.54)$$

Aquí

$$\langle \mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1} | \mathbf{x}_j, t_j \rangle = \langle \mathbf{x}_{j+1} | U(t_{j+1}, t_j) | \mathbf{x}_j \rangle = \int \frac{d^n p_j}{(2\pi\hbar)^n} \langle \mathbf{x}_{j+1} | U(t_{j+1}, t_j) | \mathbf{p}_j \rangle \langle \mathbf{p}_j | \mathbf{x}_j \rangle. \quad (2.55)$$

Aquí hemos elegido insertar la identidad en espacio de momentos a la derecha de $U(t_{j+1}, t_j)$. Se obtienen fórmulas análogas (pero no idénticas) si se inserta a la izquierda. Para tratar el elemento de matriz $\langle \mathbf{x} | U | \mathbf{p} \rangle$ tomamos el límite de ϵ pequeño

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | U(t + \epsilon, t) | \mathbf{p} \rangle &= \langle \mathbf{x} | e^{-i\epsilon H(t)/\hbar} | \mathbf{p} \rangle + O(\epsilon^2) \\ &= \langle \mathbf{x} | \left[1 - i\frac{\epsilon}{\hbar} H(t) \right] | \mathbf{p} \rangle + O(\epsilon^2) \\ &= \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \left[1 - i\frac{\epsilon}{\hbar} H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \right] + O(\epsilon^2) \\ &= \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle e^{-i\epsilon H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)/\hbar} + O(\epsilon^2), \end{aligned} \quad (2.56)$$

donde se ha introducido el *símbolo* del operador $H(t)$ ¹⁰

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \frac{\langle \mathbf{x} | H(t) | \mathbf{p} \rangle}{\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle}. \quad (2.57)$$

¹⁰Dada una función $f(\mathbf{x}, \mathbf{p})$, el símbolo le asocia un operador \hat{f} . En este sentido define una prescripción para cuantizar observables clásicos, pero $f(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ real no garantiza hermiticidad de \hat{f} . Una versión de símbolo que sí tiene esta propiedad es la *transformada de Wigner*.

Alternativamente para $H(t) = K + V(t)$ (energía cinética más potencial),

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x} | U(t + \epsilon, t) | \mathbf{p} \rangle &= \langle \mathbf{x} | e^{-i\epsilon(K+V(t))/\hbar} | \mathbf{p} \rangle + O(\epsilon^2) \\ &= \langle \mathbf{x} | e^{-i\epsilon V(t)/\hbar} e^{-i\epsilon K/\hbar} | \mathbf{p} \rangle + O(\epsilon^2) \\ &= \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle e^{-i\epsilon V(\mathbf{x}, t)/\hbar} e^{-i\epsilon \mathbf{p}^2/(2M\hbar)} + O(\epsilon^2),\end{aligned}\tag{2.58}$$

donde se ha utilizado Campbell-Hausdorff en la segunda igualdad. Por este procedimiento se pueden acotar los errores y llegar a un resultado riguroso para potenciales suficientemente regulares [11].

Insertando el resultado en la ec. (2.55), se tiene

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1} | \mathbf{x}_j, t_j \rangle &= \int \frac{d^n \mathbf{p}_j}{(2\pi\hbar)^n} \langle \mathbf{x}_{j+1} | \mathbf{p}_j \rangle e^{-i\epsilon H(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{p}_j, t_j)/\hbar} \langle \mathbf{p}_j | \mathbf{x}_j \rangle + O(\epsilon^2) \\ &= \int \frac{d^n \mathbf{p}_j}{(2\pi\hbar)^n} e^{-i\epsilon H(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{p}_j, t_j)/\hbar} e^{i(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j) \mathbf{p}_j/\hbar} + O(\epsilon^2).\end{aligned}\tag{2.59}$$

2.3.1. Integral de caminos en el espacio de las fases

De nuevo, cada uno de los N factores en (2.54) tiene un error relativo $O(\epsilon^2)$, lo cual equivale a un error relativo total $O(\epsilon)$. De modo que

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d^n \mathbf{x}_j d^n \mathbf{p}_j}{(2\pi\hbar)^n} \frac{d^n \mathbf{p}_0}{(2\pi\hbar)^n} \exp \left[\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j) \mathbf{p}_j}{\epsilon} - H(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{p}_j, t_j) \right) \right].\tag{2.60}$$

Esta expresión puede *escribirse* de forma más sugerente, como una integral de caminos en el espacio de las fases (que no es todavía la integral de caminos usual). Para ello, usamos una *notación* de caminos continuos

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \int_{(\mathbf{x}_i, t_i)}^{(\mathbf{x}_f, t_f)} \mathcal{D}(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt (\dot{\mathbf{x}}(t) \mathbf{p}(t) - H(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t), t)) \right).\tag{2.61}$$

Teniendo en cuenta que $\dot{\mathbf{x}}\mathbf{p} - H = L$ y $W = \int dt L$,

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \int_{(\mathbf{x}_i, t_i)}^{(\mathbf{x}_f, t_f)} \mathcal{D}(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)) e^{\frac{i}{\hbar} W[\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)]}.\tag{2.62}$$

Esta integral de caminos en el espacio de las fases es muy mal comportada matemáticamente y debe tratarse con sumo cuidado [4].

2.3.2. Integral de caminos en el espacio de configuración

Para obtener la integral de caminos propiamente dicha consideramos una partícula (no relativista) en un potencial

$$H(t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{x}, t) \quad (\text{operadores}). \quad (2.63)$$

Para este hamiltoniano el símbolo es simplemente

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{x}, t) \quad (\text{c-números}), \quad (2.64)$$

(cuadrático en \mathbf{p}). Podemos hacer inmediatamente las integrales sobre \mathbf{p}_j ($j = 0, 1, \dots, N-1$) en la ec. (2.60), ya que son las mismas que aparecían para el propagador libre

$$\int \frac{d^n p_j}{(2\pi\hbar)^n} e^{i\epsilon/\hbar \left((\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j) \mathbf{p}_j / \epsilon - \mathbf{p}_j^2 / (2M) \right)} = \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{n/2} e^{iM(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2 / (2\hbar\epsilon)} \quad (2.65)$$

De este modo se obtiene finalmente la expresión de la integral de caminos

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{nN/2} \int \prod_{j=1}^{N-1} d^n x_j \exp \left[\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{M}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon} \right)^2 - V(\mathbf{x}_{j+1}, t_j) \right) \right]. \quad (2.66)$$

Esta es la expresión literal. Podemos reescribirla usando una *notación* más sugestiva, con las siguientes identificaciones

$$t_j \rightarrow t, \quad \mathbf{x}_j \rightarrow \mathbf{x}(t), \quad \frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon} \rightarrow \dot{\mathbf{x}}(t), \quad \sum_{j=0}^{N-1} \epsilon \rightarrow \int_{t_i}^{t_f} dt, \quad (2.67)$$

$$\left(\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{nN/2} \int \prod_{j=1}^{N-1} d^n x_j \rightarrow \int_{(\mathbf{x}_i, t_i)}^{(\mathbf{x}_f, t_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(t)$$

Entonces

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle &= \int_{(\mathbf{x}_i, t_i)}^{(\mathbf{x}_f, t_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{i/\hbar \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}(t)^2 - V(\mathbf{x}(t), t) \right)} \\ &= \int_{(\mathbf{x}_i, t_i)}^{(\mathbf{x}_f, t_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{iW[\mathbf{x}(t)]/\hbar} \quad (t_f > t_i). \end{aligned} \quad (2.68)$$

Aunque la deducción de (2.66) vale en todo caso, la interpretación más directa corresponde a $t_f > t_i$. La ec. (2.68) expresa que la amplitud de probabilidad de encontrar la partícula en (\mathbf{x}_f, t_f) , si estaba en (\mathbf{x}_i, t_i) , se obtiene sumando sobre caminos $i \rightarrow f$ cada uno con un peso $e^{iW/\hbar}$. La normalización de la "medida" $\mathcal{D}\mathbf{x}(t)$ está fijada por la condición

$$\langle \mathbf{x}', t | \mathbf{x}, t \rangle = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}). \quad (2.69)$$

En caso de ambigüedad, por definición la ec. (2.68) es una forma breve de ec. (2.66). La integral sobre caminos continuos $\mathbf{x}(t)$ como tal no existe en sentido estricto pero se le puede dar sentido riguroso en la formulación de tiempo imaginario.

En la formulación de integral de caminos de Feynman no hay operadores, sólo c-números. Sin embargo es completamente equivalente al formalismo canónico. A menudo la formulación de Feynman se considera más intuitiva y el límite clásico más natural. La formulación canónica está basada en el *hamiltoniano*, la de integral de caminos está basada en el *lagrangiano*.

2.3.3. Integral de caminos para A partículas

La extensión de la integral de caminos al caso de A partículas es inmediato. Para

$$H(t) = \sum_{k=1}^A \frac{\mathbf{p}^{(k)2}}{2M^{(k)}} + V(\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(A)}, t), \quad (2.70)$$

se aplica ec. (2.66) casi directamente. Basta considerar que el espacio de configuración ahora es \mathbb{R}^{nA} y modificar la energía cinética,

$$\sum_{k=1}^A \frac{M^{(k)}}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_{j+1}^{(k)} - \mathbf{x}_j^{(k)}}{\epsilon} \right)^2. \quad (2.71)$$

2.3.4. Integral de caminos en teorías de campos cuánticos

Un campo es un sistema mecánico con infinitos grados de libertad (generalmente un conjunto continuo de grados de libertad). Supongamos un campo real, $\phi \in \mathbb{R}$. La configuración (espacial) del campo viene dada por el valor del campo en cada punto del espacio $\phi(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$. Un camino corresponde a una configuración espacial en cada instante $t \in [t_i, t_f]$, lo cual equivale a una configuración espacio-temporal $\phi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^4$. El camino une las configuración espacial inicial $\phi_i(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}, t_i)$ con la configuración espacial final $\phi_f(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}, t_f)$.

Para una densidad lagrangiana (Klein-Gordon con interacción)

$$\mathcal{L}(x) = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi(x) \partial^\mu \phi(x) - V(\phi(x)), \quad (2.72)$$

el lagrangiano es $L(t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \mathcal{L}(x)$ y la acción

$$W[\phi] = \int_{t_i}^{t_f} dt L(t) = \int_{\mathbb{R}^3 \times [t_i, t_f]} d^4x \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \phi(x) \partial^\mu \phi(x) - V(\phi(x)) \right]. \quad (2.73)$$

La amplitud de probabilidad de propagación de (ϕ_i, t_i) a (ϕ_f, t_f) admite una integral de caminos,

$$\langle \phi_f, t_f | \phi_i, t_i \rangle = \int_{(\phi_i, t_i)}^{(\phi_f, t_f)} \mathcal{D}\phi(x) e^{iW[\phi]/\hbar} \quad (2.74)$$

donde la integral funcional es sobre todas la configuraciones espacio-temporales del campo tales que $\phi_i(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}, t_i)$ y $\phi_f(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}, t_f)$.

Nótese que si se aproxima \mathbb{R}^3 por n puntos $\mathbf{x}^{(k)}$ (para eventualmente tomar $n \rightarrow \infty$), el campo pasa a ser equivalente a un vector n -dimensional $\phi^{(k)} = \phi(\mathbf{x}^{(k)})$ y la configuración espacio-temporal es un camino en \mathbb{R}^n , $\phi^{(k)}(t) = \phi(\mathbf{x}^{(k)}, t)$. La integral de caminos del campo discretizado es completamente equivalente a la de una partícula en un espacio n -dimensional.

Por otro lado podemos generalizar a n campos, $\phi_A(x)$, $A = 1, \dots, n$, en $d + 1$ dimensiones ($\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$),

$$\langle \phi_f, t_f | \phi_i, t_i \rangle = \int_{(\phi_i, t_i)}^{(\phi_f, t_f)} \prod_{A=1}^n \mathcal{D}\phi_A(x) e^{i/\hbar \int d^{d+1}x \left[\frac{1}{2} \sum_{A=1}^n \partial_\mu \phi_A(x) \partial^\mu \phi_A(x) - V(\phi(x)) \right]}. \quad (2.75)$$

Resulta evidente que el camino $\mathbf{x}(t)$ de una partícula en \mathbb{R}^n no es más que un campo con n componentes en $0 + 1$ dimensiones. La mecánica cuántica de un número finito de grados de libertad (o simplemente mecánica cuántica) se puede ver como una teoría de campos $0 + 1$ dimensional. A su vez una integral ordinaria en \mathbb{R}^n se puede ver como una teoría de campos en $0 + 0$ dimensiones. Al aumentar la dimensión del espacio-tiempo la integral funcional incluye más y más configuraciones y se comporta peor, lo cual se manifiesta en divergencias ultravioleta. En $0 + 1$ estas divergencias son más suaves y pueden fijarse con *prescripciones* que proporciona el formalismo canónico, basado en operadores. Para teorías de campos en dimensiones mayores esto no basta; hay que extender la discretización $\Delta t = \epsilon$ a \mathbf{x} y hacer depender los parámetros del lagrangiano en ϵ para que el límite $\epsilon \rightarrow 0$ exista, en el proceso denominado *renormalización*.

En mecánica cuántica de un número finito de grados de libertad es más usual utilizar el formalismo hamiltoniano. En teorías de campos es mucho más corriente usar el formalismo lagrangiano ya que la acción es un escalar Lorentz, mientras que el hamiltoniano es una componente de un cuadvivector.

2.3.5. Integral de caminos en tiempo imaginario

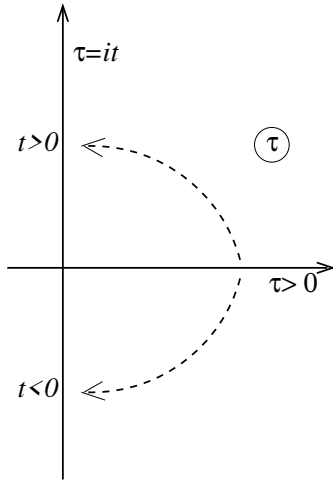
Aquí suponemos H conservativo. La idea es, en lugar de $e^{-itH/\hbar}$, considerar el *operador de evolución euclídeo*

$$U_E(\tau) = e^{-\tau H/\hbar} \quad \tau > 0, \quad (2.76)$$

y luego recuperar $e^{-itH/\hbar}$ mediante prolongación analítica (denominada *rotación de Wick*) con $\tau = it$ de modo que τ es *imaginario* cuando t es real (el caso de interés físico). Es importante resaltar que, a pesar del nombre, τ es real y positivo cuando se utiliza en $e^{-\tau H/\hbar}$.

En general H está acotado inferiormente pero no superiormente. En este caso la condición $\tau \geq 0$ es necesaria para que el operador $e^{-\tau H/\hbar}$ exista en un dominio suficientemente grande. [En hamiltonianos relativistas, con una rama de energías negativas, hay que usar $\tau < 0$ en esa rama.] Así si

$$\begin{aligned} H|n\rangle &= E_n|n\rangle, \quad E_0 < E_1 < \dots \\ |\psi\rangle &= \sum_n \psi_n|n\rangle, \quad \sum_n |\psi_n|^2 < \infty \\ \langle\psi|e^{-\tau H/\hbar}|\psi\rangle &= \sum_n |\psi_n|^2 e^{-\tau E_n/\hbar}, \end{aligned} \quad (2.77)$$



Rotación de Wick.

el valor esperado existe en el semiplano $\text{Re}(\tau) > 0$ y de ahí se extiende al resto del plano complejo τ (generalmente con multivaluación y singularidades en $\tau \leq 0$). En tiempo real se obtienen expresiones condicionalmente convergentes y el *postulado euclídeo* (es decir, empezar con tiempo imaginario y luego rotar a tiempo real) proporciona una prescripción para ellas. Así el propagador de la partícula libre en tiempo imaginario se obtiene partiendo de

$$\langle\mathbf{x}, \tau|\mathbf{0}, 0\rangle_{0,E} = \langle\mathbf{x}|e^{-\tau H_0/\hbar}|\mathbf{0}\rangle, \quad (\tau > 0). \quad (2.78)$$

La integral sobre momentos es gaussiana y absolutamente convergente

$$\langle\mathbf{x}, \tau|\mathbf{0}, 0\rangle_{0,E} = \int \frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} e^{-\tau p^2/(2M\hbar) + i\mathbf{x}\mathbf{p}/\hbar} = \left(\frac{M}{2\pi\hbar\tau}\right)^{n/2} e^{-M\mathbf{x}^2/(2\hbar\tau)}. \quad (2.79)$$

El resultado de tiempo real se obtiene aplicando la rotación de Wick aquí. El postulado euclídeo

implica que en caso de ambigüedad debe usarse la prescripción $t \rightarrow t - i0^+$ [o $t + i0^+$ en una rama de energías negativas de H].

Para $H(\tau)$ el operador de evolución euclídeo está asociado a la ecuación de Schrödinger en tiempo imaginario

$$-\hbar\partial_\tau|\psi(\tau)\rangle = H(\tau)|\psi(\tau)\rangle, \quad U_E(\tau_f, \tau_i) = T \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau H(\tau)\right) \quad (\tau_f > \tau_i), \quad (2.80)$$

donde T ordena los operadores de acuerdo con τ creciente. (Este es el orden natural, de modo que $\Delta\tau > 0$. Como se ha dicho $\Delta\tau < 0$ debe obtenerse por extensión analítica.)

Los elementos de matriz de $U_E(\tau_f, \tau_i)$ proporcionan el *propagador euclídeo*

$$\langle \mathbf{x}_f, \tau_f | \mathbf{x}_i, \tau_i \rangle_E = \langle \mathbf{x}_f | U_E(\tau_f, \tau_i) | \mathbf{x}_i \rangle. \quad (2.81)$$

El propagador euclídeo admite una integral de caminos que puede obtenerse siguiendo los mismos pasos que antes o bien haciendo la rotación de Wick en el resultado final:

$$it \rightarrow \tau, \quad \frac{d\mathbf{x}}{dt} \rightarrow i\frac{d\mathbf{x}}{d\tau}, \quad i \int dt \rightarrow \int d\tau \quad (2.82)$$

produce

$$\langle \mathbf{x}_f, \tau_f | \mathbf{x}_i, \tau_i \rangle_E = \int_{(\mathbf{x}_i, \tau_i)}^{(\mathbf{x}_f, \tau_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(\tau) e^{-W_E[\mathbf{x}(\tau)]/\hbar} \quad (\tau_f > \tau_i). \quad (2.83)$$

donde

$$W_E[\mathbf{x}(\tau)] = \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau \left(\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}(\tau)^2 + V(\mathbf{x}(\tau), \tau) \right), \quad (2.84)$$

es la *acción euclídea*. (Para el caso de una partícula no relativista en un potencial, el lagrangiano euclídeo tiene el mismo aspecto que la energía usual, pero esta no es una propiedad general.)

Igualmente, la integral de caminos en el espacio de las fases en tiempo imaginario tiene la forma

$$\langle \mathbf{x}_f, \tau_f | \mathbf{x}_i, \tau_i \rangle = \int_{(\mathbf{x}_i, \tau_i)}^{(\mathbf{x}_f, \tau_f)} \mathcal{D}(\mathbf{x}(\tau), \mathbf{p}(\tau)) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau (H(\mathbf{x}(\tau), \mathbf{p}(\tau), \tau) - i\dot{\mathbf{x}}(\tau)\mathbf{p}(\tau))\right). \quad (2.85)$$

El adjetivo euclídeo deriva de que bajo la rotación de Wick la métrica de Minkowski pasa a ser la métrica euclídea

$$g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu = -t^2 + \mathbf{x}^2 \rightarrow \tau^2 + \mathbf{x}^2 = \delta_{\mu\nu}x_E^\mu x_E^\nu. \quad (2.86)$$

La construcción con tiempo imaginario tiene ventajas matemáticas y prácticas. Desde el punto de vista matemático, permite una formulación rigurosa de la integral de caminos para el caso libre sobre caminos continuos $\mathbf{x}(\tau)$ (sin referencia a discretización y paso al límite). La medida

$$d\mu_W[\mathbf{x}(\tau)] = \mathcal{D}\mathbf{x}(\tau) e^{-\int d\tau \frac{1}{2}\dot{\mathbf{x}}^2} \quad (2.87)$$

es la *medida de Wiener* [11]. Como se verá más adelante, los caminos típicos son de tipo browniano. Son caminos continuos pero no derivables en ningún punto (con probabilidad 1). Éste es el origen del principio de incertidumbre en este formalismo. La medida se puede extender al caso de potenciales suficientemente regulares.

Desde el punto de vista práctico, a diferencia de $\mathcal{D}\mathbf{x}(\tau)e^{iW[\mathbf{x}(\tau)]/\hbar}$, $\mathcal{D}\mathbf{x}(\tau)e^{-W_E[\mathbf{x}(\tau)]/\hbar}$ es una medida real y positiva a la que se puede aplicar el método Monte Carlo, es decir, hacer un muestreo sistemático de caminos $\mathbf{x}(\tau)$ y utilizarlos para obtener observables físicos. Esto es especialmente útil en teoría complicadas en las que otros métodos son menos eficientes.

Es interesante que el propagador euclídeo es manifiestamente simétrico bajo intercambio de \mathbf{x}_f y \mathbf{x}_i :

$$\langle \mathbf{x}_f, \tau_f | \mathbf{x}_i, \tau_i \rangle_E = \langle \mathbf{x}_i, \tau_f | \mathbf{x}_f, \tau_i \rangle'_E, \quad (2.88)$$

donde a la izquierda se utiliza el potencial $V(\mathbf{x}, \tau)$ mientras que a la derecha se utiliza el potencial reflejado $V'(\mathbf{x}, \tau) = V(\mathbf{x}, \tau_i + \tau_f - \tau)$. Esto es así porque los caminos $\mathbf{x}(\tau)$ y $\mathbf{x}'(\tau) = \mathbf{x}(\tau_i + \tau_f - \tau)$ tienen la misma acción en ambos casos. En particular, para potenciales conservativos el propagador euclídeo $\langle \mathbf{x}_f | \mathbf{x}_i; \tau \rangle_E$ es directamente simétrico.

Debe notarse que para el problema considerado de una partícula en un potencial, W_E es real (y acotado inferiormente si $V(\mathbf{x}, \tau)$ lo está). Para teorías más generales, no está garantizado que $e^{-W_E/\hbar}$ sea real, y viceversa, no todo peso $e^{-W_E/\hbar}$ da lugar, bajo rotación de Wick, a una teoría unitaria (es decir, con hamiltoniano hermítico).

Conexión con mecánica estadística clásica. Nótese también la similitud entre la expresión del propagador euclídeo, con una suma sobre caminos, y la función de partición de mecánica estadística clásica, en la que hay una suma sobre configuraciones. En esta analogía, los caminos serían las configuraciones, W_E correspondería al hamiltoniano y \hbar a la temperatura. En esta imagen, las

fluctuaciones térmicas corresponderían a las fluctuaciones cuánticas (en tiempo imaginario).

2.4. Desarrollo semiclásico

2.4.1. Principio de Hamilton

Las ecuaciones de movimiento de la mecánica clásica se pueden hacer derivar del principio de Hamilton: dados (\mathbf{x}_i, t_i) y (\mathbf{x}_f, t_f) , el camino clásico (solución de las ecuaciones) $\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)$ es un extremo de la acción, es decir, la deja estacionaria en primero orden

$$\delta W[\mathbf{x}(t)] = 0, \quad \text{para } \mathbf{x}_{\text{cl}}(t) \rightarrow \mathbf{x}_{\text{cl}}(t) + \delta \mathbf{x}(t), \quad \delta \mathbf{x}(t_i) = \delta \mathbf{x}(t_f) = 0. \quad (2.89)$$

Como se ha visto el límite clásico (en la forma de ecuación de Hamilton-Jacobi) se puede obtener a partir del formalismo canónico. Se obtiene en forma muy directa (e instructiva) también a partir de la integral de caminos. En efecto, en unidades naturales $\hbar = 1$ y un sistema es clásico porque tiene una acción (adimensional) muy grande. Alternativamente, se pueden usar unidades macroscópicas (humanas) en las que \hbar es pequeña. Entonces una forma práctica de tomar el límite clásico es introducir \hbar en las expresiones y hacer $\hbar \rightarrow 0$ en ellas.

Consideremos un conjunto de caminos $\mathbf{x}^{(k)}(t)$ próximos entre sí, que unan (\mathbf{x}_i, t_i) con (\mathbf{x}_f, t_f) . Su contribución a la suma sobre caminos será

$$\sum_k e^{iW^{(k)}/\hbar}. \quad (2.90)$$

Cuando estos caminos están lejos de $\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)$ la acción no es estacionaria y varía substancialmente de un camino a otro. Como consecuencia la fase relativa entre ellos $e^{i(W^{(k)} - W^{(k')})/\hbar}$ se vuelve aleatoria en el límite $\hbar \rightarrow 0$, su promedio es cero en este límite. En cambio, cuando los caminos son próximos a $\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)$ las variaciones en W de un camino a otro son pequeñas (cero en primer orden de $\delta \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}_{\text{cl}}$) y los sumandos producen una interferencia constructiva (se suman con la misma fase). La suma de caminos tiene interferencia destructiva fuera del camino clásico y en el límite $\hbar \rightarrow 0$ la solución clásica domina la integral de caminos.

El efecto es más evidente incluso en tiempo imaginario. En este caso el camino "clásico" es la solución de $\delta W_E[\mathbf{x}(\tau)] = 0$. Cuando $\hbar \rightarrow 0$, la suma $\sum_k e^{-W^{(k)}/\hbar}$ está dominada por el camino con mínima acción, ya que para cualquier camino que no sea clásico, el peso relativo tiende a cero exponencialmente

$$e^{-(W^{(k)} - W_{\text{cl}})/\hbar} \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} 0, \quad W^{(k)} > W_{\text{cl}}. \quad (2.91)$$

De hecho en estas ideas se basan los *métodos de la fase estacionaria* (tiempo real) y *de punto de silla o de Laplace* (tiempo imaginario), para evaluar integrales del tipo (usualmente en varias dimensiones)

$$F(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{i\lambda f(s)}, \quad F_E(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{-\lambda f(s)}, \quad \lambda \rightarrow \infty. \quad (2.92)$$

λ corresponde a $1/\hbar$ y en el límite $\lambda \rightarrow \infty$ estas integrales están dominadas por el valor de $f(s_0)$ siendo s_0 un punto estacionario (o crítico), es decir, tal que $f'(s_0) = 0$, y que corresponde a la solución clásica:

$$F(\lambda) \approx e^{i\lambda f(s_0)} \Delta_{s_0}(\lambda), \quad (f'(s_0) = 0), \quad (2.93)$$

donde $\Delta_{s_0}(\lambda)$ representa el tamaño típico del intervalo alrededor de s_0 tal que $f'(s) \approx 0$ a efectos de la integral. Si hay varios puntos estacionarios hay una contribución por cada uno de ellos.

Para ver esto en más detalle consideramos el caso euclídeo y modelamos la integral de caminos con una integral en una dimensión:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{1}{\hbar}W(x)}, \quad (2.94)$$

donde $\hbar > 0$ es un parámetro y $W(x)$ es independiente de \hbar .¹¹

Queremos estudiar el desarrollo semiclásico de Z , es decir, su comportamiento para \hbar pequeño. Suponemos W real, acotada inferiormente y con un punto estacionario en el que la derivada segunda no se anula,

$$\text{mínimo en } x_0, \quad W'(x_0) = 0, \quad W''(x_0) > 0. \quad (2.95)$$

Puesto que en el límite $\hbar \rightarrow 0$ la integral está dominada por el valor en x_0 desarrollamos $W(x)$ en torno al mínimo:

$$W(x) = W_0 + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 W_0'' + \frac{1}{3!}(x - x_0)^3 W_0''' + \frac{1}{4!}(x - x_0)^4 W_0^{(4)} + O((x - x_0)^5) \quad (2.96)$$

La idea es insertar esta expresión en la integral de Z , tratar la parte cuadrática de forma exacta y el resto de forma perturbativa. La parte cuadrática es una gaussiana centrada en x_0 con anchura $\Delta x \sim \sqrt{\hbar/W_0''}$:

$$Z \approx e^{-W_0/\hbar} \Delta x. \quad (2.97)$$

¹¹Las fórmulas siguientes se pueden adaptar al caso $W(x, \hbar)$ si la dependencia en \hbar es analítica.

Para hacer un desarrollo sistemático y llevar las cuentas de potencias de \hbar hacemos un cambio a una variable ξ tal que $\Delta\xi \sim 1$

$$\xi := (x - x_0)\sqrt{\frac{W_0''}{\hbar}}, \quad w_n := \frac{W_0^{(n)}}{(W_0'')^{n/2}}, \quad n = 3, 4, \dots \quad (2.98)$$

En función de esta variable

$$\begin{aligned} Z &= e^{-W_0/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \sqrt{\frac{\hbar}{W_0''}} \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2 - \frac{1}{3!}\hbar^{1/2}w_3\xi^3 - \frac{1}{4!}\hbar w_4\xi^4 + O(\hbar^{3/2})\right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{W_0''}} e^{-W_0/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2/2} \left(1 - \frac{1}{3!}\hbar^{1/2}w_3\xi^3 - \frac{1}{4!}\hbar w_4\xi^4 + \frac{1}{2 \times 3!^2}\hbar w_3^2\xi^6 + O(\hbar^{3/2})\right). \end{aligned} \quad (2.99)$$

Las integrales pueden hacerse con

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{1}{2}ax^2+bx} &= \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{b^2/(2a)}, & \langle e^{bx} \rangle_a &= e^{b^2/(2a)}, \\ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{b^m}{m!} \langle x^m \rangle_a &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} \frac{b^{2n}}{a^n}, & \langle x^{2n} \rangle_a &= \frac{(2n-1)!!}{a^n}. \end{aligned} \quad (2.100)$$

En nuestro caso

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2/2} = \sqrt{2\pi} \quad \langle \xi^n \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2/2} \xi^n}{\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2/2}} = \begin{cases} (n-1)!! & n \text{ par} \\ 0 & n \text{ impar} \end{cases} \quad (2.101)$$

$$Z = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{W_0''}} e^{-W_0/\hbar} \left(1 - \frac{1}{3!}\hbar^{1/2}w_3\langle \xi^3 \rangle - \frac{1}{4!}\hbar w_4\langle \xi^4 \rangle + \frac{1}{2 \times 3!^2}\hbar w_3^2\langle \xi^6 \rangle + O(\hbar^2)\right), \quad (2.102)$$

con $\langle \xi^3 \rangle = 0$, $\langle \xi^4 \rangle = 3$, $\langle \xi^6 \rangle = 15$. A todos los órdenes, los términos con potencias semienteras de \hbar llevan potencias impares de ξ y por tanto se anulan.

Una forma práctica de escribir el resultado es términos de la *acción efectiva*, Γ ,

$$Z = e^{-\Gamma/\hbar} \quad (2.103)$$

con

$$\Gamma = W_0 + \frac{\hbar}{2} \log \frac{W_0''}{2\pi\hbar} + \hbar^2 \left(\frac{1}{8}w_4 - \frac{5}{24}w_3^2\right) + O(\hbar^3). \quad (2.104)$$

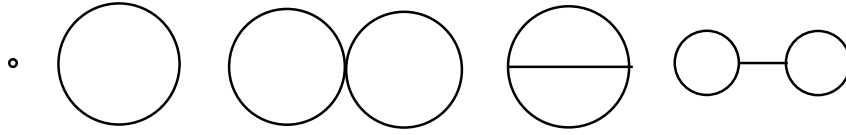


Figura 1: Los dos primeros diagramas son W_0 y la corrección a un loop. El tercero es el término con w_4 y los dos últimos términos con w_3 .

En el límite clásico la acción efectiva (o *acción cuántica*) se reduce a la clásica. Nótese que esta estimación no tiene las dimensiones correctas (Z no es adimensional si x no lo es) y eso se arregla con la primera corrección cuántica, $O(\hbar)$. El resultado para la acción efectiva se puede expresar en términos de diagramas de Feynman (más útiles en problemas multidimensionales). En estos diagramas cada nueva potencia de \hbar corresponde a un loop más por tanto el contaje en potencias de \hbar es un desarrollo en número de loops. Los términos w_n producen vértices de n puntos. Los diagramas son conexos para Γ .

Debe notarse que en general los desarrollos semiclásicos no son convergentes sino sólo *asintóticos*: si $R_n(\hbar)$ es el resto después guardar hasta $O(\hbar^n)$ inclusive, $R_n(\hbar) = O(\hbar^{n+1})$ (es decir, $|R_n| < K_n \hbar^n$ en un entorno de $\hbar = 0$), pero $\lim_{n \rightarrow \infty} R_n$ (para \hbar fijo) puede no existir o no ser necesariamente cero. Típicamente, el error de truncación es del orden del último término considerado y en las series asintóticas los términos empiezan a crecer a partir de cierto n dependiente de \hbar (menor cuanto mayor sea \hbar), por lo que la estimación empeora si se añaden más términos. Que la serie sea asintótica implica que el error se puede reducir tomando \hbar más pequeño.

2.5. La ecuación de Schrödinger

De acuerdo con la integral de caminos la amplitud de probabilidad de encontrar la partícula en un punto evoluciona con

$$\psi(\mathbf{x}_f, t_f) = \int d^n x_i \int_{\mathbf{x}(t_i)=\mathbf{x}_i}^{\mathbf{x}(t_f)=\mathbf{x}_f} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - V(\mathbf{x}(t), t) \right]} \psi(\mathbf{x}_i, t_i). \quad (2.105)$$

Queremos ver que $\psi(\mathbf{x}_f, t_f)$, dado por esta fórmula, cambia con t_f según la ecuación de Schrödinger. Ya vimos que la integral de caminos es compatible con la existencia de un operador de evolución, así que basta ver la variación de la función de onda en un dt :

$$t_i = t, \quad t_f = t + \epsilon, \quad \epsilon \rightarrow 0^+, \quad \mathbf{x} := \mathbf{x}_f, \quad \mathbf{y} := \mathbf{x}_i. \quad (2.106)$$

Como ϵ es pequeño supondremos que la integral de caminos se puede estimar por un camino típico pesado por un factor $\mathcal{N}(\epsilon)$ que tiene en cuenta el número (o peso) de los caminos relevantes.¹² En la práctica tomamos

$$\psi(\mathbf{x}, t + \epsilon) = \mathcal{N}(\epsilon) \int d^n y e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{y}}{\epsilon} \right)^2 - V(\mathbf{y}', t') \right]} \psi(\mathbf{y}, t), \quad (2.107)$$

donde han tomado un punto y tiempo intermedios para estimar el promedio del potencial sobre el camino:¹³

$$\mathbf{y}' = \mathbf{y} + \lambda_s(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad t' = t + \lambda_t \epsilon, \quad 0 \leq \lambda_{s,t} \leq 1. \quad (2.108)$$

Debido a las grandes oscilaciones en la fase de la gaussiana imaginaria, el integrando sólo será relevante cuando $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \sim \sqrt{\epsilon}$. (El argumento es más directo en tiempo imaginario, donde la gaussiana es real con anchura $\sqrt{\epsilon \hbar / M}$.) Para llevar las cuentas en potencias de ϵ es conveniente usar una variable normalizada $\boldsymbol{\xi} = O(1)$

$$\boldsymbol{\xi} = \frac{\mathbf{y} - \mathbf{x}}{\sqrt{\epsilon}}, \quad \mathbf{y} = \mathbf{x} + \sqrt{\epsilon} \boldsymbol{\xi}, \quad \mathbf{y}' = \mathbf{x} + (1 - \lambda_s) \sqrt{\epsilon} \boldsymbol{\xi}, \quad d^n y = \epsilon^{n/2} d^n \boldsymbol{\xi}. \quad (2.109)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t + \epsilon) = \mathcal{N}(\epsilon) \epsilon^{n/2} \int d^n \boldsymbol{\xi} e^{\frac{iM}{2\hbar} \boldsymbol{\xi}^2} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(\mathbf{x} + (1 - \lambda_s) \sqrt{\epsilon} \boldsymbol{\xi}, t + \lambda_t \epsilon)} \psi(\mathbf{x} + \sqrt{\epsilon} \boldsymbol{\xi}, t). \quad (2.110)$$

Desarrollamos en potencias de $\epsilon^{1/2}$ los dos factores del integrando.

$$"e^{V}" = e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} (V(\mathbf{x}, t) + O(\epsilon^{1/2}))} = 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(\mathbf{x}, t) + O(\epsilon^{3/2}), \quad (2.111)$$

$$" \psi " = \psi(\mathbf{x}, t) + \sqrt{\epsilon} \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\nabla} \psi(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{2} \epsilon \xi_i \xi_j \nabla_i \nabla_j \psi(\mathbf{x}, t) + O(\epsilon^{3/2})$$

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t + \epsilon) &= \mathcal{N}(\epsilon) \epsilon^{n/2} \int d^n \boldsymbol{\xi} e^{\frac{iM}{2\hbar} \boldsymbol{\xi}^2} \left(\psi + \frac{\epsilon}{2} \xi_i \xi_j \nabla_i \nabla_j \psi - \frac{i\epsilon}{\hbar} V \psi + O(\epsilon^2) \right) \\ &= \left[\psi + \frac{\epsilon}{2} \langle \xi_i \xi_j \rangle \nabla_i \nabla_j \psi - \frac{i\epsilon}{\hbar} V \psi + O(\epsilon^2) \right]_{(\mathbf{x}, t)} \mathcal{N}(\epsilon) \epsilon^{n/2} \int d^n \boldsymbol{\xi} e^{\frac{iM}{2\hbar} \boldsymbol{\xi}^2} \end{aligned} \quad (2.112)$$

Aquí se ha usado que las potencias semienteras de ϵ siempre van con un número impar de $\boldsymbol{\xi}$ y por tanto se anulan al integrar (el error pasa de $O(\epsilon^{3/2})$ a $O(\epsilon^2)$), y se ha definido

$$\langle f(\boldsymbol{\xi}) \rangle = \frac{\int d^n \boldsymbol{\xi} e^{\frac{iM}{2\hbar} \boldsymbol{\xi}^2} f(\boldsymbol{\xi})}{\int d^n \boldsymbol{\xi} e^{\frac{iM}{2\hbar} \boldsymbol{\xi}^2}} \quad (2.113)$$

¹²Alternativamente, puede tomarse ec. (2.66) y probar que esa expresión reproduce la ecuación de Schrödinger.

¹³Otras opciones son $V \sim \lambda_s V(\mathbf{x}) + (1 - \lambda_s) V(\mathbf{y})$, etc.

Algunas integrales:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2/2} = \sqrt{2\pi}, \quad \int d^n \xi e^{-a\xi^2/2} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{n/2}$$

$$\int d^n \xi e^{-a\xi^2/2} \xi_i \xi_j = \frac{1}{n} \delta_{ij} \int d^n \xi e^{-a\xi^2/2} \xi^2 = \frac{1}{n} \delta_{ij} \left(-2\frac{\partial}{\partial a}\right) \int d^n \xi e^{-a\xi^2/2} = \frac{1}{a} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{n/2} \delta_{ij}$$

$$\langle \xi_i \xi_j \rangle_a = \frac{1}{a} \delta_{ij}. \quad (2.114)$$

En nuestro caso $a = \frac{M}{i\hbar}$. Evidentemente, para que ambos lados de (2.112) coincidan cuando $\epsilon \rightarrow 0$ hace falta que

$$1 = \mathcal{N}(\epsilon) \epsilon^{n/2} \int d^n \xi e^{\frac{iM}{2\hbar} \xi^2}, \quad \mathcal{N}(\epsilon) = \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{n/2}. \quad (2.115)$$

Por otro lado

$$\langle \xi_i \xi_j \rangle = \frac{i\hbar}{M} \delta_{ij}. \quad (2.116)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t + \epsilon) = \psi(\mathbf{x}, t) + \frac{\epsilon}{2M} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) + O(\epsilon^2) \quad (2.117)$$

Comparando con

$$\psi(\mathbf{x}, t + \epsilon) = \psi(\mathbf{x}, t) + \epsilon \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) + O(\epsilon^2), \quad (2.118)$$

se deduce

$$i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(\mathbf{x}, t) \right] \psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.119)$$

que es la ecuación de Schrödinger. Nótese que la normalización divergente $\mathcal{N}(\epsilon)$ es un tipo de renormalización ultravioleta que se soslaya en el formalismo canónico por la condición $U(t, t) = 1$. También se ve que la elección concreta de los parámetros λ_s y λ_t no es relevante en el límite del continuo (límite $\epsilon \rightarrow 0$). Como se verá la cosa cambia en presencia de un potencial vector.

2.6. Partícula en un campo electromagnético

El lagrangiano de una partícula no relativista de carga q en un campo electromagnético externo es

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) = \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{q}{c} \dot{\mathbf{x}} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - q\Phi(\mathbf{x}, t) \quad (2.120)$$

(unidades en el sistema cgs, c es la velocidad de la luz), donde Φ y \mathbf{A} son el potencial escalar y vector.

La ecuación de movimiento resultante es

$$M\ddot{\mathbf{x}} = q\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \frac{q}{c}\dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) := \mathbf{F}_{\text{Lorentz}}, \quad (2.121)$$

donde

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\partial_t\mathbf{A}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (2.122)$$

son el campo eléctrico y magnético respectivamente.

2.6.1. Invariancia gauge

Tanto \mathbf{E} como \mathbf{B} son invariantes gauge, es decir, los nuevos potenciales

$$\Phi'(\mathbf{x}, t) = \Phi(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{c}\partial_t\Lambda(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{A}'(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \nabla\Lambda(\mathbf{x}, t), \quad (2.123)$$

producen los mismos campos \mathbf{E} y \mathbf{B} que (Φ, \mathbf{A}) . Aquí $\Lambda(\mathbf{x}, t)$ es una función arbitraria. Nótese que q no aparece ya que el campo electromagnético existe independientemente de las partículas cargadas y se acopla a cada partícula de acuerdo con la carga de ésta.

Como la fuerza de Lorentz es invariante gauge, se deduce que a nivel clásico una transformación gauge no tiene efecto ya que no modifica la solución clásica $\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)$.

2.6.2. Partícula cargada cuántica

A nivel cuántico la forma más fácil de ver el efecto de una transformación de gauge sobre la función de onda es usando el formalismo lagrangiano, es decir, la integral de caminos. Suponemos que las fórmulas derivadas para una partícula en un potencial se extienden al caso de un campo electromagnético:

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \int_{(\mathbf{x}_i, t_i)}^{(\mathbf{x}_f, t_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{iW[\mathbf{x}(t)]/\hbar}. \quad (2.124)$$

Bajo una transformación de gauge el lagrangiano se transforma así

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) \rightarrow L'(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) = \frac{M}{2}\dot{\mathbf{x}}^2 - q\Phi'(\mathbf{x}, t) + \frac{q}{c}\dot{\mathbf{x}}\mathbf{A}'(\mathbf{x}, t) = L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) + \frac{d}{dt}\frac{q}{c}\Lambda(\mathbf{x}, t), \quad (2.125)$$

donde $\frac{d}{dt} = \partial_t + \dot{\mathbf{x}}\nabla$ es la derivada total con respecto de t . Como es sabido, sumar una derivada total a un lagrangiano no afecta a las ecuaciones de Euler-Lagrange asociadas.¹⁴ El cambio en la acción es

$$\begin{aligned} W[\mathbf{x}(t)] \rightarrow W'[\mathbf{x}(t)] &= \int_{t_i}^{t_f} dt L'(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) = W[\mathbf{x}(t)] + \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{d}{dt} \frac{q}{c} \Lambda(\mathbf{x}, t) \\ &= W[\mathbf{x}(t)] + \frac{q}{c} \Lambda(\mathbf{x}_f, t_f) - \frac{q}{c} \Lambda(\mathbf{x}_i, t_i). \end{aligned} \quad (2.126)$$

Se deduce que la transformación gauge de la acción es independiente del camino concreto seguido y sólo depende de los extremos (\mathbf{x}_i, t_i) y (\mathbf{x}_f, t_f) .

La modificación en el propagador se obtiene fácilmente

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle' &= \int_{(\mathbf{x}_i, t_i)}^{(\mathbf{x}_f, t_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{iW'[\mathbf{x}(t)]/\hbar} \\ &= \int_{(\mathbf{x}_i, t_i)}^{(\mathbf{x}_f, t_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{i(W[\mathbf{x}(t)] + \frac{q}{c}\Lambda(\mathbf{x}_f, t_f) - \frac{q}{c}\Lambda(\mathbf{x}_i, t_i))/\hbar} \\ &= e^{\frac{iq}{\hbar c}\Lambda(\mathbf{x}_f, t_f)} e^{-\frac{iq}{\hbar c}\Lambda(\mathbf{x}_i, t_i)} \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle. \end{aligned} \quad (2.127)$$

Puesto que al variar \mathbf{x}_f lo que se obtiene es la función de la partícula en t_f (que estaba en \mathbf{x}_i en t_i) se deduce que bajo transformaciones de gauge la función de onda se transforma según

$$\psi'(\mathbf{x}, t) = e^{\frac{iq}{\hbar c}\Lambda(\mathbf{x}, t)} \psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.128)$$

Se puede interpretar como una transformación pasiva, en la que se cambia localmente la fase de cada estado localizado $|\mathbf{x}\rangle$

$$|\mathbf{x}\rangle' = e^{-\frac{iq}{\hbar c}\Lambda(\mathbf{x}, t)} |\mathbf{x}\rangle. \quad (2.129)$$

Cada partícula responde a la transformación de gauge de acuerdo con su carga eléctrica.

Para ver esto en el formalismo canónico, obtenemos el hamiltoniano (clásico) mediante la transformada de Legendre del lagrangiano. Se obtiene

$$H = \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right)^2 + q\Phi(\mathbf{x}, t). \quad (2.130)$$

¹⁴Como se ve a continuación, la acción cambia por una contribución que depende de (\mathbf{x}_i, t_i) y (\mathbf{x}_f, t_f) pero no del camino $\mathbf{x}(t)$, por tanto no modifica δW en el principio de Hamilton.

El hamiltoniano cuántico debe proponerse atendiendo a criterios de consistencia matemática y fenomenológica. Para tener un buen límite clásico, típicamente se sustituyen \mathbf{p} y \mathbf{x} por sus versiones cuánticas eligiendo el orden de modo que H sea hermitico. En nuestro caso además se quiere que se respete invariancia gauge: que usar (Φ, \mathbf{A}) o (Φ', \mathbf{A}') difiera en una transformación de simetría. H con \mathbf{A} y \mathbf{p} ordenados como en (2.130) satisface esta propiedad,¹⁵

$$H = \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p}^2 - \frac{q}{c}(\mathbf{p}\mathbf{A} + \mathbf{A}\mathbf{p}) + \frac{q^2}{c^2}\mathbf{A}^2(\mathbf{x}, t) \right) + q\Phi(\mathbf{x}, t). \quad (2.131)$$

Queremos verificar que si $\psi(\mathbf{x}, t)$ es una solución de la ecuación de Schrödinger para (Φ, \mathbf{A}) , $\psi'(\mathbf{x}, t)$ en (2.128) lo es para (Φ', \mathbf{A}') . En efecto, introduciendo la *derivada covariante*

$$D_\mu = \partial_\mu + \frac{iq}{\hbar c}A_\mu, \quad A^\mu = (c\Phi, \mathbf{A}), \quad A'^\mu = (c\Phi', \mathbf{A}') = A^\mu - \partial^\mu\Lambda, \quad (2.132)$$

la ecuación de Schrödinger se puede escribir

$$i\hbar D_t\psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2M}\mathbf{D}^2\psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.133)$$

Entonces¹⁶

$$D'_\mu\psi' = \left(\partial_\mu + \frac{iq}{\hbar c}A'_\mu\right)(e^{\frac{iq}{\hbar c}\Lambda}\psi) = e^{\frac{iq}{\hbar c}\Lambda}\left(\partial_\mu + \frac{iq}{\hbar c}A'_\mu + \frac{iq}{\hbar c}\partial_\mu\Lambda\right)\psi = e^{\frac{iq}{\hbar c}\Lambda}D_\mu\psi. \quad (2.134)$$

Igualmente $\mathbf{D}'^2\psi' = e^{\frac{iq}{\hbar c}\Lambda}\mathbf{D}^2\psi$, y se verifica que la transformación de gauge es una simetría.

El hamiltoniano en (2.133) se obtiene del hamiltoniano libre aplicando la prescripción de *acomplamiento mínimo*, es decir, con las sustitución $\partial_\mu \rightarrow D_\mu$. Esta prescripción garantiza invariancia gauge. En general puede haber términos adicionales invariantes gauge no mínimos, por ejemplo, $\mu\mathbf{S}\mathbf{B}$, siendo \mathbf{S} un espín.

2.6.3. Ordenación de operadores

Al pasar de una teoría clásica a su versión cuántica hay una ambigüedad en cómo ordenar los operadores. Aunque en la integral de caminos intervienen c -números, esas ambigüedades siguen

¹⁵Hermiticidad y límite clásico no fijan H . Por ejemplo se puede añadir $\lambda[\mathbf{p}\mathbf{A}, \mathbf{A}\mathbf{p}]$ que es hermitico para λ real y se anula en el límite clásico, pero no es invariante gauge.

¹⁶La derivada es covariante porque $D_\mu\psi$, a diferencia de $\partial_\mu\psi$, se transforma igual que ψ bajo transformaciones gauge.

presentes en la forma de definir con precisión el significado de la integral funcional. Esto se puede ver en el caso de una partícula en un campo electromagnético. Supongamos que discretizamos la integral de caminos y queremos ver qué hamiltoniano produce (seguimos los pasos de la sec. 2.5):

$$\psi(\mathbf{x}, t + \epsilon) = \mathcal{N}(\epsilon) \int d^n y e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \left(\frac{M}{2} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{y}}{\epsilon} \right)^2 + \frac{q}{c} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{y}}{\epsilon} \right) \mathbf{A}(\mathbf{y}', t') - q\Phi(\mathbf{y}', t') \right)} \psi(\mathbf{y}, t), \quad (2.135)$$

con $\mathbf{y}' = \mathbf{y} + \lambda_s(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, $t' = t + \lambda_t \epsilon$. Cambiando a variable $\xi = (\mathbf{y} - \mathbf{x})/\sqrt{\epsilon}$,

$$\psi(\mathbf{x}, t + \epsilon) = \mathcal{N}(\epsilon) \epsilon^{n/2} \int d^n \xi e^{\frac{iM}{2\hbar} \xi^2} e^{-\frac{iq}{\hbar c} \sqrt{\epsilon} \xi \mathbf{A}(\mathbf{x} + (1 - \lambda_s)\sqrt{\epsilon} \xi, t + \lambda_t \epsilon) - \frac{i\epsilon q}{\hbar} \Phi(\mathbf{x} + (1 - \lambda_s)\sqrt{\epsilon} \xi, t + \lambda_t \epsilon)} \psi(\mathbf{x} + \sqrt{\epsilon} \xi, t) \quad (2.136)$$

$$\begin{aligned} "e^A" &= e^{-\frac{iq}{\hbar c} \sqrt{\epsilon} \xi_i (A_i + (1 - \lambda_s)\sqrt{\epsilon} \xi_j \nabla_j A_i) + O(\epsilon^{3/2})} \\ &= 1 - \frac{iq}{\hbar c} \sqrt{\epsilon} \xi_i A_i - \frac{iq}{\hbar c} (1 - \lambda_s) \epsilon \xi_i \xi_j (\nabla_j A_i) - \frac{q^2}{2\hbar^2 c^2} \epsilon \xi_i \xi_j A_i A_j + O(\epsilon^{3/2}) \end{aligned} \quad (2.137)$$

$$"e^\Phi" = 1 - \frac{i\epsilon q}{\hbar} \Phi + O(\epsilon^{3/2})$$

$$"e^\psi" = \psi + \sqrt{\epsilon} \xi_i \nabla_i \psi + \frac{1}{2} \epsilon \xi_i \xi_j \nabla_i \nabla_j \psi + O(\epsilon^{3/2}).$$

Sustituyendo y tomando los promedios, se ve que $\mathcal{N}(\epsilon)$ toma el mismo valor que antes y

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t + \epsilon) &= \langle "e^A" "e^\Phi" "e^\psi" \rangle \\ &= \left[1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + q\Phi + \frac{q^2}{2Mc^2} \mathbf{A}^2 + \frac{i\hbar q}{Mc} (\mathbf{A} \nabla + (1 - \lambda_s)(\nabla \mathbf{A})) \right) \right] \psi \end{aligned} \quad (2.138)$$

Teniendo en cuenta que $(\nabla \mathbf{A}) = [\nabla, \mathbf{A}]$ y $\nabla = i\mathbf{p}/\hbar$, se deduce que el hamiltoniano es

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} - \frac{q}{Mc} (\lambda_s \mathbf{A} \mathbf{p} + (1 - \lambda_s) \mathbf{p} \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2Mc^2} \mathbf{A}^2 + q\Phi. \quad (2.139)$$

Si se elige $\lambda_s = \frac{1}{2}$

$$H = \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right)^2 + q\Phi(\mathbf{x}, t), \quad (2.140)$$

que garantiza una dinámica unitaria (H hermítico) e invariante gauge. Se deduce que el resultado final difiere por términos finitos que sobreviven al límite del continuo $\epsilon \rightarrow 0$, dependiendo de cómo se discretice en detalle. Esto no ocurría con el potencial escalar solo pero sí con el potencial vector. El origen es una divergencia ultravioleta presente en la integral de caminos. El término más divergente es la energía cinética $\dot{\mathbf{x}}^2$, que lleva dos derivadas y por tanto requiere más potencias de ϵ en el denominador. Esta divergencia se cancela con $\mathcal{N}(\epsilon)$. La siguiente divergencia es el término $\dot{\mathbf{x}} \mathbf{A}$ que

tiene una derivada. Es divergente pero sólo requiere una prescripción (cómo ordenar los operadores) para fijarlo. El término con Φ no introduce divergencias y no es sensible a cómo se regule a través de $\lambda_{s,t}$.

2.7. Efecto Aharonov-Bohm

Supongamos que en \mathbb{R}^3 hay una región C cilíndrica y de longitud infinita en la cual la partícula no puede penetrar. En este caso el espacio disponible para la partícula, $\mathbb{R}^3 - C$, no es simplemente conexo. Como consecuencia el propagador puede descomponerse de forma natural del siguiente modo:

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle_n \quad (2.141)$$

donde la componente n -ésima sólo suma sobre caminos que dan exactamente n vueltas alrededor de la zona excluida antes de llegar a \mathbf{x}_f .¹⁷ Fijado \mathbf{x}_i se tiene

$$\psi(\mathbf{x}_f, t_f) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \psi_n(\mathbf{x}_f, t_f). \quad (2.142)$$

Efectivamente la función de onda es multivaluada y se puede pasar de la rama n -ésima a la n' -ésima haciendo que \mathbf{x}_f dé $n' - n$ vueltas alrededor del cilindro y vuelva al mismo punto.¹⁸

Suponemos que \mathbf{x}_i y \mathbf{x}_f están en lados opuestos del cilindro y para simplificar sólo consideramos los caminos que rodean el cilindro por la “derecha” o por la “izquierda” (sin vueltas adicionales),

$$\psi(\mathbf{x}_f, t_f) = \psi_R(\mathbf{x}_f, t_f) + \psi_L(\mathbf{x}_f, t_f), \quad \psi_{R,L} = \sum_{\mathbf{x}_{R,L}(t)} e^{iW[\mathbf{x}_{R,L}(t)]/\hbar}. \quad (2.143)$$

Supongamos que hay un solenoide dentro del cilindro de modo que se puede hacer pasar un flujo magnético Φ_B por su interior. No hay campo magnético en el exterior y suponemos un régimen estacionario. La acción a lo largo de un camino $\mathbf{x}(t)$ será

$$W[\mathbf{x}(t)] = W_0[\mathbf{x}(t)] + W_m[\mathbf{x}(t)], \quad W_m[\mathbf{x}(t)] = \frac{q}{c} \int_{\mathbf{x}_i}^{\mathbf{x}_f} d\mathbf{x} \mathbf{A}, \quad (2.144)$$

¹⁷Una de las dos direcciones del eje del cilindro es “hacia arriba” por definición. Vueltas en sentido antihorario (visto desde arriba) dan un n positivo.

¹⁸Alternativamente se puede trabajar en la “superficie de Riemann” o espacio recubridor de $\mathbb{R}^3 - C$. Cada punto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 - C$ alcanzado después de dar n vueltas es un punto distinto \mathbf{x}_n del espacio recubridor. En el espacio recubridor la función de onda es univaluada y $\mathbb{R}^3 - C$ multivaluado.

donde W_0 es la acción en ausencia de campo magnético. Nótese que la contribución magnética sólo depende de la trayectoria. Todos los caminos por la derecha [resp. izquierda] dan la misma contribución magnética $W_{m,R}$ [resp. $W_{m,L}$] ya que entre dos de esos caminos no se rodea flujo magnético. Por tanto

$$\psi = \psi_{0,R}e^{iW_{m,R}/\hbar} + \psi_{0,L}e^{iW_{m,L}/\hbar}. \quad (2.145)$$

En cambio entre R y L sí se rodea flujo (independiente de las trayectorias concretas):

$$W_{m,R} - W_{m,L} = \frac{q}{c} \left(\int_R - \int_L \right) d\mathbf{x} \mathbf{A} = \oint d\mathbf{x} \mathbf{A} = \int_S d\mathbf{S} \mathbf{B} = \frac{q}{c} \Phi_B. \quad (2.146)$$

Para la función de onda

$$\psi = e^{iW_{m,L}/\hbar} \left(\psi_{0,R} e^{\frac{iq}{\hbar c} \Phi_B} + \psi_{0,L} \right) \quad (2.147)$$

La fase global no influye en la densidad de probabilidad de detectar la partícula en \mathbf{x}_f . De hecho es posible elegir el gauge de modo que $W_{m,L}$ se anule, o $W_{m,R}$ se anule, pero no ambos a la vez si $\Phi_B \neq 0$, ya que el flujo es un invariante gauge. Más generalmente

$$\psi(\mathbf{x}_f, t_f) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \psi_{0,n}(\mathbf{x}_f, t_f) e^{\frac{iqn}{\hbar c} \Phi_B}. \quad (2.148)$$

La suma sobre n produce un patrón de interferencia que se puede modificar variando Φ_B . Implica que la probabilidad de detectar la partícula en un punto *depende* del flujo magnético que atraviesa por el cilindro, incluso aunque la partícula no está en ningún momento sometida al campo magnético (*efecto Aharonov-Bohm*). Esto demuestra que una partícula cuántica es sensible a A_μ (aunque de forma invariante gauge) y no sólo a la fuerza de Lorentz.

2.8. Acciones cuadráticas

2.8.1. Propagador de acciones cuadráticas

Supongamos que tenemos una integral en n dimensiones del tipo

$$Z = \int d^n x e^{-W(x)}, \quad W(x) = \frac{1}{2} a_{ij} x^i x^j + b_i x^i + c, \quad (2.149)$$

es decir, la función W es a lo sumo cuadrática, y sea x_0 el punto estacionario, $\nabla W(x_0) = 0$. Desarrollando en serie W entorno a x_0

$$W(x) = W(x_0) + \frac{1}{2} a_{ij} (x^i - x_0^i)(x^j - x_0^j) := W(x_0) + W_2(x - x_0), \quad (2.150)$$

donde $W_2(x) = \frac{1}{2}a_{ij}x^i x^j$ denota la parte cuadrática de W . Se deduce

$$Z = e^{-W(x_0)} \int d^n x e^{-W_2(x)} = Z_{\text{cl}} Z_2, \quad (2.151)$$

el primer factor sólo depende de W en el punto estacionario y el segundo sólo depende de la parte cuadrática de W .

Esto se puede extender de forma inmediata a la integral de caminos para una *acción a lo sumo cuadrática* en $\mathbf{x}(t)$

$$\begin{aligned} W[\mathbf{x}(t)] &= \int_{t_i}^{t_f} dt dt' \frac{1}{2} A_{ij}(t, t') x^i(t) x^j(t') + \int_{t_i}^{t_f} dt B_i(t) x^i(t) + C \\ &= W[\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)] + W_2[\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_{\text{cl}}(t)], \end{aligned} \quad (2.152)$$

Donde $\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)$ es la solución clásica (que deja estacionaria la acción) que conecta (\mathbf{x}_i, t_i) con (\mathbf{x}_f, t_f) . Definiendo la fluctuación respecto de la solución clásica como

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_{\text{cl}}(t), \quad (2.153)$$

es inmediato que para la fluctuación

$$\mathbf{y}(t_i) = \mathbf{y}(t_f) = \mathbf{0}, \quad (2.154)$$

ya que los extremos están fijos para todos los caminos $\mathbf{x}(t)$ en la integral. En consecuencia

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle &= \int_{(\mathbf{x}_i, t_i)}^{(\mathbf{x}_f, t_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{iW[\mathbf{x}(t)]/\hbar} \\ &= e^{iW[\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)]/\hbar} \int_{(\mathbf{0}, t_i)}^{(\mathbf{0}, t_f)} \mathcal{D}\mathbf{y}(t) e^{iW_2[\mathbf{y}(t)]/\hbar} \\ &:= \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle_{\text{cl}} \langle \mathbf{0}, t_f | \mathbf{0}, t_i \rangle_2. \end{aligned} \quad (2.155)$$

Este resultado es exacto. El primer factor sólo depende de la acción sobre el camino clásico. El segundo contiene las fluctuaciones cuánticas pero sólo depende de la parte cuadrática de la acción y no depende de los extremos \mathbf{x}_i y \mathbf{x}_f .

La relación (2.152) se puede obtener mediante desarrollo en serie funcional:

$$W[\mathbf{x}(t) + \mathbf{y}(t)] = W[\mathbf{x}(t)] + \int dt \frac{\delta W[\mathbf{x}(t)]}{\delta x^i(t)} y^i(t) + \int dt dt' \frac{1}{2} \frac{\delta^2 W[\mathbf{x}(t)]}{\delta x^i(t) \delta x^j(t')} y^i(t) y^j(t'). \quad (2.156)$$

La serie se trunca por ser la acción a lo sumo cuadrática. La derivada segunda es $A_{ij}(t, t')$ y es independiente de $\mathbf{x}(t)$, y ese término coincide con $W_2[\mathbf{y}(t)]$. Desarrollando en torno a $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_{\text{cl}}(t)$, el término lineal en \mathbf{y} se anula.

2.8.2. Lagrangianos cuadráticos

Ejemplos de lagrangianos a lo sumo cuadráticos son los del tipo

$$L = \frac{1}{2}m_{ij}(t)\dot{x}^i(t)\dot{x}^j(t) + \frac{1}{2}\omega_{ij}(t)x^i(t)x^j(t) + b_{ij}(t)\dot{x}^i(t)x^j(t) + h_i(t)\dot{x}^i(t) + f_i(t)x^i(t) + b(t). \quad (2.157)$$

(Por ejemplo, el término $\dot{x}^i x^j$ corresponde a $A_{ij}(t, t') = -b_{ij}(t')\delta'(t - t')$.)

Vamos a considerar en más detalle el problema unidimensional¹⁹

$$L = \frac{1}{2}M\dot{x}^2 - \frac{1}{2}c(t)x^2 + f(t)x. \quad (2.158)$$

La ecuación de movimiento

$$M\ddot{x} + c(t)x = f(t) \quad (2.159)$$

proporciona la solución clásica y permite calcular el primer factor, $\langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle_{\text{cl}}$. Respecto del segundo factor

$$\langle 0, t_f | 0, t_i \rangle_2 = \int_{(0, t_i)}^{(0, t_f)} \mathcal{D}y(t) e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} [M\dot{y}^2 - c(t)y^2] dt}, \quad (2.160)$$

para calcularlo discretizamos el intervalo temporal en $N + 1$ subintervalos de tamaño ϵ :

$$\langle 0, t_f | 0, t_i \rangle_2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dy_1 \cdots dy_N \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{(N+1)/2} e^{\frac{i}{2\hbar} \sum_{j=0}^N \left[\frac{M}{\epsilon} (y_{j+1} - y_j)^2 - \epsilon c(t_j) y_j^2 \right]} \quad (2.161)$$

donde $y_0 = y_{N+1} = 0$. Por conveniencia definimos nuevas variables

$$z_j = \sqrt{\frac{M}{\hbar i \epsilon}} y_j, \quad z_0 = z_{N+1} = 0, \quad (2.162)$$

de modo que

$$\langle 0, t_f | 0, t_i \rangle_2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon}} \int \frac{dz_1 \cdots dz_N}{(2\pi)^{N/2}} e^{-\sum_{j=0}^N \frac{1}{2} \left[(z_{j+1} - z_j)^2 - \frac{\epsilon^2}{M} c(t_j) z_j^2 \right]} \quad (2.163)$$

¹⁹ De hecho, términos del tipo $b(t)\dot{x}x + h(t)\dot{x}$ se pueden generar mediante $\frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2}bx^2 + hx \right]$. En tres dimensiones la parte antisimétrica de b_{ij} no se puede eliminar así y corresponde a un campo magnético uniforme.

La exponencial puede escribirse como $\exp(-\frac{1}{2}K_{ij}z^i z^j)$ donde K es una matriz tridiagonal real y simétrica de dimensión N ,

$$K = \begin{pmatrix} a_1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & a_2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & a_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{N-1} & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & a_N \end{pmatrix}, \quad a_j = 2 - \frac{\epsilon^2}{M}c(t_j). \quad (2.164)$$

La integral

$$I = \int \frac{d^N z}{(2\pi)^{N/2}} e^{-\frac{1}{2}z^T K z} \quad (2.165)$$

puede calcularse haciendo una rotación ortogonal a la base en la que K es diagonal,

$$K = R^T K_D R, \quad R \in \text{SO}(N), \quad K_D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N). \quad (2.166)$$

$\xi = Rz$, y $z^T K z = \xi^T K_D \xi$. El jacobiano del cambio es 1.

$$I = \int \frac{d^N \xi}{(2\pi)^{N/2}} e^{-\sum_{j=1}^N \frac{1}{2}\lambda_j \xi^j \xi^j} = \prod_{j=1}^N \sqrt{\frac{1}{\lambda_j}} = (\det K)^{-1/2}. \quad (2.167)$$

$$\langle 0, t_f | 0, t_i \rangle_2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon \det K}}. \quad (2.168)$$

Para calcular $\det K$, definimos K_j como la submatriz $j \times j$ formada por la primeras j filas y columnas de K . Por inspección de la forma de las K_j se deduce la siguiente recurrencia

$$\det K_j = a_j \det K_{j-1} - (-1)^2 \det K_{j-2}, \quad (2.169)$$

junto con las condiciones iniciales

$$\det K_0 = 1, \quad \det K_1 = a_1, \quad \det K = \det K_N. \quad (2.170)$$

Teniendo en cuenta que lo que tiene límite finito es $\epsilon \det K$, introducimos una función $\varphi(t)$ tal que

$$\varphi(t_j) = \epsilon \det K_j, \quad \varphi(t_f) = \epsilon \det K, \quad (2.171)$$

que cumple

$$\frac{\varphi(t_{j+1}) - 2\varphi(t_j) + \varphi(t_{j-1}))}{\epsilon^2} = -\frac{c(t_{j+1})}{M}\varphi(t_j), \quad \varphi(t_i) = \epsilon, \quad \dot{\varphi}(t_i + \epsilon) = \epsilon \left(2 - c(t_i + \epsilon)\frac{\epsilon^2}{M}\right). \quad (2.172)$$

En el límite $\epsilon \rightarrow 0$

$$M\ddot{\varphi}(t) + c(t)\varphi(t) = 0, \quad \varphi(t_i) = 0, \quad \dot{\varphi}(t_i) = 1. \quad (2.173)$$

Resolviendo la ecuación con las condiciones de contorno indicadas se obtiene finalmente

$$\langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle = \sqrt{\frac{M}{2\pi i \hbar \varphi(t_f)}} e^{iW_{\text{cl}}(x_f, t_f; x_i, t_i)/\hbar}. \quad (2.174)$$

Nótese que la ecuación de φ no es más que la ecuación clásica de movimiento de la parte cuadrática de la teoría y de esta forma el resultado se extiende a otras teorías cuadráticas. Una fórmula alternativa [10] es

$$\langle 0, t_f | 0, t_i \rangle_2 = \sqrt{\frac{1}{2\pi i \hbar}} \sqrt{-\frac{\partial^2 W_{\text{cl}}(x_f, t_f; x_i, t_i)}{\partial x_f \partial x_i}}. \quad (2.175)$$

(W_{cl} también es a lo sumo cuadrática en (x_f, x_i) y por tanto la derivada segunda no depende de x_f y x_i .)

2.8.3. Oscilador armónico

El lagrangiano del oscilador armónico isótropo n -dimensional es

$$L = \frac{1}{2}M\dot{\mathbf{x}}^2 - \frac{1}{2}M\Omega^2\mathbf{x}^2. \quad (2.176)$$

El camino clásico entre (\mathbf{x}_i, t_i) y (\mathbf{x}_f, t_f) se calcula fácilmente, y la correspondiente acción es

$$W_{\text{cl}}(\mathbf{x}_f, t_f; \mathbf{x}_i, t_i) = \frac{M\Omega}{2\text{sen}(\Omega(t_f - t_i))} [\cos(\Omega(t_f - t_i))(\mathbf{x}_f^2 + \mathbf{x}_i^2) - 2\mathbf{x}_f\mathbf{x}_i]. \quad (2.177)$$

Nótese que como cada coordenada cartesiana va por separado, el propagador también factoriza y lo mismo se aplica a los factores $\langle | \rangle_{\text{cl}}$ y $\langle | \rangle_2$. Por tanto, el factor $\langle | \rangle_2$ se obtiene inmediatamente resolviendo la ecuación de movimiento en una dimensión y aplicando un factor por cada dimensión:

$$\langle \mathbf{0}, t_f | \mathbf{0}, t_i \rangle_2 = \left(\frac{M\Omega}{2\pi i \hbar \text{sen}(\Omega(t_f - t_i))} \right)^{3/2}. \quad (2.178)$$

En el límite $\Omega \rightarrow 0$ se recupera el propagador libre.

2.8.4. Determinante de operadores diferenciales

La relación

$$\int \frac{d^N z}{(2\pi)^{N/2}} e^{-\frac{1}{2} z^T K z} = (\det K)^{-1/2}, \quad (2.179)$$

indica que

$$\det \left[M \frac{d^2}{dt^2} + c(t) \right]^{-1/2} \propto \int_{(0,t_i)}^{(0,t_f)} \mathcal{D}y(t) e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} [M\dot{y}^2 - c(t)y^2] dt} = \sqrt{\frac{M}{2\pi i \hbar \varphi(t_f)}} \quad (2.180)$$

Aquí $M \frac{d^2}{dt^2} + c(t)$ es el operador diferencial definido en el espacio de funciones $\varphi(t)$, $t \in [t_i, t_f]$ con $\varphi(t_i) = \varphi(t_f) = 0$. Su determinante se puede definir como $\prod_n \lambda_n$, siendo λ_n los valores propios correspondientes a las funciones propias $\varphi_n(t)$. El determinante tal cual es divergente ultravioleta, pero la divergencia proviene de los valores altos de n y está dominada por la energía cinética, de modo que es un factor divergente pero independiente de $c(t)$. Por tanto el cociente

$$\frac{\det(M \frac{d^2}{dt^2} + c(t))}{\det(M \frac{d^2}{dt^2})} = \frac{\varphi(t_f)}{t_f - t_i}, \quad (2.181)$$

es finito.

En teorías de campos en $d + 1$ dimensiones (en vez de $0 + 1$) aparecen operadores diferenciales con derivadas parciales. Las divergencias son mayores y no basta con extraer un factor constante (infinito). Una de las técnicas que se aplica es la basada en la función ζ de Riemann.²⁰ Para un operador diferencial A de orden m

$$\zeta_A(s) := \text{Tr } A^{-s} = \sum_n \lambda_n^{-s}. \quad (2.182)$$

La potencia A^{-s} se puede obtener mediante $\int_{\Gamma} dz \frac{z^{-s}}{(z - A)}$ donde Γ encierra el espectro de A .

La función $\zeta_A(s)$ converge si $\text{Re}(s) > (d + 1)m$. Su extensión analítica es regular en $s = 0$ (y tiene un número finito de polos simples sobre el eje real positivo). Entonces

$$\log \text{Det } A = \text{Tr } \log A = - \left. \frac{d}{ds} \zeta_A(s) \right|_{s=0} \quad (2.183)$$

²⁰ $\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-s}$. Se define por extensión analítica desde $\text{Re}(s) > 1$. Es analítica en el plano complejo s excepto por un polo simple en $s = 1$.

proporciona un valor renormalizado.

2.9. Propiedades espectrales del propagador

2.9.1. Propagador retardado

En vez de $\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle$ es más conveniente usar el *propagador retardado* o causal, definido por

$$G_R(\mathbf{x}_f, t_f; \mathbf{x}_i, t_i) = \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle \Theta(t_f - t_i) \quad (2.184)$$

ya que es mejor comportado matemáticamente. Así como la amplitud $\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle$ es una solución de la ecuación de Schrödinger respecto de (\mathbf{x}_f, t_f) , el propagador retardado es una *función de Green* de esa ecuación:

$$\left[i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 - V(\mathbf{x}, t) \right] G_R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \langle \mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0 \rangle i\hbar\partial_t \Theta(t - t_0) = i\hbar\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)\delta(t - t_0). \quad (2.185)$$

Para estudiar propiedades espectrales suponemos que H es conservativo.

$$\begin{aligned} H|n, \alpha\rangle &= E_n|n, \alpha\rangle \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad \alpha = 1, \dots, g_n, \quad E_0 < E_1 < \dots, \\ \varphi_{n,\alpha}(\mathbf{x}) &= \langle \mathbf{x} | n, \alpha \rangle, \quad \langle n, \alpha | n', \alpha' \rangle = \delta_{nn'}\delta_{\alpha\alpha'}. \end{aligned} \quad (2.186)$$

Dado que el propagador asociado es invariante bajo traslaciones temporales lo denotamos $G_R(\mathbf{x}_f, \mathbf{x}_i; t)$ siendo $t = t_f - t_i$.

$$\begin{aligned} G_R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0; t) &= \langle \mathbf{x} | e^{-itH/\hbar} \Theta(t) | \mathbf{x}_0 \rangle = \langle \mathbf{x} | e^{-itH/\hbar} \Theta(t) \sum_{n \geq 0} \sum_{\alpha=1}^{g_n} |n, \alpha\rangle \langle n, \alpha | \mathbf{x}_0 \rangle \\ &= \sum_{n \geq 0} \sum_{\alpha=1}^{g_n} e^{-itE_n/\hbar} \Theta(t) \varphi_{n,\alpha}(\mathbf{x}) \varphi_{n,\alpha}^*(\mathbf{x}_0). \end{aligned} \quad (2.187)$$

El propagador contiene toda la información sobre el espectro y las funciones de onda. Esta información se puede extraer haciendo un análisis en frecuencias. El convenio es

$$f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} e^{-i\omega t/\hbar} \tilde{f}(\omega), \quad \tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t/\hbar} f(t). \quad (2.188)$$

En nuestro caso²¹

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t/\hbar} e^{-itE_n/\hbar} \Theta(t) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_0^{+\infty} dt e^{i\omega t/\hbar} e^{-itE_n/\hbar} e^{-\eta t} = \frac{i\hbar}{\omega - E_n + i0^+}. \quad (2.189)$$

Cuando se integra sobre ω para invertir la transformada de Fourier la prescripción $\omega + i0^+$ proporciona el resultado causal $\Theta(t)$. Aplicado al propagador

$$\tilde{G}_R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0; \omega) = \sum_{n \geq 0} \sum_{\alpha=1}^{g_n} \frac{i\hbar \varphi_{n,\alpha}(\mathbf{x}) \varphi_{n,\alpha}^*(\mathbf{x}_0)}{\omega - E_n + i0^+}. \quad (2.190)$$

La posición de los polos de $\tilde{G}_R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0; \omega)$ como función de ω proporciona el espectro, y el residuo proporciona la función de onda (manteniendo \mathbf{x}_0 fijo y variando \mathbf{x}).

También se puede trabajar a nivel de operadores, y luego tomar elementos de matriz

$$\begin{aligned} G_R(t) &= e^{-itH/\hbar} \Theta(t), & (i\hbar \partial_t - H)G_R(t) &= i\hbar \delta(t) \\ \tilde{G}_R(\omega) &= \int dt e^{i\omega t/\hbar} G_R(t) = \frac{i\hbar}{\omega - H + i0^+}. \end{aligned} \quad (2.191)$$

El espectro también se puede obtener (aunque no las funciones de onda) trabajando sólo con la traza del propagador:

$$\begin{aligned} \text{tr } G_R(t) &= \int d^n x G_R(\mathbf{x}, \mathbf{x}, t) = \sum_n g_n e^{-itE_n/\hbar} \Theta(t) \\ \text{tr } \tilde{G}_R(\omega) &= \int d^n x \tilde{G}_R(\mathbf{x}, \mathbf{x}, \omega) = \sum_n \frac{i\hbar g_n}{\omega - E_n + i0^+}. \end{aligned} \quad (2.192)$$

La traza da menos información pero a menudo es más fácil de obtener que el propagador completo.

2.9.2. Oscilador armónico

Por ejemplo, para el oscilador armónico en 1 dimensión

$$G_R(x, y; t) = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi i\hbar \text{sen}(\Omega t)}} \exp \left[\frac{iM\Omega}{2\hbar \text{sen}(\Omega t)} ((x^2 + y^2) \cos(\Omega t) - 2xy) \right] \Theta(t), \quad (2.193)$$

²¹En ausencia de $\Theta(t)$, se tiene $\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t/\hbar} e^{-itE_n/\hbar} = 2\pi\hbar \delta(\omega - E_n)$. Este resultado es consistente con la identidad $(x \pm i0^+)^{-1} = Px^{-1} \mp i\pi\delta(x)$, donde P indica valor principal de Cauchy.

Podemos calcular la traza²²

$$\int dx G_R(x, x; t) = \frac{1}{2i \operatorname{sen}(\Omega t/2)} = \frac{e^{-i\Omega t/2}}{1 - e^{-i\Omega t}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i(n+\frac{1}{2})\Omega t}, \quad t > 0 \quad (2.194)$$

Comparando con $\operatorname{tr} G_R(t) = \sum_n g_n e^{-itE_n/\hbar} \Theta(t)$ se deduce

$$E_n = \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad g_n = 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.195)$$

En realidad aquí se ha utilizado el postulado euclídeo para introducir la serie, que no es convergente. En efecto, igualmente se podría escribir

$$\frac{1}{2i \operatorname{sen}(\Omega t/2)} = \frac{e^{i\Omega t/2}}{e^{i\Omega t} - 1} = - \sum_{n=0}^{\infty} e^{i(n+\frac{1}{2})\Omega t}, \quad (2.196)$$

(que conllevaría $g_n = -1$, $E_n = -\hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$). Por supuesto el criterio correcto es el primero ya que con él la serie es convergente cuando $it = \tau > 0$ (postulado euclídeo).

2.9.3. Partícula en una semirrecta

Consideremos una partícula que se mueve en \mathbb{R} con un potencial 0 para $x > 0$ y $+\infty$ para $x < 0$. El propagador de la partícula libre en \mathbb{R} , $G_{R,0}(x_f, x_i, t)$ en (2.48), se obtiene calculando la suma sobre estados en (2.187). Estos estados son ondas planas o equivalentemente senos y cosenos, eligiendo estados propios con paridad definida. Para obtener el propagador en la semirrecta hay que hacer dos cambios: 1) incluir sólo los estados impares ($\operatorname{sen}(kx)$) y 2) poner a cero la función para $x < 0$ y reescalarla por un factor $\sqrt{2}$ en $x > 0$ para que en la semirrecta tengan la misma normalización que antes tenía en toda la recta. Por tanto

$$G_R(x_f, x_i, t) = (G_{R,0}(x_f, x_i, t) - G_{R,0}(-x_f, x_i, t))\Theta(x_f)\Theta(x_i). \quad (2.197)$$

Se comprueba (usando las propiedades análogas para el propagador libre) que $G_R(x_f, x_i, 0) = \delta(x_f - x_i)\Theta(x_f)\Theta(x_i)$ y que $G_R(x_f, x_i, t)$ satisface la condición de consistencia (2.51).

El procedimiento se puede extender a una partícula libre en \mathbb{R}^d restringida a moverse a la

²²Usando $\operatorname{sen} \alpha = 2 \operatorname{sen}(\alpha/2) \cos(\alpha/2)$ y $\cos \alpha = 1 - 2 \operatorname{sen}^2(\alpha/2)$ para simplificar el resultado

“derecha” de k planos ortogonales, con $k \leq d$.

2.9.4. Propagador euclídeo

En la versión euclídea

$$G_E(\tau) = e^{-\tau H/\hbar} \Theta(\tau), \quad \tilde{G}_E(\omega_E) = \int_0^{+\infty} d\tau e^{i\omega_E \tau/\hbar} e^{-\tau H/\hbar} = \frac{\hbar}{H - i\omega_E}. \quad (2.198)$$

$$G_E(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0; \tau) = \sum_{n \geq 0} \sum_{\alpha=1}^{g_n} e^{-\tau E_n/\hbar} \Theta(\tau) \varphi_{n,\alpha}(\mathbf{x}) \varphi_{n,\alpha}^*(\mathbf{x}_0), \quad (2.199)$$

$$\tilde{G}_E(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0; \omega_E) = \sum_{n \geq 0} \sum_{\alpha=1}^{g_n} \frac{\hbar \varphi_{n,\alpha}(\mathbf{x}) \varphi_{n,\alpha}^*(\mathbf{x}_0)}{E_n - i\omega_E}.$$

(Por supuesto el espectro y funciones de onda son los mismos en tiempo real e imaginario.) En la formulación euclídea ω_E es real. La relación rotación de Wick para frecuencias es ($e^{-it\omega} = e^{-i\tau\omega_E}$)

$$\omega = i\omega_E - i0^+, \quad iG(\omega) = G_E(\omega_E). \quad (2.200)$$

2.9.5. Dominancia del estado fundamental

En el límite $\tau \rightarrow +\infty$ el estado fundamental se hace dominante en el propagador euclídeo. En efecto, primero separamos la contribución del estado fundamental

$$G_E(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0; \tau) = e^{-\tau E_0/\hbar} \left[\sum_{\alpha} \varphi_{0,\alpha}(\mathbf{x}) \varphi_{0,\alpha}^*(\mathbf{y}) + \sum_{n>0} \sum_{\alpha} \varphi_{n,\alpha}(\mathbf{x}) \varphi_{n,\alpha}^*(\mathbf{y}) e^{-\tau(E_n - E_0)/\hbar} \right]. \quad (2.201)$$

Los estados excitados van haciéndose más irrelevantes (están exponencialmente suprimidos) en el propagador a medida que τ crece, con una vida media $\tau_n = \hbar/(E_n - E_0)$. Si el espectro tiene una separación (gap) entre E_0 y los demás estados, $\Delta = E_1 - E_0 > 0$, el estado fundamental domina el propagador para $\tau \gg \tau_1 = \hbar/\Delta$,

$$G_E(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0; \tau) = e^{-\tau E_0/\hbar} \sum_{\alpha} \varphi_{0,\alpha}(\mathbf{x}) \varphi_{0,\alpha}^*(\mathbf{y}) (1 + O(e^{-\Delta\tau/\hbar})). \quad (2.202)$$

(Nótese que frecuentemente el estado fundamental no está degenerado.) Igualmente

$$\text{tr } G_E(\tau) = g_0 e^{-\tau E_0/\hbar} (1 + O(e^{-\Delta\tau/\hbar})). \quad (2.203)$$

La energía del estado fundamental se obtiene tomando el límite $\tau \rightarrow +\infty$, bien en la expresión con traza, bien en el propagador para puntos \mathbf{x}, \mathbf{x}_0 arbitrarios (no requiere integrar).

$$\log G_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \tau) = -\frac{\tau E_0}{\hbar} + O(1) \quad (\tau \rightarrow +\infty). \quad (2.204)$$

Así, para el oscilador armónico en tiempo euclídeo

$$G_E(x, y; \tau) = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh(\Omega\tau)}} \exp\left[-\frac{M\Omega}{2\hbar \sinh(\Omega\tau)} ((x^2 + y^2) \cosh(\Omega\tau) - 2xy)\right] \Theta(\tau), \quad (2.205)$$

$$\text{tr } G_E(\tau) = \frac{1}{2 \sinh(\Omega\tau/2)},$$

se puede tomar $x = y = 0$

$$G_E(0, 0; \tau) = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh(\Omega\tau)}}. \quad (2.206)$$

Se obtiene $E_0 = \hbar\Omega/2$ usando $\sinh(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{1}{2}e^x$.

El gap Δ controla la relajación al estado fundamental. Así para una partícula libre, ec. (2.79), el comportamiento para τ grande no es exponencial sino tipo potencia, ya que el espectro $\mathbf{p}^2/2M$ no tiene un gap. (Aun así $-\frac{\hbar}{\tau} \log G_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \tau) \rightarrow E_0 = 0$.)

El estado de una partícula de masa M , $E = \sqrt{\mathbf{p}^2 + M^2}$ tiene un gap $\Delta = M$ sobre el estado vacío. En consecuencia el propagador se comporta como $e^{-\tau M}$, para τ grande. Dado que en métrica euclídea tiempo y espacio son equivalentes, el propagador va como e^{-rM} para r (distancia recorrida) grande. Esto produce la interacción tipo Yukawa por intercambio de partículas virtuales de masa M . Si $M = 0$ no hay gap y el potencial es tipo potencia (Coulomb).

El límite $\tau \rightarrow +\infty$ también proporciona la función de onda del estado fundamental. Así, para el oscilador armónico

$$G_E(x, 0; \tau) = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh(\Omega\tau)}} \exp\left[-\frac{M\Omega \cosh(\Omega\tau)}{2\hbar \sinh(\Omega\tau)} x^2\right] \quad (2.207)$$

$$\underset{\tau \rightarrow +\infty}{\sim} e^{-\Omega\tau/2} \sqrt{\frac{M\Omega}{\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{M\Omega}{2\hbar} x^2\right] = e^{-\tau E_0/\hbar} \varphi_0(x) \varphi_0^*(0),$$

es decir,

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{M\Omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{M\Omega}{2\hbar} x^2\right]. \quad (2.208)$$

En principio el método de filtrado por τ grande se puede extender al primer estado excitado, simplemente sustrayendo la contribución del estado fundamental en el propagador con lo que el primer estado excitado pasa a ser dominante. Y así sucesivamente para los demás estados. En la práctica esto no es viable a menos que se conozca el propagador de forma exacta.

Sí se puede acceder al primer estado excitado si tiene distintos números cuánticos que el fundamental, debido a alguna simetría del problema. Así, en el caso de un potencial unidimensional par, $V(-x) = V(x)$, los estados propios se clasifican en pares e impares, $\varphi_n(-x) = (-1)^n \varphi_n(x)$. Entonces,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(G_E(x, y, \tau) - G_E(-x, y, \tau)) &= \sum_{n \geq 0} \frac{1}{2}(\varphi_n(x) - \varphi_n(-x))\varphi_n^*(y)e^{-\tau E_n/\hbar} \\ &= \sum_{n \text{ impar}} \varphi_n(x)\varphi_n^*(y)e^{-\tau E_n/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.209)$$

Más generalmente, si el espacio de Hilbert se descompone como suma de espacios con distintas representaciones irreducibles μ , se puede proyectar el propagador a un sector μ y obtener el estado más bajo de ese sector. Por ejemplo, el estado más bajo de una onda parcial ℓ , si hay invariancia bajo rotaciones:

$$\int d^2 \hat{x} Y_{\ell m}^*(\hat{x}) G_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\sim} e^{-\tau E_{0,\ell}/\hbar} R_{0,\ell}(r_x) R_{0,\ell}^*(r_y) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{y}}). \quad (2.210)$$

2.10. Caminos brownianos

La integral de caminos de una partícula libre en tiempo imaginario es en realidad equivalente al llamado proceso de Wiener, estudiado por Wiener (1923) en el contexto de procesos estocásticos, concretamente para *caminantes brownianos (random walk)*. Este punto de vista arroja luz sobre la naturaleza de la integral de caminos (y al revés).

2.10.1. Movimiento browniano y ecuación de difusión

Consideremos primero el caso unidimensional. Definimos un caminante browniano como uno que se mueve por saltos aleatorios $\Delta x = \pm \lambda$, con igual probabilidad, cada $\Delta t = \epsilon$. En cada tic del reloj el caminante salta a la derecha o a la izquierda con probabilidad 1/2. El proceso de Wiener propiamente dicho se obtiene en un límite $(\lambda, \epsilon) \rightarrow (0, 0)$ adecuadamente elegido.

Si en $t = 0$ el caminante está en $x = 0$, los tiempos y posiciones permitidas son $t_N = \epsilon N$ y $x_j = j\lambda$, para $N = 0, 1, 2, \dots$ y $j \in \mathbb{Z}$ (con $|j| \leq N$ y $N - j$ par). Denotando por $p(j, N)$ la

probabilidad de hallarlo en (j, N) , se tiene

$$p(j, N) = G_B(j, N) := \begin{cases} \frac{1}{2^N} \binom{N}{\frac{N-j}{2}} & N-j \text{ par} \\ 0 & N-j \text{ impar} \end{cases}, \quad \text{si } p(j, 0) = \delta_{j,0}. \quad (2.211)$$

Evidentemente usando este resultado se puede obtener la evolución temporal de cualquier otra distribución inicial de probabilidad:

$$p(j, N) = \sum_k G_B(j-k, N)p(k, 0). \quad (2.212)$$

Es importante señalar que el camino seguido por el caminante, $x(t_j)$, es una *variable aleatoria*: en la práctica esto quiere decir que $\{x(t_j)\}_{j=0}^N$ puede generarse tirando N veces una moneda no sesgada, y en cada nueva simulación independiente se pueden obtener resultados distintos, siguiendo una distribución de probabilidad bien definida.

Volviendo al caminante inicialmente en $j = 0$, no es difícil probar que $\langle j \rangle = 0$ y $\langle j^2 \rangle = N$, es decir, la dispersión de j es $\sigma_j = \sqrt{N}$.²³ Por otro lado, usando la aproximación de Stirling

$$\log n! = n(\log n - 1) + \log(\sqrt{2\pi n}) + O(1/n), \quad (2.213)$$

se comprueba que para j^2 y N grandes y comparables,

$$\bar{G}_B(j, N) = \frac{1}{2}(G_B(j, N) + G_B(j+1, N)) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi N}} e^{-\frac{1}{2}\frac{j^2}{N}} \quad (j^2, N \rightarrow \infty \text{ con } \frac{j^2}{N} = \text{cte}). \quad (2.214)$$

Para N grande la probabilidad se reparte y (promediando entre puntos pares e impares) tiene un aspecto continuo respecto de j y concretamente gaussiano. En el límite $\epsilon \rightarrow 0$ los tiempos $t_N = N\epsilon$ tienden a formar una variable continua y lo mismo las posiciones $x_j = j\lambda$ en el límite $\lambda \rightarrow 0$. Dada una distribución (promediada) $\bar{p}(j, N)$, podemos asociar una densidad de probabilidad respecto de x :

$$1 = \sum_j \bar{p}(j, N) = \sum_j \lambda \frac{1}{\lambda} \bar{p}(j, N) \sim \int dx \rho(x, t), \quad \rho(x, t) \leftrightarrow \frac{1}{\lambda} \bar{p}(j, N). \quad (2.215)$$

Entonces (usando $N = t/\epsilon$ y $j = x/\lambda$)

$$G_B(x, t) = \sqrt{\frac{\epsilon}{2\pi\lambda^2 t}} e^{-\frac{1}{2}\frac{\epsilon x^2}{\lambda^2 t}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/(4Dt)}, \quad D := \frac{\lambda^2}{2\epsilon}. \quad (2.216)$$

²³Basta usar la identidad $(x\partial_x)^n(1+x)^N = \sum_k k^n x^k \binom{N}{k}$. El número combinatorio $\binom{N}{k}$ se anula fuera de $0 \leq k \leq N$ por $1/\Gamma(-k) = 0$, $k = 0, 1, 2, \dots$, y por tanto no es necesario especificar los límites de la suma.

D se denomina *coeficiente de difusión*. Para que en el *límite del continuo* la distribución no sea singular (plana o delta), basta elegir $\epsilon \rightarrow 0$ y $\lambda \rightarrow 0$ manteniendo D constante. La distribución está normalizada y en $t = 0$ es una delta de Dirac centrada $x = 0$.

$\rho(\mathbf{x}, t)$ representa la densidad de probabilidad de hallar al caminante en \mathbf{x} en tiempo t . A menudo un punto de vista conveniente es considerar una gran cantidad de caminantes de modo que $\rho(\mathbf{x}, t)d^d\mathbf{x}$ es proporcional al número de caminantes en el volumen $d^d\mathbf{x}$ en t .

Es interesante notar que el movimiento browniano visto a nivel macroscópico (x y t de orden 1) es continuo pero no así su velocidad:

$$v = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\lambda}{\epsilon} = O(\epsilon^{-1/2}) \rightarrow \infty. \quad (2.217)$$

El camino browniano $x(t)$ es continuo pero no diferenciable (con probabilidad 1). Si se hubiera tomado $\lambda = v\epsilon$ con v constante, los caminantes no se moverían a nivel macroscópico. En realidad, las idas y venidas hacen que el caminante avance a un ritmo proporcional a \sqrt{N} en vez de proporcional a N y hay que compensarlo con saltos más grandes $\lambda \propto \sqrt{\epsilon}$.

Veamos otra forma de deducir el resultado en el continuo. Dada una distribución de probabilidad $p(j, N)$ es inmediato calcular la nueva distribución en tiempo $N + 1$, sabiendo que $\Delta j = 1$ y $\Delta j = -1$ tienen ambos probabilidad $1/2$,

$$p(j, N + 1) = \frac{1}{2}p(j - 1, N) + \frac{1}{2}p(j + 1, N). \quad (2.218)$$

Si expresamos esta recurrencia en términos de $\rho(x, t)$ con el fin de tomar el límite al continuo²⁴

$$\rho(x, t + \epsilon) = \frac{1}{2}\rho(x - \lambda, t) + \frac{1}{2}\rho(x + \lambda, t), \quad (2.219)$$

y desarrollamos en serie de Taylor para λ y ϵ pequeños

$$(1 + \epsilon\partial_t + O(\epsilon^2))\rho(x, t) = (1 + \frac{1}{2}\lambda^2\partial_x^2 + O(\lambda^4))\rho(x, t) \quad (2.220)$$

que implica

$$\partial_t\rho(x, t) = \frac{\lambda^2}{2\epsilon}\partial_x^2\rho(x, t) + O(\epsilon) + \frac{1}{\epsilon}O(\lambda^4). \quad (2.221)$$

²⁴ $p(j, N)$ no es suave si la condición inicial es una delta (se anula en los términos con paridad incorrecta) pero podemos suponer una condición inicial suave, o bien trabajar con $\bar{p}(j, N)$. Si la distribución es suave la recurrencia tiende a suavizarla aún más.

La ecuación es no trivial o no singular cuando $\lambda \rightarrow 0$ y $\epsilon \rightarrow 0$ manteniendo D fijo. En este caso $O(\lambda^4/\epsilon) = O(\epsilon)$. La ecuación queda

$$\partial_t \rho(x, t) = D \partial_x^2 \rho(x, t). \quad (2.222)$$

Su solución con la condición de contorno $\rho(x, 0) = \delta(x)$ proporciona $G_B(x, t)$.

Este método se extiende inmediatamente al movimiento browniano en d dimensiones. En este caso, el caminante puede saltar a cualquiera de las $2d$ posiciones vecinas con igual probabilidad, y salta λ cada ϵ . Escribiendo la recurrencia en d dimensiones y tomando el límite del continuo

$$\lambda \rightarrow 0, \quad \epsilon \rightarrow 0, \quad D := \frac{\lambda^2}{2d\epsilon} = \text{cte} \quad (2.223)$$

produce

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) = D \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t), \quad (2.224)$$

que es la *ecuación de difusión* o del calor. La ecuación de difusión aparece por doquier y representa un proceso en el que la sustancia representada por la densidad ρ tiende a desparramarse o difundirse. El laplaciano hace que ρ aumente en los puntos \mathbf{x} tales que la densidad es mayor a su alrededor y viceversa, de modo que la densidad tiende a igualarse.²⁵ D controla el ritmo de difusión. (Para una sola sustancia, como aquí, D se puede eliminar mediante una elección de unidades de tiempo o espacio.) La ecuación es irreversible (no invariante bajo $t \rightarrow -t$) y de hecho $\partial_t \langle \mathbf{x}^2 \rangle = 2dD > 0$.

La solución de la ecuación de difusión con una condición de contorno tipo delta es

$$G_B(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{d/2}} e^{-\mathbf{x}^2/(4Dt)}, \quad G_B(\mathbf{x}, 0) = \delta(\mathbf{x}), \quad (2.225)$$

y la solución general es

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int G_B(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - t_0) \rho(\mathbf{y}, t_0) d^d y \quad (t > t_0). \quad (2.226)$$

$G_B(\mathbf{x}, t)$ es la función de Green retardada de la ecuación de difusión.

Para posterior referencia, notemos que el cuadrado de la distancia media recorrida por el caminante browniano es

$$\langle (\Delta \mathbf{x})^2 \rangle = 2dD\Delta t,$$

²⁵Se puede derivar a partir de la ley de Fick $\mathbf{J} = -D\nabla\rho$ (el flujo va de las zona de mayor densidad a menor) junto con la ecuación de continuidad $\partial_t\rho + \nabla\mathbf{J} = 0$ (los caminantes no desaparecen).

mientras que la variación de cada coordenada es $1/d$ de esto

$$\langle \Delta x^i \Delta x^j \rangle = 2D \Delta t \delta_{ij}.$$

Coincide con la estimación microscópica en un paso $\Delta t = \epsilon$, $\langle (\Delta \mathbf{x})^2 \rangle = \lambda^2 = 2dD\epsilon$, y $\langle \Delta x^i \Delta x^j \rangle = \lambda^2/d = 2D\epsilon \delta_{ij}$ (ya que sólo se mueve según cada eje x^i una de cada d de las veces).

También es interesante otro punto de vista. Primero notemos que la densidad de probabilidad en \mathbf{x} se puede ver como un *valor esperado*, a saber, de la función que es 1 si $\mathbf{x} \in d^d x$ y 0 en otro caso (función característica) y luego dividido por $d^d x$, o equivalentemente,

$$\rho(\mathbf{x}_f) = \langle \delta(\mathbf{x}(\tau_f) - \mathbf{x}_f) \rangle. \quad (2.227)$$

Como se ha dicho $G_B(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_i, t_f - t_i)$ es la densidad de probabilidad de hallar la partícula en (\mathbf{x}_f, t_f) si inicialmente se encontraba en (\mathbf{x}_i, t_i) . Esto se puede expresar como

$$G_B(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_i, t_f - t_i) = \mathbb{E}[\delta(\mathbf{x}(t_f) - \mathbf{x}_f) | \mathbf{x}(t_i) = \mathbf{x}_i], \quad (2.228)$$

es decir, el *valor esperado* de $\delta(\mathbf{x}(t_f) - \mathbf{x}_f)$ sobre todos los caminos brownianos $\mathbf{x}(t)$ que pasan por \mathbf{x}_i en t_i y con coeficiente de difusión D . Aquí se enfatiza que el propio camino $\mathbf{x}(t)$ es una *variable aleatoria*. Tal y como se ha construido, el proceso de Wiener es markoviano: las probabilidades asociadas a $\mathbf{x}(t)$ en tiempos $t > t_1$, sabiendo que $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}(t_1)$, son completamente independientes de la historia previa, es decir, de los valores de $\mathbf{x}(t)$ en $t < t_1$. Por tanto, el promedio sobre caminos que *empiezan* en (\mathbf{x}_i, t_i) coincide con el promedio sobre caminos que *pasan* por (\mathbf{x}_i, t_i) , de entre todos los caminos brownianos con coeficiente de difusión D iniciados en $t = -\infty$ y en todos los puntos.

2.10.2. Relación con la integral de caminos de una partícula libre

La ecuación de difusión coincide con la ecuación de Schrödinger de una partícula *libre* en tiempo imaginario. En efecto, en tiempo imaginario ($\tau = it$)

$$-\hbar \partial_\tau \psi(\mathbf{x}, \tau) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, \tau), \quad (2.229)$$

coincide con la ecuación de difusión con la identificación

$$D = \frac{\hbar}{2M}. \quad (2.230)$$

Consecuentemente las funciones de Green coinciden, ya que siguen la misma ecuación diferencial con la misma condición inicial:

$$G_{E,0}(\mathbf{x}, \tau) = \left(\frac{M}{2\pi\hbar\tau} \right)^{d/2} e^{-M\mathbf{x}^2/(2\hbar\tau)}. \quad (2.231)$$

Para la teoría browniana la identificación implica que la densidad de caminantes se puede expresar mediante una integral de caminos con extremos fijos, con el peso adecuado dado por la “energía cinética”

$$G_B(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_i, t_f - t_i) = \int_{(\mathbf{x}_i, t_i)}^{(\mathbf{x}_f, t_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{-\frac{1}{4D} \int_{t_i}^{t_f} \dot{\mathbf{x}}(t)^2 dt}. \quad (2.232)$$

La integral sobre caminos produce la densidad de probabilidad de hallar al caminante en \mathbf{x}_f en t_f si estaba en \mathbf{x}_i en t_i . El integrando define una medida en el conjunto de caminos que es la medida de Wiener:

$$d\mu_W[\mathbf{x}(t)] = \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{-\frac{1}{4D} \int \dot{\mathbf{x}}^2(t) dt}. \quad (2.233)$$

El camino browniano $\mathbf{x}(t)$ es una variable aleatoria: tirando una moneda repetidamente se genera un camino distinto cada vez con cierta probabilidad dada por $d\mu_W[\mathbf{x}(t)]$.

Por otro lado el aspecto browniano también aporta un nuevo punto de vista para la teoría cuántica. Como acabamos de ver, la *función de onda* de una partícula cuántica *libre* evolucionando en *tiempo imaginario* se puede reproducir mediante un conjunto de caminantes brownianos, ajustando el coeficiente de difusión (o equivalentemente λ y ϵ) de modo que $D = \hbar/2M$. Podemos entonces hacer la siguiente construcción: se consideran caminos aleatorios $\mathbf{x}(\tau)$ con condición inicial $\mathbf{x}(\tau_i) = \mathbf{x}_i$ fijo y extremo final *libre*, es decir, acaba donde sea que lleve el camino aleatorio en cada caso, $\mathbf{x}(\tau_f)$ es una variable aleatoria. La función de onda $\psi(\mathbf{x}_f, \tau_f) = G_{E,0}(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_i, \tau_f - \tau_i)$, para cada \mathbf{x}_f dado, no es más que la densidad de probabilidad de que el caminante se encuentre en ese \mathbf{x}_f cuando $\tau = \tau_f$. Es decir, la probabilidad infinitesimal dP de acabar en un entorno $d^d x$ de \mathbf{x}_f es $dP = \psi(\mathbf{x}_f, \tau_f) d^d x$.

La construcción que se acaba de mencionar corresponde a la función de onda con condición inicial $\psi(\mathbf{x}, \tau_i) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$. La construcción se puede generalizar para un $\psi_i(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}, \tau_i)$ cualquiera. Supongamos primero que $\psi_i(\mathbf{x})$ es una densidad de probabilidad (real no negativa y normalizada $1 = \int d^d x \psi_i(\mathbf{x})$). En este caso, simplemente se generan los caminantes en $\tau = \tau_i$ aleatoriamente de modo que muestreen esa distribución, $\mathbf{x}_i \sim \psi_i$ y se dejan evolucionar. En todo instante τ la densidad de probabilidad de caminantes en \mathbf{x} coincidirá con $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ (solución de la ecuación de Schrödinger euclídea libre con condición de contorno $\psi(\mathbf{x}, \tau_i) = \psi_i(\mathbf{x})$). En fórmulas

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}_f, \tau_f) &= \int G_{E,0}(\mathbf{x}_f, \tau_f; \mathbf{x}_i, \tau_i) \psi_i(\mathbf{x}_i) d^d x_i \\ &= \int \mathbb{E}[\delta(\mathbf{x}(\tau_f) - \mathbf{x}_f) | \mathbf{x}(\tau_i) = \mathbf{x}_i] \psi_i(\mathbf{x}_i) d^d x_i \\ &= \mathbb{E}[\delta(\mathbf{x}(\tau_f) - \mathbf{x}_f) | \mathbf{x}(\tau_i) \sim \psi_i], \end{aligned} \quad (2.234)$$

(es decir promedio sobre caminos brownianos con $D = \hbar/2M$ y con distribución ψ_i en τ_i .)

Caminantes pesados. Calcular el valor esperado indicado requiere contar el *número* de veces que el caminante acaba en $\mathbf{x} \in d^d x$ (en distintas simulaciones) o equivalentemente el *número* de caminantes que acaba en $d^d x$ en una simulación con muchos caminantes. Este número se incrementa en *una unidad* por cada nuevo evento favorable. Podemos entonces generalizar esta idea dando un peso distinto w a cada caminante, peso que puede ser complejo en general. La llegada del caminante k -ésimo a $d^d x$ aumenta la cuenta de ese elemento de volumen en w_k . Un procedimiento válido (entre otros) para calcular $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ con condición inicial $\psi(\mathbf{x}, \tau_i) = \psi_i(\mathbf{x})$ arbitraria, es el siguiente: tomar una densidad de probabilidad auxiliar $\rho_0(\mathbf{x})$, generar una muestra de caminantes distribuidos según esta densidad, $\mathbf{x}_i \sim \rho_0$, y darles a cada uno un peso $w = \psi_i(\mathbf{x}_i)/\rho_0(\mathbf{x}_i)$. Según la elección de ρ_0 , los caminantes se generarán inicialmente con más o menos probabilidad en cada punto \mathbf{x} pero eso se compensará dando al caminante un peso menor o mayor, respectivamente. El resultado final para el valor esperado no depende de la elección de ρ_0 . (Sin embargo las fluctuaciones alrededor de la media en cada simulación sí dependen. La dispersión tiende a reducirse cuanto más parecidos sean los pesos. Así, cuando $\psi_i(\mathbf{x})$ es una densidad de probabilidad lo óptimo es tomar $\rho_0 = \psi_i$.)

En fórmulas

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}_f, \tau_f) &= \int G_{E,0}(\mathbf{x}_f, \tau_f; \mathbf{x}_i, \tau_i) \psi_i(\mathbf{x}_i) d^d x_i \\ &= \int \mathbb{E}[\delta(\mathbf{x}(\tau_f) - \mathbf{x}_f) | \mathbf{x}(\tau_i) = \mathbf{x}_i] \frac{\psi_i(\mathbf{x}_i)}{\rho_0(\mathbf{x}_i)} \rho_0(\mathbf{x}_i) d^d x_i \\ &= \mathbb{E}[\delta(\mathbf{x}(\tau_f) - \mathbf{x}_f) \frac{\psi_i(\mathbf{x}(\tau_i))}{\rho_0(\mathbf{x}(\tau_i))} | \mathbf{x}(\tau_i) \sim \rho_0]. \end{aligned} \quad (2.235)$$

Inciso: evolución en tiempo real e imaginario

Según se ha visto, al menos para la partícula libre, la densidad de probabilidad browniana, $\rho(\mathbf{x}, t)$, evoluciona igual que la función de onda en tiempo imaginario, $\psi(\mathbf{x}, \tau)$. Esta densidad de probabilidad no debe confundirse con la densidad de probabilidad cuántica que es $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$, para la evolución en tiempo real.

En tiempo real e imaginario (*con o sin potencial*)

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t) &= \sum_n c_n e^{-itE_n/\hbar} \varphi_n(\mathbf{x}), & \int d^d x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 &= \sum_n |c_n|^2 = \text{cte} \\ \psi(\mathbf{x}, \tau) &= \sum_n c_n e^{-\tau E_n/\hbar} \varphi_n(\mathbf{x}), & \int d^d x |\psi(\mathbf{x}, \tau)|^2 &= \sum_n |c_n|^2 e^{-2\tau E_n/\hbar} \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\sim} |c_0|^2 e^{-2\tau E_0/\hbar} \end{aligned} \quad (2.236)$$

La evolución en tiempo imaginario es irreversible y la norma no se conserva. De hecho, para la partícula libre en tiempo euclídeo $\int d^d x \psi(\mathbf{x}, \tau) = \text{cte}$.

2.10.3. Fórmula de Feynman-Kac

Más generalmente, en presencia de un potencial, la integral de caminos expresa el propagador euclídeo como una suma de caminos $(\mathbf{x}_i, t_i) \rightarrow (\mathbf{x}_f, t_f)$ con un peso que depende de la acción

$$G_E(\mathbf{x}_f, \tau_f; \mathbf{x}_i, \tau_i) = \int_{(\mathbf{x}_i, \tau_i)}^{(\mathbf{x}_f, \tau_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(\tau) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau \left(\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}(\tau)^2 + V(\mathbf{x}(\tau), \tau) \right)} \quad (\tau_f > \tau_i). \quad (2.237)$$

Podemos definir un promedio sobre caminos pesados con la parte libre, es decir sobre caminos brownianos de tipo $D = \hbar/2M$

$$\langle F[\mathbf{x}(\tau)] \rangle_{i \rightarrow f} = \frac{\int_{(\mathbf{x}_i, \tau_i)}^{(\mathbf{x}_f, \tau_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(\tau) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}(\tau)^2} F[\mathbf{x}(\tau)]}{\int_{(\mathbf{x}_i, \tau_i)}^{(\mathbf{x}_f, \tau_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(\tau) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}(\tau)^2}} = \frac{\int_i^f d\mu_W[\mathbf{x}(\tau)] F[\mathbf{x}(\tau)]}{\int_i^f d\mu_W[\mathbf{x}(\tau)]} \quad (2.238)$$

En este caso, el propagador se escribe

$$G_E(\mathbf{x}_f, \tau_f; \mathbf{x}_i, \tau_i) = G_{E,0}(\mathbf{x}_f, \tau_f; \mathbf{x}_i, \tau_i) \left\langle e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau V(\mathbf{x}(\tau), \tau)} \right\rangle_{i \rightarrow f}. \quad (2.239)$$

Esta es la *fórmula de Feynman-Kac*. Según esta fórmula el propagador euclídeo en presencia de un potencial, difiere del libre por un factor que es el promedio de $e^{-\int d\tau V/\hbar}$ sobre caminos brownianos entre (\mathbf{x}_i, τ_i) y (\mathbf{x}_f, τ_f) . El promedio será más pequeño cuando los caminos brownianos atraviesan zonas con potencial más repulsivo y mayor cuando pasen por zonas más atractivas.²⁶

El operador de evolución euclídeo es un operador positivo, pero en general que un operador A sea positivo no implica que los elementos de matriz no diagonales de A también tengan que ser positivos (en general pueden ser complejos y dependen de la base). La fórmula de Feynman-Kac implica que el propagador euclídeo es una función positiva y esta es una propiedad específica del operador de evolución euclídeo y de la base $|\mathbf{x}\rangle$. En realidad, la positividad del propagador euclídeo ya se deducía de la fórmula de Feynman, pero la de Feynman-Kac, basada en la medida de Wiener en vez de sobre $\mathcal{D}\mathbf{x}(t)$, permite un tratamiento matemáticamente riguroso.

Una consecuencia inmediata de la positividad del propagador euclídeo es que si el estado fundamental es no degenerado, su función de onda es una función positiva (o no negativa) salvo fase. En efecto, esto se deduce de que para $\tau \rightarrow +\infty$, el propagador tiende a $e^{-E_0\tau/\hbar} \varphi_0(\mathbf{x}_f) \varphi_0^*(\mathbf{x}_i) \propto \varphi_0(\mathbf{x}_f)$.

²⁶Evidentemente todas las fórmulas con covariantes bajo un cambio de origen de energías del potencial, por tanto que V sea positivo o negativo en sí mismo no puede tener consecuencias concretas, lo que importa es si V crece o decrece al moverse de unas zonas a otras.

En el formalismo canónico se puede escribir una fórmula parecida:

$$\begin{aligned} G_E(\mathbf{x}_f, \tau_f; \mathbf{x}_i, \tau_i) &= \langle \mathbf{x}_f | T e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau H(\tau)} | \mathbf{x}_i \rangle = \langle \mathbf{x}_f | T e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau H_0(\tau)} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau V(\mathbf{x}(\tau), \tau)} | \mathbf{x}_i \rangle \\ &= G_{E,0}(\mathbf{x}_f, \tau_f; \mathbf{x}_i, \tau_i) \left\langle T e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau V(\mathbf{x}(\tau), \tau)} \right\rangle_{i \rightarrow f}, \end{aligned} \quad (2.240)$$

donde ahora

$$\langle F[\mathbf{x}(\tau)] \rangle_{i \rightarrow f} := \frac{\langle \mathbf{x}_f | T e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau H_0(\tau)} F[\mathbf{x}(\tau)] | \mathbf{x}_i \rangle}{\langle \mathbf{x}_f | T e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau H_0(\tau)} | \mathbf{x}_i \rangle}, \quad (2.241)$$

y $\mathbf{x}(\tau)$, $H_0(\tau)$ representan los operadores \mathbf{x} y H_0 insertados en tiempo τ , a efectos del operador cronológico T (no los operadores en imagen de Heisenberg, ni tampoco un camino.)

La fórmula de Feynman-Kac nos dice cómo calcular el propagador sin operadores, sólo tirando una moneda para generar los caminos brownianos (tomando ϵ suficientemente pequeño). Cada caminante que llegue a \mathbf{x}_f tiene un peso $e^{-\int d\tau V/\hbar}$ que depende del camino que haya seguido y se promedia entre ellos. Una forma de hacer esta simulación Monte Carlo es que cada caminante empiece con peso uno en \mathbf{x}_i y ese peso se actualice por un factor $e^{-\epsilon V/\hbar}$ (no hay integral) en cada paso de tiempo $d\tau = \epsilon$.²⁷ Los caminantes que pasen por zonas atractivas valdrán más y los que hayan pasado por zonas repulsivas valdrán menos. Si un caminante acaba valiendo, por ejemplo, 1.2, se puede decir que el número de caminantes no se conserva en presencia de un potencial. Eso mismo se sigue de la ecuación de Schrödinger en tiempo euclídeo:

$$\partial_\tau \psi(\mathbf{x}, \tau) = \frac{\hbar}{2M} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, \tau) - \frac{1}{\hbar} V(\mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.242)$$

Definiendo $\mathbf{J}(\mathbf{x}, \tau) = -\frac{\hbar}{2M} \nabla \psi(\mathbf{x}, \tau)$, y $\rho = \psi$, la ecuación es

$$\partial_\tau \rho(\mathbf{x}, \tau) + \nabla \mathbf{J}(\mathbf{x}, \tau) = -\frac{1}{\hbar} V(\mathbf{x}, \tau) \rho(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.243)$$

Las zonas de potencial repulsivo representan un sumidero de caminantes y las atractivas una fuente

$$\frac{d}{d\tau} \int_V d^d x \rho = - \int_{\partial V} d\mathbf{S} \mathbf{J} + \int_V d^d x \left(-\frac{1}{\hbar} V \right) \rho. \quad (2.244)$$

Más específicamente, la ecuación dice que en un paso $d\tau$ el número de caminantes en \mathbf{x} cambia por un factor $1 - \frac{d\tau}{\hbar} V(\mathbf{x}, \tau)$. Esto coincide con el factor $e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} V}$ de antes.

²⁷Recuérdese que en la integral de caminos la contribución de V es robusta frente a detalles de la discretización.

Técnicamente, el método apuntado antes de generar caminantes y actualizar sus pesos no es óptimo porque los caminos brownianos no está correlacionados con el potencial y eso implica que muchos caminantes irán por zonas prohibidas y tendrán un peso despreciable por lo que es un desperdicio usar los recursos en seguirlos. Un método más eficiente [12] es que los caminantes tengan siempre peso uno pero puedan desaparecer o por el contrario replicarse. En cada paso se genera el factor $w = e^{-\frac{\epsilon}{\hbar}V}$, si $w < 1$ el caminante es eliminado con probabilidad $1 - w$, si $1 \leq n < w < n + 1$, se crean $n - 1$ nuevos caminantes en ese mismo punto y uno más con probabilidad $w - n$. Para tiempos grandes el número total de caminantes escala como $e^{-\tau E_0/\hbar}$ y es conveniente ajustar el origen de potencial para que $E_0 = 0$, de modo que el número de caminantes no cambie en promedio.

La ec. (2.243) describe un fluido con densidad $\rho(\mathbf{x}, t)$. Más generalmente, para un fluido se tiene

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) - D\nabla\rho(\mathbf{x}, t) \quad (2.245)$$

donde $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ es un campo de velocidades que produce un término de arrastre (o deriva), frente al término de difusión. En ausencia de difusión lo que se tendría es un flujo laminar, es decir *ordenado*, de modo que si $\rho(\mathbf{x}, t_0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, para $t > t_0$ se tiene $\rho(\mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t))$, siendo $\mathbf{x}(t)$ la solución de la $\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{v}(\mathbf{x}(t), t)$ con condición inicial $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$. Por efecto de la difusión las partículas próximas tienden a separarse y la delta de Dirac pasa a una gaussiana.

Es posible añadir un término de arrastre en ec. (2.243) de modo que se puede simular $\rho(\mathbf{x}, t)$ sin pesos ni réplicas, pero construir el $\mathbf{v}(\mathbf{x}, \tau)$ apropiado requiere conocer de antemano la función de onda del estado fundamental.

Puesto que en presencia de un potencial cada caminante adquiere un peso $e^{-\int V dt/\hbar}$, la fórmula de Feynman-Kac para el propagador también se puede escribir

$$G_E(\mathbf{x}_f, \tau_f; \mathbf{x}_i, \tau_i) = \mathbb{E}[e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} V(\mathbf{x}(\tau), \tau) d\tau} \delta(\mathbf{x}(\tau_f) - \mathbf{x}_f) | \mathbf{x}(\tau_i) = \mathbf{x}_i]. \quad (2.246)$$

Si en vez del propagador ($\psi(\mathbf{x}, \tau_i) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$) se quiere obtener la función de onda $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ con una condición inicial arbitraria $\psi(\mathbf{x}, \tau_i) = \psi_i(\mathbf{x})$, se puede proceder como se indicó antes para el caso libre, generando en τ_i caminantes de acuerdo con una densidad auxiliar ρ_0 y dando inicialmente un peso distinto a cada caminante igual a ψ_i/ρ_0 . La diferencia es que ahora el peso no se mantiene constante durante la evolución sino que se actualiza de acuerdo con el factor del potencial:

$$\psi(\mathbf{x}_f, \tau_f) = \mathbb{E}[e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} V(\mathbf{x}(\tau), \tau) d\tau} \delta(\mathbf{x}(\tau_f) - \mathbf{x}_f) \frac{\psi_i(\mathbf{x}(\tau_i))}{\rho_0(\mathbf{x}(\tau_i))} | \mathbf{x}(\tau_i) \sim \rho_0]. \quad (2.247)$$

También se puede usar el siguiente método alternativo: como se vio en (2.88), el propagador de $(\mathbf{x}_i, \tau_i) \rightarrow (\mathbf{x}_f, \tau_f)$ para V es el mismo que de $(\mathbf{x}_f, \tau_i) \rightarrow (\mathbf{x}_i, \tau_f)$ para el potencial reflejado $V'(\mathbf{x}, \tau) = V(\mathbf{x}, \tau_i + \tau_f - \tau)$. Por tanto

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}_f, \tau_f) &= \int G_E(\mathbf{x}_f, \tau_f; \mathbf{x}_i, \tau_i) \psi_i(\mathbf{x}_i) d^d x_i \\ &= \int \psi_i(\mathbf{x}_i) G'_E(\mathbf{x}_i, \tau_f; \mathbf{x}_f, \tau_i) d^d x_i \\ &= E[\psi_i(\mathbf{x}(\tau_f)) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} V'(\mathbf{x}(\tau), \tau) d\tau} \mid \mathbf{x}(\tau_i) = \mathbf{x}_f].\end{aligned}\tag{2.248}$$

Es decir, $\psi(\mathbf{x}_f, \tau_f)$ se obtiene generando muchos caminantes brownianos en tiempo τ_i todos ellos en el mismo punto \mathbf{x}_f . Estos caminantes evolucionan hasta τ_f y cada uno alcanzará una posición aleatoria $\mathbf{x}(\tau_f)$. $\psi(\mathbf{x}_f, \tau_f)$ coincide con el valor esperado de $\psi_i(\mathbf{x}(\tau_f)) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} V'(\mathbf{x}(\tau), \tau) dt}$. Este método tiene la ventaja de que no involucra ninguna densidad de probabilidad auxiliar $\rho_0(\mathbf{x})$. La desventaja es que requiere una nueva simulación para cada valor de (\mathbf{x}_f, τ_f) .

Ejemplo. (Partícula en una semirrecta.) Como se vio en (2.197), para una partícula restringida a $x > 0$

$$\begin{aligned}G_E(x_f, x_i, \tau) &= (G_{E,0}(x_f, x_i, \tau) - G_{E,0}(-x_f, x_i, \tau)) \Theta(x_f) \Theta(x_i) \\ &= (G_{E,0}(x_f, x_i, \tau) - G_{E,0}(x_f, -x_i, \tau)) \Theta(x_f) \Theta(x_i).\end{aligned}\tag{2.249}$$

Esta fórmula se puede interpretar de la siguiente forma: los caminantes brownianos parten de $(x_i, 0)$ ($x_i > 0$). Los que llegan a $x < 0$ pasan a tener peso cero (por el potencial $+\infty$ en $x < 0$). Por tanto $G_E(x_f, x_i, \tau)$ es $G_{E,0}(x_f, x_i, \tau)$ quitando los caminantes que tocan $x = 0$ antes de τ . Estos son los mismos que llegarían a $x = 0$ partiendo de $x = -x_i$, de modo que una forma práctica de llevar las cuentas es poner caminantes partiendo de x_i con peso 1, y la misma cantidad partiendo de $-x_i$ con peso -1 . Aquí es importante el carácter markoviano: los caminantes que llegan a $x = 0$ desde $x > 0$ son indistinguibles (en su evolución posterior) de los que llegan desde $x < 0$.

Ejemplo. (Partícula en un potencial simétrico.) Consideremos una partícula confinada en un potencial unidimensional conservativo y simétrico, $V(x) = V(-x)$, y su propagación entre dos puntos simétricos a y $-a$. Según la fórmula de Feynman-Kac, (2.239),

$$\frac{\left\langle e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau V(x(t)) dt} \right\rangle_{(a,0) \rightarrow (-a,\tau)}}{\left\langle e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau V(x(t)) dt} \right\rangle_{(a,0) \rightarrow (a,\tau)}} = e^{+\frac{M}{2\hbar} \frac{(2a)^2}{\tau}} \frac{G_E(-a, a, \tau)}{G_E(a, a, \tau)} := F_0 F_\Delta.\tag{2.250}$$

Cada uno de los factores a la derecha tiende a 1 para $\tau \rightarrow +\infty$, F_0 por encima de 1 y F_Δ por debajo:

$$F_\Delta = \frac{G_E(-a, a, \tau)}{G_E(a, a, \tau)} = \frac{(\sum_{n \text{ par}} - \sum_{n \text{ impar}}) \varphi_n(a)^2 e^{-E_n \tau / \hbar}}{(\sum_{n \text{ par}} + \sum_{n \text{ impar}}) \varphi_n(a)^2 e^{-E_n \tau / \hbar}} < 1, \quad (2.251)$$

Además

$$F_0 \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\sim} 1 + O(\tau^{-1}), \quad F_\Delta \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\sim} 1 + O(e^{-\Delta \tau / \hbar}), \quad \Delta = E_1 - E_0. \quad (2.252)$$

Dado que la convergencia exponencial es más rápida se deduce que $F_0 F_\Delta > 1$ para τ grande, es decir,

$$\left\langle e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau V(x(t)) dt} \right\rangle_{(a,0) \rightarrow (-a,\tau)} > \left\langle e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau V(x(t)) dt} \right\rangle_{(a,0) \rightarrow (a,\tau)} \quad (\tau \rightarrow +\infty). \quad (2.253)$$

Supongamos que V presenta una barrera en $x = 0$. Se obtiene así un resultado un tanto paradójico: los caminos brownianos que empezando en a acaban en $-a$ encuentran en promedio un potencial *menor* que los que vuelven a a , aunque claramente los primeros tienen que atravesar la barrera al menos una vez (un número impar de veces) y los segundos no (cruzan la barrera un número par de veces). [Si al lector le gustan los rompecabezas puede preferir buscar la solución por sí mismo antes de seguir leyendo.]

Para aclarar qué ocurre, podemos considerar un pozo cuadrado infinito (de momento no hay barrera). Los caminos que tocan las paredes del pozo pasan a tener peso cero, y tienen peso 1 si nunca lo hacen antes de τ . La desigualdad (2.253) indica que los caminos que acaban en $-a$ tienen menos probabilidad de tocar las paredes que los que vuelven a a . Esto es razonable ya que $x = 0$ es el punto más alejado de las paredes y estar forzados a pasar por ahí reduce la probabilidad de tocar las paredes. Si ahora colocamos una barrera en $x = 0$, debe esperarse que el cociente en (2.250) disminuya (se penalice pasar por $x = 0$). Eso lo indica correctamente el factor F_Δ que decrece, ya que el gap tiende a disminuir al aumentar la barrera. [En el caso límite de barrera infinita los estados fundamental (simétrico) y primer excitado (antisimétrico) tienden a degenerarse: hay un estado fundamental a la derecha y otro a la izquierda y con igual energía.]

2.10.4. Cálculo de $It\bar{o}$

Como se vio, la invariancia gauge para la amplitud de una partícula resulta de

$$\int_i^f dt (\dot{\mathbf{x}} \mathbf{A} + c\Phi) = \int_i^f dx^\mu A_\mu \rightarrow \int_i^f dx^\mu (A_\mu - \partial_\mu \Lambda) = \int_i^f dx^\mu A_\mu - \Lambda(x_f) + \Lambda(x_i). \quad (2.254)$$

Pero esto es sólo formal, es decir, sólo verifica que se cumple una condición necesaria para la invariancia gauge, pero no constituye una condición suficiente. Para que el argumento formal realmente funcione hace falta discretizar la acción usando la regla del punto medio (u otra equivalente) en la integral de caminos:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}', t) \rightarrow \mathbf{A}\left(\frac{1}{2}(\mathbf{x}_j + \mathbf{x}_{j+1})\right). \quad (2.255)$$

El hecho de que el resultado dependa de la prescripción concreta se debe directamente a que los caminos típicos son brownianos y por tanto no suaves. A su vez esto es consecuencia de la energía cinética, que de “todos los caminos” contenidos en $\mathcal{D}\mathbf{x}(\tau)$, sólo permite los brownianos: los caminos que saltan más que $\Delta x \sim \sqrt{\Delta\tau}$ tienen tanta energía cinética que tienen peso cero en la integral de caminos.

Como ya se comentó la discretización concreta es menos relevante para el potencial escalar que para el vector debido a que el potencial vector se acopla a la velocidad y por ello es más divergente en el límite del continuo $\epsilon \rightarrow 0$. El término más divergente ultravioleta es la energía cinética y es el que fija el coeficiente de difusión $D = \hbar/2M$, es decir, cómo de poco suaves son los caminos permitidos.

La dependencia en la forma de discretizar implica una ambigüedad al definir $\int_{t_i}^{t_f} dt \dot{x}(t)F(x(t))$ siendo $x(t)$ browniano (nótese que F es una función ordinaria, no un funcional). Podemos definir

$$x_j = x(t_j), \quad t_j = t_i + j\epsilon, \quad \epsilon = \frac{t_f - t_i}{N}, \quad x_0 = x_i, \quad x_N = x_f, \quad (2.256)$$

$$\int_{x_i, \theta}^{x_f} F(x(t))dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{N-1} (x_{j+1} - x_j)F(x_j^\theta), \quad x_j^\theta = (1 - \theta)x_j + \theta x_{j+1}, \quad 0 \leq \theta \leq 1.$$

Las elecciones $\theta = 0$ y $\theta = \frac{1}{2}$ corresponden a las integrales *en el sentido de Itô* y *de Stratonovich*, respectivamente. Para un $x(t)$ suave el valor de θ no sería relevante, pero sí lo es para $x(t)$ browniano:

$$\begin{aligned} \varphi(x_f) - \varphi(x_i) &= \sum_{j=0}^{N-1} (\varphi(x_{j+1}) - \varphi(x_j)) \\ &= \sum_{j=0}^{N-1} \left(\varphi'(x_j^\theta)(x_{j+1} - x_j) + \frac{1}{2}\varphi''(x_j^\theta)(x_{j+1} - x_j)^2(1 - 2\theta) + \dots \right) \end{aligned} \quad (2.257)$$

donde se ha usado $x_j = x_j^\theta - \theta(x_{j+1} - x_j)$ y $x_{j+1} = x_j^\theta + (1 - \theta)(x_{j+1} - x_j)$. Cuando $x(t)$ es derivable, $\Delta x = O(\Delta t)$ y el segundo término tiene una contribución despreciable en el límite $N \rightarrow \infty$. Sin embargo, en el caso browniano $\Delta x^2 = 2D\Delta t$, por tanto

$$\varphi(x_f) - \varphi(x_i) = \int_{x_i, \theta}^{x_f} \frac{d\varphi(x(t))}{dx} dx + (1 - 2\theta)D \int_{t_i}^{t_f} \frac{d^2\varphi(x(t))}{dx^2} dt. \quad (2.258)$$

Si $D > 0$ sólo se recupera el resultado $\varphi(x_f) - \varphi(x_i) = \int_{x_i}^{x_f} \frac{d\varphi(x(t))}{dx} dx$ eligiendo $\theta = \frac{1}{2}$.

2.10.5. Principio de incertidumbre

El carácter browniano de $x(\tau)$ (integral de caminos en tiempo euclídeo) es el que da lugar a la no conmutación de x y p cuánticos, y a su vez al *principio de incertidumbre*. Con el fin de modelar el conmutador $[x, \dot{x}]$ ordenamos los operadores siguiendo la idea del operador cronológico

$$[x, \dot{x}] = x_{j+1} \frac{x_{j+1} - x_j}{\tau_{j+1} - \tau_j} - \frac{x_{j+1} - x_j}{\tau_{j+1} - \tau_j} x_j = \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\tau_{j+1} - \tau_j} = \frac{\Delta x^2}{\Delta \tau} = 2D = \frac{\hbar}{M}, \quad (2.259)$$

y por tanto

$$\frac{\hbar}{M} = [x, \frac{dx}{d\tau}] = [x, \frac{dx}{i dt}] = \frac{1}{iM} [x, p], \quad (2.260)$$

es decir, $[x, p] = i\hbar$. La no conmutación es consecuencia directa del efecto de difusión browniano.

2.11. Inserción de operadores y valores esperados

2.11.1. Inserción de operadores

Supongamos que queremos calcular el valor esperado de un observable A en un tiempo t_A , con $t_i < t_A < t_f$:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_{t_A} &= \langle \psi(t_A) | A | \psi(t_A) \rangle = \langle \psi_i | U(t_i, t_A) A U(t_A, t_i) | \psi_i \rangle \\ &= \langle \psi_i | U(t_i, t_f) U(t_f, t_A) A U(t_A, t_i) | \psi_i \rangle \\ &= \int \psi_i^*(\mathbf{x}'_i) \langle \mathbf{x}'_i, t_i | \mathbf{x}_f, t_f \rangle \langle \mathbf{x}_f | U(t_f, t_A) A U(t_A, t_i) | \mathbf{x}_i \rangle \psi_i(\mathbf{x}_i) d^d x'_i d^d x_f d^d x_i. \end{aligned} \quad (2.261)$$

Por conveniencia, en lugar de llegar sólo hasta t_A , se ha extendido la evolución hasta t_f . El elemento de matriz de interés es

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | A(t_A) | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \langle \mathbf{x}_f | T [e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt H(t)} A(t_A)] | \mathbf{x}_i \rangle. \quad (2.262)$$

La ordenación cronológica inserta el operador A en el tiempo t_A en el que actúa. ($A(t_A)$ no quiere decir que el operador tenga dependencia explícita en t , simplemente indica el tiempo a efectos de ordenarlo.) Más generalmente, puede haber varios operadores A_k actuando a distintos tiempos t_k y

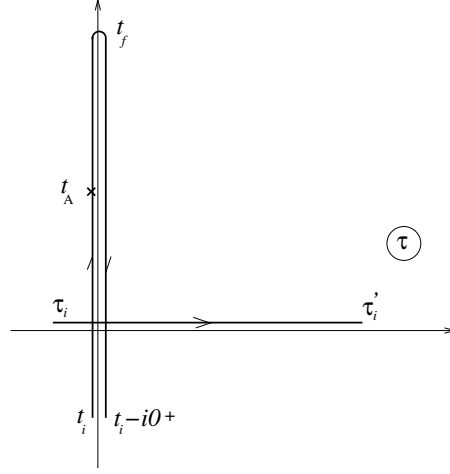


Figura 2: Recorrido de t visto en el plano complejo τ . El postulado euclídeo $\Delta\tau > 0$, requiere $\text{Im } \Delta t < 0$, de modo que entre t_i y t_i' hay un $-i\eta$ ($\eta \rightarrow 0^+$). Este recorrido se puede obtener por extensión analítica de $\tau_i \rightarrow \tau_i'$.

T se encarga de colocarlos cada uno en su tiempo:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_f, t_f | T[A_1(t_1) \cdots A_n(t_n)] | \mathbf{x}_i, t_i \rangle &= \langle \mathbf{x}_f | T \left[\prod_{k=0}^n U(t_{k+1}, t_k) \prod_{k=1}^n A_k(t_k) \right] | \mathbf{x}_i \rangle \\ &= \langle \mathbf{x}_f | T \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt H(t)} A_1(t_1) \cdots A_n(t_n) \right] | \mathbf{x}_i \rangle. \end{aligned} \quad (2.263)$$

Como vamos a ver estos elementos de matriz pueden calcularse mediante integral de caminos, y contienen toda la información sobre los operadores. Por ejemplo, se puede extraer el conmutador:

$$\begin{aligned} G_{A,B}(t_A, t_B) &:= \langle \mathbf{x}_f, t_f | T[A(t_A)B(t_B)] | \mathbf{x}_i, t_i \rangle \\ G_{A,B}(t^+, t) &= \langle \mathbf{x}_f | U(t_f, t) A(t) B(t) U(t, t_i) | \mathbf{x}_i \rangle \\ G_{A,B}(t^-, t) &= \langle \mathbf{x}_f | U(t_f, t) B(t) A(t) U(t, t_i) | \mathbf{x}_i \rangle \\ G_{A,B}(t^+, t) - G_{A,B}(t^-, t) &= \langle \mathbf{x}_f, t_f | [A, B](t) | \mathbf{x}_i, t_i \rangle. \end{aligned} \quad (2.264)$$

Un conmutador no nulo se manifiesta en una discontinuidad de salto en la función $G_{A,B}$.

2.11.2. Cálculo con integral de caminos

Consideremos el cálculo con un solo operador A insertado en tiempo t_A , ya que para más

operadores es cualitativamente igual. Como siempre dividimos $[t_i, t_f]$ en N subintervalos de tamaño ϵ . Dado que el resultado es una función continua de t_A , en el límite del continuo, $\epsilon \rightarrow 0$, se puede suponer que t_A es uno de los t_j :

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | A(t_A) | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \langle \mathbf{x}_f | U(t_f, t_f - \epsilon) \cdots U(t_A + \epsilon, t_A) A U(t_A, t_A - \epsilon) \cdots U(t_i + \epsilon, t_i) | \mathbf{x}_i \rangle. \quad (2.265)$$

A continuación se inserta una identidad $1 = \int d^d x_j | \mathbf{x}_j \rangle \langle \mathbf{x}_j |$ en cada tiempo t_j . En el caso t_A optamos por insertarlo a la derecha de A . Comparado con la integral sin A se tiene entonces

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_{j+1} | U(t_A + \epsilon, t_A) | \mathbf{x}_j \rangle &\rightarrow \langle \mathbf{x}_{j+1} | U(t_A + \epsilon, t_A) A | \mathbf{x}_j \rangle = \langle \mathbf{x}_{j+1} | U(t_A + \epsilon, t_A) | \mathbf{x}_j \rangle F_A, \\ F_A &= \frac{\langle \mathbf{x}_{j+1} | U(t_A + \epsilon, t_A) A | \mathbf{x}_j \rangle}{\langle \mathbf{x}_{j+1} | U(t_A + \epsilon, t_A) | \mathbf{x}_j \rangle} = \frac{\langle \mathbf{x}_{j+1} | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\mathbf{p}^2}{2M}} A | \mathbf{x}_j \rangle}{\langle \mathbf{x}_{j+1} | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\mathbf{p}^2}{2M}} | \mathbf{x}_j \rangle} + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (2.266)$$

Sin pérdida de generalidad se puede suponer que A es factorizable del tipo $f(\mathbf{p})h(\mathbf{x})$

$$\begin{aligned} F_A &= \frac{\int \frac{d^d p}{(2\pi\hbar)^d} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\mathbf{p}^2}{2M}} f(\mathbf{p}) h(\mathbf{x}_j)}{\int \frac{d^d p}{(2\pi\hbar)^d} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\mathbf{p}^2}{2M}}} + O(\epsilon^2) \\ &= \frac{\int \frac{d^d q}{(2\pi\hbar)^d} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\mathbf{q}^2}{2M}} f(\mathbf{q} + M \frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon}) h(\mathbf{x}_j)}{\int \frac{d^d p}{(2\pi\hbar)^d} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\mathbf{p}^2}{2M}}} + O(\epsilon^2) \\ &= \left\langle f(\mathbf{q} + M \frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon}) \right\rangle_{\mathbf{q}} h(\mathbf{x}_j) + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (2.267)$$

Éste es el factor a añadir en el integrando de la integral de caminos. Si el operador A es sólo función de \mathbf{x} basta añadir un factor $A(\mathbf{x}(t_A))$ en la integral. Si lo que se quiere es representar el operador \mathbf{p} , se obtiene

$$\mathbf{p}(t_A) \rightarrow \left\langle \mathbf{q} + M \frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon} \right\rangle_{\mathbf{q}} = M \frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon}. \quad (2.268)$$

Para la energía cinética, un cálculo similar proporciona (usando (2.114))

$$\frac{\mathbf{p}^2(t_A)}{2M} \rightarrow \left\langle \frac{1}{2M} \left(\mathbf{q} + M \frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon} \right)^2 \right\rangle_{\mathbf{q}} = \frac{M (\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{\epsilon^2} - \frac{i\hbar d}{2\epsilon}. \quad (2.269)$$

Este resultado se entiende mejor en tiempo euclídeo $i\epsilon \rightarrow \epsilon$ ($it = \tau$)

$$-\frac{M (\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{2\epsilon^2} + \frac{\hbar d}{2\epsilon}, \quad (2.270)$$

teniendo en cuenta que $\Delta \mathbf{x}^2 \sim 2dD\Delta\tau = \epsilon\hbar d/M$, lo que se tiene es un resultado del tipo $\infty - \infty$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$. La diferencia es finita y proporciona la energía cinética, sin embargo numéricamente este estimador es claramente mal comportado. Un estimador más adecuado para la energía cinética se obtiene [13] insertando los dos \mathbf{p} de $\mathbf{p}^2/2M$ uno en tiempo t_A y otro en $t_A - \epsilon$, por ejemplo. Esto proporciona la regla

$$\frac{\mathbf{p}^2(t_A)}{2M} \rightarrow \frac{M}{2} \frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)}{\epsilon} \frac{(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})}{\epsilon} \quad (2.271)$$

que ya no involucra cancelación de infinitos.

En general para varios operadores se tiene

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | T[A_1(t_1) \cdots A_n(t_n)] | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \int_{\mathbf{x}_i, t_i}^{\mathbf{x}_f, t_f} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{-W[\mathbf{x}(t)]/\hbar} A_1(t_1) \cdots A_n(t_n), \quad (2.272)$$

donde $A_k(t_k)$ se refiere a $A_k(\mathbf{x}(t_k))$ si A_k es función de \mathbf{x} o más generalmente al estimador F_A asociado. Nótese que las A_k son c -números a ambos lados de la ecuación.

2.11.3. Valores esperados en el estado fundamental

La integral de caminos en tiempo euclídeo se puede usar para calcular valores esperados de observables en el estado fundamental de un hamiltoniano conservativo. Este tipo de cálculos son especialmente útiles en teorías de campos, como una alternativa a métodos perturbativos.

Para un observable A (que suponemos independiente del tiempo)

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_f, \tau_f | A(\tau_A) | \mathbf{x}_i, \tau_i \rangle &= \langle \mathbf{x}_f | e^{-(\tau_f - \tau_A)H/\hbar} A e^{-(\tau_A - \tau_i)H/\hbar} | \mathbf{x}_i \rangle \\ &= \sum_{n, n'} e^{-(\tau_f - \tau_A)E_n/\hbar} \varphi_n(\mathbf{x}_f) \langle n | A | n' \rangle \varphi_{n'}^*(\mathbf{x}_i) e^{-(\tau_A - \tau_i)E_{n'}/\hbar} \\ &\underset{\substack{\tau_f \rightarrow +\infty \\ \tau_i \rightarrow -\infty}}{\sim} e^{-(\tau_f - \tau_i)E_0/\hbar} \varphi_0(\mathbf{x}_f) \varphi_0^*(\mathbf{x}_i) \langle 0 | A | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (2.273)$$

donde se ha supuesto que $\langle 0 | A | 0 \rangle \neq 0$ y que la función de onda del estado fundamental no se anula justamente en los puntos \mathbf{x}_i y \mathbf{x}_f elegidos. Dividiendo por la misma expresión con $A = 1$ se obtiene

$$\begin{aligned} \langle 0 | A | 0 \rangle &= \lim_{\substack{\tau_f \rightarrow +\infty \\ \tau_i \rightarrow -\infty}} \frac{\langle \mathbf{x}_f, \tau_f | A(\tau_A) | \mathbf{x}_i, \tau_i \rangle}{\langle \mathbf{x}_f, \tau_f | \mathbf{x}_i, \tau_i \rangle} \\ &= \lim_{\substack{\tau_f \rightarrow +\infty \\ \tau_i \rightarrow -\infty}} \frac{\int_{(\mathbf{x}_i, \tau_i)}^{(\mathbf{x}_f, \tau_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(\tau) e^{-W_E[\mathbf{x}(\tau)]/\hbar} A(\tau_A)}{\int_{(\mathbf{x}_i, \tau_i)}^{(\mathbf{x}_f, \tau_f)} \mathcal{D}\mathbf{x}(\tau) e^{-W_E[\mathbf{x}(\tau)]/\hbar}} := \langle A(\tau_A) \rangle_{W_E}. \end{aligned} \quad (2.274)$$

En el límite indicado de tiempos euclídeos grandes, el promedio sobre caminos no depende de la elección concreta de \mathbf{x}_i y \mathbf{x}_f ni del valor de τ_A , con tal de que τ_A se mantenga fijo en ese límite, por ejemplo se puede tomar $\tau_A = 0$. Dada esta independendencia, una elección usual es tomar $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_f$, e integrar sobre este punto para obtener la traza

$$\begin{aligned} \langle 0|A|0\rangle &= \frac{\text{tr} \left(T e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} H(\tau) d\tau} A(\tau_A) \right)}{\text{tr} \left(T e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} H(\tau) d\tau} \right)} \\ &= \frac{\int D\mathbf{x}(\tau) e^{-W_E[\mathbf{x}(\tau)]/\hbar} A(\tau_A)}{\int D\mathbf{x}(\tau) e^{-W_E[\mathbf{x}(\tau)]/\hbar}} = \langle A(\tau_A) \rangle_{W_E}, \end{aligned} \quad (2.275)$$

donde la integral es sobre caminos cerrados $\mathbf{x}(-\infty) = \mathbf{x}(+\infty)$.

El procedimiento consiste en generar caminos $\mathbf{x}(\tau)$ de i a f , pesados con $\mathcal{D}\mathbf{x}e^{-W_E/\hbar}$ (es decir, con probabilidad *proporcional* a $e^{-W_E/\hbar}$, más probables cuanto menor sea su acción). Por tanto $\mathbf{x}(\tau)$ es aquí una variable aleatoria que *muestra* la medida $\mathcal{D}\mathbf{x}e^{-W_E/\hbar}$. Para cada camino $\mathbf{x}(\tau)$ se construye el estimador $A(\tau_A)$, que es una variable aleatoria derivada, y su promedio sobre caminos proporciona $\langle 0|A|0\rangle$ para tiempo euclídeos grandes antes y después de τ_A . El motivo de que este valor esperado no dependa de las condiciones iniciales ni de τ_A es que en τ_A el camino se distribuye de acuerdo con el estado fundamental y ha perdido todo recuerdo de las condiciones en los extremos. Inicialmente el estado es $|\mathbf{x}_i\rangle = \sum_n \varphi_n^*(\mathbf{x}_i)|n\rangle$ pero después de un tiempo $\tau_1 = \hbar/\Delta$ ($\Delta = E_1 - E_0$) sólo queda el estado fundamental y lo mismo cerca de τ_f . Por tanto en el límite $\tau_f - \tau_i \rightarrow \infty$, casi todo la acción proviene de caminos termalizados con el estado fundamental.

Más concretamente, si como es frecuente A es función de \mathbf{x} , lo que se tiene es

$$\langle 0|A|0\rangle = \langle A(\mathbf{x}(\tau_A)) \rangle_{W_E}. \quad (2.276)$$

A la derecha de la ecuación se tiene el promedio sobre caminos del valor de A en $\mathbf{x}(\tau_A)$. La variable aleatoria $\mathbf{x}(\tau_A)$ tiene una cierta densidad de probabilidad $\rho(\mathbf{x})$ (independiente de A)²⁸

$$\langle A(\mathbf{x}(\tau_A)) \rangle_{W_E} = \int d^d x \rho(\mathbf{x}) A(\mathbf{x}). \quad (2.277)$$

A la izquierda se tiene el promedio cuántico en el estado fundamental que se puede escribir

$$\langle 0|A|0\rangle = \int d^d x |\varphi_0(\mathbf{x})|^2 A(\mathbf{x}). \quad (2.278)$$

²⁸Esta densidad se puede obtener considerando los valores esperados de todos los observables $A(\mathbf{x})$, o alternativamente

$$\rho(\mathbf{x}) = \langle \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}(\tau_A)) \rangle_{W_E}.$$

Se deduce que $\rho(\mathbf{x}) = |\varphi_0(\mathbf{x})|^2$. Es decir, $\mathbf{x}(\tau_A)$ (o $\mathbf{x}(\tau)$ para τ finito cualquiera) se distribuye como la densidad de probabilidad cuántica del estado fundamental.

Se puede proceder de manera alternativa, generando caminos brownianos, es decir, haciendo sólo un muestreo de la energía cinética, e incluir el efecto del potencial como un peso extra:

$$\langle 0|A|0\rangle = \lim_{\substack{\tau_f \rightarrow +\infty \\ \tau_i \rightarrow -\infty}} \frac{\int_i^f d\mu_W e^{-\int_i^f d\tau V/\hbar} A(\mathbf{x}(\tau_A))}{\int_i^f d\mu_W e^{-\int_i^f d\tau V/\hbar}} = \frac{\left\langle e^{-\int_i^f d\tau V/\hbar} A(\mathbf{x}(\tau_A)) \right\rangle_{W_{E,0}}}{\left\langle e^{-\int_i^f d\tau V/\hbar} \right\rangle_{W_{E,0}}}. \quad (2.279)$$

(Este método es menos eficiente que un muestreo directo de $D\mathbf{x}e^{-W_E/\hbar}$, y esto es general para todos los métodos Monte Carlo, ec. (2.292).)

Por lo que hemos visto, después de pesar cada caminante con $e^{-\int d\tau V/\hbar}$, $\mathbf{x}(\tau_A)$ se distribuye de acuerdo con $|\varphi_0(\mathbf{x})|^2$. En cambio, según la fórmula de Feynman-Kac la variable aleatoria $\mathbf{x}(\tau_f)$ pesada con $e^{-\int d\tau V/\hbar}$ se distribuye de acuerdo con $\varphi_0(\mathbf{x})$ para τ_f grande. La diferencia entre ambos resultados reside en que el segundo caso es del tipo (se puede reformular como) $\tau_i \rightarrow \tau_A$, con τ_A finito y $\tau_i \rightarrow -\infty$, en cambio en el primero $\tau_i \rightarrow \tau_A \rightarrow \tau_f$ con $\tau_i \rightarrow -\infty$ y $\tau_f \rightarrow +\infty$. En Feynman-Kac ($\tau_i \rightarrow \tau_A$) se mide en τ_A y el peso $e^{-\int d\tau V/\hbar}$ sólo incluye la historia del camino hasta τ_A . En el otro caso ($\tau_i \rightarrow \tau_A \rightarrow \tau_f$) también se mide $\mathbf{x}(\tau)$ en τ_A pero el peso $e^{-\int d\tau V/\hbar}$ incluye el camino completo (*antes y después* de τ_A). El factor adicional del camino después de τ_A da lugar al factor $\varphi_0^*(\mathbf{x})$ extra. (En general, bajo rotación de Wick, la propagación hasta t_A da la función de onda y la propagación después de t_A da la función de onda conjugada.)

Según el argumento que se acaba de dar, cuando $V = 0$ (o constante) el peso $e^{-\int d\tau V/\hbar} = 1$ no distinguiría entre $\tau_i \rightarrow \tau_A \rightarrow \tau_f$ y $\tau_i \rightarrow \tau_A$, y por tanto φ_0 y $|\varphi_0|^2$ deberían llevar a la misma distribución de la variable \mathbf{x} . Esto es efectivamente así ya que para la partícula libre el estado fundamental es una función constante correspondiente al estado de momento 0.

Para calcular la energía del estado fundamental (una vez fijado el origen de energías), en principio bastaría calcular $\int D\mathbf{x}e^{-W_E/\hbar}$ con extremos fijos y $\tau_f - \tau_i \rightarrow +\infty$, ya que ese propagador se comporta como $e^{-(\tau_f - \tau_i)E_0/\hbar}$. Sin embargo, el cálculo numérico de una integral en muchas dimensiones requiere un método Monte Carlo y éste sólo es práctico para obtener *promedios* (cocientes de integrales), más que los valores de las integrales en términos absolutos. Lo más práctico es utilizar la relación

$$E_0 = \langle 0|H|0\rangle = \langle 0 \left| \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{x}) \right) |0\rangle. \quad (2.280)$$

El cálculo del valor esperado de energía cinética se puede reducir al de un operador dependiente de

\mathbf{x} mediante el teorema del virial: Para un estado $|\psi\rangle$ que sea *propio* de H

$$\left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{2M} \right\rangle_\psi = \left\langle \frac{1}{2} \mathbf{x} \cdot \nabla V(\mathbf{x}) \right\rangle_\psi. \quad (2.281)$$

En efecto, la ecuación de autovalores de H se puede obtener de

$$\delta \langle H \rangle_\psi = 0, \quad (2.282)$$

para una variación arbitraria de $|\psi\rangle$. En particular tomando $\psi(\mathbf{x}) \rightarrow \psi(\lambda \mathbf{x})$:

$$\langle H \rangle_{\psi_\lambda} = \lambda^2 \langle K \rangle_\psi + \langle V(\lambda^{-1} \mathbf{x}) \rangle_\psi, \quad 0 = \frac{d}{d\lambda} \langle H \rangle_{\psi_\lambda} \Big|_{\lambda=1} = 2 \langle K \rangle_\psi - \langle \mathbf{x} \cdot \nabla V(\mathbf{x}) \rangle_\psi. \quad (2.283)$$

Para obtener la energía del primer estado excitado, un método es buscar un operador tal que $\langle 0|A|0\rangle = 0$ (pero $\langle 1|A|0\rangle \neq 0$). En este caso se calcula con la integral de caminos

$$\frac{\langle \mathbf{x}_f, \tau_f | T[A(\tau)A(0)] | \mathbf{x}_i, \tau_i \rangle}{\langle \mathbf{x}_f, \tau_f | \mathbf{x}_i, \tau_i \rangle} = \frac{\int_{(\mathbf{x}_i, \tau_i)}^{(\mathbf{x}_f, \tau_f)} D\mathbf{x}(\tau) e^{-W_E[\mathbf{x}(\tau)]/\hbar} A(\tau)A(0)}{\int_{(\mathbf{x}_i, \tau_i)}^{(\mathbf{x}_f, \tau_f)} D\mathbf{x}(\tau) e^{-W_E[\mathbf{x}(\tau)]/\hbar}} = \langle A(\tau)A(0) \rangle_{W_E}. \quad (2.284)$$

Nos interesa el límite $\tau_i \rightarrow -\infty$, $\tau_f \rightarrow +\infty$, y $\tau > 0$. Por dominancia del estado fundamental

$$\begin{aligned} \langle A(\tau)A(0) \rangle_{W_E} &= \lim_{\substack{\tau_f \rightarrow +\infty \\ \tau_i \rightarrow -\infty}} \frac{\langle \mathbf{x}_f | e^{-(\tau_f - \tau)H/\hbar} A e^{-\tau H/\hbar} A e^{\tau_i H/\hbar} | \mathbf{x}_i \rangle}{\langle \mathbf{x}_f | e^{-(\tau_f - \tau)H/\hbar} e^{-\tau H/\hbar} e^{\tau_i H/\hbar} | \mathbf{x}_i \rangle} \\ &= \lim_{\substack{\tau_f \rightarrow +\infty \\ \tau_i \rightarrow -\infty}} \frac{\langle \mathbf{x}_f | e^{-(\tau_f - \tau)H/\hbar} | 0 \rangle \langle 0 | A e^{-\tau H/\hbar} A | 0 \rangle \langle 0 | e^{\tau_i H/\hbar} | \mathbf{x}_i \rangle}{\langle \mathbf{x}_f | e^{-(\tau_f - \tau)H/\hbar} | 0 \rangle \langle 0 | e^{-\tau H/\hbar} | 0 \rangle \langle 0 | e^{\tau_i H/\hbar} | \mathbf{x}_i \rangle} \\ &= \frac{\langle 0 | A e^{-\tau H/\hbar} A | 0 \rangle}{\langle 0 | e^{-\tau H/\hbar} | 0 \rangle}. \end{aligned} \quad (2.285)$$

Insertando de nuevo un conjunto completo de estados y tomando ahora el límite $\tau \rightarrow +\infty$

$$\langle A(\tau)A(0) \rangle_{W_E} = \sum_n |\langle 0|A|n\rangle|^2 e^{-\tau(E_n - E_0)/\hbar} \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\sim} |\langle 1|A|0\rangle|^2 e^{-\tau(E_1 - E_0)/\hbar}. \quad (2.286)$$

De aquí se extrae $E_1 - E_0$. En principio, esto se puede hacer siempre usando cualquier operador A' y tomando $A = A' - \langle 0|A'|0\rangle$ (donde $\langle 0|A'|0\rangle$ se ha obtenido previamente). Por construcción este operador cumple $\langle 0|A|0\rangle = 0$ y el primer estado excitado pasa a ser dominante. Sin embargo, en cálculos numéricos la sustracción no será exacta y el estado fundamental todavía tendrá una gran influencia.

En la práctica el método es eficiente si H tiene una simetría, de modo que $|0\rangle$ y $|1\rangle$ caen en distintas representaciones irreducibles, conectadas por A . Por ejemplo, para un potencial unidimensional par, el operador $A = x$ cumple estas condiciones. Más generalmente, para estudiar un observable asociado a un estado que no sea el vacío (por ejemplo la propagación de un nucleón en QCD) es necesario *crear* ese estado previamente actuando sobre el vacío con un operador que tenga los números cuánticos apropiados.

2.12. Método Monte Carlo

Para calcular la integral de caminos se introduce una discretización de modo que el camino $\mathbf{x}(t)$ se aproxima por un vector en \mathbb{R}^n (con $n = dN$). Si además se trabaja en tiempo euclídeo, el peso $e^{-W_E/\hbar}$ es no negativo (al menos para el caso de partículas interaccionando con un potencial).

Si denotamos por \mathbf{x} el vector en \mathbb{R}^n que representa un camino completo, por $w(\mathbf{x})$ el peso positivo y $A(\mathbf{x})$ los observables, el cálculo de valores esperados toma la forma

$$\langle A \rangle_w = \frac{\int d^n x w(\mathbf{x}) A(\mathbf{x})}{\int d^n x w(\mathbf{x})} = \int d^n x \rho(\mathbf{x}) A(\mathbf{x}), \quad \rho(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mathcal{N}} w(\mathbf{x}), \quad \mathcal{N} = \int d^n x w(\mathbf{x}). \quad (2.287)$$

ρ es el peso normalizado. En general las integrales están restringidas a regiones $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ de valores aceptables de \mathbf{x} , pero podemos trabajar en \mathbb{R}^n a base de poner a cero el peso $w(\mathbf{x})$ fuera de Ω . En realidad $\int d^n x w(\mathbf{x})$ no es conocido casi nunca, y se debe trabajar con $w(\mathbf{x})$ directamente.

Ejemplo. Cómo estimar el volumen de una región $\Omega \subset [0, L]^n$ mediante Monte Carlo. Se genera una gran número N de puntos \mathbf{x}_k equidistribuidos en $[0, L]^n$. En este caso

$$\frac{\text{Vol}(\Omega)}{L^n} \approx \frac{\text{núm}(\mathbf{x} \in \Omega)}{N}. \quad (2.288)$$

El error relativo de la estimación mejora con N como $1/\sqrt{N}$.

2.12.1. Método Monte Carlo

El método Monte Carlo (Ulam, Von Neumann) se basa en tratar $\rho(\mathbf{x})$ como una densidad de probabilidad y construir una variable aleatoria \mathbf{x} distribuida de acuerdo con ρ , $\mathbf{x} \sim \rho$. Que \mathbf{x} esté distribuida según ρ quiere decir que

$$\forall \Omega \subset \mathbb{R}^n \quad \text{Prob}(\mathbf{x} \in \Omega) = \int_{\Omega} d^n x \rho(\mathbf{x}) = \int d^n x \rho(\mathbf{x}) \Theta(\mathbf{x} \in \Omega), \quad (2.289)$$

o dicho de otra forma, el número de veces que la variable \mathbf{x} toma un valor \mathbf{x}_1 frente a otro valor \mathbf{x}_2 debe estar precisamente en la proporción $\rho(\mathbf{x}_1)/\rho(\mathbf{x}_2) = w(\mathbf{x}_1)/w(\mathbf{x}_2)$.

Por construcción la esperanza matemática de $A(\mathbf{x})$ sobre \mathbf{x} así generado coincide con $\langle A \rangle_\rho$. Para estimar ese valor esperado se generan N copias²⁹ estadísticamente independientes de $\mathbf{x} \sim \rho$, $\{\mathbf{x}_k\}_{k=1}^N$, de modo que con probabilidad 1

$$\langle A \rangle_\rho = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N A(\mathbf{x}_k). \quad (2.290)$$

Por el teorema del límite central, para N finito pero grande la media aritmética es una variable aleatoria con distribución que tiende a una gaussiana centrada en $\langle A \rangle_\rho$ y con anchura que decrece como $1/\sqrt{N}$:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N A(\mathbf{x}_k) = \langle A \rangle_\rho \pm \frac{\sigma_A}{\sqrt{N}}, \quad (2.291)$$

donde $\sigma_A^2 = \langle A^2 \rangle_\rho - \langle A \rangle_\rho^2 = \langle (A - \langle A \rangle_\rho)^2 \rangle_\rho$.

El ritmo de convergencia es más bien lento, ya que por ejemplo para reducir el error en un factor 10 hay que multiplicar el número de puntos muestrales por 100. En comparación, una integral con el método de Simpson tiene error $O(h^4)$ y por tanto el error disminuye como N^{-4} con el número de puntos. Sin embargo, la comparación cambia cuando se trata de una integral multidimensional. Así en n dimensiones, si se usa un Simpson con N_1 puntos en cada dirección, el error irá como $O(h^4) = O(N_1^{-4})$ y el número de puntos total irá como $N = N_1^n$, por tanto el error escala como $O(N^{-4/n})$. Para n grande este error disminuye a un ritmo extraordinariamente lento al aumentar N , mientras que para el método Monte Carlo sigue siendo $O(N^{-1/2})$ en todo caso. En un caso típico de QCD en una red 16^4 , el número de dimensiones es $d = (3 \times 3 \times 4 \times 2 + 8 \times 4) \times 16^4 = 6815744$.

2.12.2. Muestreo de distribuciones

Hay varias técnicas para generar puntos \mathbf{x}_k distribuidos según un w dado. Todas ellas requieren tener un generador de números aleatorios con distribución uniforme en el intervalo $(0, 1)$, $x \sim U(0, 1)$ (o se pueden reducir a dicho generador). En la práctica esto se consigue de forma aproximada, usando números pseudoaleatorios generados por un ordenador.

Si se sabe muestrear una distribución $w_0(\mathbf{x})$ parecida a $w(\mathbf{x})$, un método Monte Carlo mixto es

²⁹Este N no está relacionado con el $N =$ número de subintervalos de la integral de caminos

el siguiente

$$\langle A \rangle = \frac{\int d^n x w A}{\int d^n x w} = \frac{\int d^n x w_0 (w/w_0) A}{\int d^n x w_0 (w/w_0)} = \frac{\langle (w/w_0) A \rangle_0}{\langle (w/w_0) \rangle_0}. \quad (2.292)$$

El problema de este método es que pone los puntos según ρ_0 no ρ y eso debe compensarlo con pesos w/w_0 que pueden ser muy variados (muy grandes cuando \mathbf{x} sea relevante para w pero no para w_0 y muy pequeños en el caso contrario). Como consecuencia la dispersión en numerador y denominador son muy grandes y se pierde toda la señal sobre el fondo. Sólo es útil cuando se puede ajustar w_0 para que se parezca mucho a w (*problema de muestreo relevante*).³⁰

La técnica más directa para generar $\mathbf{x} \sim w$ es la de *aceptación/rechazo*. Supongamos que el soporte de $w(\mathbf{x})$ está contenido en el hipercubo $[0, L]^n$ y que $\max_{\mathbf{x}} w < K$. Entonces, podemos generar puntos uniformemente en $[0, L]^n \times [0, K] \ni (\mathbf{x}, t)$. El punto \mathbf{x} es aceptado si y sólo si $t < w(\mathbf{x})$. [Para obtener t generamos $u_t \sim U(0, 1)$ y tomamos $t = u_t K$. Para las otras coordenadas se hace análogamente, usando n variables $u_i \sim U(0, 1)$ independientes y $x^i = u_i L$.] Los puntos \mathbf{x} así obtenidos están distribuidos según w . El problema con este método (incluso después de mejoras obvias, a saber, mejorar la base y mejorar la altura) es que generalmente w varía enormemente, por muchos órdenes de magnitud, de un punto a otro, de modo que incluso en el caso óptimo $K = \max_{\mathbf{x}} w$, la inmensa mayoría de puntos son rechazados y el método es muy ineficiente: hace falta hacer muchas llamadas a $w(\mathbf{x})$ para generar unos pocos puntos válidos, N es pequeño.

Si $w(\mathbf{x})$ es *separable* se puede generar cada coordenada por separado y equivale a n problemas unidimensionales. Para una $w(x)$ en una dimensión lo más eficiente es hacer un cambio de variable $x = x(y)$ de modo que $y \sim U(0, 1)$. Específicamente $y(x) = \int_{-\infty}^x dx' \rho(x')$.

$$\frac{dy}{dx} = \rho, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} A(x) \rho(x) dx = \int_0^1 A(x(y)) dy. \quad (2.293)$$

Ejemplo. Elegir entre n opciones con probabilidades p_i , $i = 1, \dots, N$. Para ello se genera $u \sim U(0, 1)$ y se elige la opción i -ésima si $\sum_{j < i} p_j < u < \sum_{j \leq i} p_j$.

Ejemplo. Generar puntos \mathbf{x} equidistribuidos en una bola n -dimensional de radio R . Para ello se generan n números $u_i \sim U(0, 1)$ independientes. La componente i -ésima de \mathbf{x} es $x^i = (2u_i - 1)R$. Ahora \mathbf{x} está equidistribuido en el hipercubo $[-R, R]^n$. Finalmente, nos quedamos sólo con aquellos \mathbf{x} tales que $\mathbf{x}^2 < R^2$.

Ejemplo. Generar variables gaussianas con $\langle x \rangle = 0$ y $\langle x^2 \rangle = 1$. La distribución es $\rho(x) = (2\pi)^{-1/2} e^{-x^2/2}$. Se puede usar el método de Box-Muller que consiste en generar un par de variables

³⁰Cuando el peso w es complejo a menudo se usa esta técnica con $w_0 = |w|$, ya que el método Monte Carlo puro no puede usarse.

$(x, y) \sim (2\pi)^{-1}e^{-(x^2+y^2)/2}$ y pasar a coordenadas polares (r, ϕ) :

$$1 = \int \frac{dx dy}{2\pi} e^{-(x^2+y^2)/2} = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \int_0^\infty dr r e^{-r^2/2} = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \int_0^\infty de^{-r^2/2} = \int_0^1 du_\phi \int_0^1 du_r \quad (2.294)$$

con $u_\phi = \phi/2\pi$ y $u_r = e^{-r^2/2}$. Por tanto, generando dos números u_ϕ y u_r equidistribuidos en $(0, 1)$

$$x = \cos(2\pi u_\phi) \sqrt{-2 \log u_r}, \quad y = \sin(2\pi u_\phi) \sqrt{-2 \log u_r}. \quad (2.295)$$

Ejemplo. Volumen de una esfera n -dimensional inscrita en un cubo de volumen unidad. Primero calculamos el ángulo sólido n -dimensional:

$$(2\pi)^{n/2} = \int d^n x e^{-x^2/2} = S_{n-1} \int_0^\infty dr r^{n-1} e^{-r^2/2} = S_{n-1} \Gamma(\frac{n}{2}) 2^{\frac{n}{2}-1}, \quad S_{n-1} = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2})}. \quad (2.296)$$

Entonces para el volumen de la esfera de radio $\frac{1}{2}$:

$$V = \int d^n x \Theta(\frac{n}{2} - |\mathbf{x}|) = S_{n-1} \int_0^{1/2} dr r^{n-1} = \frac{S_{n-1}}{n 2^n} = \frac{(\pi/4)^{n/2}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)}. \quad (2.297)$$

Como se ve de la expresión, el volumen ocupado por la esfera disminuye muy rápidamente a medida que la dimensión aumenta, lo cual ilustra la necesidad de hacer un muestreo relevante.

2.12.3. Métodos markovianos

Para w multidimensional general se suelen usar métodos de tipo *markoviano*. La idea es generar un caminante $\mathbf{x}(t)$ que recorra \mathbb{R}^n ergódicamente, es decir, que a la larga el tiempo que se pasa en una región $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ cualquiera sea proporcional a $\text{Prob}(\Omega) = \int_\Omega d^n \rho(\mathbf{x})$. Se cambia el promedio sobre \mathbf{x} por un promedio temporal:

$$\langle A \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt A(\mathbf{x}(t)). \quad (2.298)$$

En la mayor parte de las implementaciones el tiempo es una variable discreta, k , y el caminante pasa sucesivamente por puntos $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k, \dots$. El salto $\mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x}_{k+1}$ se rige por cierta regla aleatoria prefijada

$$\text{Prob}(\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{y} | \mathbf{x}_k = \mathbf{x}) = W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}). \quad (2.299)$$

$W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ es la (densidad de) probabilidad de saltar a \mathbf{y} si en tiempo k el caminante estaba en \mathbf{x} y evidentemente W_k debe estar normalizada y ser no negativa

$$\int d^n y W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = 1, \quad W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \geq 0. \quad (2.300)$$

A menudo la función W_k no depende k . El adjetivo markoviano se refiere a que la probabilidad de $\mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x}_{k+1}$ no depende de la historia anterior, es decir, depende sólo del valor de \mathbf{x}_k y no de los \mathbf{x}_j , $j < k$. Estos son los procesos más sencillos y mejor estudiados.

Eligiendo W_k adecuadamente se consigue que a la larga $\mathbf{x} \sim w$. Es decir, si $\rho_k(\mathbf{x})$ indica la distribución de caminantes a tiempo k ,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \rho_k(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}) \quad (2.301)$$

en sentido de valores esperados (débil). Generalmente, se empieza con un caminante generado con una distribución ρ_1 que no se parece a ρ , por lo que hay que esperar un cierto número de pasos k_0 hasta que la distribución se termalice a la de equilibrio, ρ . Después de este periodo transitorio se tiene $\mathbf{x}_{k_0} \sim \rho$. Los siguientes puntos también están distribuidos según ρ pero no son independientes de \mathbf{x}_{k_0} (no se han olvidado de esa posición) hasta pasado un cierto número de pasos r , denominado *tiempo de autocorrelación*. Ese tiempo hay que dejarlo entre cada dos medidas para que los valores sean independientes.³¹ De este modo

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N A(\mathbf{x}_{k_0+rj}) \pm \frac{\sigma_A}{\sqrt{N}}. \quad (2.302)$$

Para estimar el tiempo de relajación al equilibrio, k_0 , se puede empezar con distribuciones varias ρ_1 muy distintas entre sí y ver cuánto tardan en termalizarse a valores parecidos de los observables. Para estimar el tiempo de autocorrelación r se puede estudiar el comportamiento de estimadores contruidos con \mathbf{x} . Por ejemplo (suponiendo que las distintas componentes tienen la misma naturaleza)

$$C(t) = \frac{\sum_i x_k^i x_{k+t}^i}{n} - \frac{\sum_i x_k^i}{n} \frac{\sum_i x_{k+t}^i}{n} \sim C(0)e^{-t/r}, \quad (2.303)$$

donde x^i indica la componente i -ésima de \mathbf{x} . Alternativamente, se puede considerar una colectividad de caminantes (independientes) y estudiar

$$C^{ij}(t) = \overline{x_k^i x_{k+t}^j} - \overline{x_k^i} \overline{x_{k+t}^j} \sim C^{ij}(0)e^{-t/r}, \quad (2.304)$$

³¹Usar N puntos seguidos no introduce un sesgo en el resultado (es decir, no modifica el valor esperado) pero como sólo N/r puntos son realmente independientes el error va como $\sqrt{r/N}$ en vez de $1/\sqrt{N}$.

donde la barra horizontal indica promedio sobre caminantes de la colectividad. Después de un tiempo $t > r$ los valores de \mathbf{x} en tiempos k y $k + t$ dejan de estar correlacionados.

Los valores de k_0 y r dependen de la elección de $W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ y conviene elegir esta función para minimizar sus valores, y al mismo tiempo que generar cada nuevo punto sea lo menos costoso posible en tiempo de computación.

Para que a la larga el proceso markoviano muestree una ρ dada, hay dos condiciones claramente necesarias:

- a) La función $W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ debe ser tal que en principio el caminante pueda ir (enlazando saltos) desde cualquier punto del soporte de $w(\mathbf{x})$ a cualquier otro.
- b) En cada nuevo paso $\mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x}_{k+1}$, la distribución de \mathbf{x} se actualiza de $\rho_k(\mathbf{x})$ a $\rho_{k+1}(\mathbf{x})$:

$$\rho_{k+1}(\mathbf{y}) = \int W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \rho_k(\mathbf{x}) d^n x. \quad (2.305)$$

Entonces, si en algún momento la colectividad de caminantes está distribuida según $\rho(\mathbf{x})$, su distribución no debe cambiar en tiempos posteriores. Es decir,

$$\int W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) d^n x = \rho(\mathbf{y}). \quad (2.306)$$

Notablemente estas condiciones también son suficientes para que se satisfaga (2.301) [14].

Es relativamente fácil probar que cada paso markoviano acerca ρ_k a ρ :

$$\begin{aligned} \|\rho_{k+1} - \rho\| &:= \int d^n y |\rho_{k+1}(\mathbf{y}) - \rho(\mathbf{y})| = \int d^n y \left| \int d^n x W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) (\rho_k(\mathbf{x}) - \rho(\mathbf{x})) \right| \\ &\leq \int d^n y \int d^n x W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) |\rho_k(\mathbf{x}) - \rho(\mathbf{x})| = \int d^n x |\rho_k(\mathbf{x}) - \rho(\mathbf{x})| \\ &= \|\rho_k - \rho\|. \end{aligned} \quad (2.307)$$

Una forma práctica de garantizar que W deja invariante ρ es imponer la *condición de balance detallado*

$$W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) = W_k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rho(\mathbf{y}), \quad (2.308)$$

que implica (2.306) usando (2.300). La misma ecuación se puede escribir usando $w(\mathbf{x})$ y equivale a decir que $F_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \equiv W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \rho(\mathbf{x})$ es una función simétrica.

2.12.4. Algoritmo de Metropolis

Este método fue inventado por Rosenbluth para aplicarlo a la distribución de Boltzmann y extendido a una distribución general por Hastings. Tiene la virtud de que es muy flexible ya que no requiere propiedades específicas de $w(\mathbf{x})$, sólo saber calcular esta función en cada punto que se pida.

Para aplicar el método se necesita una densidad de probabilidad *auxiliar* $Q_k(\mathbf{z}, \mathbf{x})$ (no negativa y normalizada respecto de \mathbf{z}). Esta probabilidad dice cómo proponer un *candidato* \mathbf{z} a la nueva posición del caminante cuando éste se encuentra en \mathbf{x} . No debe confundirse $Q_k(\mathbf{z}, \mathbf{x})$ con la función $W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})$. Esta última se construye indirectamente mediante el algoritmo de Metropolis y no se necesita en forma explícita.

Dadas las funciones $Q_k(\mathbf{z}, \mathbf{x})$ y $w(\mathbf{x})$, el algoritmo de Metropolis para actualizar el valor de \mathbf{x}_k al siguiente valor en la cadena markoviana, \mathbf{x}_{k+1} , es:

1) Dado \mathbf{x}_k se genera una propuesta \mathbf{z} con $Q_k(\mathbf{z}, \mathbf{x}_k)$, y se genera un número aleatorio $u \sim U(0, 1)$.

2) Se actualiza la posición de acuerdo con la regla

$$\mathbf{x}_{k+1} = \begin{cases} \mathbf{x}_k, & \text{si } w(\mathbf{z}) < u w(\mathbf{x}_k) \quad (\text{la propuesta es rechazada}) \\ \mathbf{z}, & \text{si } w(\mathbf{z}) > u w(\mathbf{x}_k) \quad (\text{la propuesta es aceptada}) \end{cases} \quad (2.309)$$

Equivalentemente se puede decir que si $w(\mathbf{z}) > w(\mathbf{x}_k)$ (\mathbf{z} es “más probable” que \mathbf{x}_k) el nuevo punto se acepta inmediatamente, en caso contrario se acepta con probabilidad $w(\mathbf{z})/w(\mathbf{x}_k)$.³² Por supuesto, “más probable” es una forma de hablar, ya que la relación $w(\mathbf{z}) \gtrless w(\mathbf{x})$, para los mismos puntos \mathbf{z} y \mathbf{x} depende del sistema de coordenadas.

La función $Q_k(\mathbf{z}, \mathbf{x})$ se puede elegir de muchas formas con tal de que satisfaga las dos condiciones siguientes:

- a) (*irreducibilidad*) que la función $Q_k(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ sea tal que mediante saltos sucesivos se pueda llegar a cualquier punto del soporte de la función $w(\mathbf{x})$, y
- b) (*simetría*) que la función $Q_k(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ sea simétrica

$$Q_k(\mathbf{z}, \mathbf{x}) = Q_k(\mathbf{x}, \mathbf{z}). \quad (2.310)$$

³²Es importante enfatizar que cuando el candidato es rechazado, el nuevo punto \mathbf{x}_{k+1} coincide con \mathbf{x}_k . Esto *no es lo mismo* que volver a generar nuevos candidatos hasta que uno sea aceptado y tomarlo como el nuevo \mathbf{x}_{k+1} . Esta otra prescripción no produce una cadena markoviana con $\mathbf{x} \sim \rho$, sino que se estabiliza a otra distribución de equilibrio ρ' que depende de la elección de Q_k , y por tanto produce valores esperados incorrectos.

Es decir, la probabilidad de proponer \mathbf{z} estando en \mathbf{x} debe ser igual a la de proponer \mathbf{x} estando en \mathbf{z} .

Por ejemplo, una Q_k válida es un salto aleatorio dentro de una bola de radio R

$$Q_k(\mathbf{z}, \mathbf{x}) \propto \Theta(R - \|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|). \quad (2.311)$$

Una elección típica es un salto gaussiano de tamaño R a elegir. Con cualquier elección, la función Q_k producirá un cierto salto típico $\|\mathbf{z} - \mathbf{x}\| \sim R$. Aunque teóricamente el método converge en todo caso, si el valor de R se toma demasiado pequeño, y el caminante está lejos de la zona relevante, los candidatos serán aceptados pero el caminante tardará mucho en recorrer la distribución para poder muestrearla. Si por el contrario R es demasiado grande y el caminante ya está en la zona relevante, los candidatos serán casi siempre rechazados y el caminante se moverá poco, lo que también dificulta que explore la función $w(\mathbf{x})$. Más importante, en ambos casos el tiempo de autocorrelación será grande. Para la eficiencia del método es necesario que R se ajuste de modo que la proporción de candidatos aceptados esté lejos de 0% o 100%. Un valor típico es ajustar la proporción de aceptación/rechazo al 50% (o a un valor más adecuado haciendo las pruebas necesarias).

La función $W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ construida mediante el algoritmo de Metropolis es

$$W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \int_0^1 du \int d^n z Q_k(\mathbf{z}, \mathbf{x}) \left[\Theta(uw(\mathbf{x}) - w(\mathbf{z}))\delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \Theta(w(\mathbf{z}) - uw(\mathbf{x}))\delta(\mathbf{y} - \mathbf{z}) \right]. \quad (2.312)$$

Es inmediato que $\int d^n y W_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = 1$ por $\int d^n y \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) = 1$ y $\Theta(x) + \Theta(-x) = 1$. También satisface balance detallado.

En efecto, para ver esto separamos W_k en las dos componentes correspondientes a rechazo y aceptación de la propuesta

$$\begin{aligned} W_k &= W_r + W_a, \\ W_r(\mathbf{y}, \mathbf{x}) &= \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \left(1 - \int d^n z W_a(\mathbf{z}, \mathbf{x}) \right), \\ W_a(\mathbf{y}, \mathbf{x}) &= Q_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \left(\Theta(\rho(\mathbf{y}) - \rho(\mathbf{x})) + \frac{\rho(\mathbf{y})}{\rho(\mathbf{x})} \Theta(\rho(\mathbf{x}) - \rho(\mathbf{y})) \right). \end{aligned} \quad (2.313)$$

(Para obtener W_a se ha integrado primero sobre \mathbf{z} y luego sobre u .) La función W_r es del tipo $\delta(\mathbf{y} - \mathbf{x})f(\mathbf{x})$, por tanto satisface balance detallado:

$$W_r(\mathbf{y}, \mathbf{x})\rho(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x})f(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})f(\mathbf{y})\rho(\mathbf{y}) = W_r(\mathbf{x}, \mathbf{y})\rho(\mathbf{y}). \quad (2.314)$$

Para W_a , la función

$$F_a(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \equiv W_a(\mathbf{y}, \mathbf{x})\rho(\mathbf{x}) = Q_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})\left(\rho(\mathbf{x})\Theta(\rho(\mathbf{y}) - \rho(\mathbf{x})) + \rho(\mathbf{y})\Theta(\rho(\mathbf{x}) - \rho(\mathbf{y}))\right) \quad (2.315)$$

es manifiestamente simétrica bajo intercambio de \mathbf{x} e \mathbf{y} si $Q_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ lo es.

Por lo tanto, el algoritmo satisface la condición de balance detallado y a larga produce $\mathbf{x}_k \sim w$. También es posible usar una función $Q_k(\mathbf{z}, \mathbf{x})$ asimétrica. En este caso la probabilidad de aceptación pasa a ser

$$p = \min\left(1, \frac{Q_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{z}) w(\mathbf{z})}{Q_k(\mathbf{z}, \mathbf{x}_k) w(\mathbf{x}_k)}\right), \quad (2.316)$$

es decir, se acepta si $u < p$. Esta versión es covariante bajo cambios de coordenadas.

2.12.5. Aplicación a la integral de caminos

En la aplicación a integral de caminos, se trabaja en tiempo euclídeo, se discretiza el intervalo temporal $[\tau_i, \tau_f]$ con pasos ϵ , de modo que cada camino equivale a un vector $X = \{x^i(\tau_j)\}$ de dimensión dN . Generalmente se trabaja con la traza del operador de evolución, lo cual equivale a usar caminos cerrados $\mathbf{x}(\tau_i) = \mathbf{x}(\tau_f)$ y dejar libre ese punto.

El camino X se termaliza de acuerdo con el peso $w(X) = e^{-W_E[X]/\hbar}$, usando un algoritmo de Metropolis. Debido al carácter exponencial del peso, la región de caminos relevantes es relativamente pequeña, por tanto los saltos han de ser muy moderados para que la aceptación no se desplome. Generalmente se procede a “tocar” el valor de $\mathbf{x}(\tau_j)$ sólo para uno de los tiempos del camino (el cambio puede ser aceptado o rechazado), luego se pasa al siguiente tiempo τ_{j+1} , y así sucesivamente hasta que se ha hecho un *barrido* completo de todos los τ_j , $j = 1, N$. Cada barrido produce un X_k de la cadena markoviana.

En los métodos Monte Carlo es esencial que cada paso sea poco costoso (ya que hay que hacer muchos pasos). Eso se cumple en las acciones de las teorías físicas porque los lagrangianos son locales: si el campo $\phi(x)$ o camino $\mathbf{x}(t)$ cambia sólo en una zona, sólo hay que comparar el cambio de la acción en esa zona, no es necesario calcular la acción completa, lo cual sería prohibitivo. Concretamente, para una partícula en un potencial, al aplicar Metropolis se requiere comparar la acción para el camino actual X y la propuesta Z . La probabilidad de aceptación depende del cociente

$$\frac{w(Z)}{w(X)} = \frac{e^{-W_E[Z]/\hbar}}{e^{-W_E[X]/\hbar}} = e^{(W_E[X] - W_E[Z])/ \hbar}. \quad (2.317)$$

Como se ha dicho X y Z coinciden para todo los tiempos τ_j excepto uno de ellos, digamos τ_k .

$$z_j = \begin{cases} \mathbf{x}_j, & \text{si } j \neq k \\ \mathbf{x}_k + \boldsymbol{\xi}, & \text{si } j = k \end{cases} \quad (2.318)$$

entonces

$$\begin{aligned} W_E[X] - W_E[Z] &= \sum_j \left(\frac{M}{2} \frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{\epsilon} + \epsilon V(\mathbf{x}_j) \right) - \sum_j \left(\frac{M}{2} \frac{(z_{j+1} - z_j)^2}{\epsilon} + \epsilon V(z_j) \right) \\ &= \frac{M}{\epsilon} (\mathbf{x}_{k+1} + \mathbf{x}_{k-1} - 2\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\xi}) \boldsymbol{\xi} + \epsilon (V(\mathbf{x}_k) - V(\mathbf{x}_k + \boldsymbol{\xi})). \end{aligned} \quad (2.319)$$

Sólo depende de los puntos próximos y el único cálculo nuevo que requiere es $V(z_k)$.

Evidentemente, tratándose de un cálculo numérico, hay que controlar los valores de $\tau_f - \tau_i$ y ϵ así como el tamaño típico del salto $z_k - \mathbf{x}_k \sim R$ para tener una proporción de propuestas aceptadas del orden del 50%. Estos detalles se discuten en [15].

2.13. Cuantización estocástica

Suponemos grados de libertad bosónicos ϕ^i para simplificar y utilizamos la notación de DeWitt. Esto quiere decir que i incluye *todas* las etiquetas, incluido x^μ , índices Lorentz y Dirac, índices de tipo de partícula, etc. En particular, en integral de caminos $\mathbf{x}(t) = x^k(t)$, i es el par (k, t) . Además i se trata (a efectos de notación) como un índice discreto. Así ϕ representa la configuración espacio-temporal completa del campo o camino.

La acción del sistema (en tiempo euclídeo) se puede escribir

$$W(\phi) = c + h_i \phi^i + \frac{1}{2!} m_{ij} \phi^i \phi^j + \frac{1}{3!} g_{ijk} \phi^i \phi^j \phi^k + \dots \quad (2.320)$$

Los tensores m_{ij} , $g_{i_1 i_2 \dots i_n}$ son completamente simétricos, y suponemos que son reales después de la rotación de Wick. Como se vio en la sec. 2.11.3 la información sobre el sistema se puede extraer de la función de partición. Para caminos

$$Z = \text{tr} \left(T e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} H(\tau) d\tau} \right) = \int D\mathbf{x}(\tau) e^{-W_E[\mathbf{x}(\tau)]/\hbar}, \quad (2.321)$$

y en general

$$Z = \int [d\phi] P(\phi), \quad P(\phi) = e^{-W(\phi)/\hbar}. \quad (2.322)$$

Los valores esperados de los observables, $A(\phi)$, corresponden a

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int [d\phi] P(\phi) A(\phi). \quad (2.323)$$

Nótese que $A(\phi)$ es un funcional general por tanto incluye el producto de operadores en distintos tiempos (o distintos puntos, en una teoría de campos).

El promedio en ϕ se puede hacer muestreando $P(\phi)$, $\phi \sim P$, de modo que

$$\langle A \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N A(\phi_k). \quad (2.324)$$

2.13.1. Ecuación de Langevin

Lo característico del método de *cuantización estocástica* [16] es que el muestreo se hace resolviendo una *ecuación diferencial estocástica* o *ecuación de Langevin*. ϕ sigue un camino aleatorio $\phi(t)$ de modo que

$$\langle A \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(\phi(t)) dt. \quad (2.325)$$

t representa el tiempo ficticio de la simulación (no el tiempo físico, real o euclídeo). La ecuación es

$$\dot{\phi}(t) = -\nabla W(\phi(t)) + \eta(t). \quad (2.326)$$

o equivalentemente

$$\dot{\phi}^i(t) = -\partial_i W(\phi(t)) + \eta^i(t). \quad (2.327)$$

donde $\partial_i = \partial/\partial\phi^i$, y el ruido blanco $\eta^i(t)$ es una variable aleatoria gaussiana centrada independiente por cada i y t , con normalización

$$\langle\langle \eta^i(t) \eta^j(t') \rangle\rangle = 2\hbar \delta_{ij} \delta(t - t'), \quad \langle\langle \eta^i(t) \rangle\rangle = 0. \quad (2.328)$$

$\langle\langle \rangle\rangle$ indica promedio sobre el ruido, para distinguirlo del promedio cuántico.

La ecuación tiene una parte determinista (de arrastre) y una parte aleatoria (de difusión). La parte determinista llevaría ϕ al mínimo de la acción $W(\phi)$, la parte aleatoria introduce las *fluctuaciones*

cuánticas. Tomar el límite $\hbar \rightarrow 0$ equivale a quitar el ruido blanco $\boldsymbol{\eta}(t)$, $\dot{\boldsymbol{\phi}}(t) = -\nabla W(\boldsymbol{\phi}(t))$. En el límite relevante de $t \rightarrow +\infty$, $\boldsymbol{\phi}(t)$ acaba en el mínimo de W , $\dot{\boldsymbol{\phi}}(t) \rightarrow 0$ y

$$0 = \nabla W(\boldsymbol{\phi}(t)), \quad (2.329)$$

que no son más que las ecuaciones de movimiento clásicas.

Para dar sentido a la ecuación de Langevin discretizamos el tiempo ficticio t en pasos ϵ , y posteriormente $\epsilon \rightarrow 0$. En cada paso temporal

$$\boldsymbol{\phi}(t_{j+1}) = \boldsymbol{\phi}(t_j) - \epsilon \nabla W(\boldsymbol{\phi}(t_j)) + \sqrt{2\hbar\epsilon} \hat{\boldsymbol{\eta}}(t_j), \quad (2.330)$$

o equivalentemente

$$\phi^i(t_{j+1}) = \phi^i(t_j) - \epsilon \partial_i W(\boldsymbol{\phi}(t_j)) + \sqrt{2\hbar\epsilon} \hat{\eta}^i(t_j), \quad (2.331)$$

donde las $\hat{\eta}^i(t_j)$ son variables gaussianas centradas normalizadas e independientes

$$\langle\langle \hat{\eta}^i(t_j) \hat{\eta}^{i'}(t_{j'}) \rangle\rangle = \delta_{ii'} \delta_{jj'}, \quad \langle\langle \hat{\eta}^i(t_j) \rangle\rangle = 0. \quad (2.332)$$

Nótese que cuando se quita el efecto de arrastre, $\boldsymbol{\phi}(t_{j+1}) - \boldsymbol{\phi}(t_j) = \sqrt{2\hbar\epsilon} \hat{\boldsymbol{\eta}}(t_j)$, la variable $\boldsymbol{\phi}(t_j)$ simplemente sigue un movimiento browniano con $D = \hbar$ (ya que $\langle\langle \Delta\phi^i \Delta\phi^j \rangle\rangle = 2\hbar\epsilon\delta_{ij}$ en cada dirección). Entonces, la relación $\dot{\boldsymbol{\phi}}(t) = \boldsymbol{\eta}(t)$, indica que el ruido blanco $\boldsymbol{\eta}(t)$ es la derivada temporal del proceso de Wiener. Además, usando (2.233), se ve que la medida de $\boldsymbol{\eta}(t)$ es $\mathcal{D}\boldsymbol{\eta}(t) e^{-\frac{1}{4\hbar} \int \boldsymbol{\eta}^2(t) dt}$, es decir

$$\langle\langle F[\boldsymbol{\eta}(t)] \rangle\rangle = \frac{\int \mathcal{D}\boldsymbol{\eta}(t) e^{-\frac{1}{4\hbar} \int \boldsymbol{\eta}^2(t) dt} F[\boldsymbol{\eta}(t)]}{\int \mathcal{D}\boldsymbol{\eta}(t) e^{-\frac{1}{4\hbar} \int \boldsymbol{\eta}^2(t) dt}}. \quad (2.333)$$

También, derivando con respecto t y t' en

$$\langle\langle (\phi^i(t) - \phi^i(t'))(\phi^j(t) - \phi^j(t')) \rangle\rangle = 2\hbar\delta_{ij}|t - t'| \quad (2.334)$$

e invocando invariancia rotacional, se obtiene

$$\langle\langle \eta^i(t) \eta^j(t') \rangle\rangle = 2\hbar\delta_{ij}\delta(t - t'). \quad (2.335)$$

2.13.2. Ecuación de Fokker-Planck

Pasemos a demostrar que en efecto una colección de caminantes que obedezca la ecuación de Langevin hace un muestreo ergódico de $P(\boldsymbol{\phi}) = e^{-W(\boldsymbol{\phi})/\hbar}$. Denominemos $Q(\boldsymbol{\phi}, t)$ la distribución de $\boldsymbol{\phi}$ en cada instante t ,

$$Q(\boldsymbol{\phi}, t) = \langle\langle \delta(\boldsymbol{\phi} - \boldsymbol{\phi}(t)) \rangle\rangle_t. \quad (2.336)$$

Para ver cómo evoluciona Q , lo mejor es seguir la evolución de los valores esperados

$$\langle\langle A \rangle\rangle_t = \int A(\phi) Q(\phi, t) [d\phi]. \quad (2.337)$$

En un paso $t \rightarrow t + \epsilon$,

$$\begin{aligned} \langle\langle A(\phi) \rangle\rangle_{t+\epsilon} &= \langle\langle A(\phi + d\phi) \rangle\rangle_t \\ &= \langle\langle A(\phi) + d\phi^i \partial_i A(\phi) + \frac{1}{2!} d\phi^i d\phi^j \partial_i \partial_j A(\phi) + O(d\phi^3) \rangle\rangle_t \\ &= \langle\langle A + (-\epsilon \partial_i W + \sqrt{2\hbar\epsilon} \hat{\eta}^i(t)) \partial_i A + \frac{1}{2!} 2\hbar\epsilon \hat{\eta}^i(t) \hat{\eta}^j(t) \partial_i \partial_j A(\phi) + O(\epsilon^{3/2}) \rangle\rangle_t. \end{aligned} \quad (2.338)$$

En $\langle\langle A(\phi) \rangle\rangle_{t+\epsilon}$ se tiene el promedio sobre los $\hat{\eta}(t')$ hasta t que ya producen $\langle\langle A(\phi) \rangle\rangle_t$ y el promedio sobre $\hat{\eta}(t)$ que es nuevo. Tomando este último promedio, (y teniendo en cuenta que el término $O(\epsilon^{3/2})$ es impar en $\hat{\eta}(t)$) se obtiene

$$\begin{aligned} \langle\langle A \rangle\rangle_{t+\epsilon} &= \langle\langle A \rangle\rangle_t + \epsilon \langle\langle -\partial_i W \partial_i A + \hbar \delta_{ij} \partial_i \partial_j A \rangle\rangle_t + O(\epsilon^2), \\ \partial_t \langle\langle A \rangle\rangle_t &= \langle\langle -\nabla W \nabla A + \hbar \nabla^2 A \rangle\rangle_t \end{aligned} \quad (2.339)$$

Por otro lado atribuyendo $\partial_t \langle\langle A \rangle\rangle_t$ a la variación de $Q(\phi, t)$ se deduce

$$\begin{aligned} \int A \partial_t Q [d\phi] &= \int (-\nabla W \nabla A + \hbar \nabla^2 A) Q [d\phi] \\ &= \int A (\nabla(Q \nabla W) + \hbar \nabla^2 Q) [d\phi]. \end{aligned} \quad (2.340)$$

Como esto vale para cualquier $A(\phi)$, debe cumplirse

$$\partial_t Q = \hbar \nabla^2 Q + \nabla(Q \nabla W) \quad (\text{Ecuación de Fokker-Planck}). \quad (2.341)$$

Esta ecuación equivale a una ecuación de continuidad con flujo $\mathbf{J} = -Q \nabla W - \hbar \nabla Q$, es decir, con arrastre (campo de velocidades) $-\nabla W$ y coeficiente de difusión $D = \hbar$.

Es importante volver a notar que aquí que t no es el tiempo físico sino el tiempo de simulación o tiempo Langevin. El tiempo físico (o su versión euclídea) está contenido en ϕ , ϕ describe una historia espacio-temporal completa. Así, para una teoría de campos en $d + 1$ dimensiones (d espaciales y una temporal), ϕ es una función de $d + 1$ variables y $\phi(t)$ es un campo en $d + 2$ dimensiones. En el límite t grande $\phi(t)$ es una variable aleatoria que se va a distribuir de acuerdo con $P(\phi)$.

La ecuación de Fokker-Planck se puede reescribir usando $P = e^{-W/\hbar}$:

$$\partial_t Q = \hbar \nabla \left(P \nabla \left(\frac{Q}{P} \right) \right), \quad (2.342)$$

que implica que $Q = P$ es una solución de equilibrio de la ecuación de evolución.

Falta verificar que la evolución lleva cualquier Q inicial a la distribución de equilibrio. Aquí hay que suponer que P es suficientemente bien comportada (en particular real no negativa y normalizable). La forma de ver esto es llevar la ecuación de Fokker-Planck a forma hermítica (tipo ecuación de Schrödinger). Para ello definimos la *función de onda* $\Psi(\phi, t)$

$$Q(\phi, t) = \Psi(\phi, t)\Psi_0(\phi, t), \quad \Psi_0 := P^{1/2} = e^{-W/2\hbar}. \quad (2.343)$$

Simplemente reescribimos la ecuación de P como una ecuación para Ψ :

$$\begin{aligned} \partial_t Q &= \Psi_0 \partial_t \Psi, \\ \nabla (P \nabla (Q/P)) &= \nabla (\Psi_0^2 \nabla (\Psi/\Psi_0)) = \nabla (\Psi_0 \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi_0) \\ &= \Psi_0 \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi_0. \end{aligned} \quad (2.344)$$

Entonces

$$-\hbar \partial_t \Psi = (-\hbar^2 \nabla^2 + V) \Psi, \quad V(\phi) = \frac{\hbar^2 \nabla^2 \Psi_0}{\Psi_0}. \quad (2.345)$$

Es una ecuación de Schrödinger en tiempo imaginario con masa 1/2 y potencial $V = \frac{1}{4}(\nabla W)^2 - \frac{\hbar}{2} \nabla^2 W$. Por construcción Ψ_0 es un estado propio del hamiltoniano con energía cero. Éste es también el estado fundamental, ya que H se puede reescribir en la forma

$$H = S^\dagger S, \quad S = \hbar \nabla + \frac{1}{2} \nabla W, \quad (2.346)$$

y por tanto $H \geq 0$. Esto implica que $H\Psi_n = E_n\Psi_n$ con $E_n \geq 0$ y $\langle \Psi_n | \Psi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$,

$$\Psi(\phi, t) = \sum_{n \geq 0} c_n \Psi_n(\phi) e^{-tE_n/\hbar} \quad (2.347)$$

y para Q

$$Q(\phi, t) = \sum_{n \geq 0} c_n Q_n(\phi) e^{-tE_n/\hbar}, \quad Q_n(\phi) = \Psi_n(\phi)\Psi_0(\phi). \quad (2.348)$$

Las componentes transitorias Q_n ($n > 0$) no contribuyen a la normalización, sólo afectan a la distribución de ϕ :

$$\int [d\phi] Q_n = \int [d\phi] \Psi_0 \Psi_n = \delta_{n0}. \quad (2.349)$$

Para t grande $Q \rightarrow Q_0 = P$ (salvo normalización) independientemente de la distribución inicial, ya que $E_0 = 0$ y los demás estados son transitorios.

Nótese que las ecuaciones de Langevin o de Fokker-Planck, tal y como están, no son covariantes bajo cambios de coordenadas (ϕ^i). El espectro E_n y el ritmo de convergencia dependerá del sistema de coordenadas, aunque no la distribución de equilibrio $[d\phi]P(\phi)$. Existen versiones covariantes, introduciendo una métrica $g_{ij}(\phi)$, denominada *kernel* en este contexto.

2.13.3. Diagramas estocásticos

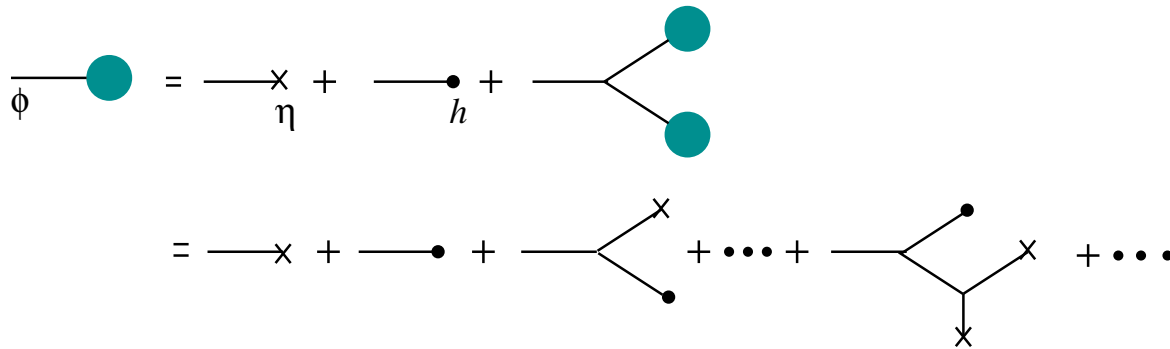


Figura 3: Diagramas de la cuantización estocástica para $\phi(t)$.

Supongamos que sólo hay vértices de tres puntos: $g_{i_1 \dots i_n} = 0$ para $n > 3$.

$$\begin{aligned} \partial_t \phi^i &= -h_i - m_{ij} \phi^j - \frac{1}{2!} g_{ijk} \phi^j \phi^k + \eta^i, \\ \phi^l(t) &= (\partial_t + m)^{-1li} (\eta^i - h_i - \frac{1}{2!} g_{ijk} \phi^j \phi^k). \end{aligned} \quad (2.350)$$

Para la teoría libre, $g_{ijk} = h_i = 0$ (y $m > 0$)

$$\begin{aligned} \phi^l(t) &= (\partial_t + m)^{-1li} \eta^i, \\ \phi^l(t) &= (e^{-tm} \phi(0))^l + \left(\int_0^t dt' e^{-(t-t')m} \eta(t') \right)^l. \end{aligned} \quad (2.351)$$

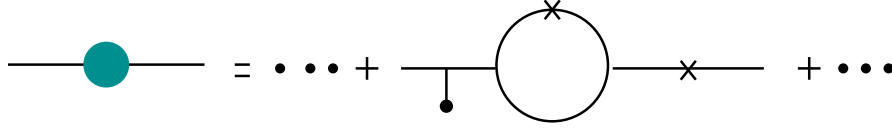


Figura 4: Diagramas para $\langle\langle\phi^k(t)\phi^l(t)\rangle\rangle$ en presencia de interacción.

El primer término es transitorio. Para la función de dos puntos o propagador se tiene

$$\begin{aligned} \langle\langle\phi^k(t)\phi^l(t)\rangle\rangle &\underset{t\rightarrow\infty}{\sim} \left\langle\left\langle\left(\int_0^t dt' e^{-(t-t_1)m}\eta(t_1)\right)^k \left(\int_0^t dt' e^{-(t-t_2)m}\eta(t_2)\right)^l\right\rangle\right\rangle \\ &= \lim_{t\rightarrow\infty} \int_0^t dt_1 2(e^{-(t-t_1)m})^{2kl} = (m^{-1})^{kl}. \end{aligned} \quad (2.352)$$

Que coincide correctamente con el resultado usual

$$\langle\phi^k\phi^l\rangle = (m^{-1})^{kl}. \quad (2.353)$$

Para más detalles sobre cuantización estocástica consúltese [17].

Referencias

- [1] A. Galindo y P. Pascual, *Mecánica Cuántica*, vols. I y II, Eudema Universidad, 1989
- [2] J. Schwinger *Particles, Sources and Fields*, vol. I. Addison-Wesley, 1970
- [3] W. Greiner *Relativistic quantum mechanics: wave equations* Springer, 1990
- [4] L. S. Schulman *Techniques and Applications of Path Integration* John Wiley & Sons, 1981
- [5] J. W. Negele y H. Orland *Quantum Theory of Many Particle Systems* Addison Wesley, 1988
- [6] B. G. Adams, *Algebraic approach to simple quantum systems*, Springer-Verlag, 1994
- [7] R. H. Landau, *Quantum Mechanics II*, John Wiley & Sons, 1996
- [8] H. Kleinert, *Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics*, World Scientific, 1990

- [9] A. L. Fetter y J.D. Walecka, *Quantum theory of many-body particle systems*, McGraw-Hill, 1971.
- [10] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948) 367.
- [11] J. Glimm y A. Jaffe, *Quantum Physics*, Springer-Verlag, 1987.
- [12] S. A. Chin, J. W. Negele and S. E. Koonin, *Annals Phys.* **157** (1984) 140.
- [13] R. P. Feynman y A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, 1965.
- [14] N. Madras, *Lectures on Monte Carlo Methods*, The Fields Institute For Research in Mathematical Sciences, American Mathematical Society, 2002.
- [15] M. Creutz and B. Freedman, *Annals Phys.* **132** (1981) 427.
- [16] G. Parisi and Y.-s. Wu, *Sci. Sin.* **24** (1981) 483.
- [17] P. H. Damgaard and H. Huffel, *Phys. Rept.* **152** (1987) 227.