

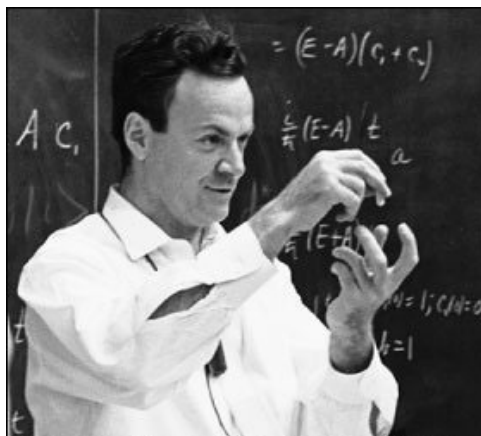
Trabajo Fin de Grado en Física

El formalismo de la integral de camino en mecánica cuántica y mecánica estadística

Alberto Mayorgas Reyes

Universidad de Sevilla

Julio de 2019



Tutor: Antonio Prados Montaña

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Universidad de Sevilla



Índice

1	Resumen, objetivos y metodología	3
2	Introducción	4
2.1	Formulación de la integral de camino de Feynman	4
2.2	Matriz densidad en mecánica cuántica	7
2.2.1	Propiedades y diferentes representaciones	9
2.2.2	Ecuación de evolución de von Neumann	12
2.2.3	Conservación de la probabilidad	13
3	Integral de camino en mecánica cuántica	15
3.1	Deducción de la integral de camino	15
3.2	Aplicaciones y casos sencillos	20
3.2.1	Partícula libre	20
3.2.2	Potenciales de la forma $V = a + bx + cx^2 + d\dot{x} + e\dot{x}x$	22
3.3	Equivalencia con la ecuación de Schrödinger	26
3.4	Dificultades. Potenciales singulares	30
4	Integral de camino en mecánica estadística	31
4.1	Matriz densidad en mecánica estadística	31
4.2	Conexión con la integral de camino	33
4.3	Aplicación. El oscilador armónico	36
5	Conclusiones	42
	Referencias	43
	Apéndice A Propagador en mecánica cuántica	45
	Apéndice B Fórmula del producto de Trotter	47
	Apéndice C Integral gaussiana	49

1 Resumen, objetivos y metodología

En este trabajo, estudiamos la integral de camino en el contexto de la mecánica cuántica no relativista y de la mecánica estadística. Dentro de la mecánica cuántica, deducimos la formulación de integral de camino de Feynman para el propagador usando el procedimiento conocido como “Trotterización”. A continuación, aplicamos el formalismo para calcular el propagador en algunos casos sencillos pero de relevancia física como la partícula libre y potenciales cuadráticos. Asimismo, demostramos la equivalencia de este formalismo con la ecuación de Schrödinger. En la parte de mecánica estadística, estudiamos la matriz densidad dentro de la colectividad canónica. Deducimos una formulación de integral de camino para la matriz densidad, aprovechando la analogía formal entre la ecuación que nos proporciona la dependencia de la matriz densidad respecto a la temperatura y la ecuación de Schrödinger. Como aplicación, resolvemos completamente el caso del oscilador armónico obteniendo el propagador. Nuestro trabajo también incluye una discusión sobre las analogías y diferencias que presenta el formalismo de la integral de camino en los dos campos, con mención a la rotación de Wick.

El objetivo general de este trabajo es la profundización en ciertos aspectos formales de la mecánica cuántica y la mecánica estadística. En concreto en la obtención del propagador a partir de la integral de camino en mecánica cuántica, lo cual nos resuelve formalmente el problema en cuestión, y de forma equivalente en mecánica estadística el objetivo principal será hallar la matriz densidad, la cual encierra toda la información del baño térmico que tratemos. Otros objetivos más específicos involucran el establecimiento “riguroso”, cuidando el detalle matemático pero manteniendo un punto de vista físico, de ciertos resultados fundamentales, como la equivalencia entre la formulación de la integral de camino con la ecuación de Schrödinger en mecánica cuántica, la conexión de la integral de camino de la matriz densidad y la del propagador cuántico, y la resolución detallada de problemas matemáticos no triviales como es resolver la integral de camino. La metodología seguida es puramente analítica, con un enfoque que trata de ser especialmente cuidadoso en la presentación de los resultados, tanto en los “fundamentales” como en los “aplicados”.

2 Introducción

2.1 Formulación de la integral de camino de Feynman

La forma estándar de formular la mecánica cuántica no relativista en cursos de grado es la que fue desarrollada por físicos como Heisenberg y Schrödinger, donde se parte de la mecánica hamiltoniana para cuantizar las magnitudes físicas. En contraste, nosotros vamos a tratar una formulación alternativa que desarrolló Feynman a finales de la década de los 40, la formulación de la integral de camino, la cual está ligada a la formulación lagrangiana de la mecánica clásica y a la acción clásica.

En 1945, el físico inglés Paul Dirac encontró la similitud entre el propagador en mecánica cuántica y la acción clásica en el caso de una partícula libre [1],

$$K(x, t; x', 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} e^{im(x-x')^2/2\hbar t} \sim e^{iS_{cl}/\hbar}. \quad (2.1)$$

Esto le hizo pensar que la acción jugaba un papel importante en la mecánica cuántica. El problema era que esta similitud con el propagador no se cumplía para sistemas no lineales. La solución al problema fue hallada gracias a Feynman y su formulación de la integral de camino, donde el propagador viene dado como la suma de todos los posibles caminos que unen el punto inicial x' con el punto final x [2].

Nuestro interés en el propagador radica en que una vez conocido este, el problema cuántico queda totalmente resuelto: dado un estado inicial en (x', t') , podemos obtener el estado del sistema en cualquier instante y posición (x, t) (véase el Apéndice A). En la formulación de Schrödinger primero obtenemos los autoestados y autovalores del hamiltoniano H del sistema para calcular el operador de evolución $U(t, t')$, y a partir de él obtener el propagador $K(x, t; x', t')$. La potencia del método de la integral de camino es que nos permite obtener el propagador K de forma directa, sin necesidad de resolver ninguna ecuación diferencial. En contraste, nos encontramos con una formulación integral que puede resultarnos menos simple o agradable, ya que como veremos tenemos una sucesión de integrales que no se pueden factorizar y que además están bajo un límite.

Antes de entrar en la formulación de la integral de caminos conviene hacer una introducción heurística para familiarizarse con la forma de esta teoría. Comencemos como en toda teoría con el caso más simple, la partícula libre en una dimensión. El cálculo del propagador $K(x, t; x', t')$ de la partícula libre con la integral de camino se puede resumir en tres puntos:

1. Considere todos los caminos $x_\alpha(t)$ que conecten los dos puntos extremos en cuestión, (x, t) y (x', t') .
2. Encuentre, para cada camino $x_\alpha(t)$, la acción $S[x_\alpha(t)]$.
3. Calcule el propagador como la suma de todas las posibles trayectorias $K(x, t; x', t') \sim \sum_\alpha e^{iS[x_\alpha(t)]/\hbar}$.
4. Normalice en la región del sistema.

Puede resultarnos chocante que esta formulación le de el mismo peso a todas las trayectorias incluida la clásica $x_{\text{cl}}(t)$, ya que en la suma la exponencial va acompañada de un factor 1 en todos los casos. La clave en este asunto es que cada trayectoria $x_\alpha(t)$ contribuye con una fase $S[x_\alpha(t)]/\hbar$ distinta a la suma, lo que provoca que los términos de la suma $e^{iS[x_\alpha(t)]/\hbar}$ se cancelen entre ellos. De esta forma solo los caminos en un cierto entorno del camino clásico interfieren de forma constructiva, debido a que aquí S es estacionaria. Esto guarda una estrecha relación con el método de la fase estacionaria y con que la trayectoria clásica es la que hace extremal (minimiza) a la acción.

Cuando la fase de un camino se aleje una cantidad $\{S[x_{\text{cl}}(t)] - S[x_\alpha(t)]\}/\hbar \simeq \pi$ de la fase de la trayectoria clásica, vamos a tener que la contribución de dicho camino a la suma, $e^{iS[x_\alpha(t)]/\hbar}$, produce interferencia destructiva. Por lo tanto, en primera aproximación en el cálculo del propagador no vamos a considerar estos caminos. Solamente nos vamos a quedar con un entorno alrededor del camino clásico, que en términos de la acción implica un intervalo de coherencia de $\hbar\pi$ entorno a S_{cl} . Expongamos un ejemplo para aclarar esta discusión. Imaginemos una partícula libre cuya trayectoria clásica es $x_{\text{cl}}(t) = x_0 + v_0 t$, donde el punto final de la trayectoria x_f cumple $x_{\text{cl}}(\Delta t) = x_f = x_0 + v_0 \Delta t$, por lo que podemos escribir la velocidad inicial de la forma $v_0 = (x_f - x_0)/\Delta t$ con Δt el tiempo transcurrido para llegar del punto inicial al final. La acción clásica se puede expresar

$$S_{\text{cl}} = S[x_{\text{cl}}(t)] = \int_0^{\Delta t} \frac{1}{2} m \dot{x}_{\text{cl}}^2 dt = \frac{1}{2} m \frac{(x_f - x_0)^2}{\Delta t}. \quad (2.2)$$

Pensemos en otra trayectoria del tipo $x(t) = x_0 + ct^2$ que cumple $x(\Delta t) = x_f$ también, por lo que $c = (x_f - x_0)/(\Delta t)^2$ (no tiene dimensiones de velocidad). Si calculamos la acción para esta trayectoria se obtiene $S = 2m(x_f - x_0)^2/(3\Delta t)$, lo que nos lleva a una diferencia entre ambas acciones de $\Delta S = S - S_{\text{cl}} = m(x_f - x_0)^2/(6\Delta t)$. Estudiemos el valor de la magnitud ΔS en comparación con el intervalo de coherencia antes citado, $\hbar\pi$, para dos casos distintos.

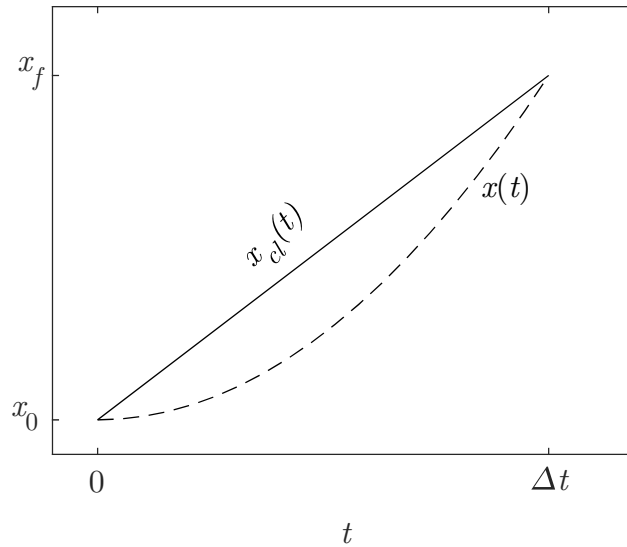


Figura 1. Trayectorias usadas como ejemplo en la sección 2.1, con expresiones $x_{cl}(t) = x_0 + v_0 t$ y $x(t) = x_0 + ct^2$. Las condiciones de contorno son las mismas para las dos trayectorias, $x(0) = x_0$ y $x(\Delta t) = x_f$.

1. El primero es una partícula macroscópica de masa $m = 1$ kg, que tarda un tiempo $\Delta t = 1$ s en recorrer su trayectoria, cuya distancia entre el punto inicial x_0 y el final x_f es $x_f - x_0 = 1$ m. La diferencia entre acciones es $\Delta S \simeq 1/6 \text{ m}^2\text{kg/s} \sim 10^{33} \hbar$, que es mucho mayor que el intervalo de coherencia $\hbar\pi$, por lo que la trayectoria no clásica contribuye destructivamente en la suma de la integral de camino. Esto justifica que el mundo macroscópico se rija por las leyes de la mecánica clásica.
2. El segundo es un electrón cuya masa es $m \simeq 9.1 \cdot 10^{-31}$ kg. Supongamos que la distancia que va a recorrer es, según el modelo de Bohr del átomo de H, del orden del perímetro de la órbita del estado fundamental, es decir, $x_f - x_0 = 2\pi a_0 \simeq 3.32 \cdot 10^{-10}$ m. Pensemos que el tiempo que tarda en recorrer la distancia $x_f - x_0$ coincide con el periodo de la órbita, $\Delta t \simeq 1.52 \cdot 10^{-16}$ s. La diferencia entre acciones vale ahora $\Delta S = 1.10 \cdot 10^{-34} \text{ m}^2\text{kg/s} \sim \hbar$, por lo que la trayectoria no clásica debe ser considerada al estar incluida en el intervalo de coherencia. Por tanto el electrón va a ser descrito como un sistema cuántico en el que hay más de una trayectoria posible, por lo que tendrá sentido calcular su propagador usando la integral de camino.

Para acabar de motivar la integral de camino, hemos de comentar que esta fue también desarrollada en otro ámbito distinto al de la cuántica, el de la mecánica estadística. En concreto, matemáticos como Wiener desarrollaron la integral funcional de forma paralela

a Feynman. De hecho, la integral de camino es una herramienta útil aplicable tanto a la mecánica cuántica como a la mecánica estadística. Por lo tanto, en este trabajo vamos a estudiar la integral de camino en los dos contextos, para finalmente ver la estrecha relación que guardan mediante la rotación de Wick. En la primera parte del trabajo trataremos la integral de camino en mecánica cuántica y en la segunda en mecánica estadística, para lo que necesitaremos introducir el concepto de la matriz densidad que exponemos en la siguiente sección.

2.2 Matriz densidad en mecánica cuántica

En los cursos elementales de mecánica cuántica que se imparten a nivel de grado se considera habitualmente un sistema cuántico aislado. Esto quiere decir que las interacciones entre este sistema y el resto del universo son despreciables para los fenómenos físicos que nos interesa analizar. Sin embargo, en muchas situaciones, la interacción del sistema con su “entorno” no puede despreciarse, aunque solamente queramos obtener (predecir) los valores de magnitudes que dependan exclusivamente de las coordenadas del sistema. Esto es lo que se denomina un *sistema cuántico abierto*. Un ejemplo paradigmático de sistema cuántico abierto es los sistemas “macroscópicos” acoplados a un baño térmico (y/o de partículas), como los estudiados en la colectividad canónica (o grancanónica) en mecánica estadística.

Para describir los sistemas cuánticos abiertos necesitamos introducir el concepto de *matriz densidad*, para lo que dividimos el universo en dos partes: el sistema en el que estamos interesados, que vendrá descrito por el conjunto completo de estados $\{|\phi_i\rangle\}$; y el resto del universo o baño descrito por $\{|\theta_i\rangle\}$. Ambos conjuntos contienen estados ortonormalizados

$$\langle\phi_i|\phi_{i'}\rangle = \langle\theta_i|\theta_{i'}\rangle = \delta_{ii'} \quad \text{Ortonormalización,} \quad (2.3)$$

$$\sum_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i| = \mathbb{I}_S, \quad \sum_i |\theta_i\rangle \langle\theta_i| = \mathbb{I}_B \quad \text{Rel. de completitud o de cierre,} \quad (2.4)$$

los cuales forman una base de espacios de Hilbert por separado (una para el sistema y otro para el entorno). Llamaremos x a las coordenadas de mi sistema e y a las coordenadas del baño, por lo tanto en la representación de posiciones $\phi_i(x) = \langle x|\phi_i\rangle$, $\theta_i(y) = \langle y|\theta_i\rangle$.

En general una función de onda que describa el universo entero se podría escribir como

un combinación lineal de los estados de ambas partes

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} C_{ij} |\phi_i\rangle |\theta_j\rangle, \quad (2.5)$$

donde en la notación está implícito que $|\phi_i\rangle |\theta_j\rangle = |\phi_i\rangle \otimes |\theta_j\rangle$ (matemáticamente, el espacio de Hilbert del universo es el producto directo de los espacios de Hilbert del sistema y del baño). Definamos ahora un operador A que solo actúe sobre nuestro sistema, $A |\phi_i\rangle |\theta_j\rangle = (A |\phi_i\rangle) |\theta_j\rangle$. La forma más rigurosa de escribirlo en la base $\{|\phi_i\rangle |\theta_j\rangle\}_{i,j}$ sería

$$A \equiv A \otimes \mathbb{I}_B = \sum_{i,i'} A_{ii'} |\phi_i\rangle \langle \phi_{i'}| \otimes \sum_j |\theta_j\rangle \langle \theta_j| = \sum_{i,i',j} A_{ii'} |\phi_i\rangle |\theta_j\rangle \langle \theta_j| \langle \phi_{i'}|. \quad (2.6)$$

En la última expresión hemos usado la notación habitual para los elementos de matriz del operador A , $A_{ii'} \equiv \langle \phi_i| A |\phi_{i'}\rangle$. El valor esperado de A en un estado total genérico $|\Psi\rangle$ se puede escribir como

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \Psi|A|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \sum_{i',j'} C_{ij}^* C_{i'j'} (\langle \theta_j| \langle \phi_i|) A (|\phi_{i'}\rangle |\theta_{j'}\rangle) \\ &\stackrel{(2.3)}{=} \sum_{i,i',j} C_{ij}^* C_{i'j} \langle \phi_i| A |\phi_{i'}\rangle = \sum_{i,i'} \langle \phi_i| A |\phi_{i'}\rangle \rho_{i'i}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

donde

$$\rho_{i'i} := \sum_j C_{ij}^* C_{i'j}. \quad (2.8)$$

Vamos a definir el *operador densidad* ρ de forma que sus elementos de matriz (elementos de la *matriz densidad*) tengan la forma $\rho_{i'i} = \langle \phi_{i'}| \rho |\phi_i\rangle$. Por lo tanto ρ solamente actúa sobre los estados de mi sistema $|\phi_i\rangle$, y el valor medio de A de la ecuación (2.7) queda

$$\langle \Psi|A|\Psi\rangle = \sum_{i,i'} \langle \phi_i| A |\phi_{i'}\rangle \langle \phi_{i'}| \rho |\phi_i\rangle \stackrel{(2.3)}{=} \sum_i \langle \phi_i| A \rho |\phi_i\rangle = \text{tr}(A\rho) = \text{tr}(\rho A). \quad (2.9)$$

En las últimas igualdades hemos usado la definición de traza, y que la traza es invariante ante permutaciones cíclicas y ante cambios de base. De la ecuación (2.8) podemos deducir que ρ es hermítica, ya que conjugando los elementos de matriz $\rho_{i'i}^* = \rho_{ii'}$. Por lo tanto el operador densidad

$$\rho = \sum_{i,i'} \rho_{i'i} |\phi_{i'}\rangle \langle \phi_i| \quad (2.10)$$

puede ser diagonalizado, quedando expresado en una base de autovectores ortonormales

$\{|i\rangle\}$ correspondientes a autovalores reales w_i que pueden ser o no degenerados (véase la pág.43 de [3]), como

$$\rho = \sum_i w_i |i\rangle \langle i|. \quad (2.11)$$

2.2.1 Propiedades y diferentes representaciones

Si en el razonamiento seguido hasta ahora hacemos $A = \mathbb{I}$, obtenemos

$$\left. \begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \Psi | \Psi \rangle \stackrel{(2.3)}{=} 1 \\ \langle A \rangle &\stackrel{(2.9)}{=} \text{tr}(\rho) \stackrel{(2.11)}{=} \sum_i w_i \end{aligned} \right\} \Rightarrow \sum_i w_i = 1. \quad (2.12)$$

Si le damos al operador la forma de un proyector “elemental” sobre la base de autovectores del operador densidad, $A = |i'\rangle \langle i'| \otimes \mathbb{I}_B = |i'\rangle \langle i'| \otimes \sum_j |\theta_j\rangle \langle \theta_j|$ obtenemos

$$\left. \begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \Psi | \left(|i'\rangle \langle i'| \otimes \sum_j |\theta_j\rangle \langle \theta_j| \right) | \Psi \rangle = \sum_j \left| \langle i' | \langle \theta_j | \right| \Psi \rangle \right|^2 \geq 0. \\ \langle A \rangle &\stackrel{(2.9)}{=} \text{tr} \left(\rho |i'\rangle \langle i'| \right) = \sum_i \langle i | \rho | i' \rangle \langle i' | i \rangle \stackrel{(2.3)}{=} w_{i'}. \end{aligned} \right\} \Rightarrow w_i \geq 0. \quad (2.13)$$

Hemos construido el operador densidad y visto algunas de sus propiedades, y ahora procedemos a reformular la mecánica cuántica en sus términos. Cualquier sistema cuántico vendrá descrito por una matriz densidad ρ , que cumple las siguientes propiedades:

(i) $\rho = \sum_i w_i |i\rangle \langle i|$, donde $\{|i\rangle\}$ es una base ortonormal del espacio de estados del sistema. (2.13a)

(ii) $w_i \geq 0$. (2.13b)

(iii) $\sum_i w_i = 1$. (2.13c)

(iv) Dado un operador A que actúa solo sobre mi sistema, su valor esperado viene dado por

$$\langle A \rangle = \text{tr}(\rho A) = \sum_{i'} \langle i' | \rho A | i' \rangle \stackrel{(2.11)}{=} \sum_{i,i'} w_i \langle i' | i \rangle \langle i | A | i' \rangle = \sum_i \underbrace{w_i}_{\text{red}} \underbrace{\langle i | A | i \rangle}_{\text{blue}}. \quad (2.13d)$$

Esta nueva formulación encierra toda la información del resto del universo (por ejemplo, el baño térmico y/o de partículas en mecánica estadística) en la matriz densidad. Así

evitamos tener que recurrir a los estados $|\theta_j\rangle$, cuya obtención es imposible en la mayor parte de situaciones de interés. El valor esperado de un operador genérico del sistema puede expresarse como el producto del valor esperado del operador en el estado $|i\rangle$ (llave azul) por la probabilidad de que el sistema esté en el estado $|i\rangle$ (llave roja).

En este punto es conveniente introducir la distinción entre estados puros y estados mezcla. Si todos los w_i salvo uno son cero, se dice que el sistema se encuentra en un estado “puro”. Para ese estado, que denotamos mediante $|i_{\text{pure}}\rangle$, además, debe darse que $w_{i_{\text{pure}}} = 1$. Entonces se reobtiene el resultado “habitual” de los cursos elementales de mecánica cuántica, donde $\langle A \rangle = \langle i_{\text{pure}} | A | i_{\text{pure}} \rangle$. Esto es, en estos cursos se estudian estos “estados puros”.

Si el estado no es puro, es decir, hay más de un w_i que es no nulo, el sistema se encuentra en un “estado mezcla”. En esos estados mezcla, el valor esperado $\langle A \rangle$ es la media estadística de los valores esperados en los estados puros $|i\rangle$ con pesos dados por las probabilidades w_i . No debemos confundir un estado mezcla (mi sistema puede estar en varios estados puros con diferente probabilidad) con que un estado puro puede venir dado por una superposición cuántica o combinación lineal de vectores o kets, por ejemplo, $|i\rangle = 2^{-1/2} |1\rangle + 2^{-1/2} |2\rangle$, los cuales pueden ser autoestados de un observable. Puede encontrarse una discusión más completa de este punto en la sección 2.1 de la referencia [3], donde se expresa la matriz densidad de un estado mezcla como una combinación lineal de matrices densidad de estados puros.

En general, el sistema estará en un estado puro si todas las probabilidades w_j son nulas menos una, $w_i = 1$. En tal caso, mi sistema se encuentra en el estado puro $|i_{\text{pure}}\rangle$ y el operador densidad tiene la forma simple

$$\rho = |i_{\text{pure}}\rangle \langle i_{\text{pure}}|. \quad (2.14)$$

Hemos usado la notación $|i_{\text{pure}}\rangle$ de Feynman para los estados puros [3]. Como hemos discutido antes, el valor esperado de un observable A en un estado puro es simplemente $\langle i_{\text{pure}} | A | i_{\text{pure}} \rangle$. La forma que tiene el operador densidad para un estado puro es la de un proyector. De hecho, se puede demostrar que la condición necesaria y suficiente para que estemos en un estado puro es $\rho = \rho^2$. De las propiedades (ii) y (iii) obtenemos que $w_i \in [0, 1]$, por lo tanto $w_i^2 \leq w_i$ y $\sum_i w_i^2 \leq \sum_i w_i$. Gracias a esta propiedad, se puede

demostrar en los dos sentidos $\rho^2 = \rho \Leftrightarrow \exists! |i\rangle = |i_{\text{pure}}\rangle$. De forma explícita

$$\rho^2 = \rho \begin{array}{c} \xleftarrow{\text{tr } \rho^2 = \text{tr } \rho = \sum_i w_i} \\ \xrightarrow{\rho^2 = \sum_i w_i^2 |i\rangle\langle i|} \end{array} \sum_i w_i^2 = \sum_i w_i = 1 \Leftrightarrow \exists! w_i = 1 \Leftrightarrow \exists! |i\rangle = |i_{\text{pure}}\rangle. \quad (2.15)$$

En la representación de posiciones (recuérdese que x denota el conjunto de todas las coordenadas del sistema), el operador densidad tiene como elementos de matriz

$$\rho(x, x') := \langle x | \rho | x' \rangle = \sum_i w_i \langle x | i \rangle \langle i | x' \rangle = \sum_i w_i i(x) i^*(x'). \quad (2.16)$$

Los valores esperados se calculan según la propiedad (iv), esto es,

$$\langle A \rangle = \text{tr}(\rho A) = \int dx \langle x | \rho A | x \rangle. \quad (2.17)$$

Como es habitual en física, la integral sobre x sin especificar límites se extiende a todo el espacio, es decir, todas las coordenadas cartesianas del sistema se integran desde $-\infty$ hasta $+\infty$. Gracias a la relación de cierre en esta base $\int dx' |x'\rangle \langle x'|$, podemos obtener los elementos $\langle x | \rho A | x \rangle$ en función de los elementos de matriz del operador densidad ρ y del operador A ,

$$\langle A \rangle = \int dx dx' \langle x | \rho | x' \rangle \langle x' | A | x \rangle = \int dx dx' \rho(x, x') A(x', x). \quad (2.18)$$

Veamos qué relación existe entre el operador densidad y el estado total del universo $\Psi(x, y)$, donde recordemos que y eran las posiciones o coordenadas externas al sistema. Para ello calculamos el valor esperado de A teniendo en cuenta que solo actúa sobre $|x\rangle$ e introduciendo el cierre en ambas coordenadas.

$$\begin{aligned} \langle \Psi | A | \Psi \rangle &= \int dx dy dx' dy' \langle \Psi | (|x'\rangle |y'\rangle) (\langle y' | \langle x' |) A (|x\rangle |y\rangle) (\langle y | \langle x |) | \Psi \rangle \\ &= \int dx dx' dy \Psi^*(x', y) A(x', x) \Psi(x, y) \\ &\stackrel{(2.18)}{\Longrightarrow} \rho(x, x') = \int_V dy \Psi^*(x', y) \Psi(x, y). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Igual que dijimos antes en una representación genérica, el operador densidad encierra toda la información del resto del universo.

		Represent. base discreta	Representación posiciones
Estado puro	ρ	$ i_{\text{pure}}\rangle \langle i_{\text{pure}} $	
	Matriz	$\langle \phi_j i_{\text{pure}} \rangle \langle i_{\text{pure}} \phi_k \rangle$	$i_{\text{pure}}(x) i_{\text{pure}}^*(x')$
	$\langle A \rangle$	$\sum_{j,k} c_j^* A_{jk} c_k$	$\int dx dx' i_{\text{pure}}(x) i_{\text{pure}}^*(x') A(x', x)$
Estado mezcla	ρ	$\sum_i w_i i\rangle \langle i $	
	Matriz	$\sum_i w_i \langle \phi_j i \rangle \langle i \phi_k \rangle$	$\sum_i w_i i(x) i^*(x')$
	$\langle A \rangle$	$\sum_{j,k} \rho_{jk} A_{kj}$	$\int dx dx' \rho(x, x') A(x', x)$

Tabla 1. Por filas, expresiones del operador densidad ρ ; elementos de matriz en una base discreta arbitraria $\{|\phi_j\rangle\}$, $\rho_{jk} = \langle \phi_j | \rho | \phi_k \rangle$, ó en la base de posiciones $\{|x\rangle\}$, $\rho(x, x') = \langle x | \rho | x' \rangle$; y valor medio de un operador $\langle A \rangle = \text{tr}(\rho A)$, distinguiendo entre estados puros y estados mezcla por filas. Para el caso de estados puro se tiene la expresión más simple $\langle A \rangle = \langle i_{\text{pure}} | A | i_{\text{pure}} \rangle$. Separamos por columnas la representación en una base discreta genérica, donde se definen los coeficientes $c_j = \langle \phi_j | i_{\text{pure}} \rangle$ y los elementos de matriz $A_{jk} = \langle \phi_j | A | \phi_k \rangle$, y la representación de posiciones donde $i(x) = \langle x | i \rangle$ y $A(x', x) = \langle x' | A | x \rangle$. Conviene señalar que denominar elemento de matriz a $A(x', x)$ es un abuso de terminología puesto que los “índices” (x, x') son continuos.

2.2.2 Ecuación de evolución de von Neumann

En este apartado deducimos la ecuación de evolución para el operador densidad. Recordemos que en general podíamos escribir $\rho = \sum_j w_j |j\rangle \langle j|$, según (i). Los autoestados $|j\rangle$ del operador densidad evolucionan en el tiempo, obedeciendo la ecuación de Schrödinger con el hamiltoniano del sistema H , véase el Apéndice A para más detalle, $|j(t)\rangle = U(t, 0) |j(0)\rangle$. En consecuencia, el operador densidad en el instante t será

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \sum_j w_j |j(t)\rangle \langle j(t)| = \sum_j w_j U(t, 0) |j(0)\rangle \langle j(0)| U^\dagger(t, 0) \\ &= U(t, 0) \rho(0) U^\dagger(t, 0). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Tomando la derivada respecto al tiempo del operador densidad, llegamos a la ecuación

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} (H\rho(t) - \rho(t)H) = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho], \quad (2.21)$$

que es la ecuación de Liouville–von Neumann.

La ecuación de Liouville–von Neumann es bastante parecida a la ecuación que describe la evolución de un observable en la imagen de Heisenberg

$$\frac{d}{dt}A_H(t) = \frac{i}{\hbar}[H_H(t), A_H(t)] + \frac{\partial A_H}{\partial t}, \quad (2.22)$$

pero aquí aparece un signo más en el conmutador. Esta diferencia se debe a que la ecuación de ρ se ha obtenido en la imagen de Schrödinger, donde los estados evolucionan en el tiempo. En la imagen de Heisenberg, los estados no evolucionan, mientras que los operadores sí mediante $A_H(t) = U^\dagger(t, t_0)A_S(t)U(t, t_0)$. Con esta expresión y la ecuación (2.20), es fácil comprobar que $\rho_H(t) = \rho(0)$, lo que indica que el operador densidad no evoluciona en la imagen de Heisenberg.

Recapitulando, la ecuación (2.21) juega el mismo papel en la evolución del operador densidad que la ecuación de Schrödinger en la evolución de los estados. A continuación veamos algunos resultados y propiedades adicionales para el operador densidad.

2.2.3 Conservación de la probabilidad

Primero vamos a demostrar la propiedad

$$\text{tr}[f(\rho)] = \text{cte.} \quad (2.23)$$

Como $\rho(t)$ se obtiene aplicando el operador de evolución $U(t, 0) = \exp(iHt/\hbar)$ a ambos lados de $\rho(0)$, y dicho operador es unitario $U^\dagger U = \mathbb{I}$, podemos simplificar en la siguiente expresión

$$\rho^n(t) = [U(t, 0)\rho(0)U^\dagger(t, 0)]^n = U(t, 0)\rho^n(0)U^\dagger(t, 0). \quad (2.24)$$

Usando este resultado y que la traza es invariante ante permutaciones cíclicas, llegamos a

$$\text{tr}[\rho^n(t)] = \text{tr}[U(t, 0)\rho^n(0)U^\dagger(t, 0)] = \text{tr}[U^\dagger(t, 0)U(t, 0)\rho^n(0)] = \text{tr}[\rho^n(0)] = \text{cte.} \quad (2.25)$$

Sea $f(\rho)$ cualquier función del operador densidad que podamos desarrollar en series de Taylor. Usando que la traza es aditiva, $\text{tr}(A + B) = \text{tr}(A) + \text{tr}(B)$, y desarrollando $f(\rho)$ en series obtenemos finalmente

$$\text{tr}[f(\rho(t))] = \text{tr}[f(\rho(0))] = \text{cte.} \quad (2.26)$$

Otra forma de obtener este resultado es usando la expresión explícita del operador densidad:

$$\begin{aligned}
 \rho &= \sum_i w_i |i\rangle \langle i| \Rightarrow \rho^2 = \sum_{i,j} w_i w_j |i\rangle \langle i|j\rangle \langle j| = \sum_i w_i^2 |i\rangle \langle i| \\
 \Rightarrow \rho^n &= \sum_i w_i^n |i\rangle \langle i| \Rightarrow f(\rho) = \sum_i f(w_i) |i\rangle \langle i| \\
 \Rightarrow \text{tr}[f(\rho)] &= \sum_j \langle j| f(\rho) |j\rangle = \sum_i f(w_i) = \text{cte}, \tag{2.27}
 \end{aligned}$$

donde los cálculos se han realizado en cualquier instante de tiempo, $|i\rangle = |i(t)\rangle$.

La conservación de la probabilidad se obtiene directamente de esta expresión, a la cual hemos llegado solo con la definición de matriz densidad y su evolución en el tiempo. Para ello, particularizamos la ecuación anterior para $f(\rho) = \rho$,

$$\text{tr}(\rho) = \sum_i w_i = \text{cte} := 1. \tag{2.28}$$

La evolución en el tiempo descrita por el operador de evolución $U(t, 0)$, cambia la forma del operador densidad pero deja sus autovalores invariantes, como era de esperar para una transformación unitaria.

3 Integral de camino en mecánica cuántica

3.1 Deducción de la integral de camino

Vamos a obtener la integral de camino postulada en la introducción. Por simplicidad, nos restringiremos a un problema monodimensional donde el hamiltoniano no depende del tiempo y el potencial no depende del momento P . Para ello realizamos una serie de transformaciones al propagador

$$K(x, t; x', 0) = \langle x | U(t, 0) | x' \rangle, \quad (3.1)$$

definido a partir del operador de evolución

$$U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}. \quad (3.2)$$

Dicho operador tiene esta forma para un problema donde el hamiltoniano es independiente del tiempo $H \neq H(t)$, véase el Apéndice A.

Como H siempre conmuta con sí mismo en el caso estacionario, podemos escribir

$$U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = \left(e^{-\frac{i}{\hbar} H \frac{t}{N}} \right)^N = \left(e^{-\frac{i}{\hbar} H \varepsilon} \right)^N = (U(\varepsilon, 0))^N, \quad \forall N \in \mathbb{N}, \quad (3.3)$$

donde hemos definido $\varepsilon = t/N$. El operador evolución se puede ver por tanto como el producto de N operadores evolución que nos desplazan un tiempo infinitesimal ε , ya que vamos a considerar que dicho tiempo es muy pequeño al tomar el límite $N \rightarrow \infty$. Este límite nos permite escribir la igualdad aproximada

$$U(\varepsilon, 0) = e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{P^2}{2m} + V(X) \right)} \simeq e^{-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)}, \quad (3.4)$$

cuya demostración está disponible en el Apéndice B (fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff, ecuación (B.11)). La diferencia entre los dos miembros de la igualdad aproximada (3.4) es del orden del conmutador de los exponentes, que es claramente del orden de ε^2 . Usando (3.4) obtenemos la expresión

$$\begin{aligned} K(x, t; x', 0) &= \langle x | \left(e^{-\frac{i}{\hbar} H \varepsilon} \right)^N | x' \rangle \\ &\simeq \langle x | e^{-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)} \cdot e^{-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)} \cdot \dots | x' \rangle. \end{aligned} \quad (3.5)$$

El siguiente paso es introducir la identidad mediante el cierre

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| \quad (3.6)$$

$N-1$ veces en la ecuación (3.5) y redefinir los dos puntos extremos como $x \rightarrow x_N$, $x' \rightarrow x_0$ (esta notación se usa a lo largo de toda la sección). Entonces,

$$\begin{aligned} K(x, t; x', 0) &= K(x_N, t; x_0, 0) \\ &\simeq \langle x_N | e^{-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} |x_{N-1}\rangle \langle x_{N-1}| \\ &\quad \times e^{-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-2} |x_{N-2}\rangle \langle x_{N-2}| \dots |x_0\rangle \\ &= \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} dx_n \right] \left[\prod_{n=1}^N \langle x_n | e^{-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)} |x_{n-1}\rangle \right]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

En la notación que usamos para la integral va implícito que tenemos $N - 1$ integrales. Usando la propiedad $f(X) |x\rangle = f(x) |x\rangle$ para el potencial $V(X)$ y gracias a la expresión para el propagador de la partícula libre, que deducimos en el Apéndice A,

$$\langle x_n | e^{-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2} |x_{n-1}\rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} e^{\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\varepsilon}}, \quad (3.8)$$

podemos obtener el propagador total

$$\begin{aligned} K(x_N, t; x_0, 0) &\simeq \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} dx_n \right] \left[\prod_{n=1}^N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} e^{\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\varepsilon}} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x_{n-1})} \right] \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} dx_n \right] e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[\frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\varepsilon^2} - V(x_{n-1}) \right]}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

El cálculo anterior puede formalizarse de modo más riguroso utilizando la fórmula del producto de Trotter (véase el Apéndice B), esto es,

$$e^{A+B} = \lim_{N \rightarrow \infty} (e^{A/N} e^{B/N})^N. \quad (3.10)$$

La “Trotterización” (3.10) hace que la igualdad aproximada en (3.5) pase a ser una igualdad estricta en el límite $N \rightarrow \infty$. Esto nos lleva finalmente a la siguiente expresión

rigurosamente valida para el propagador,

$$\begin{aligned}
 K(x_N, t; x_0, 0) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} dx_n \right] e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{n=1}^N \left[\frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\varepsilon^2} - V(x_{n-1}) \right]} \\
 &= \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x_N} \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t L(x, \dot{x}) dt' \right\}. \tag{3.11}
 \end{aligned}$$

En la última igualdad hemos usado la notación de la integral de camino

$$\int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x_N} \mathcal{D}x = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} dx_n \right], \tag{3.12}$$

que debe ser entendida tal como hemos indicado, como una mera notación. Para definir lo que significa la integral de camino y calcularla necesitamos la forma discreta obtenida en (3.9) ó (3.11), que nos permite realizar la integración. La forma continua es útil pues condensa mucha información en poco espacio. El lagrangiano $L(x, \dot{x}) = m\dot{x}^2/2 - V(x)$ se obtiene en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$, en el que $(x_n - x_{n-1})/\varepsilon \rightarrow \dot{x}$ y el sumatorio de la exponencial tiende a una integral sobre el tiempo entre 0 y t .

Usando la forma funcional de la acción

$$S[x] = \int_{t_1}^{t_2} L(x(t), \dot{x}(t), t) dt \tag{3.13}$$

podemos reescribir la integral de camino en la forma que postulamos en la introducción, esto es,

$$K(x_N, t; x_0, 0) = \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x_N} \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x] \right\}. \tag{3.14}$$

La integral de camino así obtenida, utilizando el cierre de la base de posiciones $\{|x\rangle\}$, se denomina *integral de camino en el espacio de configuración*.

Si introducimos un doble cierre $I = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| = \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p|$ en la ecuación (3.5) (posiciones y momentos), se obtiene la *integral de camino en el espacio fásico*. Concretamente, el cierre de la base de posiciones se introduce $N - 1$ veces, mientras que el

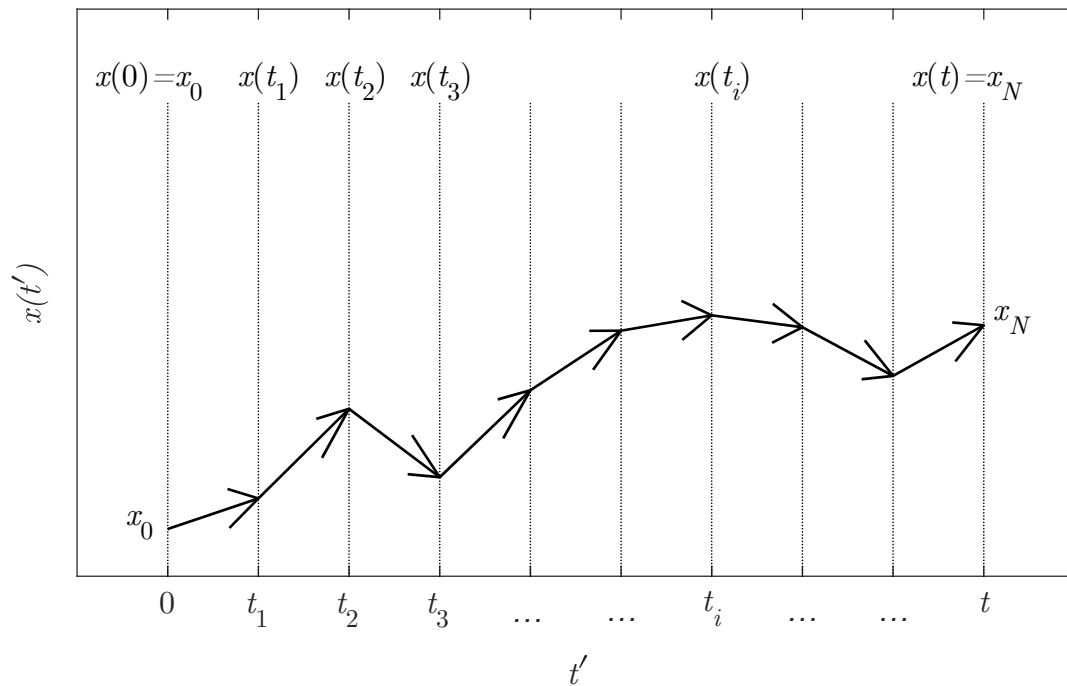


Figura 2. Discretización de la trayectoria $x(t')$ frente al tiempo t' . La trayectoria se divide en $N + 1$ puntos $x(t_i)$, donde el instante de tiempo t_i se alcanza tras haber avanzado i veces el tiempo infinitesimal $\varepsilon = t/N$, con t el tiempo final. Los extremos se encuentran fijos $x(0) = x_0, x(t) = x_N$ y actúan como condiciones de contorno de la integral de camino. Para sumar sobre todas las trayectorias, es decir, calcular la integral de camino, hemos de integrar cada punto $x_i = x(t_i)$ desde $-\infty$ hasta $+\infty$, para luego tomar el límite $N \rightarrow \infty$.

cierre de la base de momentos se introduce N veces, como sigue

$$\begin{aligned}
K(x_N, t; x_0, 0) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x_N | e^{-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp_N |p_N\rangle \langle p_N| e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} |x_{N-1}\rangle \langle x_{N-1}| \\
&\quad \times e^{-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp_{N-1} |p_{N-1}\rangle \langle p_{N-1}| \dots |x_0\rangle \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{n=1}^N dp_n \right] \left[\prod_{n=1}^{N-1} dx_n \right] e^{\frac{-i\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[\frac{p_n^2}{2m} + V(x_{n-1}) \right]} \left[\prod_{n=1}^N \langle x_n | p_n \rangle \langle p_n | x_{n-1} \rangle \right] \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{n=1}^N \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \left[\prod_{n=1}^{N-1} dx_n \right] e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[\frac{p_n(x_n - x_{n-1})}{\varepsilon} - \frac{p_n^2}{2m} - V(x_{n-1}) \right]}, \quad (3.15)
\end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta que

$$\langle x | p \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}. \quad (3.16)$$

De nuevo, la suma en el exponente se convierte en una integral en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$, lo que lleva al resultado

$$\begin{aligned}
K(x_N, t; x_0, 0) &= \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x_N} \mathcal{D}p \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t [p\dot{x} - H(x, p)] dt' \right\} \\
&= \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x_N} \mathcal{D}p \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x, p] \right\}. \quad (3.17)
\end{aligned}$$

De nuevo nos aparece la acción en el exponente, pero ahora en la descripción hamiltoniana. Consistentemente con la independencia de x y p en esta descripción, la integral funcional se realiza ahora sobre todos las posibles trayectorias $x(t')$ y $p(t')$ que conectan los puntos x_0 y x_N .

Existe una conexión directa entre las integrales de camino en que hemos obtenido en el espacio de configuración y en el espacio fásico. Nótese que nuestras deducciones usan, en los dos casos, que P aparece de forma cuadrática en el hamiltoniano. En este caso, las integrales sobre todos los p_n en la ecuación (3.15) son gaussianas y se pueden realizar

explícitamente según el procedimiento desarrollado en el Apéndice C,

$$\begin{aligned}
K(x_N, t; x_0, 0) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} dx_n \right] e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N V(x_{n-1})} \prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{p_n(x_n - x_{n-1})}{\varepsilon} - \frac{p_n^2}{2m} \right]} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} dx_n \right] e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N V(x_{n-1})} \prod_{n=1}^N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} e^{\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\varepsilon}} \\
&= \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x_N} \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x] \right\}. \tag{3.18}
\end{aligned}$$

Si P no aparece en forma cuadrática, como $H(X, P) = K(P) + V(X)$ con una energía cinética no cuadrática en P , la integral de camino en el espacio fásico sigue siendo válida pero no así la integral de camino en el espacio de configuración. Esto se debe a que no podemos obtener una expresión explícita, análoga a la ecuación (3.8) para el caso cuadrático, para el propagador infinitesimal correspondiente a la energía cinética no cuadrática $K(P)$.

Por último, conviene comentar que todo el procedimiento se puede extrapolar a trayectorias en \mathbb{R}^d . En coordenadas cartesianas, la energía cinética se podría expresar como la suma sobre las d componentes del momento lineal, y el cierre (3.6) habría que introducirlo para las d dimensiones espaciales. La forma final de la integral de camino es totalmente igual (3.12) salvo los factores de normalización y las variables de integración.

$$\int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}(t)=\mathbf{x}_N} \mathcal{D}\mathbf{x} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{d/2} \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{d/2} d\mathbf{x}_n \right], \tag{3.19}$$

3.2 Aplicaciones y casos sencillos

En este subapartado vamos a calcular el propagador, para diferentes sistemas cuánticos relativamente sencillos, a partir de la integral de camino.

3.2.1 Partícula libre

Aunque realmente este caso puede resolverse por métodos “elementales”, como se hace en el Apéndice A, está bien volver a él desde el punto de vista de la integral de camino y comprobar que proporciona el resultado correcto. En general, una partícula se considera

libre si no está sometida a ningún potencial, por lo que podremos escribir su acción como

$$S[x] = \int_0^t \frac{1}{2} m \dot{x}^2 dt' = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \frac{m}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} \right)^2 \varepsilon. \quad (3.20)$$

El propagador queda, empleando (3.12) y (3.14),

$$\begin{aligned} K(x, t; x', 0) &= \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x_N} \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x] \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N/2} \int \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} dx_n \exp \left[\sum_{n=1}^N \frac{im}{2\hbar \varepsilon} (x_n - x_{n-1})^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Con el cambio de variable $y_n = \left(\frac{m}{2\hbar \varepsilon} \right)^{1/2} x_n$ la expresión se simplifica a

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{i\pi} \right)^{N/2} \left(\frac{m}{2\hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \int \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} dy_n \exp \left[- \sum_{n=1}^N \frac{(y_n - y_{n-1})^2}{i} \right] \right\}. \quad (3.22)$$

Esta sucesión de integrales puede resolverse iterativamente. Separando la exponencial en factores, la primera integral a realizar sería

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \exp \left\{ -\frac{1}{i} [(y_2 - y_1)^2 + (y_1 - y_0)^2] \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \exp \left[-\frac{2}{i} y_1^2 - 2iy_1(y_2 + y_0) + i(y_2^2 + y_0^2) \right] \\ &= \left[\begin{array}{l} a = 4/i \\ b = -2i(y_2 + y_0) \\ c = i(y_2^2 + y_0^2) \end{array} \right] = \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \exp \left(-\frac{1}{2} a y_1^2 + b y_1 + c \right) \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \exp \left(\frac{b^2}{2a} + c \right) = \sqrt{\frac{i\pi}{2}} e^{-(y_2 - y_0)^2 / 2i}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Hemos usado la fórmula genérica de la integral gaussiana con un término lineal (véase Apéndice C, ecuación (C.1)). La segunda integral a realizar es

$$\begin{aligned} &\sqrt{\frac{i\pi}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \exp \left\{ -\frac{1}{i} [(y_3 - y_2)^2 + (y_2 - y_0)^2 / 2] \right\} \\ &= \dots = \sqrt{\frac{i\pi}{2}} e^{-(y_2 + y_0)^2 / 2i} \sqrt{\frac{2i\pi}{3}} e^{(y_0 + y_3)^2 / 6i} = \sqrt{\frac{(i\pi)^2}{3}} e^{-(y_3 - y_0)^2 / 3i}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Ya podemos apreciar la forma final que tiene la sucesión de integrales. Como el cálculo es tedioso, expondremos el resultado final (véase la sección 8.4 de [4] para más detalle).

$$\begin{aligned}
K_{\text{free}}(x_N, t; x_0, 0) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{i\pi} \right)^{N/2} \left(\frac{m}{2\hbar\varepsilon} \right)^{1/2} \int \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} dy_n \exp \left[- \sum_{n=1}^N \frac{(y_n - y_{n-1})^2}{i} \right] \right\} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{i\pi} \right)^{N/2} \left(\frac{m}{2\hbar\varepsilon} \right)^{1/2} \frac{(i\pi)^{(N-1)/2}}{N^{1/2}} e^{-(y_N - y_0)^2 / Ni} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar N \varepsilon} \right)^{1/2} e^{im(x_N - x_0)^2 / 2\hbar N \varepsilon} \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} e^{im(x_N - x_0)^2 / 2\hbar t} \tag{3.25}
\end{aligned}$$

que coincide con el propagador de la partícula libre en (3.8).

3.2.2 Potenciales de la forma $V = a + bx + cx^2 + d\dot{x} + e\dot{x}x$

Queremos escribir el propagador (3.14) para un problema donde el potencial tenga una forma cuadrática general. Para ello vamos a escribir las trayectorias que conectan dos puntos $x' \equiv x_0$ y $x \equiv x_N$ como $x(t') = x_{\text{cl}}(t') + y(t')$, donde $x_{\text{cl}}(t')$ es la trayectoria clásica del sistema e $y(t')$ se puede ver como una variación de dicha trayectoria $\delta x(t')$. Debe quedar claro el abuso de notación: x es un punto en el espacio al cual queremos propagar nuestro estado y $x(t')$ es la trayectoria dinámica del sistema. Debido a que todas las trayectorias posibles parten del punto fijo $x(0) = x_0$ y llegan hasta $x(t) = x_N$, se tiene que $y(0) = y(t) = 0$, donde aquí t es el instante de tiempo final al que propagamos la función de onda (no es una variable como t').

Nuestro siguiente paso es intentar calcular la integral de camino. Para ello procedemos, como siempre, a segmentar nuestras trayectorias en N partes, donde N es un número que después haremos tender a infinito. Como la trayectoria clásica es única, $x_{\text{cl}}(t_n)$ va a tener un único valor para un tiempo t_n , por lo que x_{cl_n} no se va a convertir en una variable de integración al discretizar. En resumen, la integral de camino queda

$$\int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x_N} \mathcal{D}x = \int_{y(0)=0}^{y(t)=0} \mathcal{D}y, \tag{3.26}$$

que en forma discreta equivale a decir $dx_n = dy_n \quad \forall n = 1, \dots, N-1$. El propagador a

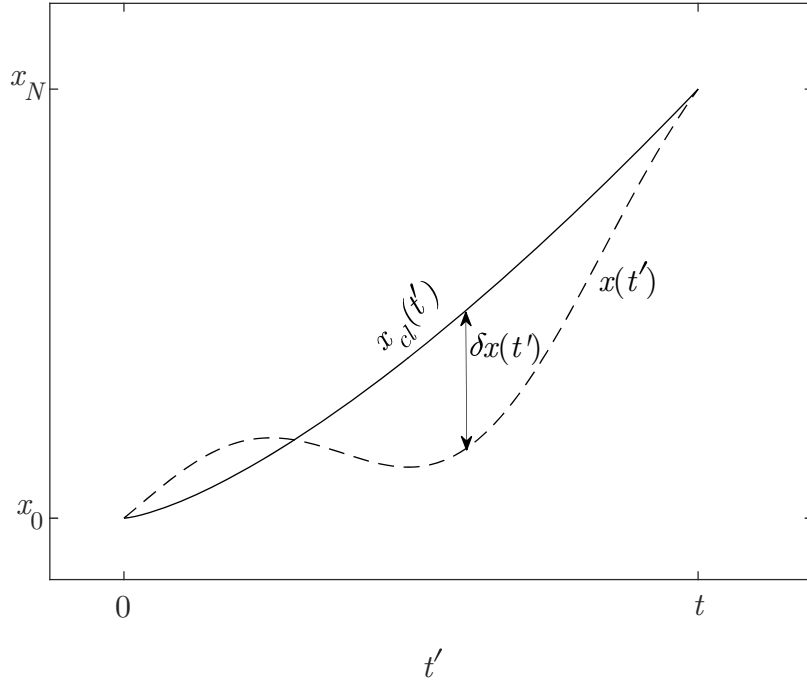


Figura 3. Trayectoria clásica $x_{cl}(t')$ y trayectoria variada $x(t')$ frente al tiempo t' . La variación de la trayectoria clásica se denota con $\delta x(t')$, y las condiciones de contorno de ambas trayectorias son las mismas $x(0) = 0$, $x(t) = x_N$.

calcular es

$$K(x, t; x', 0) = \int_{y(0)=0}^{y(t)=0} \mathcal{D}y \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl} + y]\right\}, \quad (3.27)$$

donde se sigue la notación $x' = x_0 = x(0) = x_{cl}(0) + y(0) = x_{cl}(0)$ y $x = x_N = x(t) = x_{cl}(t) + y(t) = x_{cl}(t)$. La dependencia con x y x' ya no está en las condiciones de contorno de la integral de camino como de costumbre, sino en la acción a través de x_{cl} .

El próximo paso es obtener la acción $S[x_{cl} + y] = \int_0^t L(x_{cl} + y, \dot{x}_{cl} + \dot{y}) dt'$. Como el potencial que tenemos es cuadrático, podemos escribir de forma exacta la igualdad

$$\begin{aligned} L(x_{cl} + y, \dot{x}_{cl} + \dot{y}) = & \underbrace{L(x_{cl}, \dot{x}_{cl})}_1 + \underbrace{\frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x_{cl}} y + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x_{cl}} \dot{y}}_2 \\ & + \frac{1}{2} \left(\underbrace{\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \Big|_{x_{cl}} y^2 + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \Big|_{x_{cl}} y \dot{y} + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \Big|_{x_{cl}} \dot{y}^2}_3 \right). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Analicemos cada sumando entre llaves de la anterior expresión.

1. El primero, al ser introducido en la integral de la acción, nos produce la acción clásica

$$\int_0^t L(x_{\text{cl}}, \dot{x}_{\text{cl}}) dt' = S[x_{\text{cl}}] := S_{\text{cl}}(x, x', t), \quad (3.29)$$

cuya forma explícita depende de las condiciones de contorno del problema como dijimos, $x = x(t) = x_{\text{cl}}(t)$, $x' = x(0) = x_{\text{cl}}(0)$.

2. El segundo se hace nulo debido a la ecuaciones de Euler-Lagrange ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x_{\text{cl}}} y &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x_{\text{cl}}} \right) y = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x_{\text{cl}}} y \right) - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x_{\text{cl}}} \dot{y} \\ \Rightarrow \frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x_{\text{cl}}} y + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x_{\text{cl}}} \dot{y} &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x_{\text{cl}}} y \right), \end{aligned} \quad (3.30)$$

y a las condiciones de contorno $y(0) = y(t) = 0$, tras integrar en la acción.

3. Recordando la expresión del potencial $V(x, \dot{x}) = a + bx + cx^2 + d\dot{x} + e\dot{x}x$ podemos calcular el último término con $L = T - V$.

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} = -c \quad , \quad \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} = -e \quad , \quad \frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} = m. \quad (3.31)$$

Finalmente, nuestro propagador (3.27) queda

$$\begin{aligned} K(x, t; x'0) &= \exp\left(\frac{iS_{\text{cl}}(x, x', t)}{\hbar}\right) \int_{y(0)=0}^{y(t)=0} \mathcal{D}y \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{1}{2}m\dot{y}^2 - cy^2 - ey\dot{y}\right) dt'\right] \\ &= \exp\left(\frac{iS_{\text{cl}}(x, x', t)}{\hbar}\right) \int_{y(0)=0}^{y(t)=0} \mathcal{D}y \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{1}{2}m\dot{y}^2 - cy^2\right) dt'\right], \end{aligned} \quad (3.32)$$

donde el término $ey\dot{y}$ no contribuye porque su integral, que es inmediata, es nula por las condiciones de contorno homogéneas. Esto era previsible, ya que

$$ex\dot{x} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2}x^2 \right), \quad (3.33)$$

y sabemos que dos lagrangianos cuya diferencia sea la derivada total de una función de las coordenadas generalizadas y del tiempo son equivalentes (véase el capítulo 1 de [5]). Toda la dependencia con la acción clásica queda fuera de la integral funcional, por lo que

esta se puede escribir de forma abreviada

$$K(x, t; x', 0) = e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{cl}}(x, x', t)} A(t), \quad (3.34)$$

donde

$$A(t) = \int_{y(0)=0}^{y(t)=0} \mathcal{D}y \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{1}{2} m \dot{y}^2 - cy^2 \right) dt' \right]. \quad (3.35)$$

Recordemos que S_{cl} es la acción calculada para la trayectoria clásica del sistema, la cual es única y venía determinada por la condición extremal de la acción (ecuaciones de Euler-Lagrange). Las condiciones de contorno $x = x(t) = x_{\text{cl}}(t)$ y $x' = x(0) = x_{\text{cl}}(0)$ me determinan la forma de dicha trayectoria $x_{\text{cl}}(t')$, por lo que también determinan la forma final que tendrá la acción clásica $S_{\text{cl}} = S[x_{\text{cl}}]$.

Podemos reobtener el propagador de la partícula libre (3.25) simplemente tomando $c = 0$. En este caso

$$A(t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2}. \quad (3.36)$$

Otro hecho curioso es que, en la forma final que hemos obtenido, no aparecen por ningún lado los términos lineales del potencial, por lo que la expresión de $A(t)$ es la misma para todos los potenciales de la forma $V(x) = a + bx$. Para el caso particular del oscilador armónico, $c = m\omega^2/2$, $e = 0$, la integral de camino que queda se puede resolver. Esto lo veremos más adelante en la sección 4.3.

La forma que hemos obtenido del propagador, donde la dependencia temporal está concentrada en $A(t)$, nos permite calcular probabilidades y valores medios sin conocer a priori la forma de dicho factor.

$$\begin{aligned} \Phi(x, t) &\stackrel{(A.6)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(x, t; x', t_0) \Phi(x', t_0) = A(t) \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{\frac{i S_{\text{cl}}(x, x', t)}{\hbar}} \Phi(x', t_0) \\ \Rightarrow \langle O \rangle_{\Phi}(t) &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi^*(x, t) O \Phi(x, t)}{\int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi^*(x, t) \Phi(x, t)} \neq f(A(t)). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Esta propiedad la podemos aplicar siempre que el operador O no actúe en la variable tiempo, y por supuesto siempre que el potencial tenga la forma que postulábamos al principio de la sección.

3.3 Equivalencia con la ecuación de Schrödinger

La fórmula de la integral de camino (3.11) funciona también para sistemas no estacionarios, donde $H = H(t)$. Una deducción rigurosa necesitaría expresar el operador evolución con el operador de ordenación temporal

$$U(t, t_0) = T \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right), \quad (3.38)$$

y a partir de aquí obtener la integral de camino como en el apartado 2.1. En su lugar vamos a obtener el propagador a partir de la ecuación de la integral de camino que ya conocemos (3.14), para después demostrar que el estado propagado cumple la ecuación de Schrödinger. Así habremos demostrando que en general la fórmula que conocemos es válida también para sistemas no estacionarios.

En primer lugar vamos a propagar un tiempo infinitesimal $\varepsilon = t - t_0$ nuestro estado inicial $|\Phi(t_0)\rangle$. Para ello usamos que el propagador actúa como una función de Green en la representación de posiciones, véase la ecuación (A.6) del Apéndice B.

$$\Phi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(x, t; x', t_0) \Phi(x', t_0). \quad (3.39)$$

Si por hipótesis la fórmula (3.14) es válida para este caso donde $L(t) = T - V(t)$, podremos escribir el propagador como la integral de camino ya discretizada

$$K(x, t; x', t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} dx_n \right] \exp \left(\frac{i}{\hbar} S^{(N)}(x) \right), \quad (3.40)$$

donde $S^{(N)}(x)$ es la acción (3.13) pero expresada en forma de diferencias finitas, la cual depende de todos los puntos x_i abreviados como x .

$$S^{(N)}(x) = \sum_{n=1}^N \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_{n-1}, t_0 + n\varepsilon) \right] \varepsilon. \quad (3.41)$$

Como el tiempo que nos desplazamos es infinitesimal $\varepsilon = t - t_0$, la sucesión de integrales se reduce a

$$K(x, t; x', t_0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x - x'}{\varepsilon} \right)^2 - V(x', t_0) \right] \varepsilon \right\}. \quad (3.42)$$

Esta expresión se puede obtener por otro método, usando el operador evolución infinitesimal que mostrábamos en la ecuación (3.4) pero en un caso más genérico, donde existe dependencia temporal en el hamiltoniano. Más concretamente,

$$\begin{aligned} U(t_0 + \varepsilon, t_0) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t_0)\varepsilon\right) = \exp\left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left(\frac{P^2}{2m} + V(X, t_0)\right)\right] \\ &\simeq \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\frac{P^2}{2m}\right) \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V(x, t_0)\right), \end{aligned} \quad (3.43)$$

$$K(x, t_0 + \varepsilon; x', t_0) = \langle x|U(t_0 + \varepsilon, t_0)|x'\rangle \stackrel{(3.8)}{=} \dots = (3.42) \quad (3.44)$$

En la expresión (3.43) el símbolo de igualdad aproximada significa que se han despreciado términos de orden ε^2 y superiores. Dicha igualdad es posible gracias a la fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff (véase la ecuación (B.11)). Esta idea es la que hay detrás del operador de ordenación temporal, cuando cada operador de evolución infinitesimal $U(t_i + \varepsilon, t_i)$ tiene un hamiltoniano evaluado en un instante t_i distinto, y es necesario ordenarlos en el tiempo para calcular el operador evolución $U(t, t_0)$.

Ahora que tenemos el propagador infinitesimal podemos retomar la ecuación (3.39).

$$\Phi(x, t_0 + \varepsilon) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\varepsilon\hbar} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}V(x', t_0)\right] \Phi(x', t_0). \quad (3.45)$$

De todos los términos de la integral nos vamos a centrar en $\exp[im(x-x')/2\varepsilon\hbar]$, el cual va a oscilar rápidamente cuando varíe $(x-x')$, ya que ε es infinitesimal. Cuando una función que oscila tan rápido aparece multiplicando a otra que es suave como $\Phi(x', t_0)$ (la cual pertenece a las funciones de cuadrado integrable) en una integral como la de la expresión anterior, esta se anula en la mayor parte del intervalo debido a las rápidas oscilaciones de la fase de la exponencial. Este método se conoce como el método de la fase estacionaria, que se discute en detalle en la sección 6.5 de la referencia [6]. Como ocurría al principio en el cálculo introductorio de la integral de camino, la única contribución sustancial a la integral ocurre en la región donde la fase $m(x-x')/2\varepsilon\hbar$ es estacionaria. Definiendo $\eta = x' - x$, la fase estacionaria ocurre en $\eta = 0$, y la región de coherencia (en la cual la exponencial contribuye a la integral) queda delimitada por la condición

$$\frac{m\eta^2}{2\varepsilon\hbar} \lesssim \pi \Leftrightarrow |\eta| \lesssim \left(\frac{2\varepsilon\hbar\pi}{m}\right)^{1/2}. \quad (3.46)$$

Esta condición se entiende mejor si recordamos la Introducción 2.1, donde la interferencia destructiva de las trayectorias se producía cuando la diferencia de fase era mayor que π .

Retomando la integral (3.45),

$$\Phi(x, t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp \left[\frac{im\eta^2}{2\varepsilon\hbar} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x + \eta, t_0) \right] \Phi(x + \eta, t_0), \quad (3.47)$$

desarrollamos en potencias en torno a x hasta primer orden en ε y por lo tanto hasta segundo orden en η según (3.46). Para la función Φ ,

$$\begin{aligned} \Phi(x + \eta, t_0) &= \Phi(x', t_0) \simeq \\ &\simeq \Phi(x, t_0) + \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x'} \right|_{x'=x} (x' - x) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x'^2} \right|_{x'=x} (x' - x)^2 + \mathcal{O}((x' - x)^3) \\ &= \Phi(x, t_0) + \eta \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x'} \right|_{x'=x} + \frac{\eta^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x'^2} \right|_{x'=x} + \mathcal{O}(\eta^3), \end{aligned} \quad (3.48)$$

y para el término que incluye el potencial,

$$\begin{aligned} \exp \left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x + \eta, t_0) \right) &\simeq 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x + \eta, t_0) \\ &\simeq 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[V(x, t_0) + \eta \left. \frac{\partial V}{\partial x'} \right|_{x'=x} + \mathcal{O}(\eta^2) \right] \\ &\simeq 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, t_0) + \mathcal{O}(\eta\varepsilon). \end{aligned} \quad (3.49)$$

Combinando las ecuaciones (3.48) y (3.49) se obtiene que

$$\begin{aligned} \Phi(x + \eta, t_0) \exp \left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x + \eta, t_0) \right) &\simeq \Phi(x, t_0) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \Phi(x, t_0) V(x, t_0) + \eta \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x'} \right|_{x'=x} \\ &\quad + \frac{\eta^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x'^2} \right|_{x'=x} + \mathcal{O}(\eta\varepsilon). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Hemos tenido en cuenta que los términos del orden de $\eta\varepsilon$ van como η^3 , ya que ε es de orden η^2 según (3.46). La integral (3.47) queda

$$\begin{aligned} \Phi(x, t) &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp \left(\frac{im\eta^2}{2\varepsilon\hbar} \right) \left[\Phi(x, t_0) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \Phi(x, t_0) V(x, t_0) + \right. \\ &\quad \left. + \eta \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x'} \right|_{x'=x} + \frac{\eta^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x'^2} \right|_{x'=x} + \mathcal{O}(\eta\varepsilon) \right], \end{aligned} \quad (3.51)$$

y aplicando las propiedades de la integral gaussianas del Apéndice C, la función de onda

toma la forma

$$\begin{aligned} \Phi(x, t) = & \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{1/2} \left[\left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{1/2} \Phi(x, t_0) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{1/2} \Phi(x, t_0) V(x, t_0) \right. \\ & \left. + \frac{\hbar \varepsilon}{2im} \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{1/2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.52)$$

El sumando con la derivada primera y el que contiene $\mathcal{O}(\eta\varepsilon) = \mathcal{O}(\eta^3)$ son nulos por paridad. Finalmente, reordenando y simplificando la última expresión obtenida, aparece la ecuación de Schrödinger para un desplazamiento infinitesimal de tiempo,

$$\Phi(x, t) - \Phi(x, t_0) = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t_0) \right] \Phi(x, t_0). \quad (3.53)$$

Tomando el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ y teniendo en cuenta la definición de derivada obtenemos la ecuación de Schrödinger en la base de posiciones.

Existe la posibilidad de generalizar la integral de camino al espacio euclídeo \mathbb{R}^d simplemente cambiando x por \mathbf{x} e introduciendo exponentes $d/2$ (en vez de $1/2$) en los factores de normalización, como hicimos al escribir (3.19). De esto se sirve L. S. Schulman para deducir la ecuación de Schrödinger para el potencial electromagnético a partir de la integral de camino (véase la sección 4 en la referencia [7]).

Mientras en el apartado 3.1 hemos deducido la expresión la integral de camino a partir de la ecuación de Schrödinger, en este apartado 3.3 hemos optado por el camino inverso, para demostrar que ambas formulaciones son equivalentes. En los textos modernos de mecánica cuántica se opta por una formulación más general de la misma, donde a partir del operador evolución se obtiene la dinámica del sistema en sus dos versiones, ecuación de Schrödinger e integral de camino (véase el capítulo 2 de [8] y los capítulos 3 y 6 de [9]). De forma esquemática:

- Apartado 3.1 Ecuación Schrödinger \longrightarrow $U(t, t_0)$ \longrightarrow Integral de camino
- Apartado 3.3 Ecuación Schrödinger \longleftarrow $U(t, t_0)$ \longleftarrow Integral de camino
- Formulación moderna [8], [9] Ecuación Schrödinger \longleftarrow $U(t, t_0)$ \longrightarrow Integral de camino

La idea de la formulación “moderna” puede resumirse del modo siguiente. Debido a la linealidad de la mecánica cuántica, debe existir un operador lineal que haga evolucionar los estados según $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$. Como la evolución temporal debe preservar la norma de la función de onda, el operador $U(t, t_0)$ ha de ser unitario, $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = \mathbb{I}$. Además tenemos la identidad $U(t, t) = \mathbb{I}$. Estas propiedades más la clausura y asociatividad hacen que $U(t, t_0)$ pertenezca al grupo unitario de operadores actuando sobre funciones de onda. Su versión infinitesimal tiene la forma $U(t, t_0) = \mathbb{I} + iG(t_0)(t - t_0)$, donde G debe ser un operador hermítico. Aplicando esta expresión de $U(t, t_0)$ sobre una función de onda $|\Psi(t_0)\rangle$ y tomando el límite $t - t_0 \rightarrow 0$ llegamos a la ecuación $i\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = -G(t) |\Psi(t)\rangle$, que no es más que la ecuación de Schrödinger, con la identificación $G(t) = -H(t)/\hbar$.

3.4 Dificultades. Potenciales singulares

En el caso de potenciales más complicados como el Coulombiano, donde aparece una potencia x^{-1} , la construcción de la integral de camino que tenemos deja de ser válida. Esto se debe a que en la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff (B.11) aparecen términos no despreciables de orden ε debido a los conmutadores. Por consiguiente la fórmula de Trotter (3.10) ya no es válida, ya que el operador potencial no está acotado. Esta discusión se sale del objetivo de este trabajo, un tratamiento riguroso de este caso se puede encontrar en [10].

4 Integral de camino en mecánica estadística

4.1 Matriz densidad en mecánica estadística

De acuerdo con la colectividad canónica, la probabilidad de que un sistema en equilibrio a temperatura T esté en el estado $|\varphi_i\rangle$ es

$$\frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}, \quad (4.1)$$

donde E_i es la energía asociada a $|\varphi_i\rangle$, solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo $H|\varphi_i\rangle = E_i|\varphi_i\rangle$ (nos centramos en sistemas conservativos, donde $H \neq H(t)$). Usamos la notación $\beta = (k_B T)^{-1}$ con k_B la constante de Boltzmann y $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$ la función de partición, que nos asegura la normalización de nuestra distribución de probabilidades. Recordemos de la ecuación (2.13d), que la probabilidad de que el sistema estuviese en el autoestado $|\varphi_i\rangle$ de la matriz densidad era w_i , la cual dependía del entorno en el que se encontraba sumergido nuestro sistema. En este caso concreto, dicha probabilidad será la canónica, postulada en la última ecuación. Por lo tanto el operador densidad se puede escribir

$$\rho = \sum_i w_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|, \quad \text{donde } w_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}. \quad (4.2)$$

Como $|\varphi_i\rangle$ son autoestados del hamiltoniano, podemos escribir

$$\rho = \sum_i \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta H} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \quad (4.3)$$

usando la relación de cierre. Se puede modificar aún más si tenemos en cuenta

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_n e^{-\beta E_n} \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = \sum_n \langle \varphi_n | e^{-\beta H} | \varphi_n \rangle = \text{tr}(e^{-\beta H}), \quad (4.4)$$

obteniendo finalmente

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{tr}(e^{-\beta H})}. \quad (4.5)$$

Recordemos que tanto H como ρ son operadores en este contexto. Nótese que es claro que ρ conmuta con H , luego el operador densidad no evoluciona en el tiempo de acuerdo con la ecuación de Liouville-von Neumann (2.21). Esto no podía ser de otra manera, ya que la colectividad canónica describe un sistema en equilibrio.

Ahora que tenemos la matriz densidad, podemos calcular cualquier valor esperado o valor medio de las magnitudes típicas en mecánica estadística, como por ejemplo la energía interna promedio del sistema

$$\langle H \rangle := U = \text{tr}(\rho H) = \frac{\text{tr}(H e^{-\beta H})}{\text{tr}(e^{-\beta H})}. \quad (4.6)$$

Si nos fijamos en el operador densidad como una función de β , podemos escribir que

$$\rho(\beta) = \frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)}. \quad (4.7)$$

Dado que la función de partición es simplemente un factor de normalización, podemos trabajar con el operador densidad sin normalizar, esto es, definimos $\rho(\beta) = e^{-\beta H}$. Para no complicar la notación, no introducimos un nuevo símbolo para el operador densidad sin normalizar. Simplemente recordamos que al calcular valores medios, habrá que dividir por $\text{tr}(\rho)$. Derivando respecto de β se obtiene la ecuación

$$\boxed{-\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = H \rho}. \quad (4.8)$$

También podemos deducir esta ecuación de un modo alternativo [3]: como sabemos que $\{|\varphi_i\rangle\}_i$ son autoestados del hamiltoniano, podemos escribir los elementos de matriz de ρ en dicha base,

$$\rho_{ij} = \langle \varphi_i | \rho | \varphi_j \rangle = \langle \varphi_i | e^{-\beta H} | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} e^{-\beta E_i}. \quad (4.9)$$

Derivando a ambos lados de la expresión

$$\frac{\partial \rho_{ij}}{\partial \beta} = -\delta_{ij} E_i e^{-\beta E_i} = -E_i \rho_{ij} \Rightarrow -\langle \varphi_i | \frac{\partial \rho}{\partial \beta} | \varphi_j \rangle = \langle \varphi_i | H \rho | \varphi_j \rangle, \quad (4.10)$$

que nos conduce a la ecuación (4.8). La condición inicial de (4.8) es $\rho(\beta = 0) = \mathbb{I}$.

La ecuación (4.8) nos permite obtener la matriz densidad de un sistema genérico en contacto con un baño térmico a temperatura T , donde conozcamos su hamiltoniano H . Sin duda, llama la atención la semejanza de esta ecuación con la ecuación de Schrödinger para el operador de evolución U . Las dos ecuaciones son formalmente idénticas si se realiza el cambio de variable $it/\hbar \rightarrow \beta$, que se conoce como rotación de Wick y veremos

más detalladamente en secciones posteriores de esta memoria. De forma heurística,

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = HU \xrightarrow{it/\hbar \rightarrow \beta} -\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = H\rho. \quad (4.11)$$

En la representación de posiciones $\rho(x, x') = \sum_i e^{-\beta E_i} \varphi_i(x) \varphi_i^*(x')$, la ecuación (4.8) toma la forma

$$-\frac{\partial \rho(x, x'; \beta)}{\partial \beta} = H_x \rho(x, x'; \beta), \quad \rho(x, x'; 0) = \delta(x - x'). \quad (4.12)$$

La notación H_x indica que el hamiltoniano se expresa en la representación de posiciones, $\langle x | H \rho(\beta) | x' \rangle = H_x \langle x | \rho(\beta) | x' \rangle = H_x \rho(x, x'; \beta)$. Las condiciones de contorno de la ecuación dependen del problema en cuestión y su geometría. Por simplicidad en los cálculos vamos a suponer, de aquí en adelante, que el sistema en el que estamos interesados es tan grande que se puede tratar como si fuese \mathbb{R} (monodimensional). Esto nos permite usar las bases continuas de posiciones y momentos como hasta ahora. En el caso de un sistema finito, debido a las condiciones de contorno en su frontera, el momento estaría cuantizado y no podríamos usar el cierre $\int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p|$. La función de partición tiene una expresión simple en la representación de posiciones, concretamente

$$Z(\beta) = \text{tr}(e^{-\beta H}) = \text{tr}(\rho(\beta)) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x | \rho(\beta) | x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, x; \beta). \quad (4.13)$$

4.2 Conexión con la integral de camino

Podríamos hacernos una pregunta, ¿por qué usar la ecuación de la matriz densidad (4.8), si tenemos directamente la forma de dicha matriz según (4.5)? La respuesta no es trivial, y para ello vamos a realizar un cálculo simple que nos llevará a un resultado sorprendente.

Consideremos el caso de la partícula libre $H = P^2/2m$ con P el operador momento lineal en una dimensión, que en la representación de posiciones equivale al operador diferencial $-i\hbar \partial_x$. Para obtener ρ en la representación de posiciones, resolvemos la ecuación (4.12),

$$\frac{\partial \rho(x, x'; \beta)}{\partial \beta} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, x'; \beta), \quad \rho(x, x'; 0) = \delta(x - x'). \quad (4.14)$$

Esta ecuación es una EDP típica de difusión en una dimensión. En concreto su solución

es una función de Green (*heat kernel*, ver Tema 5 de [11]).

$$\rho(x, x'; \beta) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} \exp\left[-\left(\frac{m}{2\hbar^2\beta}\right)(x-x')^2\right]. \quad (4.15)$$

El prefactor antes de la exponencial hace que en el límite $\beta \rightarrow 0$ tengamos la delta de Dirac. Un detalle a tener en cuenta es que esta solución es válida siempre que el entorno en el que resolvemos la ecuación sea \mathbb{R} . Como comentábamos antes, nuestro sistema es tan grande que a efectos prácticos lo trataremos como \mathbb{R} . En su defecto el problema se complica bastante, véase el capítulo 2 de [12] para una discusión detallada.

El proceso alternativo hubiera sido, en vez de resolver una EDP, obtener directamente

$$\begin{aligned} \rho(x, x') &= \langle x | \rho | x' \rangle \stackrel{(4.7)}{=} \langle x | e^{-\beta H} | x' \rangle = \langle x | e^{-\beta \frac{P^2}{2m}} | x' \rangle = \langle x | e^{-\beta \frac{P^2}{2m}} \int_{-\infty}^{\infty} dp | p \rangle \langle p | x' \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle \stackrel{(3.16)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \frac{1}{2\pi\hbar} e^{ip(x-x')/\hbar} \\ &= \left[\begin{array}{l} a = \beta/m \\ b = i(x-x')/\hbar \\ c = 0 \end{array} \right] = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \exp\left[-\frac{m(x-x')^2}{2\hbar^2\beta}\right] \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} \exp\left[-\frac{m(x-x')^2}{2\hbar^2\beta}\right], \end{aligned} \quad (4.16)$$

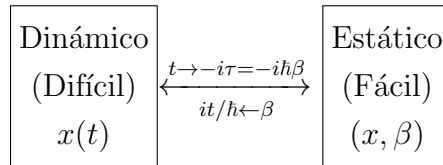
donde aplicamos la ecuación (C.1) para resolver la integral gaussiana. Así obtenemos la misma matriz densidad que resolviendo la EDP (4.15). Si el hamiltoniano hubiese sido algo más complicado, por ejemplo con un potencial $V(X)$, este procedimiento hubiera sido algo más complejo.

$$\begin{aligned} \rho(x, x') &= \langle x | e^{-\beta H} | x' \rangle = \langle x | e^{-\beta \frac{P^2}{2m} - \beta V(X)} | x' \rangle \stackrel{(3.10)}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x | \left(e^{-\frac{\beta P^2}{2mN}} e^{-\frac{\beta V(X)}{N}} \right)^N | x' \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x | e^{-\frac{\beta P^2}{2mN}} e^{-\frac{\beta V(X)}{N}} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} | x_{n-1} \rangle \langle x_{n-1} | e^{-\frac{\beta P^2}{2mN}} e^{-\frac{\beta V(X)}{N}} \dots \\ &\quad \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-\frac{\beta P^2}{2mN}} e^{-\frac{\beta V(X)}{N}} | x' \rangle. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Así llegamos a una expresión que tiene toda la pinta de la integral de camino para la partícula con un potencial genérico, que escribimos en la sección 3.1. Hemos pasado de una formulación diferencial (4.12) a una integral (4.17). A simple vista la forma diferencial parece más “amigable”, por eso es la que se introduce en la mayoría de cursos de mecánica cuántica y mecánica estadística. En este trabajo gracias a la artillería proporcionada en las

primeras secciones, podemos abordar este problema con la técnica de integral de camino.

La matriz densidad solución de la ecuación (4.12) será entonces igual al propagador de la ecuación de Schrödinger para una partícula que se mueve en el potencial $V(X)$, tras aplicar la rotación de Wick $it/\hbar \rightarrow \beta$ ó equivalentemente $t \rightarrow -i\tau = -i\hbar\beta$. La rotación de Wick puede entenderse como un método o “truco” para pasar de un problema dinámico en d dimensiones a uno estático en $d + 1$ dimensiones, o viceversa. En nuestro caso, podemos pasar de un problema dinámico cuántico en una dimensión a otro estático en dos dimensiones, donde las “coordenadas” son x y β .



Por tanto podemos escribir la ecuación (4.17) en la forma

$$\rho(x, x'; \beta) = K(x_N, \tau; x_0, 0) = \int_{x(0)=x_0}^{x(\tau)=x_N} \mathcal{D}x \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau L_{\text{stat}}(x, \dot{x}) d\tau' \right\}, \quad (4.18)$$

que equivale a aplicarle la rotación de Wick a la expresión (3.11), donde $x_N := x$, $x_0 := x'$, $\dot{x} = dx/d\tau$. El parámetro $\tau = \beta\hbar$ tiene unidades de tiempo y es tratado en la integral de camino como lo era t . Aunque a menudo se le llame tiempo imaginario, debe quedar claro que no es un tiempo real físico, sino simplemente un parámetro. La función $L_{\text{stat}}(x, \dot{x}) = m\dot{x}^2/2 + V(x)$ no es el lagrangiano de la mecánica aunque se le parece salvo un signo, el cual se debe a que cada derivada respecto de τ introduce un factor i que cambia el signo de la “energía cinética”. Debido a que no tenemos la unidad imaginaria i en la exponencial, podemos aplicar el método del punto de silla para estimar el valor de la integral de camino, en vez de usar el método de la fase estacionaria. Esto nos permite comprobar más fácilmente qué “caminos” contribuyen en mayor medida a la integral. La función de partición de la ecuación (4.13) se puede calcular considerando solo trayectorias en la integral de camino que sean cerradas, de forma que su “periodo” sea $\beta\hbar$,

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, x; \beta) = \oint_{x(0)=x(\beta\hbar)} \mathcal{D}x \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} L_{\text{stat}}(x, \dot{x}) d\tau' \right\}. \quad (4.19)$$

Por último, antes de pasar a las aplicaciones de la integral de camino en mecánica estadística, comentar que la generalización de la formulación de integral de camino para la matriz densidad para un sistema con N grados de libertad es inmediata. Para ello,

simplemente hay que sustituir dx por el producto $dx_1 \dots dx_N$ como se explica en la sección 3.1 del libro de Feynman [3].

4.3 Aplicación. El oscilador armónico

Un ejemplo directo para aplicar la integral de camino en mecánica estadística, es el de una partícula ligada a un potencial tipo oscilador armónico. Recordemos que en la sección 3.2.2 obtuvimos el propagador para un potencial de la forma $V = a + bx + cx^2 + d\dot{x} + e\dot{x}x$, lo que nos permite centrarnos en un caso concreto donde $a = b = d = e = 0$ y $c = m\omega^2/2$, el oscilador armónico. Tras la rotación de Wick $t \rightarrow -i\tau$, la ecuación del propagador (3.32) queda

$$K(x, \tau_f; x', 0) = \exp\left(\frac{-S_{\text{cl}}}{\hbar}\right) \int_{y(0)=0}^{y(\tau_f)=0} \mathcal{D}y \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\tau_f} \left(\frac{1}{2}m\dot{y}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2\right) d\tau\right]. \quad (4.20)$$

La integral de camino en su versión discretizada, según las expresiones (3.12) y (3.41), se reduce a

$$\begin{aligned} I_C &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}\right)^{N/2} \int \prod_{n=1}^{N-1} dy_n \exp\left\{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2}m \left(\frac{y_n - y_{n-1}}{\varepsilon}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y_{n-1}^2\right]\right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}\right)^{N/2} \int \prod_{n=1}^{N-1} dy_n \exp\left\{-\frac{m}{2\hbar\varepsilon} \sum_{n=2}^{N-1} [(y_n - y_{n-1})^2 + y_1^2 + y_{N-1}^2] \right. \\ &\quad \left. - \frac{m\omega^2\varepsilon}{2\hbar} \sum_{n=1}^N y_{n-1}^2\right\}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

ya que $y(0) = y_0 = 0$, $y(\tau) = y_N = 0$. La suma del exponente se puede escribir en forma matricial $-\frac{1}{2}\boldsymbol{\eta}^T \boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\eta}$, donde $\boldsymbol{\eta}^T = (y_1, \dots, y_{N-1})$ y $\boldsymbol{\Omega}$ es una matriz cuadrada de dimensión $N - 1$, cuya forma explícita es

$$\boldsymbol{\Omega} = \frac{m}{\hbar\varepsilon} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} + \frac{m\omega^2\varepsilon}{\hbar} \mathbf{I}_{N-1}, \quad (4.22)$$

con \mathbf{I}_{N-1} la matriz identidad de dimensión $N - 1$. Esto facilita la integración, ya que podemos aplicar la ecuación (C.2) del Apéndice C. La ecuación (4.21) se simplifica a

$$I_C = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon} \right)^{N/2} \int \prod_{n=1}^{N-1} dy_n e^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{\eta}^T \boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\eta}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon} \right)^{N/2} \sqrt{\frac{(2\pi)^{N-1}}{\det(\boldsymbol{\Omega})}}. \quad (4.23)$$

Ahora necesitamos calcular el determinante de la matriz simétrica y definida positiva $\boldsymbol{\Omega}$, el cual no podemos sacar del límite de la anterior expresión porque la dimensión de $\boldsymbol{\Omega}$ depende de N . Definimos a_n como el menor principal de $\boldsymbol{\Omega}$ de orden n , es decir, el determinante de una submatriz de $\boldsymbol{\Omega}$ que sigue preservando su forma de matriz simétrica,

$$a_n := \det \left\{ \frac{m}{\hbar\varepsilon} \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}_n} + \frac{m\omega^2\varepsilon}{\hbar} \mathbf{I}_n \right\}. \quad (4.24)$$

\mathbf{A}_n es una submatriz de dimensión n . El determinante de $\boldsymbol{\Omega}$ no es más que $\det(\boldsymbol{\Omega}) = a_{N-1}$. Usando la propiedad $\det(a\mathbf{A}) = a^n \det(\mathbf{A})$, donde $a \in \mathbb{C}$ y \mathbf{A} es una matriz de dimensión n , el menor principal se simplifica a

$$a_n = \left(\frac{m}{\hbar\varepsilon} \right)^n \det(\mathbf{A}_n + \omega^2\varepsilon^2 \mathbf{I}_n) = \left(\frac{m}{\hbar\varepsilon} \right)^n \det(\mathbf{A}_n + b\mathbf{I}_n), \quad b := \omega^2\varepsilon^2. \quad (4.25)$$

Si no tuviésemos el sumando con la matriz identidad \mathbf{I}_n , se comprueba fácilmente que el determinante de \mathbf{A}_n cumple una relación de recurrencia,

$$\det(\mathbf{A}_n) = 2 \det(\mathbf{A}_{n-1}) - \det(\mathbf{A}_{n-2}), \quad n \geq 3. \quad (4.26)$$

Esto ocurre porque al desarrollar el determinante de \mathbf{A}_n por la primera fila obtenemos solamente dos sumandos. El primero es el determinante de una matriz igual que \mathbf{A}_n pero con una dimensión menos, \mathbf{A}_{n-1} . El segundo es el determinante una matriz con la primera columna llena de ceros salvo su primer número, por lo que podemos volver a desarrollarlo por esta columna dando un nuevo determinante de una matriz que coincide con \mathbf{A}_{n-2} . Resulta sencillo extrapolar al caso en el que estamos interesados, pues añadir el

sumando $b\mathbf{I}_n$ a esta expresión solo produce un leve cambio en (4.26). Esto es, definiendo $\alpha_n = \det(\mathbf{A}_n + b\mathbf{I}_n)$,

$$\alpha_n = (2 + b)\alpha_{n-1} - \alpha_{n-2}, \quad n \geq 3. \quad (4.27)$$

Esta expresión es una ecuación en diferencias homogénea, para la que proponemos una solución de la forma

$$\alpha_n = cr^n. \quad (4.28)$$

Un estudio exhaustivo de este tipo de ecuaciones se puede encontrar en el capítulo 2 de [6]. Dado que la ecuación es de segundo orden, necesitamos dos condiciones de contorno: los valores α_1 y α_2 , que permitirían obtener el resto de la sucesión α_3, α_4 , etc. de modo iterativo. Es sencillo comprobar que $\alpha_1 = (2 + b)$ y $\alpha_2 = (2 + b)^2 - 1$, esto es $\alpha_2 = (2 + b)\alpha_1 - \alpha_0$ si definimos $\alpha_0 = 1$. De este modo, podemos generalizar la relación de recurrencia (4.27) al caso $n \geq 2$ e imponer las condiciones de contorno

$$\alpha_0 = 1, \quad \alpha_1 = 2 + b. \quad (4.29)$$

Sustituyendo la forma de solución propuesta en la ecuación (4.28) en la ecuación (4.27) queda la expresión

$$r^2 = (2 + b)r - 1, \quad (4.30)$$

cuyas raíces son

$$r_{\pm} = \frac{b}{2} \pm \frac{\sqrt{b^2 + 4b}}{2} + 1. \quad (4.31)$$

La solución general de la ecuación (4.27) tiene entonces la forma

$$\alpha_n = c_1 r_-^n + c_2 r_+^n. \quad (4.32)$$

Para calcular las constantes c_1 y c_2 tenemos que imponer las condiciones de contorno (4.29). El problema es que obtenemos una expresión de $\det(\mathbf{\Omega}) = a_{N-1} = \left(\frac{m}{\hbar\varepsilon}\right)^n \alpha_{N-1}$ poco simplificada. La idea básica es que b , de acuerdo con su definición (4.25) donde depende de ε , es infinitesimal y por tanto α_n varía muy lentamente con n . Esto se debe a que las raíces r_{\pm} de la ecuación (4.31) son muy próximas a la unidad en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$. Por tanto, podemos pasar a una formulación continua en que los cálculos se simplifican considerablemente. En concreto, la ecuación (4.27) pasa a tomar la siguiente forma,

$$\frac{\alpha_n - 2\alpha_{n-1} + \alpha_{n-2}}{\varepsilon^2} = \omega^2 \alpha_{n-1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d^2 \alpha}{d\tau^2} = \omega^2 \alpha(\tau). \quad (4.33)$$

donde hemos definido $\tau_n = n\varepsilon$. La sucesión de valores α_n se transforma así en una función $\alpha(\tau)$ de la variable continua τ , ya que $\tau_n - \tau_{n-1} = \varepsilon \rightarrow 0^+$. Para evitar problemas en el paso al límite conviene definir $\varphi_n = \varepsilon\alpha_n$, de forma que la ecuación diferencial queda inalterada.

$$\frac{\varphi_n - 2\varphi_{n-1} + \varphi_{n-2}}{\varepsilon^2} = \omega^2\varphi_{n-1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d^2\varphi}{d\tau^2} = \omega^2\varphi(\tau). \quad (4.34)$$

La solución general de esta ecuación diferencial es

$$\varphi(t) = c_1 e^{\omega\tau} + c_2 e^{-\omega\tau}. \quad (4.35)$$

Usamos como condiciones iniciales las siguientes expresiones para tiempo discretizado,

$$\varphi(0) = \varphi_0 = \varepsilon\alpha_0 \rightarrow 0, \quad (4.36a)$$

$$\left. \frac{d\varphi}{d\tau} \right|_{\tau=0} \simeq \frac{\varphi_1 - \varphi_0}{\varepsilon} = \varepsilon \left(\frac{\alpha_1 - \alpha_0}{\varepsilon} \right) = (2+b) - 1 = 1 + \omega^2\varepsilon^2 \rightarrow 1, \quad \text{ya que } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (4.36b)$$

La ecuación (4.36b) justifica el escalamiento $\alpha = \varphi/\varepsilon$; por una parte $\alpha(\varepsilon) - \alpha(0) \sim \varepsilon\alpha'(0)$ y por otra $\alpha(\varepsilon) - \alpha(0) = \alpha_1 - \alpha_0 \sim 1$, lo que provoca valores infinitos de $\alpha'(0) \sim \varepsilon^{-1}$ en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ si no se define el escalamiento. Comparando con la solución general (4.35) y su derivada evaluadas en $\tau = 0$,

$$\varphi(0) = c_1 + c_2, \quad \left. \frac{d\varphi}{d\tau} \right|_{\tau=0} = \omega c_1 - \omega c_2, \quad (4.37)$$

obtenemos las constantes $c_1 = -c_2 = \frac{1}{2\omega}$. Por tanto, la solución general para $\varphi(\tau)$ queda

$$\varphi(\tau) = \frac{1}{\omega} \sinh(\omega\tau). \quad (4.38)$$

Recapitulando, el determinante que buscábamos es

$$\det(\mathbf{\Omega}) = a_{N-1} \stackrel{(4.25)}{=} \left(\frac{m}{\hbar\varepsilon} \right)^{N-1} \det(\mathbf{A}_{N-1} + b\mathbf{I}_{N-1}) = \left(\frac{m}{\hbar\varepsilon} \right)^{N-1} \alpha_{N-1}. \quad (4.39)$$

La solución $\varphi(\tau)$ es estrictamente correcta tras haber tomado el límite $\varepsilon \rightarrow 0$, por lo que vamos a usar la expresión del determinante en función de α_{N-1} y luego sustituimos por

$\varphi(\tau)$ tras el límite. Finalmente la integral de camino (4.23) queda

$$\begin{aligned} I_C &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon} \right)^{N/2} \sqrt{\frac{(2\pi)^{N-1}}{\det(\mathbf{\Omega})}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon} \right)^{N/2} \sqrt{\left(\frac{2\pi\hbar\varepsilon}{m} \right)^{N-1} \frac{1}{\alpha_{N-1}}} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon\alpha_{N-1}}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varphi_{N-1}}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varphi(\tau_f)}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\beta\hbar\omega)}}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

El tiempo discretizado que corresponde a φ_{N-1} es $\tau = (N-1)\varepsilon$, por lo que al tomar el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ (o $N \rightarrow \infty$ que es equivalente) obtenemos el tiempo final τ_f , que aparece como un parámetro en el propagador (véase la ecuación (4.20)).

Para obtener el propagador completo solo nos falta la acción clásica. Recuérdese que en mecánica estadística no teníamos estrictamente la acción dentro de la integral de camino, ya que el “lagrangiano” era diferente (signo + en la energía potencial, véase (4.18)). La ecuación de Euler-Lagrange de $L_{\text{stat}}(x, \dot{x}) = m\dot{x}^2/2 + m\omega^2 x^2/2$ es $\ddot{x}_{\text{cl}} - \omega x_{\text{cl}} = 0$, cuya solución general es $x_{\text{cl}}(\tau) = c_1 \sinh(\omega\tau) + c_2 \cosh(\omega\tau)$. Recuérdese del apartado 3.2.2 que la dependencia con los puntos x y x' del propagador está implícita en la acción clásica, ya que esta se calcula usando la trayectoria clásica del sistema. Dicha trayectoria cumple las condiciones de contorno $x_{\text{cl}}(0) = x'$, $x_{\text{cl}}(\tau_f) = x$, que aplicadas a solución general nos dan la particular que buscamos. Finalmente, con la trayectoria clásica obtenida, podemos calcular la acción clásica,

$$S_{\text{cl}} = \int_0^{\tau_f} d\tau L_{\text{stat}}(x_{\text{cl}}, \dot{x}_{\text{cl}}) = \dots = \frac{m\omega}{2\sinh(\omega\tau_f)} [(x^2 + x'^2) \cosh(\omega\tau_f) - 2xx']. \quad (4.41)$$

Nos hemos saltado algunas operaciones porque son directas. Recapitulando, el propagador completo (4.20) es $I_C \exp\left(-\frac{S_{\text{cl}}}{\hbar}\right)$.

$$\begin{aligned} K(x, \tau_f; x', 0) &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\omega\tau_f)}} \\ &\times \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar\sinh(\omega\tau_f)} [(x^2 + x'^2) \cosh(\omega\tau_f) - 2xx']\right\}. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Si usamos la expresión $\tau_f = \beta\hbar$, comprobamos que el propagador calculado coincide a la perfección con la matriz densidad $\rho(x, x'; \beta)$ de un problema de mecánica estadística, para un sistema que siente un potencial tipo oscilador armónico y está en contacto con un baño térmico a temperatura $T = 1/(k_B\beta)$ (véase el apartado 2.5 de [3]). Así corroboramos la relación directa entre la matriz densidad y el propagador para un problema con tiempo imaginario o tras una rotación de Wick (véase la ecuación (4.18) del apartado 4.2).

Podemos relacionar el propagador obtenido con el de un problema cuántico con hamiltoniano $H = P^2/(2m) + m\omega^2 X^2/2$. Lo único que debemos hacer es aplicar una rotación de Wick a la inversa, esto es, $\tau \rightarrow it$. Esto conduce al resultado

$$K(x, it; x', 0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega t)}} \times \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega t)} [(x^2 + x'^2) \cos(\omega t) - 2xx']\right\}, \quad (4.43)$$

donde hemos usado las identidades $\sinh(it) = i \sin(t)$ y $\cosh(it) = \cos(t)$. Existen otros métodos para calcular este propagador, como el Método de Schwinger y el Método Algebraico (para mayor información véase [13]).

5 Conclusiones

A continuación, enumeramos las conclusiones principales de nuestro trabajo:

1. En mecánica cuántica, el formalismo de la integral de camino nos proporciona una forma alternativa para obtener el propagador, que es completamente equivalente a encontrar la función de Green de la ecuación de Schrödinger.
2. Una de las ventajas de la integral de camino es que proporciona una imagen física intuitiva para el propagador: todas las trayectorias posibles entre los puntos inicial y final contribuyen al propagador con un “peso” dado por $\exp\{iS[x]/\hbar\}$, donde $S[x]$ es el valor de la acción clásica para la trayectoria considerada.
3. La conexión con la mecánica clásica es particularmente sencilla en el contexto de la integral de camino y mucho más “transparente” que en la ecuación de Schrödinger: en el límite $\hbar \rightarrow 0$ solo la trayectoria que hace estacionaria la acción contribuye a la integral, lo que lleva al principio de acción estacionaria de la mecánica clásica.
4. El cálculo de la integral de camino no es trivial en general ya que es una integral funcional, y solamente puede hacerse hasta el final en algunos casos sencillos. Dentro de la mecánica cuántica, hemos estudiado la partícula libre y un potencial cuadrático genérico. En el segundo caso, es interesante resaltar que el propagador incluye una función multiplicativa que depende exclusivamente del tiempo (y no de los puntos inicial y final): esta función es una “normalización” y su forma explícita no es necesaria para obtener los valores esperados de las magnitudes físicas, lo que simplifica considerablemente el cálculo.
5. La obtención de la matriz densidad en mecánica estadística es esencial pues nos permite calcular magnitudes como valores esperados y la función de partición, de la cual se derivan los potenciales termodinámicos.
6. Calcular la matriz densidad es un problema formalmente equivalente a obtener el propagador en mecánica cuántica. Esto nos permite, mediante el uso de la rotación de Wick, eliminar la unidad imaginaria en la función peso $\exp\{iS[x]/\hbar\}$ de la integral de camino cuántica, lo que facilita el estudio de la convergencia de la integral (método del punto de silla en lugar del de la fase estacionaria).
7. Obtener la matriz densidad para el oscilador armónico resulta más complicado usando la integral de camino que resolviendo la “ecuación de evolución” de la matriz

densidad (4.8). Sin embargo, el cálculo con la integral de camino se puede generalizar con facilidad para el caso de una frecuencia que dependa del tiempo $\omega(t)$ (véase capítulo 6 de [7]), mientras que la ecuación de Schrödinger se vuelve mucho más difícil de resolver en este caso (véase [14]).

Referencias

- [1] P. A. M. Dirac, “On the analogy between classical and quantum mechanics,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 17, pp. 195–199, 1945.
- [2] R. P. Feynman, “Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 20, pp. 367–387, 1948.
- [3] R. Feynman, *Statistical Mechanics: A Set Of Lectures*. New York: Avalon Publishing, 1998.
- [4] R. Shankar, *Principles of quantum mechanics*. New York: Springer, 2014.
- [5] L. D. Landau, *Mecánica*. Barcelona: Reverté, 1994.
- [6] C. M. Bender, *Advanced mathematical methods for scientists and engineers*. New York: Springer, 1999.
- [7] L. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*. New York: Wiley, 1996.
- [8] J. J. Sakurai, *Modern quantum mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.
- [9] J. Schwichtenberg, *Physics from symmetry*. New York: Springer Internacional Publishing, 2018.
- [10] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*. Singapore: World Scientific, 2009.
- [11] M. Stone, *Mathematics for physics : a guided tour for graduate students*. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.
- [12] N. Berline, *Heat kernels and Dirac operators*. Berlin: Springer, 2004.

-
- [13] F. A. Barone, H. Boschi-Filho, and C. Farina, “Three methods for calculating the Feynman propagator,” *American Journal of Physics*, vol. 71, no. 5, pp. 483–491, 2003.
- [14] D. G. Vergel and E. J. Villaseñor, “The time-dependent quantum harmonic oscillator revisited: Applications to quantum field theory,” *Annals of Physics*, vol. 324, pp. 1360 – 1385, 2009.
- [15] V. Kaplunivsky, “On Perturbation Theory, Dyson Series, and Feynman Diagrams,” 2011. Descargable desde <http://bolvan.ph.utexas.edu/~vadim/Classes/11f/dyson.pdf>.
- [16] A. Wipf, “Path integrals,” 2015. Descargable desde <https://www.tpi.uni-jena.de/qfphysics/homepage/wipf/lecturenotes.html>.
- [17] H. F. Trotter, “On the product of semi-groups of operators,” *Proceedings of the American Mathematical Society*, vol. 10, pp. 545–551, 1959.
- [18] B. Hall, *Quantum Theory for Mathematicians*. New York: Springer, 2013.
- [19] V. Kac and P. Cheung, *Gauss’s Binomial Formula and a Noncommutative Binomial Formula*. New York: Springer, 2002.
- [20] D. Ž. Djoković, “An elementary proof of the Baker-Campbell-Hausdorff-Dynkin formula,” *Mathematische Zeitschrift*, vol. 143, pp. 209–211, 1975.
- [21] E. W. Weisstein, “Gaussian integral,” 2019. Descargable desde <http://mathworld.wolfram.com/GaussianIntegral.html>.

Apéndice A Propagador en mecánica cuántica

En mecánica cuántica no relativista, la ecuación que determina la evolución del estado de mi sistema físico es la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = H |\Phi(t)\rangle, \quad (\text{A.1})$$

donde $|\Phi(t)\rangle$ es la función de onda que describe el estado del sistema y H es el hamiltoniano del sistema. Para obtener el estado en un tiempo t debemos resolver esta ecuación. Para ello, vamos a definir el operador de evolución temporal como

$$|\Phi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Phi(t_0)\rangle, \quad (\text{A.2})$$

donde $|\Phi(t_0)\rangle$ es el estado inicial del sistema, el cual suponemos conocido pero arbitrario. Introduciendo esta expresión en la ecuación de Schrödinger obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) |\Phi(t_0)\rangle = HU(t, t_0) |\Phi(t_0)\rangle \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0). \quad (\text{A.3})$$

Esta es la ecuación diferencial mediante la que se obtiene el operador de evolución temporal. En el caso simple en que H no dependa del tiempo, podemos resolverla directamente con el resultado

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}. \quad (\text{A.4})$$

Aunque H sea un operador y no un número, podemos resolver la ecuación como si lo fuera, ya que la solución obtenida es consistente con la ecuación diferencial

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0) \right)^n \\ &= i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}H \right)^n n(t-t_0)^{n-1} = i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}H \right)^{n+1} (t-t_0)^n \\ &= \begin{cases} H \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}H \right)^n (t-t_0)^n = HU(t, t_0). \\ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}H \right)^n (t-t_0)^n H = U(t, t_0)H. \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Ambas expresiones son equivalentes porque $U(t, t_0)$ conmuta con el hamiltoniano.

El operador de evolución así obtenido es un operador unitario $UU^\dagger = U^\dagger U = I$. En el caso de sistemas no conservativos se complica su obtención, puesto que los operadores

hamiltoniano de instantes distintos pueden no conmutar y hay que emplear el símbolo de ordenación temporal (véase [15] y el capítulo 15 de [16]). Al obtener el operador de evolución hemos resuelto formalmente la ecuación de Schrödinger. Usando la representación de posiciones,

$$\begin{aligned}\Phi(x, t) &= \langle x | \Phi(t) \rangle = \langle x | U(t, t_0) | \Phi(t_0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x | U(t, t_0) | x' \rangle \langle x' | \Phi(t_0) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(x, t; x', t_0) \Phi(x', t_0),\end{aligned}\tag{A.6}$$

donde hemos definido el propagador

$$K(x, t; x', t_0) = \langle x | U(t, t_0) | x' \rangle,\tag{A.7}$$

que no es más que una función de Green que aparece en un producto de convolución junto al estado inicial. Nótese que la condición inicial para el propagador es $K(x, t = t_0; x', t_0) = \langle x | I | x' \rangle = \delta(x - x')$.

El caso más simple de propagador que podemos calcular analíticamente es el de la partícula libre, donde el hamiltoniano es independiente del tiempo y tiene la forma $H = P^2/(2m)$, con P el operador momento lineal. El operador es, según la ecuación (A.4),

$$U(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i(t-t_0)}{2m\hbar}P^2\right].\tag{A.8}$$

Añadiendo la relación de cierre en el espacio de momentos $I = \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p|$ y teniendo en cuenta la relación de los autokets del operador momento, $P |p\rangle = p |p\rangle$, podemos calcular el propagador introduciendo la expresión del operador evolución (A.8) dentro de la ecuación (A.7). De modo explícito,

$$\begin{aligned}K(x, t; x', t_0) &= \langle x | e^{-\frac{i(t-t_0)}{2m\hbar}P^2} | x' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x | e^{-\frac{i(t-t_0)}{2m\hbar}P^2} | p \rangle \langle p | x' \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\frac{i(t-t_0)}{2m\hbar}p^2} \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle \stackrel{(3.16)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\frac{i(t-t_0)}{2m\hbar}p^2} \frac{1}{2\pi\hbar} e^{ip(x-x')/\hbar} \\ &= \begin{bmatrix} a = i(t-t_0)/(m\hbar) \\ b = i(x-x')/\hbar \\ c = 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi m\hbar}{i(t-t_0)}} \exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right] \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}} \exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right].\end{aligned}\tag{A.9}$$

La integral es del tipo gaussiana y se resuelve haciendo uso de la ecuación C.1. También hemos empleado la expresión

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{ipx/\hbar} \quad (\text{A.10})$$

para las autofunciones del operador P en la representación de posiciones; el factor de normalización hace que $\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$.

Apéndice B Fórmula del producto de Trotter

La fórmula del producto de Trotter tiene la forma

$$e^{X+Y} = \lim_{N \rightarrow \infty} (e^{X/N} e^{Y/N})^N, \quad (\text{B.1})$$

donde X e Y son operadores autoadjuntos y su suma $X + Y$ es autoadjunta en la intersección de sus dominios. La demostración de esta fórmula la realizó Trotter en 1959 [17], y puede ser encontrada en la sección 20.1 de [18]. Nosotros nos limitaremos a demostrarla la fórmula del producto de Lie, que es un caso particular de la de Trotter y más simple de resolver, donde X e Y son dos matrices cuadradas (véase la sección 2.2 de [16] ó la sección 16.4 de [18]).

Sean dos matrices cuadradas A y B cualesquiera sobre las que actúa una norma $\|\cdot\|$, la cual cumple, entre otras propiedades,

$$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|, \quad \|A \cdot B\| \leq \|A\| \cdot \|B\|. \quad (\text{B.2})$$

Definimos $S_n = \exp[(A + B)/n]$ y $T_n = \exp(A/n) \exp(B/n)$, lo que nos simplificará mucho futuros cálculos, y realizamos la siguiente suma telescópica,

$$\begin{aligned} \|S_n^n - T_n^n\| &= \|S_n^{n-1}(S_n - T_n) + S_n^{n-1}T_n - T_n^n\| = \dots \\ &= \|S_n^{n-1}(S_n - T_n) + S_n^{n-2}(S_n - T_n)T_n + \dots + (S_n - T_n)T_n^{n-1}\|. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Debido a las propiedades de la norma (B.2), es inmediato que

$$\|\exp(A)\| = \left\| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k \right\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \|A^k\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \|A\|^k = \exp(\|A\|) \quad (\text{B.4})$$

para cualquier matriz A , de lo que deriva la expresión

$$\|S_n\| = \|\exp[(A + B)/n]\| \leq \exp(\|A + B\|/n) \leq \exp[(\|A\| + \|B\|)/n]. \quad (\text{B.5})$$

De forma equivalente, se llega a la misma desigualdad para $\|T_n\|$, que de forma compacta podemos expresar

$$\|S_n\|, \|T_n\| \leq \exp[(\|A\| + \|B\|)/n] := a^{1/n}. \quad (\text{B.6})$$

Con esta desigualdad y las propiedades de la norma, la ecuación (B.3) se transforma en

$$\begin{aligned} \|S_n^n - T_n^n\| &= \|S_n^{n-1}(S_n - T_n) + S_n^{n-2}(S_n - T_n)T_n + \dots + (S_n - T_n)T_n^{n-1}\| \\ &\leq \|S_n^{n-1}(S_n - T_n)\| + \|S_n^{n-2}(S_n - T_n)T_n\| + \dots + \|(S_n - T_n)T_n^{n-1}\| \\ &\leq \|S_n\|^{n-1} \cdot \|S_n - T_n\| + \|S_n\|^{n-2} \cdot \|S_n - T_n\| \cdot \|T_n\| + \dots \\ &= na^{(n-1)/n} \|S_n - T_n\|. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Resumiendo hasta ahora, tenemos la expresión

$$\left\| e^{A+B} - (e^{A/n}e^{B/n})^n \right\| \leq na^{(n-1)/n} \|S_n - T_n\|, \quad (\text{B.8})$$

por lo que si conseguimos que el miembro de la derecha tienda a 0 en el límite $n \rightarrow \infty$, habremos conseguido demostrar la fórmula de Trotter (B.1) para matrices. En lugar de realizar el cálculo detallado, nos limitamos a escribir la expresión

$$S_n - T_n = -\frac{1}{2n^2}[A, B] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^3}\right). \quad (\text{B.9})$$

De forma resumida, comentamos que el procedimiento consiste en expresar las exponenciales de S_n y T_n como series de potencias y desarrollar un binomio del tipo $(A + B)^k$, el cual presenta dificultades porque tenemos que aplicar la fórmula binomial no conmutativa (véase para más detalle [19]). La no conmutatividad introduce sumandos con forma de conmutadores anidados. Finalmente, tomando el límite $n \rightarrow \infty$ en la ecuación (B.8), obtenemos la expresión (B.1) para matrices, como queríamos demostrar. De modo explícito, introduciendo la expresión (B.9) en la ecuación (B.8),

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \left\| e^{A+B} - (e^{A/n}e^{B/n})^n \right\| &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} na^{\frac{n-1}{n}} \left[-\frac{\|[A, B]\|}{2n^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^3}\right) \right] = 0 \\ \Rightarrow e^{A+B} &= \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{A/n}e^{B/n})^n. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

La ecuación (B.9) puede ser generalizada al caso de operadores, $e^X e^Y = e^Z$, donde

$$Z = X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}[X, [X, Y]] - \frac{1}{12}[Y, [X, Y]] + \dots \quad (\text{B.11})$$

Esta ecuación se conoce como la fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff, cuya demostración en detalle se puede encontrar en la referencia [20]. La ecuación (B.11) nos resulta útil en mecánica cuántica si queremos separar la exponencial e^{T+V} en el producto de dos exponenciales $e^T e^V$ para un tiempo infinitesimal, como nos ocurría en la sección 3.3 cuando queríamos calcular el propagador infinitesimal, ya que todos los términos que incluyen conmutadores no contribuyen en primer orden infinitesimal (véase la ecuación (3.43) como ejemplo). En contraste, la fórmula de Trotter (B.1) es más útil cuando el intervalo de tiempo que propagamos los estados no es infinitesimal, ya que consigue separar la exponencial de la suma en el producto de las exponenciales bajo un paso al límite, mientras la fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff (B.11) introduce términos adicionales con forma de conmutadores que no podemos despreciar a tiempo finito. Sirva como ejemplo la igualdad aproximada escrita en la ecuación (3.4) tras aplicar la fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff, frente a la igualdad estricta de la ecuación (3.11) tras aplicar la fórmula de Trotter (véase la sección 3 para una discusión más detallada del ejemplo).

Apéndice C Integral gaussiana

En este Apéndice exponemos las expresiones de las integrales gaussianas que más vamos a utilizar en esta memoria. La demostración completa puede ser hallada en [21].

La integral de una función gaussiana arbitraria de una variable es

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{1}{2}ax^2 + bx + c\right) = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{2a} + c\right), \quad \forall a, b, c \in \mathbb{C}, \Re(a) > 0 \quad (\text{C.1})$$

Esta expresión se puede generalizar al caso de una distribución normal multivariante,

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^n \mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{\eta}^T \boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\eta}} = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det(\boldsymbol{\Omega})}}, \quad (\text{C.2})$$

donde $\boldsymbol{\Omega}$ ha de ser una matriz $n \times n$ simétrica y definida positiva, y el vector $\boldsymbol{\eta}$ contiene todas las variables de integración x_1, x_2, \dots, x_n . Para el cálculo de valores esperados es

útil la expresión

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{(2n+1)!!}{(2a)^n}, \quad (\text{C.3})$$

donde el doble factorial se define como

$$n!! = \prod_{k=0}^{\lceil \frac{n}{2} \rceil - 1} (n - 2k), \quad (\text{C.4})$$

con $\lceil n \rceil$ la función parte entera techo.