

Integral de Camino en el formalismo de Schwinger-Keldysh

A partir del valor de expectación $\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A)$, usando que $\rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)$ y la ciclicidad de la traza tenemos que:

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(U^\dagger(t, t_0)AU(t, t_0)\rho(t_0)) \quad (1)$$

Esto es equivalente a haber partido desde el concepto de que el estado no varía en el tiempo mientras que sí lo hacen los observables, de forma que $A(t) = U^\dagger(t, t_0)A(t_0)U(t, t_0)$. Esta expresión entonces no distingue entre los así llamados cuadros de Schrodinger y de Heisenberg.

A partir de la notación de índices desarrollada, es posible reescribir la traza en el valor de expectación de un operador A en un tiempo t expuesto en (1) de la forma

$$\langle A(t) \rangle = \int_{\mathcal{Q}} dq_0^- (U(t_0, t)AU(t, t_0)\rho(t_0))[q_0^-, q_0^-] \quad (2)$$

Dado que cada objeto dentro del paréntesis es un operador, podemos escribir el conjunto en términos de productos de operadores, así:

$$\langle A(t) \rangle = \int_{\mathcal{Q}} dq_0^- \int_{\mathcal{Q}} dq_0^+ \int_{\mathcal{Q}} dq_N^- \int_{\mathcal{Q}} dq_N^+ U(t_0, t)[q_0^-, q_N^-] A[q_N^+, q_N^-] U(t, t_0)[q_N^+, q_0^+] \rho(t_0)[q_0^+, q_0^-] \quad (3)$$

donde los superíndices $+$ y $-$ serán más evidentes luego, y estarán representando los índices q en las ramas de ida o de vuelta debido a la propagación del operador U .

1 Discretización del intervalo de tiempo

Ahora, discretizaremos nuestro intervalo de tiempo en N pasos: $\epsilon = \frac{t-t_0}{N}$. Así, el operador unitario $U(t, t_0)$ que contiene una integral, se puede escribir como una suma de Riemann:

$$\int_{t_0}^t dt' H(t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon H(t_k) \quad (4)$$

donde $t_k = t_0 + k\epsilon$. Y aplicando esto en $U(t, t_0)$ con cuidado por el operador de ordenamiento temporal, tendremos que

$$U(t, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=0}^{N-1} e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_k)} \quad (5)$$

Al tomar el complejo conjugado en (4) y usar que $U^\dagger(t, t_0) = U(t_0, t)$, tendremos que:

$$U(t_0, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=N-1}^0 e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_k)} \quad (6)$$

donde la notación de la productoria es tal que:

$$\prod_{k=0}^{N-1} e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_k)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_{N-1})} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_1)} e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_0)}$$

es decir, multiplica por la derecha en orden creciente del índice, mientras que

$$\prod_{k=N-1}^0 e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_k)} = e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_0)} e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_1)} \dots e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_{N-1})}$$

En síntesis, la productoria multiplica por la derecha en orden decreciente (el último va primero).

Con este desarrollo y usando nuestra notación para el producto de operadores:

$$U(t, t_0)[q_N^+, q_0^+] = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{Q}} dq_{N-1}^+ \dots \int_{\mathcal{Q}} dq_2^+ \int_{\mathcal{Q}} dq_1^+ e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_{N-1})} [q_N^+, q_{N-1}^+] \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_1)} [q_2^+, q_1^+] e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_0)} [q_1^+, q_0^+] \quad (7)$$

$$U(t_0, t)[q_0^-, q_N^-] = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{Q}} dq_1^- \int_{\mathcal{Q}} dq_2^- \dots \int_{\mathcal{Q}} dq_{N-1}^- e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_0)} [q_0^-, q_1^-] e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_1)} [q_1^-, q_2^-] \dots e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_{N-1})} [q_{N-1}^-, q_N^-] \quad (8)$$

Notemos que en la expresión (8) tenemos objetos siempre del tipo $e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_k)} [q_{k+1}^+, q_k^+]$, mientras que en (9) sólo hay objetos de la forma $e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_k)} [q_k^-, q_{k+1}^-]$, donde ahora los objetos H no son operadores, sino que debido a que las exponenciales se pueden escribir como series, estos $H(t_k)$ aquí son los «elementos de matriz» que componen el operador H , los cuales ahora son sólo números.

2 Reexpresión del Hamiltoniano en términos de los índices p y q

Trabajaremos entonces el objeto $e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_k)} [q_{k+1}^+, q_k^+]$. Para ello, dado que como $N \rightarrow \infty$ entonces $\epsilon \rightarrow 0$, podremos expandir la exponencial en series y tendremos que

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_k)} [q_{k+1}^+, q_k^+] \approx \mathbb{I}[q_{k+1}^+, q_k^+] - \frac{i}{\hbar} \epsilon H(t_k) [q_{k+1}^+, q_k^+] \quad (9)$$

Existen varias formas de escribir el Hamiltoniano. Una de ellas, tal vez la más conocida es hacerlo de la forma

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(Q) \quad (10)$$

donde Q y P son observables canónicamente conjugados, m es un parámetro que representa la masa de partícula u objeto del sistema y la función $V(Q)$ representa un potencial que normalmente sólo depende del observable Q . Usaremos como primer acercamiento a las integrales de camino esta forma de escribir el Hamiltoniano, y más adelante volveremos a revisarla usando otra representación. De este modo, al tomar los elementos de matriz $[q_{k+1}^+, q_k^+]$, tendremos que:

$$H(t_k)[q_{k+1}^+, q_k^+] = \frac{1}{2m} P^2[q_{k+1}^+, q_k^+] + V(Q)[q_{k+1}^+, q_k^+] \quad (11)$$

El último objeto es simple, puesto que los índices q son autovalores de Q simplemente:

$$V(Q)[q_{k+1}^+, q_k^+] = V(q_k^+) \delta(q_{k+1}^+ - q_k^+) \quad (12)$$

Por otro lado podemos escribir P^2 como producto de P consigo mismo:

$$P^2[q_{k+1}^+, q_k^+] = \int_{\mathcal{Q}} d\bar{q} P[q_{k+1}^+, \bar{q}] P[\bar{q}, q_k^+] \quad (13)$$

Utilizando la expresión encontrada para escribir el operador P con los índices q , se tendrá que:

$$P^2[q_{k+1}^+, q_k^+] = \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_k^+}{2\pi\hbar} (p_k^+)^2 e^{\frac{i}{\hbar} p_k^+ (q_{k+1}^+ - q_k^+)} \quad (14)$$

Así, juntando las ecuaciones (12), (13) en la ecuación (11) y usando la representación de Fourier de la identidad en índices q en la ecuación (9) se tendrá que:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(t_k)}[q_{k+1}^+, q_k^+] \approx \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_k^+}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p_k^+(q_{k+1}^+ - q_k^+)} \left(1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon \left(\frac{(p_k^+)^2}{2m} + V(q_k^+)\right)\right) \quad (15)$$

Volviendo a rearmar la exponencial, y ordenando tendremos que:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(t_k)}[q_{k+1}^+, q_k^+] = \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_k^+}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon \left(p_k^+ \left(\frac{q_{k+1}^+ - q_k^+}{\epsilon}\right) - H(q_k^+, p_k^+, t_k)\right)} \quad (16)$$

donde hemos definido

$$H(q_k^+, p_k^+, t_k) = \frac{(p_k^+)^2}{2m} + V(q_k^+) \quad (17)$$

el cual corresponde al autovalor de $H(t_k)$ construido con los autovalores q_k^+ y p_k^+ de Q y P respectivamente en el tiempo t_k . Con estos objetos, podemos reescribir la ecuación (6) como:

$$U(t, t_0)[q_N^+, q_0^+] = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_0^+}{2\pi\hbar} \left(\prod_{k=1}^{N-1} \int_{\mathcal{Q}} dq_k^+ \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_k^+}{2\pi\hbar} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(p_k^+ \left(\frac{q_{k+1}^+ - q_k^+}{\epsilon} \right) - H(q_k^+, p_k^+, t_k) \right)} \quad (18)$$

Procedemos de manera análoga para la ecuación (7) y obtendremos que:

$$U(t_0, t)[q_0^-, q_N^-] = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_0^-}{2\pi\hbar} \left(\prod_{k=1}^{N-1} \int_{\mathcal{Q}} dq_k^- \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_k^-}{2\pi\hbar} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(p_k^- \left(\frac{q_{k+1}^- - q_k^-}{\epsilon} \right) - H(q_k^-, p_k^-, t_k) \right)} \quad (19)$$

Con esto, el valor de expectación se escribe después de ajustar:

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{Q}} dq_N^+ \int_{\mathcal{Q}} dq_N^- \left(\prod_{k=0}^{N-1} \int_{\mathcal{Q}} dq_k^- \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_k^-}{2\pi\hbar} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(p_k^- \left(\frac{q_{k+1}^- - q_k^-}{\epsilon} \right) - H(q_k^-, p_k^-, t_k) \right)} A[q_N^-, \\ &q_N^+] \left(\prod_{k=0}^{N-1} \int_{\mathcal{Q}} dq_k^+ \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_k^+}{2\pi\hbar} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(p_k^+ \left(\frac{q_{k+1}^+ - q_k^+}{\epsilon} \right) - H(q_k^+, p_k^+, t_k) \right)} \rho(t_0)[q_0^+, q_0^-] \end{aligned} \quad (20)$$

Es posible trabajar en esta expresión con los índices q y p , sin embargo, arreglaremos las exponenciales de forma de integrar p , para quedarnos sólo con una variable. Para ello, utilizando la expresión para el Hamiltoniano en (16), podemos reexpresar:

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \\ \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{Q}} dq_N^+ \int_{\mathcal{Q}} dq_N^- &\left(\prod_{k=0}^{N-1} \int_{\mathcal{Q}} dq_k^- e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{q_{k+1}^- - q_k^-}{\epsilon} \right)^2 - V(q_k^-) \right)} \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_k^-}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{2\hbar m} \epsilon \left(p_k^- - m \left(\frac{q_{k+1}^- - q_k^-}{\epsilon} \right) \right)^2} \right) \times \\ A[q_N^-, q_N^+] &\left(\prod_{k=0}^{N-1} \int_{\mathcal{Q}} dq_k^+ e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{q_{k+1}^+ - q_k^+}{\epsilon} \right)^2 - V(q_k^+) \right)} \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_k^+}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{2\hbar m} \epsilon \left(p_k^+ - m \left(\frac{q_{k+1}^+ - q_k^+}{\epsilon} \right) \right)^2} \right) \rho(t_0)[q_0^+, \\ &q_0^-] \end{aligned} \quad (21)$$

donde hemos sumado y restado $m^2 \left(\frac{q_{k+1}^+ - q_k^+}{\epsilon} \right)^2$ y $m^2 \left(\frac{q_{k+1}^- - q_k^-}{\epsilon} \right)^2$ dentro de las exponenciales para completar cuadrados, para luego separar las exponenciales que tiene sólo variables p_k .

Dentro de la expresión para el valor de expectación para el operador A encontramos integrales del tipo:

$$I = \prod_{k=0}^{N-1} \int_{\mathcal{P}} \frac{dp_k}{2\pi\hbar} e^{\pm \frac{i}{2\hbar m} \left(p_k - m \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\epsilon} \right)^2 \right)} \quad (22)$$

Utilizando los resultados de integrales gaussianas (ver Apéndice C), esta expresión se escribe de la forma:

$$I = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \left(\frac{2\pi\hbar m}{\epsilon} \right)^{N/2} e^{\pm \frac{i\pi N}{4}} \quad (23)$$

Notamos que dentro de la expresión para el valor de expectación las fases $e^{\pm \frac{i\pi N}{4}}$ se cancelan dado que aparecen multiplicadas entre ellas. Así, reorganizando todo se tendrá que

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \left(\frac{2\pi\hbar m}{\epsilon} \right)^{N/2} \prod_{k=0}^N \int_{\mathcal{Q}} dq_k^- \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{q_{k+1}^- - q_k^-}{\epsilon} \right)^2 - V(q_k^-) \right)} A[q_N^-, \\ q_N^+] &\left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \left(\frac{2\pi\hbar m}{\epsilon} \right)^{N/2} \prod_{k=0}^N \int_{\mathcal{Q}} dq_k^+ \right) e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{q_{k+1}^+ - q_k^+}{\epsilon} \right)^2 - V(q_k^+) \right)} \rho(t_0)[q_0^+, q_0^-] \end{aligned} \quad (24)$$

Dado que originalmente la propagación hacia adelante debido a $U(t, t_0)$ lleva de t_0 a t y luego se devuelve con el operador $U(t_0, t)$, quiere decir que por consistencia debemos tener un contorno cerrado de forma que

$$q_N' = q_N \quad (25)$$

Al tomar el límite continuo, $\epsilon \rightarrow 0$, $\frac{q_{k+1}^+ - q_k^+}{\epsilon} \rightarrow \dot{q}^+(t')$ y $\frac{q_{k+1}^- - q_k^-}{\epsilon} \rightarrow \dot{q}^-(t')$, mientras que la sumatoria se convierte en integral, $\sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \rightarrow \int_{t_0}^t dt'$. Aquí, hemos denotado con el superíndice $+$ la trayectoria hacia adelante, y con el superíndice $-$ la trayectoria hacia atrás. Además, hemos pasado en este límite $q_0^+ \rightarrow q^+(t_0)$, $q_0^- \rightarrow q^-(t_0)$ y $q_N^+ \rightarrow q^+(t) = q^-(t)$. Así, reescribimos

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \int \mathcal{D}q^+ \int \mathcal{D}q^- A(q^+(t)) \rho[q^+(t_0), \\ q^-(t_0)] &e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left(\left(\frac{1}{2} m \dot{q}^+(t')^2 - V(q^+) \right) - \left(\frac{1}{2} m \dot{q}^-(t')^2 - V(q^-) \right) \right)} \end{aligned} \quad (26)$$

donde hemos denotado $A(q^+(t)) = A[q^+(t), q^+(t)]$, dado que $q^+(t) = q^-(t)$, y con ello indicamos que el operador A es evaluado en un sólo punto en realidad. Además, hemos quitado de $\rho(t_0)$ el paréntesis dado que la dependencia en t_0 aparece dentro de los índices $[q^+(t_0), q^-(t_0)]$ y hemos definido

$$\int \mathcal{D}q^\pm = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \left(\frac{2\pi\hbar m}{\epsilon} \right)^{N/2} \prod_{k=0}^{N-1} \int_{\mathcal{Q}} dq_k^\pm \quad (27)$$

En este punto, es importante señalar que $\int \mathcal{D}q$ no es una medida de integración bien definida en el sentido riguroso de la teoría de la medida, ya que consiste en un número infinito de variables. La notación $\int \mathcal{D}q$ simplemente denota el límite $N \rightarrow \infty$ de integrales múltiples discretas, tal como se muestra en la ecuación (5).

Por otro lado, vemos que el término $\left(\frac{2\pi\hbar m}{\epsilon}\right)^{N/2}$ es un objeto completamente divergente, sin embargo, esta «integral funcional» de igual modo nos permitirá extraer información. Matemáticamente, existen problemas para darle un sentido estricto a estas integrales funcionales, especialmente porque la medida de Lebesgue no existe en espacios de dimensión infinita. En algunos casos (como para integrales gaussianas en p o q) sí se puede dar un sentido riguroso usando teoría de probabilidades en espacios de Hilbert o métodos de Wiener, pero para Hamiltonianos generales con interacciones no lineales, la integral de camino sigue siendo una construcción formal.

A pesar de esto, la notación funcional es extremadamente útil y la emplearemos en nuestras construcciones, verificando que funciona correctamente para describir los fenómenos que queremos estudiar.

Por otro lado, es importante señalar que dado que son dos diferentes objetos, las variables q^+ y q^- no son iguales, dado que representan los valores de la variable en la propagación hacia adelante y hacia atrás respectivamente.

Ahora, reconocemos que dentro de la exponencial, aparece una diferencia entre dos objetos similares, los cuales reconocemos como el lagrangiano usual:

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q) \quad (28)$$

Esto, define la acción:

$$S[q] = \int_{t_0}^t dt' L(q, \dot{q}) \quad (29)$$

Por tanto, el valor de expectación se escribe

$$\langle A(t) \rangle = \int \mathcal{D}q^+ \int \mathcal{D}q^- A[q^+(t), q^+(t)] \rho[q^+(t_0), q^-(t_0)] e^{\frac{i}{\hbar}(S[q^+] - S[q^-])} \quad (30)$$

Sintetizando todo, el valor de expectación es expresado en términos de estas integrales funcionales de las variables $q^\pm$ que describen la evolución hacia adelante (+) y hacia atrás (−) en el tiempo. Esto corresponde a la representación de Schwinger-Keldysh para el valor de expectación de un observable en tiempo real. El objeto $A[q^+(t), q^+(t)]$ representa el que se ha evaluado el observable A en el extremo final del contorno de integración (tiempo t). Finalmente, la densidad inicial $\rho[q^+(t_0), q^-(t_0)]$ contiene la información de la distribución inicial del sistema en el tiempo t_0 .