

Propagador en ejemplo armónico

A partir de nuestra expresión para el funcional generador, introduciremos la matriz densidad dentro de la exponencial usando el logaritmo:

$$Z[J^+, J^-] = \frac{\int \mathcal{D}q^+ \int \mathcal{D}q^- e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' (L(q^+, \dot{q}^+) + J^+(t') q^+(t') - L(q^-, \dot{q}^-) - J^-(t') q^-(t')) - \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0)))}}{\int \mathcal{D}q^+ \int \mathcal{D}q^- e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' (L(q^+, \dot{q}^+) - L(q^-, \dot{q}^-)) - \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0)))}} \quad (1)$$

Esta forma nos será útil también.

1 Ejemplo armónico

Ahora, recordemos que el Lagrangiano lo escribimos en términos de una variable q . Supongamos que podemos preparar el sistema de forma que se encuentre cercano a un mínimo de este potencial, que llamaremos $\bar{q}$. Esto nos permite expandir el potencial en torno a $\bar{q}$, y suponiendo que se mantiene cerca podemos aproximar hasta orden cuadrático:

$$V(q) \approx V(\bar{q}) + \frac{\partial V}{\partial q} \Big|_{q=\bar{q}} (q - \bar{q}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial q^2} \Big|_{q=\bar{q}} (q - \bar{q})^2 \quad (2)$$

Como $\bar{q}$ es un mínimo, entonces el segundo término se anula. Definimos

$$\frac{\partial^2 V}{\partial q^2} \Big|_{q=\bar{q}} = m\omega^2 \quad (3)$$

y el Lagrangiano ahora es:

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(\bar{q}) - \frac{1}{2} m\omega^2 (q - \bar{q})^2 \quad (4)$$

Por otro lado, aunque el mínimo del potencial sea $\bar{q}$ en principio esto no necesariamente significa que podamos expandir el logaritmo de la matriz densidad en torno a $(\bar{q}, \bar{q})$, sin embargo, dado que asumimos inicialmente que preparamos el sistema en torno a ese mínimo del potencial, es razonable pensar en que la mayor probabilidad de encontrar el sistema es en torno a ese punto, por tanto lo usaremos para expandir, recordando que en un caso general no necesariamente esto es cierto. Así, la expansión será:

$$\begin{aligned} & \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0))) = \ln(\rho(\bar{q}, \bar{q})) \\ & + \frac{\partial \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0)))}{\partial q^+(t_0)} \Big|_{(q^+, q^-) = (\bar{q}, \bar{q})} (q^+(t_0) - \bar{q}) + \frac{\partial \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0)))}{\partial q^-(t_0)} \Big|_{(q^+, q^-) = (\bar{q}, \bar{q})} (q^-(t_0) - \bar{q}) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0)))}{\partial q^+(t_0) \partial q^+(t_0)} \Big|_{(q^+, q^-) = (\bar{q}, \bar{q})} (q^+(t_0) - \bar{q})^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0)))}{\partial q^+(t_0) \partial q^-(t_0)} \Big|_{(q^+, q^-) = (\bar{q}, \bar{q})} (q^+(t_0) - \bar{q})(q^-(t_0) - \bar{q}) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0)))}{\partial q^-(t_0) \partial q^-(t_0)} \Big|_{(q^+, q^-) = (\bar{q}, \bar{q})} (q^-(t_0) - \bar{q})^2 + \dots + \end{aligned} \quad (5)$$

Notemos que si $(\bar{q}, \bar{q})$ es un punto de mayor probabilidad de ρ , entonces es un máximo allí, y por tanto la primera derivada se anula. Entonces podemos reescribir:

$$\begin{aligned} \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0))) &= \ln(\rho(\bar{q}, \bar{q})) + \frac{1}{2} D_0^{++} (q^+(t_0) - \bar{q})^2 + \frac{1}{2} D_0^{-+} (q^-(t_0) - \bar{q})(q^+(t_0) - \bar{q}) \\ &+ \frac{1}{2} D_0^{+-} (q^+(t_0) - \bar{q})(q^-(t_0) - \bar{q}) + \frac{1}{2} D_0^{--} (q^-(t_0) - \bar{q})^2 \end{aligned} \quad (6)$$

donde hemos definido:

$$D_0^{++} = \frac{\partial^2 \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0)))}{\partial q^+(t_0) \partial q^+(t_0)} \Big|_{(q^+, q^-) = (\bar{q}, \bar{q})} \quad (7)$$

$$D_0^{--} = \frac{\partial^2 \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0)))}{\partial q^-(t_0) \partial q^-(t_0)} \Big|_{(q^+, q^-) = (\bar{q}, \bar{q})} \quad (8)$$

$$D_0^{+-} = \frac{\partial^2 \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0)))}{\partial q^+(t_0) \partial q^-(t_0)} \Big|_{(q^+, q^-) = (\bar{q}, \bar{q})} \quad (9)$$

$$D_0^{-+} = \frac{\partial^2 \ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0)))}{\partial q^-(t_0) \partial q^+(t_0)} \Big|_{(q^+, q^-) = (\bar{q}, \bar{q})} \quad (10)$$

Si el estado inicial es tal que es muy homogéneo y concentrado cerca del punto mínimo del potencial, podemos aproximar $\ln(\rho(q^+(t_0), q^-(t_0))) \approx \ln(\rho(\bar{q}, \bar{q}))$. Dado que esto es sólo un número en principio, éste se cancela en Z debido a la normalización en el denominador, por lo que no importará. Así, simplemente ignoraremos en (6) ese término constante y mantendremos los términos cuadráticos.

De esta manera, insertando la ecuación (4) y (6) con las consideraciones anteriores en el funcional generador, el término dentro de la exponencial superior es:

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left(\frac{1}{2} m (\dot{q}^+)^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 (q^+ - \bar{q})^2 + J^+(t') q^+(t') - \frac{1}{2} m (\dot{q}^-)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 (q^- - \bar{q})^2 - J^-(t') q^-(t') \right) - \\ & \left(\frac{1}{2} D_0^{++} (q^+(t_0) - \bar{q})^2 + \frac{1}{2} D_0^{-+} (q^-(t_0) - \bar{q})(q^+(t_0) - \bar{q}) + \frac{1}{2} D_0^{+-} (q^+(t_0) - \bar{q})(q^-(t_0) - \bar{q}) + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} D_0^{--} (q^-(t_0) - \bar{q})^2 \right) \end{aligned} \quad (11)$$

Encontraremos el mismo término excepto por los $J^\pm$ en la exponencial del denominador. Podemos realizar un cambio de variable $q^\pm - \bar{q} \rightarrow q^\pm$ donde debido a que estamos dentro de las integrales definidas en $\int \mathcal{D}q^+ \int \mathcal{D}q^-$, y esta expresión pasa a ser:

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left(\frac{1}{2} m (\dot{q}^+)^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 (q^+)^2 + J^+(t') q^+(t') - \frac{1}{2} m (\dot{q}^-)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 (q^-)^2 - J^-(t') q^-(t') + \right. \\ & \left. \bar{q} (J^+(t') - J^-(t')) \right) - \left(\frac{1}{2} D_0^{++} (q^+(t_0))^2 + \frac{1}{2} D_0^{-+} (q^-(t_0))(q^+(t_0)) + \frac{1}{2} D_0^{+-} (q^+(t_0))(q^-(t_0)) + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} D_0^{--} (q^-(t_0))^2 \right) \end{aligned} \quad (12)$$

Podemos arreglar el término de la derivada temporal integrando por partes:

$$\pm \frac{1}{2} m (\dot{q}^\pm)^2 = \pm \frac{1}{2} m \frac{d}{dt'} (q^\pm \dot{q}^\pm) \mp \frac{1}{2} m q^\pm \frac{d^2}{dt'^2} q^\pm \quad (13)$$

Si asumimos que los términos de borde de $q(t')$ se anulan, entonces el primer término se cancela al estar dentro de la integral, así, podemos reescribir lo que está dentro de la exponencial como:

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left(-\frac{1}{2} q^+ \left(m \frac{d^2}{dt'^2} + m \omega^2 \right) q^+ + J^+(t') q^+(t') + \frac{1}{2} q^- \left(m \frac{d^2}{dt'^2} + m \omega^2 \right) q^- - J^-(t') q^-(t') + \right. \\ & \left. \bar{q} (J^+(t') - J^-(t')) \right) - \left(\frac{1}{2} D_0^{++} (q^+(t_0))^2 + \frac{1}{2} D_0^{-+} (q^-(t_0))(q^+(t_0)) + \frac{1}{2} D_0^{+-} (q^+(t_0))(q^-(t_0)) + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} D_0^{--} (q^-(t_0))^2 \right) \end{aligned} \quad (14)$$

El término $\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \bar{q}(J^+(t') - J^-(t'))$ que estará en la exponencial del numerador puede ser reabsorbido en las medidas de integración $\int \mathcal{D}q^+ \int \mathcal{D}q^-$ dado que el término $e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \bar{q}(J^+(t') - J^-(t'))}$ no contribuye a q directamente, sino que sólo es una fase en Z , así que lo ignoraremos en adelante. Más aún, al calcular las derivadas para obtener las funciones de correlación, se fija al final $J^+ = J^- = 0$, por lo que ese término no tendrá relevancia.

Por otro lado, podemos ajustar los últimos términos usando deltas de Dirac y escribiendo el signo menos como $\frac{i}{\hbar}$, de forma que obtenemos

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left(-\frac{1}{2} q^+ \left(m \frac{d^2}{dt'^2} + m\omega^2 \right) q^+ + J^+(t') q^+(t') + \frac{1}{2} q^- \left(m \frac{d^2}{dt'^2} + m\omega^2 \right) q^- - J^-(t') q^-(t') + \right. \\ & \left. \bar{q}(J^+(t') - J^-(t')) \right) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' \left(\frac{1}{2} q^+(t') D^{++}(t', t'') q^+(t'') + \frac{1}{2} q^-(t') D^{--}(t', t'') q^-(t'') + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} q^+(t') D^{+-}(t', t'') q^-(t'') + \frac{1}{2} q^-(t') D^{-+}(t', t'') q^+(t'') \right) \end{aligned} \quad (15)$$

donde definimos

$$D^{++}(t', t'') = i\hbar D_0^{++} \delta(t' - t_0) \delta(t'' - t_0) \quad (16)$$

$$D^{--}(t', t'') = i\hbar D_0^{--} \delta(t' - t_0) \delta(t'' - t_0) \quad (17)$$

$$D^{+-}(t', t'') = i\hbar D_0^{+-} \delta(t' - t_0) \delta(t'' - t_0) \quad (18)$$

$$D^{-+}(t', t'') = i\hbar D_0^{-+} \delta(t' - t_0) \delta(t'' - t_0) \quad (19)$$

Luego, definiendo los vectores $\mathbf{J}(t) = \begin{pmatrix} -J^+(t) \\ J^-(t) \end{pmatrix}$ y $\mathbf{q}(t) = \begin{pmatrix} q^+(t) \\ q^-(t) \end{pmatrix}$ tendremos que podemos escribir:

$$Z[\mathbf{J}] = \frac{\int \mathcal{D}\mathbf{q} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' \mathbf{q}^T(t') G^{-1}(t', t'') \mathbf{q}(t'') - \int_{t_0}^t dt' \mathbf{J}^T(t') \mathbf{q}(t') \right)}}{\int \mathcal{D}\mathbf{q} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' \mathbf{q}^T(t') G^{-1}(t', t'') \mathbf{q}(t'') \right)}} \quad (20)$$

donde hemos denotado

$$G^{-1}(t', t'') = G_{\text{dyn}}^{-1}(t', t'') + G_{\text{ini}}^{-1}(t', t'') \quad (21)$$

con

$$G_{\text{ini}}^{-1}(t', t'') = \begin{pmatrix} D^{++}(t', t'') & D^{+-}(t', t'') \\ D^{-+}(t', t'') & D^{--}(t', t'') \end{pmatrix} \quad (22)$$

la cual engloba información sobre el estado inicial y

$$G_{\text{dyn}}^{-1}(t', t'') = \begin{pmatrix} -m \left(\frac{d^2}{dt'^2} + \omega^2 \right) \delta(t' - t'') & 0 \\ 0 & m \left(\frac{d^2}{dt'^2} + \omega^2 \right) \delta(t' - t'') \end{pmatrix} \quad (23)$$

codificará la dinámica del sistema. Esta notación con G^{-1} será evidente luego, aunque por ahora, será importante el que hemos escrito nuestro funcional generador en términos de vectores y matrices que recuerdan las integrales gaussianas. Usaremos eso para conectar con nuestros resultados anteriores.

2 Propagadores y funcional generador

Dado que la exponencial tiene forma gaussiana, al discretizar el tiempo el término $\mathcal{D}\mathbf{q}$ se convierte en una integral multivariable sobre $(q_0, q_1, \dots, q_N)$, la cual puede tratarse como una integral gaussiana normal de varias variables acopladas. Al tomar el límite $N \rightarrow \infty$, esto es equivalente, en la práctica, a integrar directamente sobre $\mathcal{D}\mathbf{q}$. Notemos que esto ocurre porque la acción es cuadrática. No está garantizado que se pueda hacer lo mismo para acciones más generales.

Así, realizando las integrales del numerador y denominador usando nuestros resultados de integrales gaussianas:

$$Z[\mathbf{J}] = e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' \mathbf{J}^T(t') G(t', t'') \mathbf{J}(t'')} \quad (24)$$

Aquí resultó de importancia mantener el denominador, a pesar de saber que es sólo 1, para cancelar factores como una raíz de un determinante que aparecen de la integración del numerador.

En la ecuación (24) tenemos explícitamente que el producto dentro de la exponencial es:

$$\mathbf{J}^T(t') G(t', t'') \mathbf{J}(t'') = \begin{pmatrix} -J^+(t') & J^-(t') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G^{++}(t', t'') & G^{+-}(t', t'') \\ G^{-+}(t', t'') & G^{--}(t', t'') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -J^+(t'') \\ J^-(t'') \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{J}^T(t') G(t', t'') \mathbf{J}(t'') = J^+(t') G^{++}(t', t'') J^+(t'') - J^+(t') G^{+-}(t', t'') J^-(t'') - J^-(t') G^{-+}(t', t'') J^+(t'') + J^-(t') G^{--}(t', t'') J^-(t'') \quad (25)$$

Notemos que si derivamos (24) una vez respecto a $J^\pm$ tendremos que siempre habrá un producto de algún G por un $J^\pm$, por lo que al fijar al final $J^\pm$ a cero, tendremos que:

$$\frac{\delta Z}{\delta J^\pm(t)} \Big|_{J^+=J^-=0} = 0 \quad (26)$$

Es decir,

$$\langle q^\pm(s) \rangle = 0 \quad (27)$$

Cualquier promedio sobre una sola variable $q^\pm$ será cero si podemos escribir el término de la exponencial en una forma cuadrática en q .

Por otra parte, recordemos que al derivar respecto de $J^\pm$ dos veces obtenemos las funciones que definimos como $G^{++}(t, t')$, $G^{--}(t, t')$, $G^{+-}(t, t')$ y $G^{-+}(t, t')$. Por tanto, podemos visualizar que precisamente éstas son las componentes de $G(t', t'')$. Comprobemos que es así. Desde la expresión (24), usando explícitamente la ecuación (25) derivamos respecto a $J^\pm$ y fijando $J^\pm = 0$ al final, se tiene que:

$$\frac{\delta Z}{\delta J^+(t) \delta J^+(t')} \Big|_{J^+=J^-=0} = -\frac{i}{\hbar} G^{++}(t, t') \quad (28)$$

$$\frac{\delta Z}{\delta J^-(t) \delta J^-(t')} \Big|_{J^+=J^-=0} = -\frac{i}{\hbar} G^{--}(t, t') \quad (29)$$

$$\frac{\delta Z}{\delta J^-(t) \delta J^+(t')} \Big|_{J^+=J^-=0} = \frac{i}{\hbar} G^{+-}(t, t') \quad (30)$$

$$\frac{\delta Z}{\delta J^+(t) \delta J^-(t')} \Big|_{J^+=J^-=0} = \frac{i}{\hbar} G^{-+}(t, t') \quad (31)$$

cuyas expresiones corresponden a las definidas con anterioridad. En consecuencia, las segundas derivadas del funcional generador entregan las componentes de la matriz G , a la que llamamos propagador, ya que codifica tanto la dinámica del sistema (cómo evolucionan las fluctuaciones en el tiempo) como la información del estado inicial (a través de los términos G_{ini}^{-1} derivados de la matriz densidad). Por lo tanto, G contiene toda la información necesaria para describir cómo se correlacionará y propagará el sistema a lo largo del tiempo.