1. Un sistema cuántico a temperatura finita

La idea de esta clase es repasar métodos para calcular la función de partición de un sistema cuántico a temperatura finita usando integrales de camino, tomando como caso de estudio un oscilador armónico. Es decir, queremos calcular

$$Z = \text{ tr } e^{-\beta H} \tag{1}$$

con

$$H = \frac{1}{2}\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \omega^2 x^2\right] \tag{2}$$

Por supuesto no nos interesa el resultado, que ya conocemos

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)} = \frac{1}{2\sinh\frac{1}{2}\beta\omega} \tag{3}$$

sino la manera de calcularlo.

La primer observación involucra la analogía entre la matriz densidad térmica

$$\rho = e^{-\beta H} \tag{4}$$

y el operador de evolución

$$U(t) = e^{-itH} \tag{5}$$

es decir

$$\rho = U(-i\beta) \tag{6}$$

Lo que ganamos es que sabemos expresar los elementos de matriz del operador evolución en términos de una integral de camino

$$\langle X|U(t)|X'\rangle = \int_{x(0)=X',x(t)=X} Dx\; e^{iS} \tag{7}$$

con

$$S = \int_0^t dt'\; \frac{1}{2}\left[\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - \omega^2 x^2\right] \tag{8}$$

y por lo tanto deducimos que

$$\langle X|\rho|X'\rangle = \int_{x(0)=X',x(-i\beta)=X} Dx\; e^{iS} \tag{9}$$

donde ahora la integral temporal en la acción 8 es una integral sobre una curva Γ en el plano de la variable compleja t que empieza en 0 y termina en $-i\beta$

$$S = \int_\Gamma dz\; \frac{1}{2}\left[\left(\frac{dx}{dz}\right)^2 - \omega^2 x^2\right] \tag{10}$$

Para calcular la integral parametrizamos Γ como $z = z(\lambda)$, $0 \leq \lambda \leq 1$. Entonces

$$S = \int_0^1 d\lambda\; \frac{1}{2}\left[\frac{d\lambda}{dz}\left(\frac{dx}{d\lambda}\right)^2 - \frac{dz}{d\lambda}\omega^2 x^2\right] \tag{11}$$

Para que la integral de camino sea convergente, es necesario que $\text{Re } iS \leq 0$ para cualquier camino. Pero si $z = \xi + i\eta$, entonces

$$\text{Re } iS = \int_0^1 d\lambda\; \frac{1}{2}\frac{d\eta}{d\lambda}\left[\frac{1}{|\frac{dz}{d\lambda}|^2}\left(\frac{dx}{d\lambda}\right)^2 + \omega^2 x^2\right] \tag{12}$$

de manera que para que la integral de camino converja debe ser

$$\frac{d}{d\lambda}\mathrm{Im}\, z \leq 0 \tag{13}$$

Existen muchos contornos que satisfacen esta propiedad, la elección de uno u otro depende de qué es lo que uno quiere calcular (ver Calzetta y Hu, Nonequilibrium quantum field theory, Cambridge (2008)). Por ahora nos quedaremos con el "contorno de Matsubara", $z = -it$, $0 \leq t \leq \beta$. Entonces

$$\langle X|\rho|X'\rangle = \int_{x(0)=X',x(\beta)=X} Dx\ e^{-S} \tag{14}$$

con

$$S = \int_0^\beta dt\ \frac{1}{2}\left[\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \omega^2 x^2\right] \tag{15}$$

Nótese que la acción 15 corresponde en realidad a un oscilador invertido.

Con esta expresión para los elementos de matriz encontramos que

$$Z = \ \mathrm{tr}\ \rho = \int_{-\infty}^{\infty} dX\ \int_{x(0)=x(\beta)=X} Dx\ e^{-S} \tag{16}$$

Es decir, la función de partición es la integral de camino sobre trayectorias *periódicas* (con período β) en el tiempo euclídeo. Esta observación puede tomarse como la definición de equilibrio térmico en teoría cuántica.

Antes de encarar la traza, volvamos al elemento de matriz genérico 14. Para calcular la integral de camino empezamos por aislar la trayectoria clásica

$$x = \bar{x} + \xi \tag{17}$$

donde $\bar{x}$ es la solución de la ecuación de movimiento

$$\frac{d^2}{dt^2}\bar{x} - \omega^2\bar{x} = 0 \tag{18}$$

con condiciones de contorno $\bar{x}(0) = X'$ y $\bar{x}(\beta) = X$, y ξ es una fluctuación arbitraria con condiciones de contorno $\xi(0) = \xi(\beta) = 0$. Para un oscilador armónico la acción se desacopla

$$S[x] = S[\bar{x}] + S[\xi] \tag{19}$$

y por lo tanto el elemento de matriz se factoriza

$$\langle X|\rho|X'\rangle = f[\beta]\, e^{-S[\bar{x}]} \tag{20}$$

con

$$f[\beta] = \int_{\xi(0)=\xi(\beta)=0} Dx\ e^{-S[\xi]} \tag{21}$$

Observamos que

$$S[\bar{x}] = \frac{1}{2}\left[X\frac{d\bar{x}}{dt}(\beta) - X'\frac{d\bar{x}}{dt}(0)\right] \tag{22}$$

La solución explícita para $\bar{x}$ es

$$\bar{x}(t) = X\frac{\sinh\omega t}{\sinh\omega\beta} + X'\frac{\sinh\omega(\beta - t)}{\sinh\omega\beta} \tag{23}$$

Calculando las derivadas encontramos que

$$S[\bar{x}] = \frac{\omega}{2\sinh\omega\beta}\left[\left(X^2 + X'^2\right)\cosh\omega\beta - 2XX'\right] \tag{24}$$

Para calcular la función $f[\beta]$ observamos que los elementos de matriz de ρ satisfacen la *ecuación de Feynman-Kac*, que es la rotación de Wick de la ecuación de Schrödinger

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\langle X|\rho|X'\rangle = \frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \omega^2 X^2\right]\langle X|\rho|X'\rangle \tag{25}$$

con la condición de contorno de que

$$\langle X|\rho|X'\rangle \to \delta\left(X - X'\right) \tag{26}$$

cuando $\beta \to 0$. Reemplazando la expresión 20 y poniendo $X = X' = 0$ (ya que sólo nos interesa la dependencia de f con β) obtenemos

$$\frac{df}{d\beta} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2 S\left[\bar{x}\right]}{\partial X^2}\left[X = X' = 0\right] f \tag{27}$$

o sea

$$\frac{df}{d\beta} = -\frac{\omega}{2}\frac{\cosh\omega\beta}{\sinh\omega\beta} f \tag{28}$$

La solución que incorpora la condición inicial es

$$f\left[\beta\right] = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi\sinh\omega\beta}} \tag{29}$$

Ahora sí volvemos a la traza de ρ. Cuando $X = X'$ la acción clásica se reduce a

$$S\left[\bar{x}\right] = \frac{\omega X^2}{\sinh\omega\beta}\left[\cosh\omega\beta - 1\right] = \omega X^2 \frac{\sinh\frac{1}{2}\omega\beta}{\cosh\frac{1}{2}\omega\beta} \tag{30}$$

de manera que

$$\mathrm{tr}\ \rho = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi\sinh\omega\beta}}\int_{-\infty}^{\infty} dX\ e^{-\omega X^2 \sinh\frac{1}{2}\omega\beta/\cosh\frac{1}{2}\omega\beta} = \frac{1}{2\sinh\frac{1}{2}\omega\beta} \tag{31}$$

Tal y como esperábamos.

Ahora que hemos visto cuál debe ser el valor de $f\left[\beta\right]$, vamos a ver una manera más sistemática de obtenerlo. Por supuesto, esta manera no va a ser más útil para el oscilador armónico; lo que nos proponemos es demostrar el método.

Recordemos que

$$f\left[\beta\right] = \int_{\xi(0)=\xi(\beta)=0} Dx\ e^{-S[\xi]} \tag{32}$$

Como ξ se anula en los límites,en este caso al integrar por partes no aparece el término de borde y

$$f\left[\beta\right] = \int_{\xi(0)=\xi(\beta)=0} Dx\ e^{-(1/2)\int_0^\beta dt\ \xi\left[-\frac{d^2}{dt^2}+\omega^2\right]\xi} \tag{33}$$

Si pensamos ésto como una Gaussiana multivaluada con muchísimos grados de libertad, podemos escribir

$$f\left[\beta\right] = \left[\mathrm{Det}\ H\right]^{-1/2} \tag{34}$$

donde H es el operador

$$H\left(t, t'\right) = \left[-\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2\right]\delta\left(t - t'\right) \tag{35}$$

actuando en el espacio de funciones que se anulan en $t = 0$ y β. Es conveniente pensar que hay kets $|t\rangle$ que forman una base en este espacio. Es decir, pensamos a la función $\xi\left(t\right)$ como un vector $|\xi\rangle$, tal que $\xi\left(t\right) = \langle t|\xi\rangle$.

Ahora escribimos H en términos de sus elementos de matriz

$$\langle t\,|H|\,t'\rangle = \left[-\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2\right]\delta\left(t - t'\right) \tag{36}$$

El paso siguiente es la fórmula

$$\ln\ \mathrm{Det}\ H = \mathrm{Tr}\ \ln H = \int_0^\beta dt\ \langle t\,|\ln H|\, t\rangle \tag{37}$$

Para calcular el logaritmo apelamos a la representación

$$\ln\alpha = \int_0^\infty \frac{ds}{s}\ \left[e^{-s} - e^{-\alpha s}\right] \tag{38}$$

que es obviamente cierta cuando $\alpha = 1$, y tal que las derivadas de ambos miembros coinciden. Extendiendo esta identidad a operadores, encontramos que

$$\langle t\,|\ln H|\, t'\rangle = \ \mathrm{const}\ \ \langle t\,|\mathbf{1}|\, t'\rangle - \int_0^\infty \frac{ds}{s}\ \left\langle t\,\left|e^{-sH}\right|\, t'\right\rangle \tag{39}$$

donde $\langle t\,|\mathbf{1}|\, t'\rangle = \delta\left(t - t'\right)$.

El operador e^{-sH} se conoce como el *heat kernel*, porque los elementos de matriz

$$K\left[t, t'; s\right] = \left\langle t\,\left|e^{-sH}\right|\, t'\right\rangle \tag{40}$$

obedecen la ecuación

$$\frac{\partial K}{\partial s} = -HK = \left[\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2\right] K\left[t, t'; s\right] \tag{41}$$

que es análoga a la ecuación del calor. Las condiciones de contorno son

$$\begin{aligned} &K\left[t, t'; 0\right] = \delta\left(t - t'\right) \\ &K\left[t, t'; s\right] \to 0 \text{ cuando } s \to \infty \\ &K\left[0, t'; s\right] = K\left[\beta, t'; s\right] = 0 \end{aligned} \tag{42}$$

Claramente conviene escribir

$$K\left[t, t'; s\right] = K_0\left[t, t'; s\right] e^{-\omega^2 s} \tag{43}$$

Entonces

$$\frac{\partial K_0}{\partial s} = \frac{d^2 K_0}{dt^2} \tag{44}$$

Una función que se anula en 0 y en β se puede escribir como

$$K_0\left[t, t'; s\right] = \sum_{n=1}^\infty C_n\left[t'; s\right] \sin n\pi\frac{t}{\beta} \tag{45}$$

donde

$$C_n = \frac{2}{\beta}\int_0^\beta dt\ K_0\left[t, t'; s\right] \sin n\pi\frac{t}{\beta} \tag{46}$$

Es claro que

$$C_n = c_n\left[t'\right] e^{-n^2\pi^2 s/\beta^2} \tag{47}$$

Los c_n resultan de evaluar la serie en $s = 0$, y finalmente

$$K\left[t, t'; s\right] = \frac{2}{\beta}\sum_{n=1}^\infty \sin n\pi\frac{t}{\beta}\ \sin n\pi\frac{t'}{\beta}\ e^{-s\left[n^2\pi^2/\beta^2 + \omega^2\right]} \tag{48}$$

Ponemos $t = t'$ e integramos sobre t y s para obtener

$$\ln\ \mathrm{Det}\ H = \sum_{n=1}^\infty \ln\left[\frac{n^2\pi^2}{\beta^2} + \omega^2\right] \tag{49}$$

Este resultado no parece muy alentador, pero escribamoslo como

$$\text{Det } H = \frac{1}{\omega} \left\{ \omega \prod_{n=1}^{\infty} \left[\frac{n^2\pi^2}{\beta^2} + \omega^2 \right] \right\} \tag{50}$$

La expresión entre corchetes es una función de ω que se anula cuando $\omega = 0$ o $\pm in\pi\beta^{-1}$, que son exactamente los ceros de $\sinh \beta\omega$. Por lo tanto podemos asumir que hay una proporcionalidad

$$\text{Det } H = C \frac{\sinh \beta\omega}{\omega} \tag{51}$$

que es el resultado correcto, ver 29 y 34.

En realidad podríamos haber ahorrado un montón de trabajo usando un truco que expone Sidney Coleman en sus “The uses of instantons” (ver S. Coleman, Aspects of Symmetry, Cambridge, 1985). Consideremos un operador de la forma

$$H = -\frac{d^2}{dt^2} + f(t) \tag{52}$$

en el espacio de funciones que se anulan en 0 y en β, y sea $\Phi_\lambda(t)$ la solución de

$$[H - \lambda]\, \Phi_\lambda(t) = 0 \tag{53}$$

con condiciones *iniciales* $\Phi_\lambda(0) = 0$ y $\dot{\Phi}_\lambda(0) = 1$. Ahora sean

$$f_1(\lambda) = \text{Det } [H - \lambda] \tag{54}$$

y

$$f_2(\lambda) = \Phi_\lambda(\beta) \tag{55}$$

Es fácil ver que $f_1 = 0$ si y sólo si $f_2 = 0$: si $f_1 = 0$ entonces λ es un autovalor de H, y el autovector correspondiente es proporcional a Φ_λ, que entonces se anula en $t = \beta$. Si $f_2 = 0$, Φ_λ es un autovector de H con autovalor λ, y por lo tanto $f_1 = 0$. De manera que debe ser

$$\text{Det } [H - \lambda] \propto \Phi_\lambda(\beta) \tag{56}$$

y en particular

$$\text{Det } H \propto \Phi_0(\beta) \tag{57}$$

En el caso que nos ocupa, $f = \omega^2$,

$$\Phi_0(\beta) = \frac{\sinh \beta\omega}{\omega} \tag{58}$$

y recuperamos el resultado 51.