



Fundamentos de la teoría cuántica de campos fuera de equilibrio

Autor:

Lucciano Hector Toscano Torres

Asesor:

Dr. Miguel Angel Bastarrachea Magnani

PROYECTO TERMINAL I: INVESTIGACIÓN TEÓRICA
CLAVE 2111107. TRIMESTRE 23-I.

Licenciatura en Física
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

19 de Junio 2023

Índice

1. Introducción	3
1.1. Historia e importancia	3
2. Teoría cuántica de campos	4
2.1. Funciones de Green	4
2.2. Integral de camino de Feynman	7
3. Teoría de Keldysh	9
3.1. Estados Coherentes	11
3.2. Integrales Gaussianas	15
3.3. Función de partición	18
3.4. Rotación de Keldysh	24
4. Oscilador armónico	25
5. Conclusiones	28
6. Apendice	29
6.1. Matriz de densidad y sus propiedades	29
6.2. Operador de evolución	30
6.3. Representación de Heisenberg	33
6.4. Ec. De Von Neumann	35

Resumen

Dentro de las microcavidades ópticas surge una interacción fuerte entre luz (fotones) y materia (excitones de un semiconductor), que forman cuasipartículas llamadas polaritones. Las interacciones polariton-polariton dan efectos cuánticos bosónicos como el condensado Bose-Einstein, la superfluidez y la superconductividad. A pesar de las técnicas que se hacen para conocer las propiedades de estas cuasipartículas (como la aproximación de campo medio), no suelen considerarse efectos que están altamente fuera de equilibrio, por lo que se requieren nuevos métodos para describir mejor sus propiedades y sus aplicaciones. Además en estos sistemas polaritónicos se tienen interacciones de muchos cuerpos, por lo que su descripción puede darse a través de la segunda cuantización y esta a su vez nos lleva a una teoría cuántica de campos (*QFT* por sus siglas en inglés). De modo que en el presente texto se tratará con las técnicas matemáticas de una *QFT* en equilibrio y fuera de equilibrio, basada en el *formalismo de Keldysh*; para después poder describir los efectos e interacciones entre polaritones.

1. Introducción

1.1. Historia e importancia

Como se sabe el universo está compuesto de muchas partículas que están interactuando en todo momento, no solo entre ellas también por los campos que crean -como el gravitacional o el electromagnético. Sin embargo, el principal problema son los potenciales entre partículas que en mecánica cuántica clásica se tendrían que agregar a la ecuación de Schrödinger. A pesar de que esta ecuación describiría el estado completo de un sistema, es impracticable (en la mayoría de los casos) ya que si son N partículas, se tendrían N -ecuaciones acopladas. Entonces para obtener una solución de una manera más sencilla, se tienen que desarrollar otras teorías o mejorar las que existen. En este caso se desarrollará la segunda cuantización, la cual fue desarrollada por Dirac para los bosones [1] y luego mejorada por Fock [2], Jordan y Wigner [3]. En esta teoría las partículas pasan a ser excitaciones de un campo, como los fotones para el campo electromagnético, así se pasa a tener una *teoría cuántica de campos* (*QFT* por sus siglas en inglés). Asimismo al tener muchos cuerpos, se tienen interacciones fuertes entre ellos que llevan a dividir el Hamiltoniano en uno interactuante y otro no interactuante.

La primer teoría cuántica de campos fue la *electrodinámica cuántica*, desarrollada independientemente por Tomonaga, Schwinger y Feynman, aproximadamente en 1948 [4, 5, 6]. Se tendrá atención especial a la técnica de Feynman en la sección 2 de este texto. Gracias a este avance, se pudieron desarrollar las teorías cuánticas de campos para la fuerza fuerte, la fuerza débil y, la que tratará este texto, *cuántica de campos fuera de equilibrio*. Los pioneros en esta teoría fuera de equilibrio fueron Julian Schwinger [7] y siendo formalizada por Leonid Keldysh [8]. Keldysh (7 de abril de 1931 – 11 de noviembre de 2016) fue un físico Ruso, profesor en el *Instituto de Física Lebedev* de la Academia Rusa de Ciencias en Moscú.

Este proyecto tratará de una revisión sobre el *formalismo de Keldysh*, que usa una técnica análoga a la integral de trayectoria de Feynman, este método es usado tanto en equilibrio como fuera de equilibrio. Se empezará con una somera introducción a la teoría cuántica de campos, las funciones que se usan y una idea de la integral de camino de Feynman. Después se desarrollará la teoría de Keldysh, junto a un ejemplo para ver el significado de diversos conceptos introducidos ahí. El objetivo a futuro es tratar sistemas novedosos como los fluidos cuánticos de luz, que ofrecen efectos únicos fuera de equilibrio e interacciones fuertes, como la condensación Bose Einstein, la superfluidez y la superconductividad [9].

2. Teoría cuántica de campos

Como se mencionó desde el descubrimiento de la primera teoría cuántica de campos, que trata sobre las interacciones electromagnéticas (*electrodinámica cuántica*), se han desarrollado otras que unifican las fuerzas fundamentales de la naturaleza, la fuerza débil (con el *modelo electrodébil*) y la fuerza fuerte (con la *cromodinámica cuántica*). Con estas se logró crear una sola que es capaz de explicar casi todos los fenómenos que existen, esta teoría es el *modelo estándar*; que constituye uno de los mayores logros en la física por su precisión y su gran rango de aplicación [10]. En general es esencial para la física nuclear, la física atómica, física de materia condensada, astrofísica y física de partículas. Hasta ahora la única fuerza que escapa al marco de esta teoría es la gravedad, que tiene su propio desarrollo en la Relatividad General.

Como se tratará con la teoría cuántica de campos fuera de equilibrio de muchos cuerpos, es necesario introducir algunos conceptos matemáticos generales que se usarán a lo largo del texto y que serán de gran ayuda para llegar a la teoría de Keldysh. Uno de ellos son las *funciones de Green*. Estas funciones son muy importantes porque nos permiten calcular las propiedades más importantes del sistema como la probabilidad de que una partícula pase de un punto a otro, la distribución espectral del sistema, la densidad promedio de las partículas o la densidad de corriente promedio [11, 12]. El otro es la integral de caminos de Feynman, ya que la teoría de Keldysh la usa de una forma similar y porque da una visión distinta de la teoría cuántica que es equivalente a la de Schrödinger.

2.1. Funciones de Green

La función de Green o propagador de una partícula es la amplitud de probabilidad de encontrar a una partícula en el sistema en un punto r_2 y un tiempo t_2 , dado que estaba originalmente en un punto inicial r_1 y un tiempo inicial t_1 . Primero tomemos un sistema donde el operador Hamiltoniano no depende del tiempo $H_0 \neq H_0(t)$, con la ecuación de Schrödinger:

$$[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.1)$$

donde $\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \hat{U}(t, t_0) | \alpha \rangle$, $|\alpha\rangle$ es un vector de estado o ket usualmente se suele escribir como $|\psi\rangle$ son equivalentes, $\hat{U}(t, t_0)$ es el operador de evolución tratado en el apéndice, $H_0(\mathbf{r})$ es el Hamiltoniano sin interacciones donde conocemos sus eigenestados que son las energías de la partícula libre ($E_a = \hbar\omega_a$) y $V(\mathbf{r})$ es un potencial externo que puede ser tratado como una perturbación. La función de onda, si no dependiera de $V(\mathbf{r})$, puede ser desarrollada en eigenkets $|a\rangle$ de un observable A que conmuta con $H_0(\mathbf{r})$, por lo que ambos tendrían los mismos eigenkets [13]. De esta manera H_0 al no depender del tiempo se usa la ecuación del apéndice 6.19

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \exp\left\{ \frac{-i\hat{H}_0(t-t_0)}{\hbar} \right\} | \alpha, t_0 \rangle \quad (2.2)$$

$$= \sum_a \langle \mathbf{r} | a \rangle \langle a | \alpha, t_0 \rangle \exp\left\{ \frac{-iE_a(t-t_0)}{\hbar} \right\} \quad (2.3)$$

$$= \sum_a c_a(t_0) u_a(\mathbf{r}) \exp\left\{ \frac{-iE_a(t-t_0)}{\hbar} \right\}, \quad (2.4)$$

dónde se aplicó

$$\sum_a |a\rangle \langle a| = 1, \quad (2.5)$$

$$u_a(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | a \rangle \Rightarrow u_a^*(\mathbf{r}) = \langle a | \mathbf{r} \rangle. \quad (2.6)$$

Esta última ecuación es una eigenfunción de un operador \hat{A} . También

$$c_a(t_0) = \langle a | \alpha, t_0 \rangle = \int d^3r' \langle a | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \alpha, t_0 \rangle = \int d^3r' u_a^*(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t_0). \quad (2.7)$$

Sustituyendo

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_a \int d^3r' \langle a | \mathbf{r}' \rangle \Psi(\mathbf{r}', t_0) \langle \mathbf{r} | a \rangle \exp\left\{ \frac{-iE_a(t-t_0)}{\hbar} \right\} \quad (2.8)$$

$$= \int d^3r' G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) \Psi(\mathbf{r}', t_0), \quad (2.9)$$

se define

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) \equiv \sum_a |\langle \mathbf{r} | a \rangle|^2 \exp\left\{ \frac{-iE_a(t-t_0)}{\hbar} \right\} \quad (2.10)$$

$$= \sum_a \langle \mathbf{r} | a \rangle \langle a | \mathbf{r}' \rangle \exp\left\{ \frac{-iE_a(t-t_0)}{\hbar} \right\}, \quad (2.11)$$

esta función se puede reescribir usando la completitud de la base a ,

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) = \langle \mathbf{r} | \exp\left\{ \frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar} \right\} | \mathbf{r}' \rangle. \quad (2.12)$$

Además es una solución de la ecuación de Schrödinger [14]

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - H_0(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) \right] G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t_0), \quad (2.13)$$

entonces la inversa de la función G se puede definir simbólicamente como

$$G^{-1}(\mathbf{r}, t) \equiv \left[i \frac{\partial}{\partial t} - H_0(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) \right]. \quad (2.14)$$

La ecuación 2.8 nos dice la contribuciones de la función de onda inicial $\Psi(\mathbf{r}', t_0)$ a la función de onda final $\Psi(\mathbf{r}, t)$, propagadas desde todos los puntos \mathbf{r}' al tiempo t_0 hasta el

punto \mathbf{r} en el tiempo $t > t_0$. Por esta razón $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0)$ se llama propagador y es una función de Green. De este caso si $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, tomando $t_0 = 0$ e integrando sobre todo el espacio la ecuación 2.12 se vuelve

$$\begin{aligned} G(t) &\equiv \int G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}, 0) d^3r \\ &= \int \sum_a |\langle \mathbf{r} | a \rangle|^2 \exp\left\{\frac{-iE_a t}{\hbar}\right\} d^3r \\ &= \sum_a \exp\left\{\frac{-iE_a t}{\hbar}\right\}, \end{aligned}$$

Esta ecuación, al ser la suma sobre los estados a , se puede ver que es análoga a la función de partición de la física estadística escogiendo tiempo imaginarios. Por lo que, con t imaginaria, se define β que es real y positiva tal que

$$\beta \equiv \frac{it}{\hbar}. \quad (2.15)$$

De esta manera $G(t)$ puede ser identificada como la función de partición

$$Z \equiv G(t) = \sum_a \exp\{-\beta E_a\}. \quad (2.16)$$

Como se verá a lo largo de este texto y con este ejemplo, algunas técnicas de propagadores en cuántica también son útiles en física estadística.

Ahora se pide la condición de causalidad, que los eventos iniciales solo se propaguen hacia el futuro. Esto quiere decir que para $t < t_0 \Rightarrow G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) = 0$, entonces con la función escalón,

$$\theta(t - t_0) = \begin{cases} 1 & \text{si } t > t_0 \\ 0 & \text{si } t < t_0 \end{cases} \quad (2.17)$$

Una vez más reescribiendo el propagador tenemos que

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) = \theta(t - t_0) \langle \mathbf{r} | \exp\left\{\frac{-i\hat{H}(t - t_0)}{\hbar}\right\} | \mathbf{r}' \rangle \quad (2.18)$$

Si notamos que lo que está dentro del braket es el operador de evolución, podemos escribir el propagador y la función de onda de manera general para un tiempo arbitrario $t' < t$ como

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \theta(t - t') \langle \mathbf{r} | \hat{U}(t, t') | \mathbf{r}' \rangle \quad (2.19)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r' \theta(t - t') \langle \mathbf{r} | \hat{U}(t, t') | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \alpha, t' \rangle. \quad (2.20)$$

Asimismo la función de Green nos permite calcular el espectro energético con la parte imaginaria de la energía, donde en el plano complejo estas energías son polos simples (por este motivo son resonancias del sistema) [13].

2.2. Integral de camino de Feynman

En la representación de Heisenberg (ver ecuación 6.28 del apéndice) el propagador 2.12 puede escribirse como

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) = \langle \mathbf{r}, t | \mathbf{r}', t_0 \rangle, \quad (2.21)$$

en esta representación esta ecuación es la amplitud de probabilidad de que una partícula que está inicialmente en t_0 en la posición \mathbf{r}' sea encontrada en un tiempo posterior t y una posición \mathbf{r} . No tiene que ser un tiempo inicial t_0 , puede ser a cualquier tiempo $t' < t$. Análogo a los kets de posición de Schrödinger, a cualquier tiempo los kets en la representación de Heisenberg forman un conjunto completo, por lo que se puede tener el operador identidad como

$$\int d^3r |\mathbf{r}, t\rangle \langle \mathbf{r}, t| = \hat{1}. \quad (2.22)$$

En seguida con este operador se puede dividir la parte temporal de la ecuación 2.21 cuantas veces se quiera (se tiene una traslación finita temporal), siendo análogo a una suma de Riemann para después pasa al límite donde es continuo. Este desarrollo, fue creado por R.P. Feynman en 1948 [4], lo que lleva a una formulación independiente de la mecánica cuántica. Así dividiendo el intervalo temporal de t_1 a t_N en $N - 1$ partes iguales

$$\delta t \equiv t_n - t_{n-1} = \frac{t_N - t_1}{N - 1}, \quad (2.23)$$

se considera amplitud de transición del punto inicial (x_1, t_1) -en una dimensión al punto final (x_N, t_N) , usando 2.22 en 2.21 se llega a

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2 \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \\ &\quad \times \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_{N-2}, t_{N-2} \rangle \dots \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Para cada intervalo se considera una amplitud de probabilidad, como 2.21, al conocer cada una e integrar respecto a cada x_n ; $n \in 2, 3 \dots, N - 1$ se podría tener la solución de la ecuación original. A diferencia de la mecánica clásica, en cuántica la partícula podría estar en cualquier trayectoria incluso las que no son posibles de manera clásica, por eso se tiene una suma sobre todos los caminos posibles. Sin embargo, aún no se puede obtener una solución directa porque no se conoce la forma explícita de cada $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$.

Examinando los operadores de evolución $\hat{U}(t, t_0)$ (del apéndice) se tienen exponenciales complejas, con exponentes con unidades de la acción (energía por unidad de tiempo), por el Hamiltoniano y el tiempo. Como el Hamiltoniano se puede deducir del Lagrangiano y este a su vez del principio de mínima acción. Con esta observación Feynman y Dirac [15] propusieron que la fase de las funciones de onda es la acción clásica (la integral respecto al tiempo del Lagrangiano clásico alrededor de un camino) esto es

$$\exp \left[i \int_{t_1}^{t_2} \frac{dt L_{clas}(x, \dot{x})}{\hbar} \right] \sim \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle. \quad (2.25)$$

Antes de establecer una igualdad, se introduce una notación para la acción que es

$$S(n, n-1) \equiv \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt L_{clas}(x, \dot{x}), \quad (2.26)$$

en esta notación no es explícito que se está tratando de una sola trayectoria, pero por L_{clas} es evidente que es a través de un solo camino donde se integra. Si se toma un solo camino se tendrán contribuciones sucesivas de cada división temporal (solo del camino específico) por lo cual se tiene

$$\prod_{n=2}^N \exp\left[i \frac{S(n, n-1)}{\hbar}\right] = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N S(n, n-1)\right] = \exp\left[\frac{iS(N, 1)}{\hbar}\right], \quad (2.27)$$

dónde se definió

$$S(N, 1) \equiv \sum_{n=2}^N S(n, n-1). \quad (2.28)$$

Nuevamente esta no es la solución de $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$, solo es la contribución de una trayectoria, aún se tienen que hacer las integrales de cada x_n . Para desarrollar la conjetura al continuo con $\delta t \rightarrow 0$ (diferencias temporales infinitamente pequeñas), la ecuación 2.25, para cualquier x_n , con una constante de normalización B que depende de δt es

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = B(\delta t) \exp\left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar}\right]. \quad (2.29)$$

Para el valor de la constante, por ortonormalidad y en el caso de una partícula libre ($V(x) = 0$), se consigue [16]

$$B(\delta t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}\right)^{1/2},$$

esta constante es para cada camino. Por lo que la transición de probabilidad 2.24, al tener divisiones infinitamente pequeñas o $N \rightarrow \infty$ divisiones es

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}\right)^{(N-1)/2} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2 \exp\left[\frac{iS(N, 1)}{\hbar}\right], \quad (2.30)$$

Definiendo un operador integral infinito como

$$\int_{x_1}^{x_N} \mathbf{D}[x(t)] \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}\right)^{(N-1)/2} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2, \quad (2.31)$$

permite reescribir la ecuación 2.30 (donde se toma el límite $N \rightarrow \infty$ para la acción) como

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int_{x_1}^{x_N} \mathbf{D}[x(t)] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_N} L_{clas}(x, \dot{x})\right]. \quad (2.32)$$

t_N y x_N no se ven afectadas por el límite porque son puntos fijos en el espacio-tiempo, nuestras condiciones de frontera. La ecuación 2.32 es la **Integral de caminos de Feynman**. Se puede ver que es la suma de todos los caminos por 2.30.

3. Teoría de Keldysh

Para tratar los sistemas a bajas temperaturas, que tienen un Hamiltoniano dependiente del tiempo $\hat{H}(t)$ y están compuestos de muchas partículas, como el campo electromagnético, es necesario tomar la idea que Keldysh desarrolló [8]. En el texto se tomará como referencia los libros [12, 17, 11], en este capítulo se tratará otra clase de kets llamados estados coherentes, también se verán las integrales Gaussianas y la forma de resolverlas, luego el uso y obtención de la función de partición (aunque desde el principio se habla un poco de ella) y al final de la rotación de Keldysh que condensará todo lo que se usó anteriormente. En estos sistemas se usará el operador de densidad que depende del tiempo $\hat{\rho}(t)$ y no la función de onda, por ser representación más general que incluye estados mixtos (clásicos y cuánticos), dada por 6.32 descrito en el apéndice.

En este caso se asume que se sabe el estado del sistema en un tiempo en el pasado lejano $t \rightarrow -\infty$, donde estaba descrito por $\hat{\rho}(-\infty)$ y en ese tiempo el hamiltoniano $\hat{H}(-\infty) = \hat{H}_0$ no tiene interacciones. Pero estas interacciones son cambiadas lentamente y adiabáticamente (sin intercambio de calor) para alcanzar su verdadero valor real momentos antes del tiempo de observación $\hat{H}(t')$, vale la pena notar que este Hamiltoniano puede depender del tiempo.

En cambio de la ecuación de Schrödinger usual, la matriz de densidad en el caso fuera de equilibrio evoluciona respecto la ecuación de Von Neumann 6.33,

$$\Rightarrow i \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)], \quad (3.1)$$

dónde se toma $\hbar = 1$ en términos del operador de evolución operador ec. 6.32 de densidad está escrito como

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}_{t,-\infty} \hat{\rho}(-\infty) \hat{U}_{-\infty,t}^\dagger, \quad (3.2)$$

también se reescribió el operador de evolución

$$\hat{U}_{t,-\infty} \equiv \hat{U}(t, -\infty). \quad (3.3)$$

La solución de la ec. De Von Neumann en su forma más general viene dada por las series de Dyson 6.21, la cual se puede reescribir en la representación de Heisenberg como

$$\hat{U}_{t,t'} = \mathbb{T} e^{-i \int_{t'}^t \hat{H}(t) dt}, \quad (3.4)$$

este es un producto infinito llamado *exponencial ordenada en el tiempo*, donde \mathbb{T} ordena los operadores a la izquierda que están cronológicamente después o los que están antes a la derecha. Para conocer el valor esperado de un operador $\hat{A}(t)$ en el tiempo t , similar que la ec. 6.6 que es independiente del tiempo, se define

$$\langle \hat{A} \rangle(t) \equiv \frac{Tr[\hat{A} \hat{\rho}(t)]}{Tr[\hat{\rho}(t)]} = \frac{Tr[\hat{A} \hat{U}_{t,-\infty} \hat{\rho}(-\infty) \hat{U}_{-\infty,t}^\dagger]}{Tr[\hat{\rho}(t)]} = \frac{Tr[\hat{U}_{-\infty,t} \hat{A} \hat{U}_{t,-\infty} \hat{\rho}(-\infty)]}{Tr[\hat{\rho}(t)]}, \quad (3.5)$$

La última igualdad es por la permutación cíclica dentro de la traza. Esta expresión -leída de derecha a izquierda- muestra la evolución del sistema desde $t \rightarrow -\infty$ donde conocemos el operador de densidad, hacía t en el momento que medimos, después de regreso

hacia $t \rightarrow -\infty$. De esta manera se evoluciona la observable desde el estado inicial de ida y regreso en el tiempo. Ahora se puede evolucionar el estado hasta $t \rightarrow +\infty$ y regresar hasta $t \rightarrow -\infty$ usando $\hat{U}_{t,+\infty}\hat{U}_{+\infty,t} = \hat{1}$ en 3.5, junto a 6.14 se tiene

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \frac{\text{Tr}[\hat{U}_{-\infty,t} \hat{1} \hat{A} \hat{U}_{t,-\infty} \hat{\rho}(-\infty)]}{\text{Tr}[\hat{\rho}(-\infty)]} = \frac{\text{Tr}[\hat{U}_{-\infty,t} \hat{U}_{t,+\infty} \hat{U}_{+\infty,t} \hat{A} \hat{U}_{t,-\infty} \hat{\rho}(-\infty)]}{\text{Tr}[\hat{\rho}(-\infty)]}$$

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \frac{\text{Tr}[\hat{U}_{-\infty,+\infty} \hat{U}_{+\infty,t} \hat{A} \hat{U}_{t,-\infty} \hat{\rho}(-\infty)]}{\text{Tr}[\hat{\rho}(-\infty)]}. \quad (3.6)$$

Esta evolución temporal de ida y regreso se llama *contorno de tiempo cerrado* \mathcal{C} fig 1. El observable \hat{A} se mide en algún tiempo t en la rama que va hacia adelante en el tiempo, usualmente $\text{Tr}[\hat{\rho}(-\infty)] = \text{Tr}[\hat{\rho}(t)] = 1$ ya que se encuentra normalizado. En casos fuera de equilibrio es necesaria la traza porque puede ser similar a la función de partición canónica.

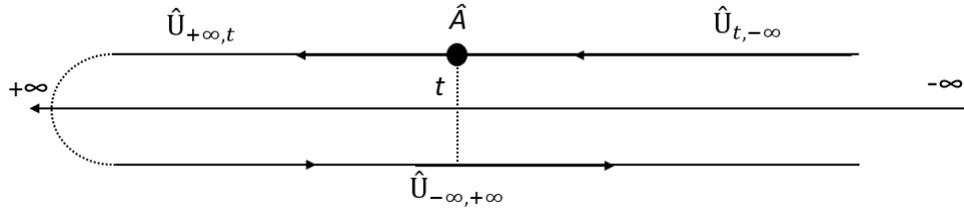


Figura 1: Contorno de tiempo cerrado \mathcal{C} , cuando $t \rightarrow +\infty$ el operador de evolución regresa hacia $t \rightarrow -\infty$. Este contorno está descrito por 3.6.

El operador de evolución en este contorno puede ser descrito como $\hat{U}_{\mathcal{C}} = \hat{U}_{-\infty,+\infty} \hat{U}_{+\infty,-\infty}$. Si el Hamiltoniano es el mismo de ida y regreso, como un sistema en equilibrio, entonces la evolución en ambos sentidos de ida-regreso de cualquier estado lo deja exactamente igual. De esta manera simplemente se tiene que $\hat{U}_{\mathcal{C}} = \hat{1}$, y entonces también se puede definir la función de partición como

$$Z \equiv \frac{\text{Tr}[\hat{U}_{\mathcal{C}} \hat{\rho}(-\infty)]}{\text{Tr}[\hat{\rho}(-\infty)]}, \quad (3.7)$$

que en este caso da $Z = 1$, donde también se considera $\rho(-\infty)$ normalizado. Recordando que la función de partición es la suma de todos los estados posibles del sistema.

Por otro lado si se tiene un observable en cualquier lado del contorno, similar a 3.5, entonces se tiene que modificar el Hamiltoniano $\hat{H}(t)$ para agregar este término de manera que se define

$$\hat{H}_V^{\pm} \equiv \hat{H}(t) \pm \hat{A}V(t). \quad (3.8)$$

Hay una parte del operador que no depende explícitamente del tiempo y otra que sí, que es $V(t)$, por lo que se separa en estas dos componentes. El signo más o menos se refiere a la parte de ida o regreso respectivamente, $V(t)$ es un potencial que depende del tiempo. Así

como el hamiltoniano es distinto en ambas ramas del contorno, $\hat{\mathcal{U}}_c[V] \neq \hat{1}$, en este caso $\hat{\mathcal{U}}_c[V]$ es descrito por 6.21 o por 3.4, sustituyendo adecuadamente el nuevo Hamiltoniano en la respectiva $\hat{\mathcal{U}}$. La función de partición de esta manera se vuelve

$$Z[V] \equiv \frac{\text{Tr}\{\hat{\mathcal{U}}_c[V]\hat{\rho}(-\infty)\}}{\text{Tr}[\hat{\rho}(-\infty)]}. \quad (3.9)$$

Usando esta función, en 3.6 el resultado será

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \left. \frac{i}{2} \frac{\delta Z[V]}{\delta V(t)} \right|_{V=0}, \quad (3.10)$$

como se verá a lo largo de este capítulo se tendrán resultados similares a este. Se hace notar se tiene una ecuación que describe la distribución de partículas en el sistema conforme avanza el tiempo, al regresar en la otra rama se conocerían los cambios que tuvo el sistema.

3.1. Estados Coherentes

La función de partición nos permite encontrar la función generadora y esta a su vez nos muestra los valores de las observables de interés. La manera más sencilla para encontrar la función generadora de los bosones, es a través de la base de Fock en segunda cuantización. Se usan los operadores de *creación* \hat{a}_i^\dagger y *aniquilación* \hat{a}_i bosónicos tales que cumplen

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (3.11)$$

Estos operadores pueden actuar en un estado de muchos cuerpos con $N = \sum_i n_i$ bosones distribuidos en distintos niveles de energía cada uno con una ocupación de n_i partículas. Para introducir otro concepto solo se trabajará con un solo estado de una sola partícula $|n_i\rangle$; el cual cumple con las siguientes propiedades

$$\langle n_i | n_j \rangle = \delta_{ij}; \quad \sum_n |n_i\rangle \langle n_i| = \hat{1}, \quad (3.12)$$

lo que significa que la base de Fock de ese estado de una sola partícula es una base ortonormal. En este caso los operadores \hat{a}_i^\dagger y \hat{a}_i cumplen con

$$\hat{a}_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle \quad (3.13)$$

$$\hat{a}_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle \quad (3.14)$$

El estado del vacío es importante para la normalización, en este no hay partículas

$$|n_i = 0\rangle \equiv |0\rangle \quad (3.15)$$

Al pasar a segunda cuantización el Hamiltoniano en la función de partición depende de los operadores de aniquilación y creación, entonces conviene usar otros eigenestados de estos operadores, que facilitaran las integrales a realizar, para bajas temperaturas, estos son los *estados coherentes*. Ya que al estar cerca de $T = 0$ las funciones de onda son coherentes, porque su fase es la misma, así su incertidumbre es la mínima y se comportan como

osciladores armónicos [18]. Estos estados están parametrizados por un número complejo z , se definen como un estado propio derecho del operador de aniquilación \hat{a}_i con valor propio z tales que

$$\hat{a}_i |z\rangle = z |z\rangle; \quad \langle z| \hat{a}_i^\dagger = z^* \langle z|, \quad (3.16)$$

donde * indica conjugación compleja. Cada estado de una sola partícula tiene su operador de aniquilación propio pero al ser indistinguibles las partículas se toma el mismo. Si el Hamiltoniano tiene los operadores \hat{a}_i^\dagger al lado izquierdo de los operadores \hat{a}_i entonces se tiene que $\hat{H} = \hat{H}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i)$ y sus elementos de matriz en estos estados son dados por

$$\langle z| \hat{H}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) |z'\rangle = \hat{H}(z^*, z') \langle z|z'\rangle. \quad (3.17)$$

En cualquier caso sino estuvieran ordenados de esta manera, siempre se puede ordenar con las reglas de conmutación 3.11. Por otro lado como los estados de número $|n_i\rangle$ son una base completa se expande $|z\rangle$ en estos términos

$$|z\rangle = \sum_{n_i=0}^{\infty} C_{n_i} |n_i\rangle, \quad (3.18)$$

aplicando el operador de aniquilación y por 3.14

$$\hat{a} |z\rangle = \sum_{n_i=0}^{\infty} C_{n_i} \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle = z \sum_{n_i=0}^{\infty} C_{n_i} |n_i\rangle. \quad (3.19)$$

Al igualar los coeficientes, se tiene

$$\begin{aligned} C_{n_i} \sqrt{n_i} &= z C_{n_i-1} \\ \Rightarrow C_{n_i} &= \frac{z}{\sqrt{n_i}} C_{n_i-1}. \end{aligned}$$

Sustituyendo $n_i - 1$ veces los coeficientes se llega a

$$C_{n_i} = \frac{z^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} C_0 \quad (3.20)$$

Así se obtiene

$$|z\rangle = C_0 \sum_{n_i=0}^{\infty} \frac{z^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |n_i\rangle. \quad (3.21)$$

Para obtener C_0 hay que normalizar el estado coherente, de la siguiente manera:

$$\langle z|z\rangle = 1 = |C_0|^2 \sum_{n_i} \sum_{n'_i} \frac{z^{*n_i} z^{n'_i}}{\sqrt{n_i! n'_i!}} \langle n_i|n'_i\rangle,$$

por la ortonormalidad de 3.12 la ecuación anterior se vuelve

$$1 = |C_0|^2 \sum_{n_i=0}^{\infty} \frac{|z|^{2n_i}}{n_i!} = |C_0|^2 e^{|z|^2} \Rightarrow C_0 = \pm e^{-\frac{1}{2}|z|^2}. \quad (3.22)$$

Se toma el valor positivo, finalmente los estados coherente descritos en la base de números se puede escribir de dos maneras, una por lo anterior escrito y otra por la normalización $|n_i\rangle = \frac{(a^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |0\rangle$ [19]

$$|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n_i=0}^{\infty} \frac{z^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |n_i\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n_i=0}^{\infty} \frac{z^{n_i} (a^\dagger)^{n_i}}{n_i!} |0\rangle \quad (3.23)$$

$$= e^{a^\dagger z - \frac{1}{2}|z|^2} |0\rangle. \quad (3.24)$$

$$\langle z| = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n_i=0}^{\infty} \frac{(z^*)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} \langle n_i| \quad (3.25)$$

Ahora los estados coherentes no son ortogonales, para $|z\rangle$ y $|z'\rangle$ se tiene con 3.23 y 3.25

$$\begin{aligned} \langle z|z'\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|z|^2 - \frac{1}{2}|z'|^2} \sum_{n_i, n_j=0}^{\infty} \frac{z^{*n_i} z'^{n_j}}{\sqrt{n_i! n_j!}} \langle n_i|n_j\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}|z|^2 - \frac{1}{2}|z'|^2} \sum_{n_i=0}^{\infty} \frac{(z^* z')^{n_i}}{n_i!} \\ &= e^{-\frac{1}{2}|z|^2 - \frac{1}{2}|z'|^2 + z^* z'} = e^{-\frac{1}{2}(|z|^2 + |z'|^2 - z z'^* - z^* z')} = e^{\frac{1}{2}(z^* z' - z z'^*) - \frac{1}{2}|z - z'|^2}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

Como el primer término es una fase compleja

$$|\langle z|z'\rangle|^2 = e^{-|z - z'|^2} \neq 0. \quad (3.27)$$

Pero si $|z - z'|$ crece se vuelven casi ortogonales, pero nunca llegan a serlo, por lo que a esta clase de base se le llama *sobrecompleta* [20, 21].

Por otro lado se tiene que cumplir la relación de completitud de los estados coherentes, la cual es dada por una integral en el plano complejo de z tal que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |z\rangle \langle z| d[z^*, z] = \hat{1}, \quad (3.28)$$

donde si $z = x + iy$ entonces

$$d[z^*, z] \equiv \frac{d(\text{Re } z)d(\text{Im } z)}{\pi} = \frac{dx dy}{\pi}. \quad (3.29)$$

Para mostrar esto usando nuevamente 3.23 y 3.25 se llega a

$$\int_{-\infty}^{\infty} |z\rangle \langle z| d[z^*, z] = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|z|^2} \sum_{n_i, n_j=0}^{\infty} \frac{z^{n_i} (z^*)^{n_j}}{\sqrt{n_i! n_j!}} |n_i\rangle \langle n_j| d[z^*, z], \quad (3.30)$$

cambiando a coordenadas polares del plano complejo $z = r e^{i\theta} \Rightarrow dx dy = r dr d\theta$. Así la ecuación anterior se vuelve

$$\int_{-\infty}^{\infty} |z\rangle \langle z| d[z^*, z] = \sum_{n_i, n_j=0}^{\infty} \frac{|n_i\rangle \langle n_j|}{\pi \sqrt{n_i! n_j!}} \int_0^{\infty} e^{-r^2} r^{n_i + n_j + 1} dr \int_0^{2\pi} e^{i\theta(n_i - n_j)} d\theta. \quad (3.31)$$

Como

$$\int_0^{2\pi} e^{i\theta(n_i - n_j)} d\theta = 2\pi \delta_{n_i n_j},$$

sustituyendo y desarrollando

$$\int_{-\infty}^{\infty} |z\rangle \langle z| d[z^*, z] = \sum_{n_i=0}^{\infty} \frac{|n_i\rangle \langle n_i|}{n_i!} \int_0^{\infty} 2r^{2n_i+1} e^{-r^2} dr. \quad (3.32)$$

Ahora sea $r^2 = u \Rightarrow 2r dr = du$; y así la otra integral, por la función Gamma [22]

$$\int_0^{\infty} u^{n_i} e^{-u} du = n_i!$$

Con esta integral y usando 3.12 se logra

$$\int_{-\infty}^{\infty} |z\rangle \langle z| d[z^*, z] = \sum_{n_i=0}^{\infty} |n_i\rangle \langle n_i| = \hat{1} \quad (3.33)$$

Igualmente se tienen otras identidades que se usaran para el cálculo de la traza de la función de partición y del operador de densidad en la base coherente. Para un operador \hat{A} en el espacio de ocupación de número y su igualdad en el de estados coherente, se tiene

$$\begin{aligned} Tr[\hat{A}] &\equiv \sum_{n_i=0}^{\infty} \langle n_i| \hat{A} |n_i\rangle = \sum_{n_i=0}^{\infty} \langle n_i| \hat{A} \int_{-\infty}^{\infty} |z\rangle \langle z| n_i\rangle d[z^*, z] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d[z^*, z] \sum_{n_i=0}^{\infty} \langle z| n_i\rangle \langle n_i| \hat{A} |z\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d[z^*, z] \langle z| \hat{A} |z\rangle, \end{aligned}$$

donde se usa 3.33 y 3.12. Así el resultado es

$$\Rightarrow Tr[\hat{A}] \equiv \sum_{n_i=0}^{\infty} \langle n_i| \hat{A} |n_i\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d[z^*, z] \langle z| \hat{A} |z\rangle \quad (3.34)$$

Otra identidad es la solución de una función que depende de la densidad en los estados coherentes, dada por

$$f(\rho) \equiv \langle z| \rho^{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i} |z'\rangle. \quad (3.35)$$

Derivando parcialmente respecto a ρ

$$\frac{\partial f}{\partial \rho} = \langle z| \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rho^{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - 1} |z'\rangle,$$

usando la relación $g(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) \hat{a}_i = \hat{a}_i g(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - 1)$ -que se ocupa en la conmutación de los operadores- se tiene

$$\frac{\partial f}{\partial \rho} = \langle z| \hat{a}_i^\dagger \rho^{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i} \hat{a}_i |z'\rangle = z^* z' \langle z| \rho^{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i} |z'\rangle = z^* z' f(\rho).$$

Integrando esta ecuación diferencial con la condición inicial $f(1) = e^{-\frac{1}{2}(|z|^2 + |z'|^2) + z^* z'} = \langle z| z'\rangle$ (que viene de la ecuación 3.26) se llega a

$$f(\rho) = \langle z| \rho^{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i} |z'\rangle = e^{-\frac{1}{2}(|z|^2 + |z'|^2) + z^* z' \rho} \quad (3.36)$$

Estas propiedades son muy importantes ya que se tendrán integrales gaussianas, como 3.33, porque en la acción (la cual es la fase de la función de onda como se vió en la sección 2) se tienen coeficientes cuadráticos [12, 4].

3.2. Integrales Gaussianas

Antes de generalizar este tipo de integrales se comenzará con la más sencilla, que al mismo tiempo es una función de partición general, cuyos parámetros dependerán de $J, a \in \mathbb{C}$, que tiene la forma

$$Z[J^*, J] = \int_{-\infty}^{\infty} d[z^*, z] e^{-z^* a z + z^* J + J^* z}. \quad (3.37)$$

Para obtener el resultado se divide la integral en la parte real y compleja con $z = x + iy$ y con 3.29

$$\begin{aligned} Z[J^*, J] &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{-a(x^2+y^2)+(x-iy)J+J^*(x+iy)} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+x(J+J^*)} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ay^2+iy(J^*-J)}. \end{aligned}$$

Completando el cuadrado, primero para x

$$\begin{aligned} -ax^2 + x(J + J^*) &= -a \left[x^2 - \frac{x(J + J^*)}{a} + \frac{(J + J^*)^2}{4a^2} - \frac{(J + J^*)^2}{4a^2} \right] \\ &= -a \left[x - \frac{(J + J^*)}{2a} \right]^2 + \frac{(J + J^*)^2}{4a}, \end{aligned}$$

ahora para y

$$\begin{aligned} -y^2 + iy(J^* - J) &= -a \left[y^2 - \frac{iy(J^* - J)}{a} - \frac{(J^* - J)^2}{4a^2} + \frac{(J^* - J)^2}{4a^2} \right] \\ &= -a \left[y - \frac{i(J^* - J)}{2a} \right]^2 - \frac{(J^* - J)^2}{4a}. \end{aligned}$$

De esta manera se consigue que

$$Z[J^*, J] = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a \left[x - \frac{(J+J^*)}{2a} \right]^2 + \frac{(J+J^*)^2}{4a}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-a \left[y - \frac{i(J^*-J)}{2a} \right]^2 - \frac{(J^*-J)^2}{4a}},$$

usando dos cambios de variables para las partes cuadráticas de x también y , que en consecuencia da dos integrales Gaussianas

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a \left[x - \frac{(J+J^*)}{2a} \right]^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-a \left[y - \frac{i(J^*-J)}{2a} \right]^2} = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-u^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}.$$

Mientras que desarrollando los exponentes

$$\frac{(J + J^*)^2}{4a} - \frac{(J^* - J)^2}{4a} = \frac{J^* J}{a} = \frac{|J|^2}{a},$$

así se obtiene

$$Z[J^*, J] = \frac{1}{a} e^{\frac{J^* J}{a}}. \quad (3.38)$$

Si $a = 1$, se llega a que

$$\int_{-\infty}^{\infty} d[z^*, z] e^{-|z|} (z^*)^n z^{n'} = \frac{\partial^{n+n'}}{\partial J^n \partial (J^*)^{n'}} Z[J^*, J] \Big|_{J=J^*=0} = n! \delta_{n,n'}, \quad (3.39)$$

este resultado se usó para obtener 3.33, como se observa de las ecuaciones anteriores a esa. Ahora para generalizarlo, sea $\hat{A} = (\hat{A}_{ij})_{N \times N}$ una matriz compleja, hermitiana y de tamaño $N \times N$, donde $i, j \in \{1, 2, \dots, N\}$, sus coeficientes son \hat{A}_{ij} (los cuales son números complejos). Con eigenvalores, $\lambda_i \in \mathbb{C}$, tales que tienen partes reales no negativas, $Re(\lambda_i) \geq 0$. Entonces la función de partición es dada por [17]

$$Z[J^*, J] = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N d[z_j^*, z_j] e^{-\sum_{ij} z_i^* \hat{A}_{ij} z_j + \sum_j [z_j^* J_j + J_j^* z_j]}. \quad (3.40)$$

Para resolverla, como se tienen N eigenvalores distintos de \hat{A} , es diagonalizable por una transformación unitaria [23] dada por

$$\hat{A} = \hat{U}^\dagger \hat{D} \hat{U}, \quad (3.41)$$

donde \hat{U} es un operador unitario, mientras que \hat{D} es

$$\hat{D} = (\hat{D}_{ij})_{N \times N} = (\delta_{ij} \lambda_j)_{N \times N} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N); \quad (3.42)$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j, \\ 0 & \text{si } i \neq j. \end{cases} \quad (3.43)$$

También del operador unitario

$$\hat{1} = (\delta_{ij})_{N \times N} = \hat{U}^\dagger \hat{U}; \quad (3.44)$$

$$\delta_{jj} = 1 = \sum_{m=1}^N \hat{U}_{jm}^* \hat{U}_{mj}. \quad (3.45)$$

Con estas ecuaciones sustituyendo y desarrollando en el exponente, para el primer término

$$\sum_{ij} z_i^* \hat{A}_{ij} z_j = \sum_{ij} z_i^* \hat{U}_{ij}^* \hat{D}_{jj} \hat{U}_{ij} z_j = \sum_{ij} z_i^* \hat{U}_{ij}^* \lambda_j \hat{U}_{ij} z_j,$$

y haciendo el cambio de variable

$$w_i = \sum_j \hat{U}_{ij} z_j, \quad (3.46)$$

$$w_i^* = \sum_j z_j^* \hat{U}_{ji}^*, \quad (3.47)$$

con $w_i \in \mathbb{C}$, $d[w_j^*, w_j] = d[z_j^*, z_j]$ ya que la transformación al no depender de z_j la diferencial no cambia. Por lo tanto

$$\sum_{ij} z_i^* \hat{A}_{ij} z_j = w_j^* \lambda_j w_j. \quad (3.48)$$

Para el segundo término del exponente de 3.40, introduciendo 3.45 entre los coeficientes

$$\begin{aligned} \sum_j^N [z_j^* J_j + J_j^* z_j] &= \sum_j^N [z_j^* \sum_{m=1}^N \hat{U}_{jm}^* \hat{U}_{mj} J_j + J_j^* \sum_{m=1}^N \hat{U}_{jm}^* \hat{U}_{mj} z_j] \\ &= \sum_{jm}^N [z_j^* \hat{U}_{jm}^* \hat{U}_{mj} J_j + J_j^* \hat{U}_{jm}^* \hat{U}_{mj} z_j], \end{aligned}$$

ahora con 3.46, 3.47 y junto al cambio de variable

$$L_i = \sum_j \hat{U}_{ij} J_j, \quad (3.49)$$

$$L_i^* = \sum_j J_j^* \hat{U}_{ji}^*, \quad (3.50)$$

donde $L_i \in \mathbb{C}$. Entonces se llega a

$$\sum_j^N [z_j^* J_j + J_j^* z_j] = w_j^* L_j + L_j^* w_j. \quad (3.51)$$

Sustituyendo ambos resultados en 3.40

$$Z[J^*, J] = \prod_{j=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} d[w_j^*, w_j] e^{-w_j^* \lambda_j w_j + w_j^* L_j + L_j^* w_j}, \quad (3.52)$$

estas son N integrales que son similares a lo que se obtuvo en 3.38. De esta manera el resultado es

$$Z[J^*, J] = \prod_{j=1}^N \frac{e^{L_j^* \lambda_j^{-1} L_j}}{\lambda_j} = \frac{e^{\sum_j^N L_j^* \lambda_j^{-1} L_j}}{\det \hat{A}},$$

donde $\det \hat{A} = \prod_{j=1}^N \lambda_j$, mientras que en la parte de la exponencial

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N L_j^* \lambda_j^{-1} L_j &= \sum_{i,j=1}^N (J_i^* \hat{U}_{ij}^*) \lambda_j^{-1} (\hat{U}_{ji} J_i) = \sum_{i,j=1}^N J_i^* (\hat{U}_{ij}^* \lambda_j^{-1} \hat{U}_{ji}) J_j \\ &= \sum_{i,j=1}^N J_i^* (\hat{A}^{-1})_{ij} J_j. \end{aligned}$$

Así se consigue que

$$Z[J^*, J] = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N d[z_j^*, z_j] e^{-\sum_{ij}^N z_i^* \hat{A}_{ij} z_j + \sum_j^N [z_j^* J_j + J_j^* z_j]} = \frac{e^{\sum_{i,j}^N J_i^* (\hat{A}^{-1})_{ij} J_j}}{\det \hat{A}}. \quad (3.53)$$

A partir de esta ecuación, se puede obtener el promedio entre el producto de un par de variables [17]

$$\langle z_a z_b^* \rangle \equiv \frac{1}{Z[0,0]} \left. \frac{\delta^2 Z[J^*, J]}{\delta J_a^* \delta J_b} \right|_{J=J^*=0} = \hat{A}_{ab} \quad (3.54)$$

La identidad para variables reales ($x_j \in \mathbb{R} : j \in \{1, 2, \dots, N\}$) es de la forma

$$Z[J] = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N \frac{dx_j}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} x_i \hat{A}_{ij} x_j + \sum_j x_j J_j} = \frac{e^{\frac{1}{2} \sum_{ij} J_i (\hat{A}^{-1})_{ij} J_j}}{\sqrt{\det \hat{A}}}, \quad (3.55)$$

donde \hat{A} es una matriz compleja y simétrica, además como podemos notar esta integral sale de 3.53 pero con este último detalle de simetría. Como se verá en un momento, este formalismo se empleará a continuación para resolver nuestra función de partición.

3.3. Función de partición

Tomaremos el sistema más simple con bosones ocupando un solo estado cuántico con energía ω_i . Su Hamiltoniano en segunda cuantización es [19]

$$\hat{\mathcal{H}} = \omega_0 \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i, \quad (3.56)$$

donde el operador de número está definido como

$$\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i, \quad (3.57)$$

tal que

$$\hat{N}_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle. \quad (3.58)$$

La función de partición viene dada por 3.7, la matriz de densidad inicial que asumimos que está en equilibrio cuando $t \rightarrow \infty$

$$\hat{\rho}_0 \equiv \hat{\rho}_0 = e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N}_i)} = e^{-\beta(\omega_0 - \mu) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i}, \quad (3.59)$$

donde μ es el potencial químico, $\beta = \frac{1}{kT}$ y k es la constante de Boltzmann. Para esta matriz su traza es

$$Tr[\hat{\rho}_0] = \sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta(\omega_0 - \mu)n_i} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\omega_0 - \mu)}}, \quad (3.60)$$

la segunda igualdad es cierta si $e^{-\beta(\omega_i - \mu)} < 1$, ya que es la serie geométrica. Se puede observar que esta traza es la distribución de Bose-Einstein y es el valor esperado en los estados de ocupación.

Ahora se dividirá el contorno temporal en $2(N - 1)$ partes iguales con longitud $\delta t = (t_{2N} - t_1)/[2(N - 1)]$, tales que $t_1 = t_{2N} \rightarrow -\infty$ y $t_N = t_{N+1} \rightarrow \infty$ (similar que 2.23 en la sección 2) porque se hacen traslaciones finitas en el tiempo para verificar sino hay irregularidades. Para obtener $Tr[\hat{\mathcal{U}}_C \hat{\rho}_0]$ con la ec. 3.34 alrededor del contorno

$$Tr[\hat{\mathcal{U}}_C \hat{\rho}_0] = \int_C d[z^*, z] \langle z | \hat{\mathcal{U}}_C \hat{\rho}_0 | z \rangle. \quad (3.61)$$

y con 3.33 escrito como

$$\int |z_j\rangle \langle z_j| d[z_j^*, z_j] = \hat{1}, \quad (3.62)$$

en cada punto $j \in \{1, 2, \dots, 2N\}$, la cual es nuestra división temporal. Entonces se obtiene (leído de derecha a izquierda)

$$\begin{aligned} Tr[\hat{\mathcal{U}}_C \hat{\rho}_0] &= \int d[z_{2N}^*, z_{2N}] \langle z_{2N} | \hat{\mathcal{U}}_{-\delta t} \int d[z_{2N-1}^*, z_{2N-1}] |z_{2N-1}\rangle \langle z_{2N-1} | \hat{\mathcal{U}}_{-\delta t} \times \dots \\ &\dots \times \int d[z_{N+1}^*, z_{N+1}] |z_{N+1}\rangle \langle z_{N+1} | \hat{1} \int d[z_N^*, z_N] |z_N\rangle \langle z_N | \hat{\mathcal{U}}_{+\delta t} \times \dots \\ &\dots \times \int d[z_2^*, z_2] |z_2\rangle \langle z_2 | \hat{\mathcal{U}}_{+\delta t} \int d[z_1^*, z_1] |z_1\rangle \langle z_1 | \hat{\rho}_0 |z_{2N}\rangle, \end{aligned} \quad (3.63)$$

no hay operador de evolución en los puntos t_N y t_{N+1} porque en el infinito son el mismo como se mencionó. Además $\hat{\mathcal{U}}_{\pm\delta t}$ es el operador de evolución en el intervalo $+\delta t$ ($-\delta t$) en la dirección positiva (negativa), dado por

$$\hat{\mathcal{U}}_{\pm\delta t} = e^{\mp i\hat{H}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i)\delta t}. \quad (3.64)$$

Los elementos de matriz de 3.63 entonces vienen dados por

$$\begin{aligned} \langle z_j | \hat{\mathcal{U}}_{\pm\delta t} |z_{j-1}\rangle &= \langle z_j | e^{\mp i\hat{H}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i)\delta t} |z_{j-1}\rangle \approx \langle z_j | [1 \mp i\hat{H}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i)\delta t] |z_{j-1}\rangle \\ &= \langle z_j |z_{j-1}\rangle [1 \mp iH(z_j^*, z_{j-1})\delta t] \approx e^{-\frac{1}{2}(|z_j|^2 + |z_{j-1}|^2) + z_j^* z_{j-1} \mp iH(z_j^*, z_{j-1})\delta t}, \end{aligned} \quad (3.65)$$

en las que las aproximaciones son validas en orden lineal de δt . Se han usado las expresiones de un operador ordenado 3.17 para la cuarta igualdad y la no ortogonalidad de los estados coherentes 3.26. En nuestro ejemplo $\hat{H}(z_j^*, z_{j-1}) = \omega_0 z_j^* z_{j-1}$. Para el último término de 3.63 usando la ecuación 3.36, se tiene como resultado

$$\langle z_1 | \hat{\rho}_0 |z_{2N}\rangle = e^{-\frac{1}{2}(|z_1|^2 + |z_{2N}|^2) + z_1^* z_{2N} \rho(\omega_0)}, \quad (3.66)$$

donde $\rho(\omega_0) \equiv e^{-\beta(\omega_0 - \mu)}$, aunque esta $\rho(\omega_0)$ dependería del problema que se trate. Finalmente con todos los términos la función de partición es

$$Z = \frac{1}{Tr[\hat{\rho}_0]} \int \prod_{j=1}^{2N} d[z_j^*, z_j] e^{\sum_{j=1}^{2N} [-|z_j|^2 + z_j^* z_{j-1} \mp iH(z_j^*, z_{j-1})\delta t] + z_1^* z_{2N} \rho(\omega_0)}. \quad (3.67)$$

Haciendo un cambio de variable sea $j' \equiv j - 1$ y definiendo la matriz $\hat{G}_{jj'}^{-1}$ (Cuyo significado físico se explicará adelante) tal que

$$iG_{jj'}^{-1} \equiv \begin{cases} -1 & si & j = j', \\ h_- \equiv 1 - i\omega_0\delta t & si & j' = j - 1 \text{ y } 1 < j < N, \\ 1 & si & j = N + 1, j' = N, \\ h_+ \equiv 1 + i\omega_0\delta t & si & j' = j - 1 \text{ y } N < j < 2N - 1, \\ \rho(\omega_0) & si & j = 1 \text{ y } j' = 2N. \end{cases} \quad (3.68)$$

En forma matricial

$$iG^{-1} = iG_{jj'}^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & \rho(\omega_0) \\ h_- & -1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & h_+ & -1 \end{pmatrix} \quad (3.69)$$

h_{\pm} depende del problema tratado, por otro lado en iG^{-1} como se puede ver en su diagonal el -1 es por la constante de normalización, los términos debajo de la diagonal ($j' = j - 1$) vienen de 3.65 y el último término que estaría en una esquina de 3.66. De esta manera la función de partición se vuelve

$$Z = \frac{1}{Tr[\hat{\rho}_0]} \int \prod_{j=1}^{2N} d[z_j^*, z_j] \exp \left(i \sum_{j,j'=1}^{2N} z_j^* G_{jj'}^{-1} z_{j'} \right). \quad (3.70)$$

Como se puede observar esta ecuación 3.70 es similar a las integrales Gaussianas desarrolladas anteriormente en la subsección anterior, por eso podemos identificarlas como son funciones de partición. Ahora para ver si nuestro factor de normalización es el correcto, aplicando 3.53 con $\hat{A} = -i\hat{G}^{-1}$; $J_j = 0 \forall j \in \{1, 2, \dots, 2N\}$, solo es necesario calcular el determinante

$$\begin{aligned} \det[-i\hat{G}^{-1}] &= (-1)^{2N} - \rho(\omega_0)(h_-h_+)^{N-1} = 1 - \rho(\omega_0)(1 + \omega_0^2\delta t^2)^{N-1} \\ &\approx 1 - \rho(\omega_0)e^{\omega_0^2\delta t^2(N-1)}, \end{aligned}$$

se busca que los intervalos temporales sean infinitamente pequeños para unirlos [13], entonces $N \rightarrow \infty$ entonces $\delta t^2(N-1) \rightarrow 0$ por lo tanto

$$\det[-i\hat{G}^{-1}] = 1 - \rho(\omega_0). \quad (3.71)$$

Sustituyendo este valor en la función de partición 3.70, como se dijo de 3.53 y con 3.60:

$$Z = \frac{1}{Tr[\rho_0]} \cdot \frac{1}{\det[-i\hat{G}^{-1}]} = \frac{1 - \rho(\omega_0)}{1 - \rho(\omega_0)} = 1, \quad (3.72)$$

se comprueba que sí está normalizado, pasando de intervalos discretos a continuos. La ecuación 3.70 puede escribirse en forma continua directamente tomando el límite $N \rightarrow \infty$ entonces las variables $z_j \rightarrow z(t)$ se convierten en campos por lo que

$$Z[z(t)] = \int \mathbf{D}[z^*(t), z(t)] e^{iS[z^*, z]}, \quad (3.73)$$

donde

$$\mathbf{D}[z^*(t), z(t)] \equiv \prod_{j=1}^{2N} \frac{d[z_j^*, z_j]}{Tr[\hat{\rho}_0]}, \quad (3.74)$$

el exponente $S[z^*, z]$ es la acción, como se mencionó es la fase de las funciones de onda. Además esta integral es similar a la integral de caminos de Feynman 2.32. En forma discreta como se vió de la ec. 3.67 es

$$S[z_j^*, z_j] \equiv \sum_{j,j'=1}^{2N} z_j^* G_{jj'}^{-1} z_{j'} \quad (3.75)$$

$$= \sum_{j=1}^{2N} [i|z_j|^2 - iz_j^* z_{j-1} - H(z_j^*, z_{j-1})\delta t] - iz_1^* z_{2N} \rho(\omega_0), \quad (3.76)$$

δt puede definirse de otra manera, ya que según del lado en el que se encuentre en el contorno \mathcal{C} sería negativo o positivo, por lo que $\delta t \equiv \pm \delta_t$. Prosiguiendo en el continuo se tiene

$$S[z^*, z] = \int_{\mathcal{C}} dt z^*(t) \hat{G}^{-1} z(t), \quad (3.77)$$

entonces los J de las integrales Gaussianas, en este caso son los campos z , en la siguiente sección se verá otra forma de ver estas variables. Ahora el operador \hat{G}^{-1} se toma la primer parte de la acción para un sistema no interactuante, en el continuo como $\delta t \rightarrow 0$ logra que

$$\begin{aligned} \lim_{\delta t \rightarrow 0} \delta t [iz_j^* \frac{z_j - z_{j-1}}{\delta t} - \omega_0 z_j^* z_{j-1}] &= z^*(t)(i\partial_t - \omega_0)z(t) \\ \Rightarrow \hat{G}^{-1} &= i\partial_t - \omega_0, \end{aligned} \quad (3.78)$$

\hat{G}^{-1} , es una función inversa de Green (como la ecuación 2.14 de la sección 2) pero definida para este problema.

Se puede tratar la integral de contorno como una sola integral desde $-\infty < t < \infty$, separando el campo bosónico $z(t)$ en dos componentes en el contorno de la rama de ida $z^+(t)$ y en la de regreso $z^-(t)$. Reescribiendo la acción

$$\begin{aligned} S[z^*, z] &= \int_{-\infty}^{\infty} dt z^{+*}(t) \hat{G}^{-1} z^+(t) + \int_{\infty}^{-\infty} dt z^{-*}(t) \hat{G}^{-1} z^-(t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt [z^{+*}(t) \hat{G}^{-1} z^+(t) - z^{-*}(t) \hat{G}^{-1} z^-(t)], \end{aligned} \quad (3.79)$$

al cambiar de rama cambia el signo de la derivada parcial. Ambas componentes están relacionadas porque hay componentes fuera de la diagonal de la matriz discreta 3.69, pero en esta notación no parece haber relación. Para encontrar esta conexión se tiene que desarrollar otra representación, esto es a través de otras funciones de Green que serán desarrolladas en breve.

Por la propiedad 3.54, la función de Green entre dos campos bosónicos complejos es

$$\langle z_j z_{j'}^* \rangle \equiv \int \mathbf{D}[z^*, z] z_j z_{j'}^* \exp \left(i \sum_{k,k'=1}^{2N} z_k^* G_{kk'}^{-1} z_{k'} \right) = iG_{jj'}. \quad (3.80)$$

Para calcular la inversa de la matriz 3.69 la que nos daría G , se puede conseguir a través de eliminación Gaussiana o por la matriz adjunta. Por ejemplo si fuera una matriz de $N = 3 \Rightarrow 2N \times 2N = 6 \times 6$, se tendría

$$iG_{jj'}^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho(\omega_0) \\ h_- & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_- & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_+ & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_+ & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.81)$$

mientras que su inversa sería,

$$iG_{jj'} = \frac{1}{\det[-i\hat{G}^{-1}]} \begin{pmatrix} 1 & \rho h_+^2 h_- & \rho h_+^2 & \rho h_+^2 & \rho h_+ & \rho(\omega_0) \\ h_- & 1 & \rho h_+^2 h_- & \rho h_+^2 h_- & \rho h_+ h_- & \rho h_- \\ h_-^2 & h_- & 1 & \rho h_+^2 h_-^2 & \rho h_+ h_-^2 & \rho h_-^2 \\ h_-^2 & h_- & 1 & 1 & \rho h_-^2 h_+ & \rho h_-^2 \\ h_-^2 h_+ & h_- h_+ & h_+ & h_+ & 1 & \rho h_-^2 h_+ \\ h_-^2 h_+^2 & h_- h_+^2 & h_+^2 & h_+^2 & h_+ & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.82)$$

donde $\rho = \rho(\omega_0)$, generalizar esta matriz a una de tamaño N no es sencillo sin embargo se puede deducir de esta matriz. Si se usan los campos z_j^\pm anteriormente definidos, entonces $j \in \{1, 2, \dots, N\}$ y la matriz $2N \times 2N$ ahora iría de $1, \dots, N, N, \dots, 1$. Se indexa de esta manera porque si estamos del lado positivo se toma el campo z_j^+ que va de 1 a N , mientras que del lado negativo el campo es z_j^- que va de N a 1 . Entonces para estos campos

$$\langle z_j^+ z_{j'}^{-*} \rangle \equiv iG_{jj'}^< = \frac{\rho h_+^{j'-1} h_-^{j-1}}{\det[-i\hat{G}^{-1}]}, \quad (3.83)$$

$$\langle z_j^- z_{j'}^{+*} \rangle \equiv iG_{jj'}^> = \frac{h_+^{N-j} h_-^{N-j'}}{\det[-i\hat{G}^{-1}]}, \quad (3.84)$$

$$\langle z_j^+ z_{j'}^{+*} \rangle \equiv iG_{jj'}^\top = \frac{h_-^{j-j'}}{\det[-i\hat{G}^{-1}]} \times \begin{cases} 1 & \text{si } j \geq j', \\ \rho(h_+ h_-)^{N-1} & \text{si } j < j', \end{cases}, \quad (3.85)$$

$$\langle z_j^- z_{j'}^{-*} \rangle \equiv iG_{jj'}^{\tilde{\top}} = \frac{h_+^{j-j'}}{\det[-i\hat{G}^{-1}]} \times \begin{cases} \rho(h_+ h_-)^{N-1} & \text{si } j > j', \\ 1 & \text{si } j \leq j', \end{cases} \quad (3.86)$$

donde \top y $\tilde{\top}$ representan el ordenamiento y antiordenamiento. Cada una de las matrices anteriores son parte de la matriz $iG_{jj'}$, cada una con tamaño $N \times N$; $iG_{jj'}^<$ (llamado *G-menor*) es la parte superior derecha, $iG_{jj'}^>$ (llamado *G-mayor*) es la parte inferior izquierda, $iG_{jj'}^\top$ es la parte inferior derecha y $iG_{jj'}^{\tilde{\top}}$ es la parte superior izquierda (estas últimas llamadas funciones de Green ordenada y antiordenada en el tiempo respectivamente). La matriz $i\hat{G}_{jj'}$ puede escribirse como

$$i\hat{G}_{jj'} = \frac{1}{\det[-i\hat{G}^{-1}]} \begin{pmatrix} iG_{jj'}^\top & iG_{jj'}^< \\ iG_{jj'}^> & iG_{jj'}^{\tilde{\top}} \end{pmatrix} \quad (3.87)$$

Pasando al continuo estas funciones, esto es $N \rightarrow \infty$, recordando que $h_{\pm} = 1 \pm i\omega_0\delta t$, luego

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} (h_+ h_-)^N &= 1, \\ \lim_{N \rightarrow \infty} h_{\pm}^j &= e^{\pm i\omega_0 \delta t j} = e^{\pm i\omega_0 t}, \end{aligned}$$

donde se define $\delta t j \equiv t$, también por esta definición el signo j también es cambiado en la exponencial. Usando 3.71 se llega a que

$$\langle z^+(t) z^{-*}(t') \rangle = iG^<(t, t') = n e^{-i\omega_0(t-t')}, \quad (3.88)$$

$$\langle z^-(t) z^{+*}(t') \rangle = iG^>(t, t') = \frac{e^{-i\omega_0(t-t')}}{1-\rho} = (n+1)e^{-i\omega_0(t-t')}, \quad (3.89)$$

$$\langle z^+(t) z^{+*}(t') \rangle = iG^{\mathbb{T}}(t, t') = \theta(t-t')iG^>(t, t') + \theta(t'-t)iG^<(t, t'), \quad (3.90)$$

$$\langle z^-(t) z^{-*}(t') \rangle \equiv iG^{\bar{\mathbb{T}}}(t, t') = \theta(t'-t)iG^>(t, t') + \theta(t-t')iG^<(t, t'), \quad (3.91)$$

en donde se empleó la función escalón 2.17 y se definió

$$n(\omega_0) \equiv \frac{\rho(\omega_0)}{1-\rho(\omega_0)}, \quad (3.92)$$

que es el número de ocupación bosónico, como se puede ver en los libros de estadística [24]. En las ecuaciones 3.90 y 3.91 hay una ambigüedad por la definición de la función escalón, ya que no está definida para tiempos iguales. Debe entenderse que en ambas ecuaciones en el primer término cuando $t = t'$ entonces $\theta(0) = 1$ y en el segundo $\theta(0) = 0$, esto por las definiciones en forma discreta 3.85 y 3.86. También la matriz discreta 3.87 en forma continua se escribe como

$$i\hat{G}(t, t') = \begin{pmatrix} iG^{\mathbb{T}}(t, t') & iG^<(t, t') \\ iG^>(t, t') & iG^{\bar{\mathbb{T}}}(t, t') \end{pmatrix} \quad (3.93)$$

Regresando a verificar la conexión entre los campos $z^+(t)$ y $z^-(t)$, la forma continua de 3.80, usando la acción 3.79, es de la siguiente forma

$$\langle z^{\pm}(t) z^{\pm}(t')^* \rangle \equiv \int \mathbf{D}[z^*, z] z^{\pm}(t) z^{\pm*}(t') e^{iS[z^*, z]}, \quad (3.94)$$

a pesar de que parece que no hay relación en los campos mencionados antes, por las ecuaciones 3.89 y 3.88 se puede observar que hay términos cruzados que relacionan ambos campos. Además con estas cuatro funciones de Green se desarrollará la parte más importante para los sistemas fuera de equilibrio, notando que no son funciones independientes por

$$iG^{\mathbb{T}}(t, t') + iG^{\bar{\mathbb{T}}}(t, t') - iG^>(t, t') - iG^<(t, t') = \theta(t-t')(iG^>(t, t') + iG^<(t, t')) + \theta(t'-t)(iG^>(t, t') + iG^<(t, t')) - iG^>(t, t') - iG^<(t, t')$$

así que para $t > t'$ y $t < t'$ se cancelan los términos, consiguiendo que

$$\Rightarrow G^{\mathbb{T}}(t, t') + G^{\bar{\mathbb{T}}}(t, t') - G^>(t, t') - G^<(t, t') = 0. \quad (3.95)$$

Por esta razón, a través de una transformación lineal se desarrollará la *rotación de Keldysh*, la cual da una relación entre las cuatro funciones de Green sin usar la parte discreta de estas.

3.4. Rotación de Keldysh

Definiendo una transformación lineal unitaria [12]

$$\hat{U} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \hat{U}^\dagger, \quad (3.96)$$

$$\Rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{1}. \quad (3.97)$$

Con esta transformación aplicada a los campos z^+ y z^- , como si fueran un vector

$$\hat{U} \begin{pmatrix} z^+ \\ z^- \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} z^+ + z^- \\ z^+ - z^- \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} z^{cl} \\ z^q \end{pmatrix}, \quad (3.98)$$

tales que z^{cl} y z^q son el *campo clásico* y *cuántico*, respectivamente. z^{cl} nos da las contribuciones que no dependen del tiempo, en cambio z^q da las fluctuaciones que dependen del tiempo. En la siguiente sección se estudiará un caso de porque es una variable clásica. Seguidamente con usando la transformación a la matriz de bloques 3.93, se logra otra representación

$$\hat{U} i\hat{G}(t, t') \hat{U}^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} iG^\top(t, t') & iG^<(t, t') \\ iG^>(t, t') & iG^{\bar{\top}}(t, t') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \langle z^\alpha(t) z^{\beta*}(t) \rangle \equiv iG^{\alpha\beta}(t, t') = \hat{U} i\hat{G}(t, t') \hat{U}^\dagger = \begin{pmatrix} iG^K(t, t') & iG^R(t, t') \\ iG^A(t, t') & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.99)$$

en este caso $\alpha, \beta \in \{cl, q\}$. El último elemento viene de 3.95, mientras que los otros elementos de matriz están definidos por

$$iG^K(t, t') \equiv iG^{cl, cl}(t, t') = \frac{1}{2}(iG^\top + iG^{\bar{\top}} + iG^> + iG^<) = G^> + G^< = (2n + 1)e^{-i\omega_0(t-t')}, \quad (3.100)$$

$$iG^R(t, t') \equiv iG^{cl, q}(t, t') = \frac{1}{2}(iG^\top - iG^{\bar{\top}} + iG^> - iG^<) = \theta(t - t')(iG^> - iG^<) = \theta(t - t')e^{-i\omega_0(t-t')}, \quad (3.101)$$

$$iG^A(t, t') \equiv iG^{q, cl}(t, t') = \frac{1}{2}(iG^\top - iG^{\bar{\top}} - iG^> + iG^<) = \theta(t' - t)(iG^< - iG^>) = -\theta(t' - t)e^{-i\omega_0(t-t')}. \quad (3.102)$$

Los superíndices K , R y A son por las componentes de *Keldysh*, *retardada* y *adelantada* de la función de Green, respectivamente. Por un lado se tiene la correlación del operador de creación z^α hacía el de creación $z^{\beta*}$. Mientras que el significado de las matrices: G^R no se anula para $t > t'$ por lo que se 'retrasa' en aparecer, en cuanto a G^A no se anula para $t < t'$ entonces se 'adelanta' en manifestarse; ambas funciones tienen información de los estados cuánticos del sistema y su espectro de energías. G^K tiene la información de los estados de ocupación para situaciones fuera de equilibrio [11]. Aunque se hizo este cálculo para un ejemplo en particular, este es el resultado general del *Formalismo de Keldysh*.

4. Oscilador armónico

En esta sección revisaremos brevemente un ejemplo con un potencial, el oscilador armónico cuántico. Para esto se usa la acción de contorno de Keldysh 3.77 junto a 3.78 con su campo complejo $z(t)$, escrito en sus partes imaginaria y compleja

$$z(t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_0}} (P(t) - i\omega_0 X(t)), \quad (4.1)$$

$$z^*(t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_0}} (P(t) + i\omega_0 X(t)). \quad (4.2)$$

Sustituyendo en la expresión de la acción

$$\begin{aligned} z^*(t)\hat{G}^{-1}z(t) &= \frac{1}{2\omega_0} (P(t) + i\omega_0 X(t))(i\partial_t - \omega_0)(P(t) - i\omega_0 X(t)) \\ &= \frac{1}{2\omega_0} (P + i\omega_0 X)(i\dot{P} + \omega_0 \dot{X} - \omega_0 P + i\omega_0^2 X) \\ &= \frac{1}{2\omega_0} (iP\dot{P} + \omega_0 P\dot{X} - \omega_0 P^2 + i\omega_0^2 PX - \omega_0 X\dot{P} + i\omega_0^2 X\dot{X} - i\omega_0^2 XP - \omega_0^3 X^2) \\ &= \frac{1}{2\omega_0} \left(i\frac{d}{dt}(P^2/2) + \omega_0(P\dot{X} - X\dot{P}) - \omega_0 P^2 + i\omega_0^2 \frac{d}{dt}(X^2/2) - \omega_0^3 X^2 \right) \\ &= \frac{1}{2\omega_0} \left(i\frac{d}{dt}(P^2/2) + \omega_0 \left(P\dot{X} - \left(\frac{d(XP)}{dt} - \dot{X}P \right) \right) - \omega_0 P^2 + i\omega_0^2 \frac{d}{dt}(X^2/2) - \omega_0^3 X^2 \right) \\ &= \frac{d}{dt} \left(\frac{iP^2}{4\omega_0} - \frac{XP}{2} + i\omega_0 \frac{X^2}{4} \right) + P\dot{X} - \frac{P^2}{2} - \frac{\omega_0^2}{2} X^2. \end{aligned}$$

Se define una nueva variable

$$F(t) = -\frac{XP}{2} + \frac{i}{4\omega_0} [P^2 + \omega_0^2 X^2], \quad (4.3)$$

de esta manera se obtiene

$$z^*(t)\hat{G}^{-1}z(t) = \frac{dF(t)}{dt} + \dot{X}P - \frac{P^2}{2} - \frac{\omega_0^2}{2} X^2. \quad (4.4)$$

Sustituyendo en la acción esta última expresión

$$S[P, X] = \int_c dt \left[\frac{dF(t)}{dt} + \dot{X}P - \frac{P^2}{2} - \frac{\omega_0^2}{2} X^2 \right], \quad (4.5)$$

el primer término al ser una diferencial exacta y por los términos de frontera tiene que ser cero. Así que solo queda

$$S[P, X] = \int_c dt \left[\dot{X}P - \frac{P^2}{2} - \frac{\omega_0^2}{2} X^2 \right], \quad (4.6)$$

esta es la acción de un oscilador armónico cuántico escrito en forma Hamiltoniana. Se puede separar $P(t)$ e integrarla de la siguiente manera

$$\begin{aligned} S[P, X] &= \int_{\mathcal{C}} dt \left[-\frac{1}{2} (P^2 - 2\dot{X}P + \dot{X}^2) + \frac{1}{2}\dot{X}^2 - \frac{\omega_0^2}{2}X^2 \right] \\ &= -\frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}} dt (P - \dot{X})^2 + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}} dt [\dot{X}^2 - \omega_0^2 X^2] \\ &= S[P] + S[X], \end{aligned}$$

donde se definen

$$S[P] \equiv -\frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}} dt (P - \dot{X})^2 \quad (4.7)$$

$$S[X] \equiv \int_{\mathcal{C}} dt \left[\frac{\dot{X}^2}{2} - \frac{\omega_0^2 X^2}{2} \right], \quad (4.8)$$

la acción 4.7 se puede integrar con ayuda de 3.55. Mientras que la ec. 4.8 es la acción del Lagrangiano de Feynman del oscilador armónico [16], en el formalismo de tiempo cerrado. Se puede generalizar, esta última acción para un potencial de una partícula de la siguiente manera

$$S[X] = \int_{\mathcal{C}} dt \left[\frac{\dot{X}^2}{2} - V(X) \right]. \quad (4.9)$$

Ahora se usará el formalismo de la rotación de Keldysh para el campo X con 3.98, que en este caso da

$$\begin{pmatrix} X^{cl}(t) \\ X^q(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} X^+(t) + X^-(t) \\ X^+(t) - X^-(t) \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

en tanto que sus relaciones inversas son

$$\begin{pmatrix} X^+(t) \\ X^-(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} X^{cl}(t) + X^q(t) \\ X^{cl}(t) - X^q(t) \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

En consecuencia la acción adquiere la forma

$$\begin{aligned} S[X^{cl}, X^q] &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[\frac{\dot{X}^{+2}}{2} - V(X^+) \right] + \int_{\infty}^{-\infty} dt \left[\frac{\dot{X}^{-2}}{2} - V(X^-) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[\frac{\dot{X}^{+2}}{2} - V(X^+) - \frac{\dot{X}^{-2}}{2} + V(X^-) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[\frac{(\dot{X}^{cl} + \dot{X}^q)^2}{2} - V(X^{cl} + X^q) - \frac{(\dot{X}^{cl} - \dot{X}^q)^2}{2} + V(X^{cl} - X^q) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[\frac{\dot{X}^{cl\ 2} + \dot{X}^q\ 2 - \dot{X}^{cl\ 2} - \dot{X}^q\ 2}{2} + 2\dot{X}^{cl}\dot{X}^q - V(X^{cl} + X^q) + V(X^{cl} - X^q) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[2\dot{X}^{cl}\dot{X}^q - V(X^{cl} + X^q) + V(X^{cl} - X^q) \right], \end{aligned}$$

integrando por partes el primer término de esta última igualdad

$$2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \dot{X}^{cl} \dot{X}^q = 2 \dot{X}^{cl} X^q \Big|_{-\infty}^{\infty} - 2 \int_{-\infty}^{\infty} dt X^q \ddot{X}^{cl}.$$

Se llega a que la acción es

$$S[X^{cl}, X^q] = 2 \dot{X}^{cl} X^q \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[-2X^q \ddot{X}^{cl} - V(X^{cl} + X^q) + V(X^{cl} - X^q) \right], \quad (4.12)$$

esta es la forma de Keldysh de la integral de caminos de Feynman o *acción de Keldysh-Feynman*. Si se consideran pequeñas las fluctuaciones cuánticas X^q , se pueden desarrollar el potencial en series de este término

$$\begin{aligned} V(X^{cl} \pm X^q) &\approx V(X^{cl}) \pm \frac{\partial V(X^{cl})}{\partial X^{cl}} X^q = V(X^{cl}) \pm V'(X^{cl}) X^q, \\ \Rightarrow -V(X^{cl} + X^q) + V(X^{cl} - X^q) &\approx -V(X^{cl}) - V'(X^{cl}) X^q + V(X^{cl}) - V'(X^{cl}) X^q \\ &= -2V'(X^{cl}) X^q, \end{aligned}$$

Sustituyendo en la acción

$$S[X^{cl}, X^q] \approx 2 \dot{X}^{cl} X^q \Big|_{-\infty}^{\infty} - 2 \int_{-\infty}^{\infty} dt X^q \left[\ddot{X}^{cl} + V'(X^{cl}) \right], \quad (4.13)$$

integrando directamente la componente cuántica se obtiene una funcional delta, que implica que la componente clásica sea

$$\ddot{X}^{cl} = -V'(X^{cl}), \quad (4.14)$$

por esta razón la parte simétrica del campo es la parte clásica. Por esta razón se puede conseguir el comportamiento clásico a través de z^{cl} y solo se tendría que analizar el comportamiento cuántico a través de X^q .

5. Conclusiones

El método de Keldysh requiere hacer un contorno cerrado en el tiempo para calcular los valores esperados de operadores, las funciones de partición y las distribuciones de partículas en sistemas tanto en equilibrio como fuera de equilibrio. A través de la rotación de Keldysh es posible obtener funciones de Green (propagadores) que abren camino a la descripción de sistemas fuertemente interactuantes, como es el caso de los sistemas polaritónicos. Como trabajo futuro se pretende aplicar este formalismo a problemas específicos fuera de equilibrio, incluyendo el caso de fluidos cuánticos de luz.

6. Apendice

6.1. Matriz de densidad y sus propiedades

Podemos pensar en un estado mixto (una mezcla de estados puros), aquí se tienen una combinación de estados clásicos y cuánticos. Nuestro proposito es calcular el valor medio de un operador \hat{A} cualquiera en esta mezcla de estados (*ensamble*). Primero supongamos que tenemos el valor esperado de \hat{A} para un estado $|\alpha^{(i)}\rangle$ el cual es $\langle \alpha^{(i)} | \hat{A} | \alpha^{(i)} \rangle$, su respectivo peso estadístico es w_i , ahora el promedio o valor esperado del conjunto de estos estados es

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \hat{A} | \alpha^{(i)} \rangle, \quad (6.1)$$

donde los w_i cumplen la propiedad

$$\sum_i w_i = 1. \quad (6.2)$$

Ahora si expresamos el estado $|\alpha^{(i)}\rangle$ en una base arbitraria $|n\rangle$

$$|\alpha^{(i)}\rangle = \sum_n \langle n | \alpha^{(i)} \rangle |n\rangle = \sum_n a_{in} |n\rangle, \quad (6.3)$$

con los coeficientes $a_{in} = \langle n | \alpha^{(i)} \rangle$, que son números reales. Sustituyendo en 6.1 se tiene

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_i w_i \sum_n \sum_m \langle \alpha^{(i)} | n \rangle \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \alpha^{(i)} \rangle \\ &= \sum_{n,m} \sum_i \left(w_i \langle m | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | n \rangle \right) \langle n | \hat{A} | m \rangle, \end{aligned}$$

la segunda igualdad viene porque son coeficientes. Se puede definir el **operador de densidad** como

$$\hat{\rho} \equiv \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}| = \sum_i w_i \hat{P}_i, \quad (6.4)$$

$\hat{P}_i = |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}|$ es el proyector sobre el estado $|\alpha^{(i)}\rangle$. Continuando con el valor esperado del operador \hat{A}

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle &= \sum_{n,m} \langle m | \hat{\rho} | n \rangle \langle n | \hat{A} | m \rangle \\
&= \sum_{n,m} \rho_{mn} A_{nm} \\
&= \sum_m (\hat{\rho} \hat{A})_{mm}.
\end{aligned}$$

Para lo que se define **la matriz de densidad** como

$$\rho_{mn} \equiv \langle m | \hat{\rho} | n \rangle = \sum_i w_i \langle m | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | n \rangle. \quad (6.5)$$

Finalmente tenemos que el valor esperado se puede escribir como

$$\langle \hat{A} \rangle = tr(\hat{\rho} \hat{A}). \quad (6.6)$$

Algunas propiedades de 6.4, como podemos notar, primero que es Hermitiano $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$. También podemos ver que cumple la una normalización porque

$$tr(\hat{\rho}) = \sum_{i,n} w_i \langle n | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | n \rangle = \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(i)} \rangle = 1. \quad (6.7)$$

Si solo tenemos un estado puro, solo existe un $w_i = 1$ y lo demás son cero, en este caso tenemos $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, se puede decir que es idempotente, o viceversa si cumple esta propiedad puede decirse que es puro. Ahora verificamos que $\hat{\rho}$ es un operador positivo, tomando un vector $|\beta\rangle$ en el espacio de estados, tenemos que

$$\langle \beta | \hat{\rho} | \beta \rangle = \sum_i w_i \langle \beta | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | \beta \rangle = \sum_i w_i |\langle \beta | \alpha^{(i)} \rangle|^2 \geq 0 \quad (6.8)$$

Es importante decir que matriz de densidad describe un conjunto de estados cuánticos que dependen de como esté preparado el sistema.

6.2. Operador de evolución

Se puede saber el ket (o vector de estado) a un tiempo inicial t_0 , definido por $|\alpha, t_0\rangle$. Ahora se puede representar la evolución de este ket a un tiempo $t > t_0$, suponiendo que el ket no se mantiene igual, como $|\alpha, t_0; t\rangle$. Se tiene que encontrar el operador que nos muestra la evolución temporal de el ket, para esto como el estado inicial está normalizado a la unidad, esperamos que lo siga siendo a pesar de que pase el tiempo. Puesto de otra forma se pide la unitariedad

$$\langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1 \Rightarrow \langle \alpha, t_0; t | \alpha, t_0; t \rangle = 1. \quad (6.9)$$

Entonces se busca un operador que avance en el tiempo al ket y el cual es llamado *operador de evolución temporal* que tiene que ser unitario, se denota como $\hat{U}(t, t_0)$ y al ser unitario se cumple

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = 1, \quad (6.10)$$

donde el adjunto viene dado

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) = [\hat{U}(t, t_0)]^\dagger = \hat{U}(t_0, t). \quad (6.11)$$

Esto indica que retrocede el estado cuántico en el tiempo. Por lo tanto nuestro ket en el tiempo $t > t_0$ puede ser representado como

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle, \quad (6.12)$$

de esta manera podemos ver que se cumple la ecuación 6.9. De igual manera para un observable \hat{A} a un tiempo inicial t_0 , un ket representado por los demás eigenkets tiene coeficientes $c_{a'}(t_0)$ y para ese ket en un tiempo $t > t_0$ (con el mismo observable) sus coeficientes son $c_{a'}(t)$; debido a la conservación de la probabilidad (por la ecuación 6.9) se cumple

$$\sum_{a'} |c_{a'}(t_0)|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}(t)|^2. \quad (6.13)$$

Una igualdad entre coeficientes individuales en distintos tiempos podría no existir, es decir que podría cambiar la probabilidad de cada coeficiente con el tiempo $|c_{a'}(t_0)| \neq |c_{a'}(t)|$.

Otra propiedad que se tiene que cumplir es la composición, tomando $t_2 > t_1 > t_0$, si buscamos la evolución temporal de t_0 a t_2 , también podemos tomar la evolución temporal de t_0 a t_1 , luego de t_1 a t_2 . Puesto con el operador de evolución:

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0). \quad (6.14)$$

Si consideramos una traslación temporal infinitesimal dt en el operador de evolución entonces tenemos $\hat{U}(t_0 + dt, t_0)$ este operador debe ser el operador identidad si dt tiende a cero, por lo que se considera una diferencia de primer orden en dt . Además de esto debe tener un operador hermitiano como factor en dt , este operador debe tener las unidades del

inverso del tiempo por lo que se considera el Hamiltoniano dividido entre \hbar . Dicho todo esto el operador de evolución infinitesimal es:

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - i \frac{\hat{H}}{\hbar} dt \quad (6.15)$$

Ahora bien con ayuda de 6.14 se tiene:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t + dt, t_0) &= \hat{U}(t + dt, t) \hat{U}(t, t_0) = \left(1 - i \frac{\hat{H}}{\hbar} dt \right) \hat{U}(t, t_0) \\ \Rightarrow \hat{U}(t + dt, t_0) - \hat{U}(t, t_0) &= -i \left(\frac{\hat{H}}{\hbar} \right) \hat{U}(t, t_0) dt \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\hat{U}(t + dt, t_0) - \hat{U}(t, t_0)}{dt} &= \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \end{aligned}$$

Aplicando límite y con la definición de derivada obtenemos

$$\begin{aligned} i\hbar \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{\hat{U}(t + dt, t_0) - \hat{U}(t, t_0)}{dt} &= i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \lim_{dt \rightarrow 0} \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} &= \hat{H} \hat{U}(t, t_0), \end{aligned} \quad (6.16)$$

esta ecuación 6.16 es la *ecuación de Schrödinger del operador de evolución*. Con esta ecuación aplicada a un ket por la izquierda, en el momento inicial t_0 obtenemos la ecuación de Schrödinger para un ket, entonces

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (6.17)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = \hat{H} |\alpha, t_0, t\rangle \quad (6.18)$$

Sin embargo, si conocemos $\hat{U}(t, t_0)$ y como actúa sobre el ket inicial $|\alpha, t_0\rangle$ no tenemos que complicarnos con la ecuación mencionada anteriormente. Con la ecuación 6.16 podemos conocer el valor explícito de $\hat{U}(t, t_0)$, tenemos tres casos según el comportamiento de \hat{H}

1. Si \hat{H} no depende del tiempo la solución de (6.15) es

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[\frac{-i\hat{H}(t - t_0)}{\hbar} \right]. \quad (6.19)$$

2. Si \hat{H} depende del tiempo pero las \hat{H} 's conmutan para cada $t' > t_0$ la solución es

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right]. \quad (6.20)$$

3. Si depende del tiempo, pero las \hat{H} 's no conmutan su solución son las series de Dyson, dada por

$$\hat{U}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n). \quad (6.21)$$

donde $t_1 > t_2 > \dots > t_n$.

6.3. Representación de Heisenberg

Cuando el operador de evolución temporal actúa sobre el ket se le llama *imagen de Schrödinger*. Además, existe otro formalismo donde cambian con el tiempo los observables, en vez de los kets, a esto lo llamamos *imagen de Heisenberg*. Al aplicar el operador $\hat{U}(t, t_0 = 0) = \hat{U}(t)$ (por simplicidad tomamos el tiempo inicial en cero) a $\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle$ por la derecha y su adjunto por la izquierda

$$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle \rightarrow \langle \beta | \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) | \alpha \rangle = \langle \beta | \cdot (\hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t)) \cdot | \alpha \rangle. \quad (6.22)$$

Podemos usar la imagen de Heisenberg haciendo que el operador $\hat{U}(t)$ no actúe en el ket de estado, sino en el observable (en este caso el ket de estado se mantiene constante); por asociatividad en la ec. 6.22 podemos definir que el observable cambia con el tiempo desde la imagen de Schrödinger a la de Heisenberg como

$$\hat{A}^{(H)}(t) \equiv \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}^{(S)} \hat{U}(t). \quad (6.23)$$

Observemos que podemos asumir que $\hat{A}^{(S)}$ no depende explícitamente del tiempo. Cuando $t = t_0 = 0$ los operadores de evolución se vuelven el operador unitario, por lo que ambas imágenes coinciden, esto es

$$\hat{A}^{(H)}(0) = \hat{A}^{(S)}. \quad (6.24)$$

Con esta observación podemos notar que el valor esperado de \hat{A} en ambas representaciones, es el mismo para ambos

$$\langle \alpha, t_0 | \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U} | \alpha, t_0 \rangle = \langle \alpha, t_0 | \hat{A}^{(H)}(t) | \alpha, t_0 \rangle. \quad (6.25)$$

Por otro lado, ahora nos preguntamos que sucede con los kets base como los eigenkets de un observable a' , por ejemplo $\hat{A}^{(S)} |a'\rangle = a' |a'\rangle$, este resultado es en la imagen de Schrödinger. Si a esta ket base primero le aplicamos \hat{U}^\dagger por la izquierda, luego 6.23 podemos observar como cambia este eigenket con el tiempo en la representación de Heisenberg:

$$\hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U} \hat{U}^\dagger |a'\rangle = \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} |a'\rangle = \hat{U}^\dagger a' |a'\rangle = a' \hat{U}^\dagger |a'\rangle. \quad (6.26)$$

La última igualdad es porque el valor esperado a' no cambia con el tiempo. De esta última ecuación observamos el valor eigenvalor de $\hat{A}^{(H)}$ es a' para unos kets base $\hat{U}^\dagger |a'\rangle$ en la representación de Heisenberg:

$$\hat{A}^{(H)} (\hat{U}^\dagger |a'\rangle) = a' (\hat{U}^\dagger |a'\rangle). \quad (6.27)$$

A partir de esto podemos definir los kets base, que cambian con el tiempo, en la representación de Heisenberg como:

$$|a', t\rangle_H = \hat{U}^\dagger |a'\rangle; \langle a', t|_H = \langle a'| \hat{U} \quad (6.28)$$

Debido a que el operador cambia en el tiempo su espectro también, lo cual es de esperar. Además de 6.26 podemos ver que el eigenvalor se mantiene constante en el tiempo, para ver esto desarrollamos:

$$\begin{aligned} {}_H \langle a', t| \hat{A}^{(H)} |a', t\rangle_H &= \langle a'| \hat{U} \hat{A}^{(H)} \hat{U}^\dagger |a'\rangle = \langle a'| \hat{U} a' \hat{U}^\dagger |a'\rangle = {}_H \langle a', t| a' |a', t\rangle_H \\ &\Rightarrow \langle a'| \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U} \hat{U}^\dagger |a'\rangle = a' \langle a'| \hat{U} \hat{U}^\dagger |a'\rangle \\ &\Rightarrow \langle a'| \hat{A}^{(S)} |a'\rangle = a' \langle a'|a'\rangle. \end{aligned}$$

Dicho lo anterior podemos deducir la ecuación de movimiento en esta imagen, derivando respecto al tiempo la ecuación 6.23

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}^{(H)}(t)}{dt} &= \frac{\partial \hat{U}^\dagger(t)}{\partial t} \hat{A}^{(S)} \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}^{(S)} \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{A}^{(S)} \hat{U} + \frac{1}{i\hbar} \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{H} \hat{U} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} - \frac{1}{i\hbar} \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U}. \end{aligned}$$

La penúltima igualdad viene de la ecuación 6.16 con su adjunto, la última igualdad viene de 6.10 y cambiando el orden de los factores, finalmente obtenemos:

$$\frac{d\hat{A}^{(H)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^{(H)}, \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U}]. \quad (6.29)$$

Similar a 6.23 podemos definir el Hamiltoniano en la representación de Heisenberg como:

$$\hat{H}^{(H)} \equiv \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U}, \quad (6.30)$$

así obtenemos

$$\frac{d\hat{A}^{(H)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^{(H)}, \hat{H}^{(H)}]. \quad (6.31)$$

Esta es la ecuación de movimiento de Heisenberg.

6.4. Ec. De Von Neumann

Dada la matriz de densidad y el operador de evolución, podemos saber como cambia esta matriz de densidad con el tiempo. Considerando la ecuación 6.4, y suponiendo que es a un tiempo inicial ($t_0 = 0$), aplicamos los operadores \mathcal{U} a la izquierda y \mathcal{U}^\dagger a la derecha:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger = \sum_i w_i |\alpha^{(i)}, t\rangle \langle \alpha^{(i)}, t|, \quad (6.32)$$

6.32 es la operador de densidad dependiente del tiempo. Ahora podemos calcular su derivada, suponemos que los w_i no cambian con el tiempo:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} &= \sum_j w_j \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} |\alpha^{(j)}, t\rangle \right) \langle \alpha^{(j)}, t| + |\alpha^{(j)}, t\rangle \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha^{(j)}, t| \right) \right] \\ &= \sum_j w_j \left[\left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\alpha^{(j)}, t\rangle \right) \langle \alpha^{(j)}, t| + \left(\frac{-1}{i\hbar} \langle \alpha^{(j)}, t| \hat{H} \right) \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{H} \sum_j w_j |\alpha^{(j)}, t\rangle \langle \alpha^{(j)}, t| - \sum_j w_j |\alpha^{(j)}, t\rangle \langle \alpha^{(j)}, t| \hat{H} \right] \\ &\Rightarrow i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)], \end{aligned} \quad (6.33)$$

la segunda igualdad viene de la ecuación 6.18 y la última viene de 6.31. Esta ecuación 6.33 es la ecuación de Von Neumann. Este operador cumple con

$$\begin{aligned} \text{tr}(\hat{\rho}(t)) &= \sum_{i,n} w_i \langle n | \alpha^{(i)}, t \rangle \langle \alpha^{(i)}, t | n \rangle = \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)}, t | \alpha^{(i)}, t \rangle \\ &= \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \alpha^{(i)} \rangle = 1. \end{aligned}$$

Referencias

- [1] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the emission and absorption of radiation. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 114:243–265, 1927.
- [2] V. Fock. Konfigurationsraum und zweite Quantelung. *Zeitschrift für Physik*, 75(9-10):622–647, September 1932.
- [3] P. Jordan and E. Wigner. Über das Paulische Äquivalenzverbot. *Zeitschrift für Physik*, 47(9-10):631–651, September 1928.
- [4] R. P. Feynman. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, 20:367–387, Apr 1948.
- [5] J. Schwinger. On quantum-electrodynamics and the magnetic moment of the electron. *Phys. Rev.*, 73:416–417, Feb 1948.
- [6] S. Tomonaga, Z. K. and T. Tati. On a relativistically invariant formulation of the quantum theory of wave fields. ii: Case of interacting electromagnetic and electron fields. *Progress of Theoretical Physics*, 2(3):101–116, 10 1947.
- [7] J Schwinger. Brownian motion of a quantum oscillator. *Journal of Mathematical Physics*, 2(3):407–432, 12 1961.
- [8] L. V. Keldysh. Diagram technique for nonequilibrium processes. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 47:1515–1527, 1964.
- [9] Iacopo Carusotto and Cristiano Ciuti. Quantum fluids of light. *Rev. Mod. Phys.*, 85:299–366, Feb 2013.
- [10] R. Oerter. *La teoría de casi todo*. Fondo de Cultura Económica, 2008.
- [11] J. Rammer. *Quantum Field Theory of Non equilibrium States*. Cambridge University Press, 2007.
- [12] Alexander Altland and Ben D. Simons. *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge University Press, 2 edition, 2010.
- [13] J.J Sakurai and Jim Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2017.
- [14] H. Bruus and K. Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics*. Oxford Graduate Texts, 2003.
- [15] P. A. M. Dirac. The Lagrangian in quantum mechanics. *Phys. Z. Sowjetunion*, 3:64–72, 1933.
- [16] R.P. Feynman and A.R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path integrals*. Dover Publication, 2010.

-
- [17] Alex Kamenev. *Field Theory of Non-Equilibrium Systems*. Cambridge University Press, 2011.
- [18] Wei-Min Zhang, Da Hsuan Feng, and Robert Gilmore. Coherent states: Theory and some applications. *Rev. Mod. Phys.*, 62:867–927, Oct 1990.
- [19] L. de la Peña. *Introducción a la Mecánica Cuántica*. Fondo de Cultura Económica, 2006.
- [20] M. O. Scully and M. S. Zubairy. *Quantum Optics*. Cambridge University Press, 1997.
- [21] C. Gerry and P. Knight. *Introductory Quantum Optics*. Cambridge University Press, 2005.
- [22] G. B. Arfken, H. J. Weber, and F. E. Harris. *MATHEMATICAL METHODS FOR PHYSICISTS, Seventh Edition*. Elsevier, 2013.
- [23] S.H. Friedberg. *Algebra Lineal*. Prentice-Hall, 1982.
- [24] L. G. Colín. *Introducción a la física estadística*. El Colegio Nacional, 2008.