Física y Matemática: La Mirada del Matemático.

José R. León R.
Escuela de Matemáticas, Facultad de Ciencias, U.C.V. *

En este trabajo presentaré varios problemas que han constituido fuente de preocupación y estudio tanto de físicos como de matemáticos. Veremos que no siempre las ópticas son las mismas. A pesar de tratar con el mismo problema, algunas veces los intereses son complementarios y otras definitivamente opuestos. Por razones de tiempo y de competencia, me limitaré a exponer problemas de la Física Matemática ligados a las Probabilidades y más específicamente con el Movimiento Browniano.

Consideraré:

1. (a) Definición del Movimiento Browniano (M.B.) y su uso como una herramienta teórica para el establecimiento de experiencias conducentes a la determinación del Número de Avogadro. Los nombres ligados a esta iniciativa fueron A. Einstein [2] y J. Perrin [8] (entre otros).
   (b) Inspiración matemática que surge de la consideración del problema anterior y la concepción del M. B. como una medida de probabilidad en el espacio de funciones continuas $C[0,1]$. Existencia de funciones no diferenciables y el establecimiento de un Cálculo o Análisis en un espacio de dimensión infinita.

2. (a) La visión de Feynman [5] de la mecánica cuántica. La instrumentación de la función de onda ψ, solución de la ecuación de Schrödinger, como una integral de "camino sobre trayectorias" de la exponencial compleja de la acción clásica. El límite clásico como una analogía del método de la fase estacionaria. La imposibilidad de definir una medida "compleja" que posea las buenas propiedades.
   (b) La interpretación de M. Kac [9] al cambiar "la medida compleja sobre las trayectorias" por la medida de probabilidad asociada al M. B. sobre $C[0,1]$ y cómo esta aproximación lleva a la solución de la ecuación del calor con enfriamiento

*Conferencia dictada en la III Escuela de Relatividad, Campos y Astrofísica.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \psi}{\partial t} = \dfrac{1}{2}\Delta\psi - V\psi \\ \\ \psi(0,x) = \varphi(x) \end{cases}$$

3. El problema de la fase estacionaria asintótica de integrales de Laplace.
   (a) En el caso Feynman límite clásico, expansión en potencias de $\hbar$.
   (b) Grandes desviaciones y expansión semiclásica para la ecuación del calor con enfriamiento.

1 Introducción

Comenzaremos con una cita del libro de J. Perrin "Les atomes": "Las curvas que no poseen tangente son la regla". Para la época en la que fue formulada, tal observación debe calificarse de revolucionaria, rompe con el paradigma existente en ese momento, que pregonaba que las curvas continuas sin derivadas, como las del famoso ejemplo de Weierstrass, eran más bien la excepción. Estas ideas le surgieron a Perrin, según Pierre-Gilles de Gennes, por las observaciones experimentales que hacía del Movimiento Browniano.

El Movimiento Browniano toma su nombre del botánico inglés Robert Brown y aunque los matemáticos y físicos lo recordamos por este hecho, E. Nelson [7] nos dice que su biografía en la Enciclopedia Británica no menciona este descubrimiento, más bien habla de sus trabajos en botánica. No fue Brown quien describiera por primera vez este fenómeno, en sus trabajos se citan a varios antecesores que ya lo habían observado.

Llamó la atención a Brown, el movimiento errático que efectuaban partículas de polen suspendidas en agua y concluyó que "no sólo tejidos orgánicos, sino también substancias inorgánicas, efectúan el mismo movimiento" (las llamó partículas "animadas o irritables").

La primera teoría dinámica del Movimiento Browniano postulaba que las partículas estaban vivas. Esto obedecía principalmente a lo en boga que estaba el vitalismo en esa época. Brown sin embargo, niega en sus trabajos que él hubiera establecido que las partículas fueran animadas. Su teoría es que la materia está compuesta por pequeñas partículas, que él llamó moléculas activas, que exhiben un movimiento rápido e irregular cuyo origen se encuentra en las partículas en sí mismas y no en el medio que las rodea.

El primer trabajo riguroso sobre el M. Browniano fue realizado por A. Einstein en 1905 [2] (el mismo año de la teoría de la relatividad y del fotón).

En la argumentación de Einstein existen dos partes bien diferenciadas. En primer lugar está la discusión matemática sobre la cual inicialmente sólo daremos un esbozo para volver luego con más detenimiento.

Si llamamos $p_t(x)$ la probabilidad de que una partícula browniana se encuentre entre x y $x + dx$ en el tiempo t entonces, bajo ciertas suposiciones físicas, Einstein derivó la ecuación de difusión que debía satisfacer p_t

$$\frac{\partial p_t(x)}{\partial t} = D\Delta p_t(x).$$

siendo D una constante positiva (la constante de difusión). Si la partícula se encuentra en el origen de coordenadas en el tiempo cero, $p_0(x) = \delta(x)$ (Delta de Dirac), entonces la solución será

$$p_t(x) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{|x|^2}{4Dt}}$$

(Generalmente los probabilistas ponemos $D = 1/2$ para el movimiento Browniano estándar). $|x|$ es la distancia euclidiana al origen. La segunda parte del argumento es física y trata de establecer relaciones entre la constante D y otras cantidades físicas. Así obtuvo la siguiente notable identidad:

$$D = \frac{kT}{m\beta}$$

donde T es la temperatura absoluta, k la constante de Boltzman, m la masa de la partícula y β es una constante con dimensiones de frecuencia. Se puede calcular $m\beta$ usando la aproximación que consiste en considerar que las partículas son esferas de radio a y usar luego la teoría de fricción de Stokes, lo que permite obtener $m\beta = 6\pi\eta a$ siendo η el coeficiente de viscocidad del fluido. En este caso se verifica que $D = \frac{kT}{6\pi\eta a}$. Como η y T pueden ser determinados y en un experimento controlado se pueden usar partículas de radio conocido, entonces k puede ser determinada y así el número de Avogadro. Los experimentos que condujeron a su determinación fueron hechos por J. Perrin y un colaborador (Chandesaigues) [8] obteniendo una aproximación sorprendente.

Suposiciones matemáticas de Einstein

a) $x_t - x_s$ es independiente de x_s.

b) la densidad de $x_t - x_s$ sólo depende de $t - s$

$$x_t - x_s + x_s = x_t$$

$$\Rightarrow p_{t-s} * p_s = p_t \Rightarrow p_h * p_s = p_{h+s}$$

$$p_{h+s}(y) = \int_{\mathbf{R}} p_h(y-x)p_s(x)dx = \int_{\mathbf{R}} p_s(y+x)p_h(x)dx$$

c) $p_s(-x) = p_s(x)$

d) $p_s(\{x : |x| \geq \varepsilon\}) = o(s)$

Bajo estas suposiciones obtenemos, usando el desarrollo de Taylor,

$$\frac{p_{h+s}(y) - p_s(y)}{h} = \frac{1}{h}p'_s(y)\int_{-\infty}^{\infty} xp_h(x)dx + \frac{1}{h}\frac{1}{2}p''_s(y)\int_{-\infty}^{\infty} x^2 p_h(x)dx + o(1)$$

Notemos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 p_h(x)dx = 2Dh.$$

Tomando límite cuando $h \to 0$ obtenemos:

$$\frac{\partial p_t}{\partial t} = \frac{1}{2}p''_t(y)2D \Rightarrow \left[\frac{\partial p_t}{\partial t} = D\frac{\partial^2 p_t}{\partial x^2}\right].$$

Hasta aquí el trabajo de Einstein. Ahora iremos hacia la reflexión de Wiener [10], estrictamente matemática, y con preocupaciones de naturaleza diferente. Para simplificar la notación trabajaremos con una sola coordenada x_t. En vista de las suposiciones (a), (b), (c) y (d), supongamos que queremos averiguar cuál es la probabilidad del siguiente paquete de trayectorias:

$$P\{w : x_0 = x, a_1 \leq x_{t_1} \leq b_1, a_2 \leq x_{t_2} \leq b_2, \ldots, a_n \leq x_{t_n} \leq b_n\} = P(C_n).$$

El conjunto de trayectorias queda ejemplificado en la gráfica siguiente. Si $0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \ldots \leq t_n \leq 1$, la poligonal quebrada de la figura representa una de estas posibles funciones.

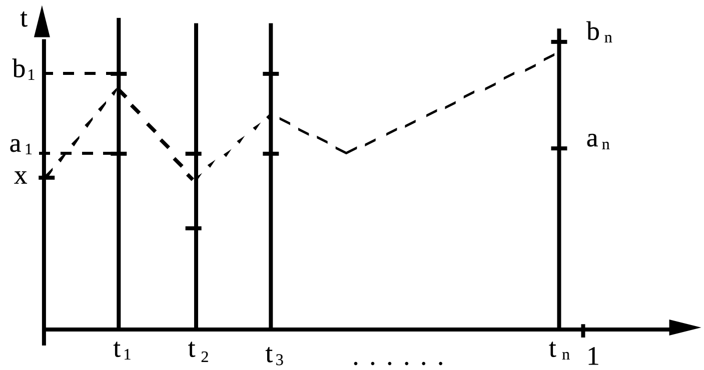


Figura 1

$$P(C_n) = \int_{a_1}^{b_1} \cdots \int_{a_n}^{b_n} p_{t_1}(y_1-x)p_{t_2-t_1}(y_2-y_1)\cdots p_{t_n-t_{n-1}}(y_n-y_{n-1})dy_1\cdots dy_n.$$

Esta probabilidad define un sistema coherente de probabilidades sobre la clase de los cilindros de $C^x[0,1]$ (trayectorias comenzando en x y continuas). Wiener en 1923 [10] pudo probar que esta probabilidad definida sobre estos cilindros podía ser extendida a $(C^x[0,1],\mathcal{B})$, cobrando así sentido preguntas como:

(i) ¿Cuál es la probabilidad de las funciones continuas y diferenciables en el intervalo $[0,1]$, $C^1[0,1]$?. Se obtiene sin dificultad:

$$P^x(C'[0,1]) = 0$$

(ninguna trayectoria Browniana es diferenciable).

(ii) $P\left\{w : \lim_{n\to\infty}\sum_{i=1}^{2^n-1}\left(X(\frac{i+1}{2^n}) - X(\frac{i}{2^n})\right)^2 = D\right\} = 1$
(esto nos da una forma aproximada de calcular D). Lo que significa que aunque las trayectorias tienen variación infinita poseen variación cuadrática finita; en efecto D puede ser calculada exactamente con particiones cada vez más finas.

Una determinación importante es la del módulo de continuidad para X_t, una trayectoria típica del Movimiento Browniano, que verifica:

$$\limsup_{h\to 0}\frac{|X_{t+h}-X_t|}{h^{1/2-\delta}} \leq C$$

para $\delta > 0$ tan pequeño como se quiera y además

$$\limsup_{h\to 0}\frac{|X_{t+h}-X_t|}{h^{1/2+\delta}} = +\infty.$$

El resultado preciso se debe a Paul Lévy [6]

$$\limsup_{h\to 0}\frac{X_{t+h}-X_t}{[2h\log\log(1/h)]^{1/2}} = 1.$$

2 La amplitud en Mecánica Cuántica. Fórmula de Feynman-Kac

(a) La visión de Feynman de la mecánica cuántica.

La forma más elegante de determinar el camino $x(t)$ que sigue una trayectoria clásica es el principio de mínima acción. Si $x(t), \dot{x}(t)$ designan la posición y la velocidad de una partícula clásica, la acción se define como

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t)dt$$

donde L es el Lagrangiano del sistema. En el caso de una partícula en un potencial eléctrico V, $\quad L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x,t)$, así

$$S = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2}\dot{x}^2(t) - V(x,t)\right) dt.$$

Una de las genialidades de R. P. Feynman [5], consistió en establecer una "regla" de cuantización. Al contrario de lo que pasa en la mecánica clásica, ahora, en el caso cuántico, no es importante una sola sino que todas las trayectorias que unen $(t_a, x(t_a))$ y $(t_b, x(t_b))$ cuentan. ¿Cómo cuentan o cuál es la contribución de cada trayectoria?. La fase, puesto que ahora estamos en presencia de un número complejo, es para cada trayectoria igual a $i/hS[x(\cdot)]$.

La amplitud de probabilidades de ir de "a" a "b" es la suma de la exponencial de estas fases

$$K(b,a) = \sum_{\forall\ los\ caminos} \phi[x(t)], \qquad \phi[x(t)] = e^{i/hS[x(t)]}$$

y $P(b,a)$, la probabilidad de ir de $a \to b$, será igual a

$$P(b,a) = |K(b,a)|^2$$

La forma como Feynman dio significado Físico-Matemático a la expresión de $K(b,a)$ fue similar a la construcción de una integral de Riemann infinito dimensional.

Sea $N_\varepsilon = t_b - t_a; \quad \varepsilon = t_{i+1} - t_i; \quad t_0 = t_a; \quad t_N - t_b; \; x_0 = x_a; \; x_N = x_b$

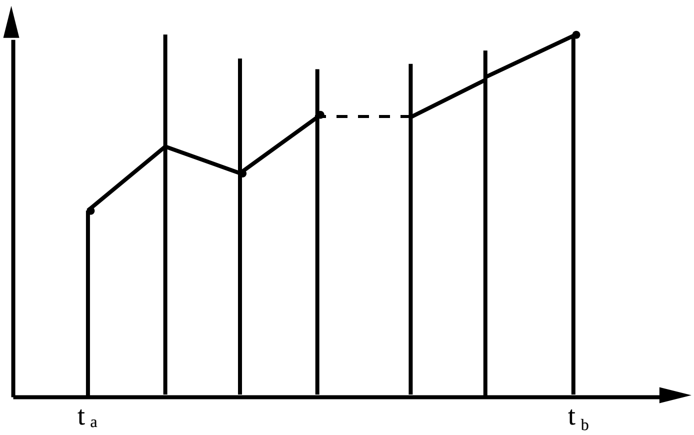
$$K(b,a) \sim \int \cdots \int \phi[x(t)] dx_1 dx_2 \cdots dx_{N-1}$$

(observemos que no se integra en los extremos pues están fijos).

Seleccionar la constante de normalización para substituir el signo de proporcionalidad por el de igualdad es un problema difícil. No obstante en el caso en que: $S = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x,t)$ basta poner $A = \left(\frac{2\pi i h\varepsilon}{m}\right)^{1/2}$ y así

$$K(b,a) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{A} \int \cdots \int e^{(i/h)S[b,a]} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \cdots \frac{dx_{N-1}}{A}$$

cuando $S[b,a] = \int_{t_b}^{t_a} \frac{m}{2}\dot{x}^2(t) - V(x(t),t)dt$.



Se llega así a la famosa notación

$$K(b,a) = \int_a^b e^{(i/h)S[b,a]}\mathcal{D}x(t)$$

que no es sino el "path integral". En el caso $V = 0$, correspondiente a una partícula libre, se obtiene por el método bosquejado anteriormente que:

$$\begin{aligned} K(b,a) &= \lim_{\varepsilon\to 0}\int\cdots\int e^{[\frac{im}{2h\varepsilon}\sum_{i=1}(x_i-x_{i-1})^2]}dx_1\ldots dx_{N-1}\left(\frac{2\pi ih\varepsilon}{m}\right)^{-N/2} \\ &= \left[\frac{2\pi ih(t_b-t_a)}{m}\right]^{-1/2} e^{\frac{im}{2h}\frac{(x_b-x_a)^2}{(t_b-t_a)}} \end{aligned}$$

función que satisface

$$\boxed{-\frac{h}{i}\frac{\partial K(b,a)}{\partial t_b} = -\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2 K(b,a)}{\partial x_b^2}}$$

que es la ecuación de Schrödinger para la partícula libre.

La similitud entre ambas situaciones, Movimiento Browniano y Ecuación de Schrödinger, no puede ser más estimulante.

Para abordar el problema de la partícula en un campo debemos establecer la regla de dos eventos en sucesión. Supongamos que $t_a \leq t_c \leq t_b$. Entonces

$$S[b,a] = S[b,c] + S[c,a]$$

(Esto pasa porque no anticipamos)

$$K(b,a) = \int e^{i/hS[b,c]+i/hS[c,a]}\mathcal{D}x(t).$$

Es posible dividir cada trayectoria en dos partes. La primera parte termina en $x_c = x(t_c)$ y la segunda tiene puntos extremos x_c y x_b. Es por consiguiente posible integrar todos los caminos que van de a hasta c y luego los que van de c hasta b, así el resultado puede ser escrito:

$$K(b,a) = \int_{x_c}\int_c^b e^{(i/kS[b,c])}K(c,a)\mathcal{D}x(t)dx_c = \int_{x_c} K(b,c)K(c,a)dx_c.$$

Definamos $\Psi(x,t)$, la función de onda, como la amplitud de probabilidad total de llegar a (x,t) desde cualquier parte del pasado; $|\Psi(x,t)|^2$ será la probabilidad de encontrar la partícula en (x,t); $K(x_2,t_2;x_1,t_1)$ es el propagador $(x_1,t_1) \to (x_2,t_2)$

$$\Psi(x_2,t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_2,t_2;x_3,t_3)\Psi(x_3,t_3)dx_3.$$

Esta ecuación integral nos permite obtener la ecuación diferencial que satisface $\Psi(x,t)$

$$\begin{aligned}\Psi(x,t+\varepsilon) &= \textstyle\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A}\left[e^{\frac{i}{h}\frac{m(x-y)^2}{2\varepsilon}}e^{-i/k^{\varepsilon}V\left(\frac{x+y}{2},t\right)}\right]\Psi(y,t)dy \\ \Psi(x,t+\varepsilon) &= \textstyle\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A}\left[e^{\frac{i}{h}\frac{m\eta^2}{2\varepsilon}}e^{-i/h\varepsilon V\left(\frac{2x+\eta}{2},t\right)}\right]\Psi(x+\eta,t)d\eta\end{aligned}$$

Si hacemos la expansión de Taylor hasta el primer orden en el tiempo y segundo orden en el espacio obtenemos

$$\Psi(x,t)+\varepsilon\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{A}e^{in\eta^2/2h\varepsilon}\left[1-\frac{i\varepsilon}{h}V(x,t)\right]\times\left[\Psi(x,t)+\eta\frac{\partial\Psi}{\partial x}+\frac{1}{2}\eta^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right]dy.$$

Usando $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{A}e^{im\eta^2/2h\varepsilon}\eta d\eta = 0$ y $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{A}e^{im\eta^2/2h\varepsilon}\eta^2 d\eta = \frac{ih\varepsilon}{m}$ obtenemos, siempre al primer orden: $\Psi + \varepsilon\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \Psi - \frac{i\varepsilon}{h}V\Psi - \frac{h\varepsilon}{2im}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$

$$\Rightarrow \quad \boxed{-\frac{h}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi} \quad \text{E. de Schrödinger.}$$

(b) Ahora el turno a los matemáticos

¿Existe una medida compleja sobre las trayectorias que dé cuenta de la Integral de Feynman?

¿Es posible dar sentido matemático a estas ideas siderales?

¿Existe otro tipo de modelo donde todo pueda establecerse sin pena?

Me parece conveniente en este momento incluir una frase de L. Schulman:

"The practicioner of functional integration whose main interest lies in quantun mechanics is of necessity a person with a guilty conscience. Nature has given us complex amplitudes, but mathematicians only allow us to add paths with real measure".

La respuesta a la primera pregunta es negativa: en 1968 Gelfand y Yaglon publicaron un excelente artículo [3] (con una importante influencia en la Física y en la Matemática), donde creían haber definido una tal medida compleja; 5 o 6 meses mas tarde Cameron (alumno de Wiener) encontró un contraejemplo [1] que daba al traste con los deseos de los dos grandes matemáticos rusos.

Los intentos desde ese momento han sido intensos por tratar de sustituir la noción de medida por otras más débiles y hasta ahora tenemos, desde el punto de vista matemático, una botánica (taxonomía) de integrales de Feynman.

La tercera de las preguntas dio origen a una de las ideas mas fructíferas en la Teoría de las Probabilidades; fue desarrollada por Marc Kac [9] y consiste en sustituir en el procedimiento original de Feynman la medida generada por el Movimiento Browniano (con los cambios correspondientes).

(c) Proceso de Kac. $V(x,t) = V(x)$

$$-\frac{h}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -h^2/2m\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi$$

si cambiamos $t = -ith$ la ecuación que nos queda es:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V(x)\Psi.$$

Es lo que se llama ecuación del calor con enfriamiento si $V \geq 0$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -H(\Psi) \qquad\qquad H = \frac{-h^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

H es el operador suma del $\frac{-h^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ y de la multiplicación por V. Una fórmula de Trotter (una demostración accesible se puede leer en el libro de B. Simon [9]) nos dice que

$$e^{-tH}g = \lim_{n\to\infty}\left(e^{\frac{-h^2 t}{2m}\Delta/n}e^{-tV/n}\right)^n g$$

(La demostración de esta fórmula y otras similares, ha creado toda una rama en el Análisis Funcional).

No olvidemos que la solución de la Ecuación del Calor con enfriamiento, se escribe en el sentido de semigrupos.

$$\Psi(x,t) = e^{-tH} g(x).$$

En vista de que sabemos que

$$e^{-tV} g(x) = e^{-tV(x)} g(x)$$

y que

$$e^{-\frac{h^2}{2m} t\Delta} g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} g(y) \frac{e^{-\frac{|x-y|^2}{2(h^2 t/m)}}}{\sqrt{2\pi \left(\frac{h^2 t}{m}\right)}} dy,$$

es inmediato escribir una fórmula integral para

$$\left(e^{-(h^2/2m)\frac{t}{n}\Delta} e^{-tV/n}\right)^n g(x)$$

$$= \int_{\mathbf{R}^n} e^{-t/n \sum_{j=0}^{n-1} V(x_{jt/n})} p_{t/n}(x - x_1) \ldots p_{t-\frac{(n-1)t}{n}}(x_n - x_{n-1}) g(x_n) dx_1 \cdots dx_n$$

$$= \int_{C[0,1]} e^{-t/n \sum_{j=0}^{n-1} V(X_{jt/n})} d\mu^x(x_t).$$

Ahora el hecho de ser μ^x una verdadera medida de probabilidad nos permite usar el teorema de la convergencia acotada de Lebesgue. El teorema establece que si $f_n \xrightarrow{c.s.} f$ y además $|f_n| \leq M$ entonces

$$\lim_{n\to\infty} \int f_n d\mu = \int f d\mu.$$

Sabemos que x_t es continua para las trayectorias típicas del Movimiento Browniano y si V es continuo salvo un conjunto de medida cero

$$\lim_{n\to\infty} \frac{t}{n} \sum_{j=0}^{n-1} V(X_{(jt/n)}) = \int_0^t V(x_s) ds$$

como V es positivo

$$0 \leq e^{-t/n \sum_{j=0}^{n-1} V(X_{(jt/n)})} \leq 1$$

entonces se desprende sin dificultad que:

$$\lim_{n\to\infty} \left(e^{-(h/2m)\frac{t}{n}\Delta} e^{-tV/n}\right)^n g(x) = \int_{C[0,1]} e^{-\int_0^t V(X_s) ds} g(X_t) d\mu_0^x(x_.)$$

Esta es la Fórmula de Feynman-Kac. Resumiendo:

$$\Psi(x,t) = e^{-tH}g(x) = \int_{C[0,1]} e^{-\int_0^t V(X_s)ds} g(X_t) d\mu_0^x(x.)$$

En notación probabilística:

$$= E^x \left\{ e^{-\int_0^t V(X_s)ds} g(X_t) \right\} = E \left\{ e^{-\int_0^t V(x+b_s)ds} g(x+b_t) \right\}$$

donde b_t es el Movimiento Browniano estándar.
¿Qué se puede hacer con esta fórmula que sea también útil a la Física?.

(a) Si $\rho_\beta(x', x)$ es la matriz de densidad en mecánica estadística, entonces esta función verifica la ecuación

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = \frac{h^2}{2m} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - V\rho}$$

(Ecuación del calor con enfriamiento con la sustitución $\beta \leftrightarrow t$).

(b) Se puede estudiar el operador H, definido generalmente en $L^2(\mathbf{R}^3)$, en los diferentes $L^p(\mathbf{R}^3)$, lo que da indicaciones sobre el decaimiento de sus autofunciones.

(c) Se simplifica mucho el estudio asintótico de $\rho_\beta(x, x')$ cuando tanto β, como h se hacen pequeños.

Para exhibir su poder demostraremos lo que se llama cotas en el espacio de fases (cf. [9], pag. 94).

Teorema: *Sea $V \in L^1_{loc}(\mathbf{R}^3)$ y positivo. Definamos $H(h) = \frac{-h^2}{2m}\Delta + V$. Entonces*

$$T_r(e^{-\beta H(h)}) \leq \int_{\mathbf{R}^3} \int_{\mathbf{R}^3} \frac{dpdx}{(2\pi h)^3} e^{-\beta\left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right)}.$$

(**Observación**: $(p, x) \in \mathbf{R}^6$).

Demostración:

En primer lugar debemos establecer una fórmula de Feynman-Kac para

$$T_r(e^{-\beta H(h)}) = \int \rho_\beta(x,x)dx$$

cuando $\rho_\beta(x,x')$ es la matriz de densidad del problema

$$\begin{aligned} e^{-\beta H(h)}\varphi(x) &= \int \rho_\beta(x,x')\varphi(x')dx' \\ &= \int E[e^{-\beta\int_0^t V(x+b_s)ds}|b_t = x'-x]\varphi(x')p_t(x'-x)dx'. \end{aligned}$$

El proceso b_t es el movimiento Browniano que parte de cero, obteniéndose sin dificultad

$$\rho_\beta(x,x') = E[e^{-\beta\int_0^t V(x+b_s)ds}|b_t = x'-x]p_t(x'-x)$$

$$\rho_\beta(x,x) = E[e^{-\beta\int_0^t V(x+b_s)ds}|b_s = 0]p_t(0)$$

$$T_r(e^{-\beta H}) = \int_{\mathbf{R}^\nu} dxE[e^{-\beta\int_0^t V(x+b_s)ds}|b_t = 0]p_t(0) = (*)$$

Una desigualdad clásica aplicada al integrando (se usa que $e^{-\beta x}$ es convexa) nos dice

$$e^{-\beta t\int_0^t V(x+b_s)\frac{ds}{t}} \leq \int_0^t e^{-t\beta V(x+b_s)}\frac{ds}{t}$$

y

$$(*) \leq \int_{\mathbf{R}^3} E\left[\int_0^t e^{-t\beta V(x+b_s)}\frac{ds}{t}|b_t = 0\right]p_t(0)dx.$$

Usando Fubini para intercambiar integrales (recordar que E es una integral)

$$E\left[\int_0^t \frac{ds}{t}\int_{\mathbf{R}^3} dxe^{-t\beta V(x)}|b_t = 0\right]p_t(0) = \int_{\mathbf{R}^3}\int_{\mathbf{R}^3} \frac{dpdx}{(2\pi h)^3}e^{-\beta\left(\frac{p^2}{2m}+V(x)\right)}dx$$

3 Límite clásico

a) Ideas de Feynman: Fase estacionaria en dimensión finita.

En esta sección seguiremos estrechamente la discusión de Feynman en el artículo [5].
En la fórmula:

$$K(b,a) = \sum_{\forall \; los \; caminos} \phi[x(t)], \quad \phi[x(t)] = e^{i/hS[x(t)]}$$

todas las trayectorias contribuyen de la misma forma. Aunque las fases varíen no queda muy claro, en el límite clásico, cómo es que alguna trayectoria en particular cobrará más importancia que las otras. La aproximación clásica corresponde al caso en que las dimensiones, las masas, los tiempos, etc., son grandes, en comparación con la pequeña cantidad h. Esto significa que el exponente $\frac{S}{h}$ resulta ser un ángulo muy grande. Si cambiamos de trayectoria en una cantidad δx, pequeña en la escala clásica, el cambio que experimentará S será también pequeño en esta escala. Sin embargo, el cambio no será de la misma magnitud cuando se mide en la extremadamente pequeña unidad h. Esto implica que cambios pequeños en la trayectoria generarán enormes cambios en fase y los senos y cosenos resultantes oscilarán rápidamente entre valores negativos y positivos; de tal manera que la contribución neta será cero. Por otra parte, en la proximidad de la trayectoria clásica $\hat{x}$, para la cual S toma un extremo, no hay cambios, en el primer orden por lo menos, en S. Todas las contribuciones para trayectorias en este paquete están cerca en fase y el valor de esta fase es aproximadamente S_{cl} =Acción Clásica, por consiguiente no existe cancelación en este caso.

De esta manera se llega a la aproximación

$$K(a,b) = G(h)e^{i/hS_{cl}}$$

donde $G(h)$ es una función suave del parámetro h. Esta aproximación será válida para $S >> h$.

b) Implementación de estas ideas por medio de un procedimiento matemático.

Desarrollaremos a continuación un procedimiento, puesto en práctica en Gzyl & León [4], para encontrar el "Límite Clásico" para la versión euclidiana de la ecuación de Schrödinger con campo magnético, esto es: cuando se hace la sustitución $t := -it$. Consideraremos la ecuación:

$$h\frac{\partial \psi_h}{\partial t} = 1/2(h\nabla + A(x))^2\psi_h(x,t) - V(x)\psi_h(x,t) \; (**)$$

con condición inicial

$$\psi_h(x,0) = f(x)e^{-\frac{S_0(x)}{h}}$$

Para darle sentido matemático al problema planteado en a), debemos considerar a h como un parámetro que haremos tender a cero. Demostraremos que

$$\lim_{h\to 0} -h\psi_h(x,t) = S(x,t)$$

donde $S(x,t)$ es la acción asociada al problema clásico:

$$S(x,t) = S_0(x(t)) + \int_0^t 1/2\{\dot{x}^2(s) - A(x(s)) + V(x(s))\}ds$$

sobre todas las trayectorias $x : [0,t] \rightarrow \mathbf{R}^3$ que verifican la condición inicial $x(0) = x$. La trayectoria que hace estacionaria a esta acción verifica la ecuación de Newton en [0,t]:

$$\ddot{x}_i = \dot{x}^j \partial_j A_i(x) - \dot{x}^j \partial_i A_j(x) + \partial_i V(x)$$

con condiciones de frontera:

$$x(0) = x,\ \dot{x}(t) = -\nabla S_0(x(t)) + A(x(t))$$

Notemos la aparición del signo más para $\nabla V(x)$ en la ecuación de Newton, lo que es consecuencia del cambio de t por $-it$. La solución de la ecuación $(**)$ se escribe por medio de una fórmula de Feynman-Kac como:

$$\begin{aligned}\psi_h(x,t) = E\{f(x + h^{1/2}b_t)\exp\{h^{-1}(\int_0^t A(x + h^{1/2}b_s)db_s \\ + \int_0^t V(x + h^{1/2}b_s)ds - S_0(x + h^{1/2}b_t))\}\end{aligned}$$

Existe una fórmula de traslación debida a Cameron & Martin que permite escribir la expresión anterior trasladada en la trayectoria clásica. De esta forma podemos escribir

$$\psi_h(x,t) = E[f(x(t) + h^{1/2}b_t)M_h(t)exph^{-1}(\int_0^t \dot{x}(s)h^{1/2}db_s + 1/2\int_0^t \dot{x}^2(s)ds)]$$

donde

$$M_h(t) = e^{\{1/h[\int_0^t A(x_s+h^{1/2}b_t)\cdot(dx_s+h^{1/2}db_s)+\int_0^t V(x_s+h^{1/2}b_s)ds-S_0(x_t+h^{1/2}b_t)]\}}$$

Usando el desarrollo de Taylor para las funciones f, A, V y S_0 evaluadas en $x(\cdot) + b$ y alrededor de $x(\cdot)$ obtenemos:

$$\psi_h(x,t) = \exp^{\{-\frac{S(x,t)}{h}\}} E[f(x(t) + h^{1/2}b_t)N_h(t)]$$

con el segundo factor del término de la derecha acotado como función de h, lo que permite obtener

$$\lim_{h\rightarrow 0} -h\log\psi_h(x,t) = S(x,t).$$

Referencias

[1] **R. Cameron** *The Ilstow and Feynman Integrals.* J. Anal. Math. **10** (1962/1963) 287-361.

[2] **A. Einstein** *Investigations on the Theory of the Brownian Movement.* Edited with notes by R. Fürth. Dover 1956.

[3] **I. Gelfand, A. Yaglom** *Integration in function spaces and its applications to quantum physics.* J. Math. Phys. **1** (1960), 48-69.

[4] **H.Gzyl, J.R. León** *Classical Limits via Brownian Motion.* Notas de Matemáticas U.L.A. **100** (1989), 83-89

[5] **R.P. Feynman** *Space time approach to non relativistic quantum mechanics..* Rev. Modern Physics. **20** (1948) 367-387.

[6] **P. Lévy** *Processus Stochastique et Mouvement Brownien.* Gauthier-Villars, Paris 1948.

[7] **E. Nelson** *Dynamical Theories of Brownian Motion.* Mathematical Notes. Princeton University Press.

[8] **J. Perrin** *Les atomes.*

[9] **B. Simon** *Functional integration and quantun physics.* Academic Press, New York 1981.

[10] **N. Wiener**. *Differential space.* J. Math Phys. Sci. **2** (1923) 132-174.