Feynmanova formulace kvantové mechaniky

Michal Lenc

Poznámky k přednášce Vybrané kapitoly z kvantové mechaniky

jaro 2009

1. Schrödingerova rovnice

Odvodíme nerelativistickou Schrödingerovu rovnici pro jednorozměrný případ

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+V(x,t)\psi(x,t) \tag{1.1}$$

z výrazu pro amplitudu pravděpodobnosti přechodu z bodu x do bodu y za infinitesimálně malý časový interval ε

$$K(x,t+\varepsilon|\,y,t)=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m(x-y)^2}{2\varepsilon}-\varepsilon V\left(\frac{x+y}{2},t\right)\right]\right\} \quad . \tag{1.2}$$

Musí tedy platit (po substituci $y=x+\eta$)

$$\psi(x,t+\varepsilon)=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m\eta^2}{2\varepsilon}-\varepsilon V\left(x+\frac{\eta}{2},t\right)\right]\right\}\psi(x+\eta,t)\,d\eta \quad . \tag{1.3}$$

Rozvoje do prvního řádu včetně podle mocnin ε (přitom η je úměrné $\varepsilon^{1/2}$) dají

$$\psi+\varepsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}}\left[\psi+\eta\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{1}{2}\eta^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V\psi\right]d\eta \quad , \tag{1.4}$$

přičemž všechny funkce jsou počítány pro argument x, t. U ε^0 je identita, výraz u $\varepsilon^{1/2}$ je roven nule a výraz u ε je právě Schrödingerova rovnice.

2. Užitečné integrály

Integrály potřebné pro výpočet v (1.4) získáme z obecnějšího výrazu

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{i\left[a(x_2-x)^2+b(x-x_1)^2\right]\right\}dx \quad , \quad a>0\,,b>0 \quad . \tag{2.1}$$

Po doplnění výrazu v exponentu na čtverec a substituci dostáváme

$$I=\frac{2}{(a+b)^{1/2}}\exp\left\{i\frac{ab}{a+b}(x_2-x_1)^2\right\}F \quad , \quad F=\int_0^{\infty}\exp\left\{ix^2\right\}dx \quad . \tag{2.2}$$

Cauchyova věta pro vhodnou křivku v komplexní rovině dává

$$\int_0^R \exp\left\{i x^2\right\} dx + R \int_0^{\pi/4} \exp\left\{R^2 \left(i\cos 2\theta - \sin 2\theta\right)\right\} \exp\left\{i\theta\right\} d\theta + \exp\left\{i\frac{\pi}{4}\right\} \int_R^0 \exp\left\{-x^2\right\} dx = 0 \quad . \tag{2.3}$$

V limitě $R \to \infty$ je

$$\int_0^\infty \exp\left\{i x^2\right\} dx = \exp\left\{i\frac{\pi}{4}\right\} \int_0^\infty \exp\left\{-x^2\right\} dx \tag{2.4}$$

Poissonův integrál se počítá například jako

$$\int_0^\infty \exp\left\{-x^2\right\} dx = \left[\int_0^\infty \exp\left\{-x^2\right\} dx \int_0^\infty \exp\left\{-y^2\right\} dy\right]^{1/2} = \left[\frac{\pi}{2}\int_0^\infty r \exp\left\{-r^2\right\} dr\right]^{1/2} = \frac{\pi^{1/2}}{2} \quad . \tag{2.5}$$

Fresnelův integrál je tedy

$$F = \int_0^\infty \exp\left\{i x^2\right\} dx = \frac{1}{2}(\pi)^{1/2} \exp\left\{i\frac{\pi}{4}\right\} = \frac{1}{2}(\pi i)^{1/2} \tag{2.6}$$

a počítaný integrál

$$I = \left(\frac{\pi i}{a+b}\right)^{1/2} \exp\left\{i\frac{ab}{a+b}\left(x_2 - x_1\right)^2\right\} \quad . \tag{2.7}$$

Při výpočtu integrálů v (1.4) potřebujeme $b = m/(2\hbar\varepsilon)$

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{ib\eta^2\right\} d\eta = \left(\frac{\pi i}{b}\right)^{1/2} = \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \quad ,$$
$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \eta^2 \exp\left\{ib\eta^2\right\} d\eta = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial b} I_0 = -\frac{1}{2ib}\left(\frac{\pi i}{b}\right)^{1/2} = -\frac{\hbar\varepsilon}{im}\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \quad . \tag{2.8}$$

Zobecnění na vícerozměrný případ není obtížné. Uvažujme N-rozměrný vektor (sloupec) η a symetrickou matici Ω. Matici Ω lze diagonalizovat ortogonální transformací

$$\Omega = O^T \Omega_D O \quad , \quad \det O = 1 \quad , \quad \Omega_D = \mathrm{diag}\left(\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_N\right) \tag{2.9}$$

a vektor η transformovat na

$$\xi = O\eta \quad , \quad \xi^T = \eta^T O^T \quad . \tag{2.10}$$

Máme pak (Jacobián transformace $\eta \to \xi$ je roven jedné)

$$I^N = \int_{-\infty}^{\infty} d\eta_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} d\eta_N \exp\left\{ i\, b\, \eta^T\, \Omega\, \eta \right\} = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_N \exp\left\{ i\, b\, \xi^T\, \Omega_D\, \xi \right\} =$$
$$\prod_{k=1}^{N} \left(\frac{\pi\, i}{b\, \omega_k} \right)^{1/2} = \left(\frac{\pi\, i}{b} \right)^{N/2} \frac{1}{\left(\det \Omega_D\right)^{1/2}} = \left(\frac{\pi\, i}{b} \right)^{N/2} \frac{1}{\left(\det \Omega\right)^{1/2}} \quad . \tag{2.11}$$

3. Feynmanův integrál po trajektoriích

Amplituda pravděpodobnosti přechodu z bodu x_a do bodu x_b je

$$K\left(x_b, t_b \,|\, x_a, t_a\right) = \int \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S\left[x(t) \right] \right\} d\left[x(t) \right] \quad ,$$
$$x(t_a) = x_a \quad , \quad x(t_b) = x_b \quad , \quad S\left[x(t) \right] = \int_{t_a}^{t_b} L\left(\dot{x}(t), x(t), t \right) dt \quad . \tag{3.1}$$

Míra v nejjednodušším případě: rozdělíme časový interval na $N+1$ stejných dílů

$$K\left(x_b, t_b \,|\, x_a, t_a\right) = \lim_{N\to\infty} \left[\frac{m}{2\pi\, i\, \hbar\, \tau} \right]^{(N+1)/2} \int \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S\left[x(t) \right] \right\} \prod_{k=1}^{N} d\, x_k \quad ,$$
$$\tau = \frac{t_b - t_a}{N+1} \quad , \quad t_k = k\,\tau \quad , \quad x(t_a) = x_a = x_0 \quad , \quad x(t_k) = x_k \quad , \quad x(t_b) = x_b = x_{N+1} \quad , \tag{3.2}$$
$$S\left[x(t) \right] = \tau \sum_{k=0}^{N} L\left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau}, \frac{x_{k+1} + x_k}{2}, \frac{t_{k+1} + t_k}{2} \right) \quad .$$

Při dělení je třeba opatrnosti (Wiener, Ito). Proměnná Brownova pohybu $x(t)$ a integrál

$$I_\omega = \int_{t_a}^{t_b} f\left(x(t) \right) d\, x \equiv \lim_{N\to\infty} \sum_{k=0}^{N} \left(x_{k+1} - x_k \right) \left[\omega\, f\left(x_k \right) + (1-\omega)\, f\left(x_{k+1} \right) \right] \quad , \quad 0 \le \omega \le 1 \quad . \tag{3.3}$$

"Normální" chování dostaneme jenom pro $\omega = 1/2$. Klasické pohybové rovnice dostáváme z variačního principu

$$\delta S = S\left[x_{cl} + \delta x \right] - S\left[x_{cl} \right] = 0 \quad ,$$
$$S\left[x + \delta x \right] = \int_{t_a}^{t_b} L\left(\dot{x} + \delta \dot{x}, x + \delta x, t \right) dt = \tag{3.4}$$
$$\int_{t_a}^{t_b} \left[L + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} + \frac{\partial L}{\partial x} \delta x \right] dt = S[x] + \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} + \frac{\partial L}{\partial x} \delta x \right] dt \quad ,$$

odkud pak

$$\delta S = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \Bigg|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} \right] \delta x \, dt \quad . \tag{3.5}$$

Pro kvantově mechanické kvasiklasické přiblížení je

$$\begin{aligned} & K\left(x_b, t_b \,|\, x_a, t_a\right) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\left[x_{cl}(t)\right]\right\} \int \exp\left\{\frac{i}{2\hbar}\delta^2 S\left[\delta x(t)\right]\right\} d\left[\delta x(t)\right] \quad , \\ & \delta x(t_a) = \delta x(t_b) = 0 \quad , \\ & \delta^2 S\left[\delta x(t)\right] = \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} (\delta \dot{x})^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} \delta \dot{x} \delta x + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} (\delta x)^2 \right]\Bigg|_{x = x_{cl}} dt \quad . \end{aligned} \tag{3.6}$$

Druhou variaci můžeme upravit integrací per partes do tvaru

$$\begin{aligned} & \delta^2 S\left[\delta x(t)\right] = \left(\delta x, \hat{\Lambda} \delta x\right) \quad , \\ & \hat{\Lambda} = -\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \frac{d}{dt} + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x}\right] + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} \frac{d}{dt} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \quad , \end{aligned} \tag{3.7}$$

kde skalární součin je definován jako (máme takto Hilbertův prostor!)

$$(\xi, \eta) = \int_{t_a}^{t_b} \xi(t) \eta(t) \, dt \quad . \tag{3.8}$$

Napišme teď v ortonormální bázi

$$\delta x(t) = \sum_n c_n u_n(t) \quad , \quad \hat{\Lambda} u_n(t) = \lambda_n u_n(t) \quad , \quad u_n(t_a) = u_n(t_b) = 0 \quad . \tag{3.9}$$

Potom je

$$\delta^2 S\left[\delta x(t)\right] = \sum_n \lambda_n c_n^2 \quad , \quad d\left[x(t)\right] = J \prod_n d c_n \tag{3.10}$$

a pro amplitudu přechodu máme

$$K\left(x_b, t_b \,|\, x_a, t_a\right) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\left[x_{cl}(t)\right]\right\} \int \exp\left\{\frac{i}{2\hbar} \sum_n \lambda_n c_n^2\right\} J \prod_n d c_n \quad . \tag{3.11}$$

Jakobián J má tu důležitou vlastnost, že se nemění při volbě báze. Integrál se snadno spočte a je tedy

$$K\left(x_b, t_b \,|\, x_a, t_a\right) = J \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\left[x_{cl}(t)\right]\right\} \prod_n \left(\frac{2\pi i \hbar}{\lambda_n}\right)^{1/2} \quad . \tag{3.12}$$

Zavedeme si něco jako neporušenou úlohu („volná částice“), kde bude

$$\hat{\Lambda}^{(f)} = -\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \frac{d}{dt}\right] \quad , \quad \hat{\Lambda}^{(f)} u_n^{(f)}(t) = \lambda_n^{(f)} u_n^{(f)}(t) \quad , \quad u_n^{(f)}(t_a) = u_n^{(f)}(t_b) = 0 \quad , \tag{3.13}$$

pak konečný výsledek je

$$K(x_b, t_b | x_a, t_a) = K^{(f)}(x_b, t_b | x_a, t_a) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} S^{(f)}\left[x_{cl}^{(f)}(t)\right]\right\} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\left[x_{cl}(t)\right]\right\} \prod_n \left(\frac{\lambda_n^{(f)}}{\lambda_n}\right)^{1/2} \quad . \tag{3.14}$$

4. Propagátor pro kvadratický lagrangián

Předpokládejme, že Lagrangeova funkce je nejvýše kvadratický polynom v rychlosti a souřadnicích, tj. má tvar

$$L(\dot{x}, x, t) = A(t)\dot{x}^2 + B(t)\dot{x}x + C(t)x^2 + D(t)\dot{x} + F(t)x + E(t) \quad . \tag{4.1}$$

Protože můžeme položit

$$B(t)x\dot{x} = \frac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}B(t)x^2\right] - \frac{1}{2}\dot{B}(t)x^2 \quad , \quad D(t)\dot{x} = \frac{d}{dt}\left[D(t)x\right] - \dot{D}(t)x \quad ,$$
$$E(t) = \frac{d}{dt}\int^t E(\tau)\,d\tau \quad , \tag{4.2}$$

stačí uvažovat lagrangiány tvaru

$$L(\dot{x}, x, t) = \frac{1}{2}a(t)\dot{x}^2 - \frac{1}{2}c(t)x^2 + f(t)x \quad . \tag{4.3}$$

Podle (3.6) máme

$$K(x_b, t_b | x_a, t_a) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\left[x_{cl}(t)\right]\right\} \int \exp\left\{\frac{i}{2\hbar}\delta^2 S\left[y(t)\right]\right\} d\left[y(t)\right] \quad ,$$
$$S\left[x_{cl}(t)\right] = \int_{t_a}^{t_b} \left\{\frac{1}{2}a(t)\left[\dot{x}_{cl}(t)\right]^2 - \frac{1}{2}c(t)\left[x_{cl}(t)\right]^2 + f(t)x_{cl}(t)\right\} dt \quad ,$$
$$\delta^2 S\left[y(t)\right] = \int_{t_a}^{t_b} \left[\left.\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\right|_{x = x_{cl}} \dot{y}^2 + \left.\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\right|_{x = x_{cl}} y^2\right] dt = \int_{t_a}^{t_b} \left[a(t)\dot{y}^2 - c(t)y^2\right] dt \quad ,$$
$$y(t_a) = y(t_b) = 0 \quad . \tag{4.4}$$

Klasická trajektorie je řešením Lagrangeovy rovnice

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right] - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\left[a(t)\frac{dx_{cl}(t)}{dt}\right] + c(t)x_{cl}(t) = f(t) \quad . \tag{4.5}$$

S pomocí (4.5) můžeme zjednodušit vyjádření pro klasický účinek

$$S\left[x_{cl}(t)\right]=\frac{1}{2}\left[a(t)\,x_{cl}(t)\frac{d\,x_{cl}(t)}{dt}\Bigg|_{t=t_a}^{t=t_b}+\int_{t_a}^{t_b} f(t)\,x_{cl}(t)\,dt\right] \quad . \tag{4.6}$$

Vzhledem k podmínce $y(t_a)=y(t_b)=0$ máme

$$\int \exp\left\{\frac{i}{2\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\left[a(t)\,\dot{y}^2-c(t)\,y^2\right]dt\right\}d\left[y(t)\right]=G(t_b,t_a) \quad . \tag{4.7}$$

Pro výpočet (4.7) existuje několik metod. Pro jednoduchost budeme v dalším předpokládat $a(t)=m$. Zapišme nejprve funkci $G(t_b,t_a)$ pomocí diskretizace, t.j. rozdělením intervalu t_b-t_a na $N+1$ ekvidistatních částí, přitom $t_j=t_a+j\left(t_b-t_a\right)/\left(N+1\right)$. Je tedy

$$G(t_b,t_a)=\lim_{N\to\infty}\int d\,y_1\ldots d\,y_N\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{(N+1)/2}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N}\left[\frac{m}{2\varepsilon}\left(y_{j+1}-y_j\right)^2-\frac{\varepsilon}{2}c_j\,y_j^2\right]\right\} \quad , \tag{4.8}$$

kde $c_j=c(t_j)$. Zavedeme si značení pro vektor η

$$\eta=\begin{pmatrix} y_1\\ \cdot\\ \cdot\\ y_N\end{pmatrix} \quad , \quad \eta^T=\begin{pmatrix} y_1 & . & . & y_N\end{pmatrix} \tag{4.9}$$

a matici Ω

$$\Omega=\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & 0 & \\ & -1 & 2 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & 0 & & \ddots & 2 & -1\\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix}-\frac{\varepsilon^2}{m}\begin{pmatrix} c_1 & & & & & \\ & c_2 & & \ddots & 0 & \\ & & c_3 & \ddots & & \\ & & & \ddots & & \\ & 0 & & \ddots & c_{N-1} & \\ & & & & & c_N \end{pmatrix} \quad . \tag{4.10}$$

Potom můžeme (4.8) zapsat jako

$$G(t_b,t_a)=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{(N+1)/2}\int d^N\eta\,\exp\left\{i\frac{m}{2\varepsilon\hbar}\eta^T\,\Omega\eta\right\} \quad . \tag{4.11}$$

Podle (2.11) je

$$G(t_b,t_a)=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{1/2}\lim_{N\to\infty}\frac{1}{\left(\varepsilon\det\Omega\right)^{1/2}} \quad . \tag{4.12}$$

Vezme-li z matice Ω jen prvních j řádků a sloupců, označíme příslušný determinant jako D_j. Definujeme si $D_0=1$ a můžeme tak psát

$$D_0 = 1 \quad , \quad D_1 = 2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1 \quad , \quad D_2 = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1\right)\left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_2\right) - 1 = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_2\right) D_1 - D_0 \quad ,$$
$$D_3 = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_3\right)\left[\left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_2\right)\left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1\right) - 1\right] - \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1\right) = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_3\right) D_2 - D_1 \quad , \ldots\ldots. \tag{4.13}$$

Obecně pak

$$D_{j+1} = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_{j+1}\right) D_j - D_{j-1} \quad . \tag{4.14}$$

Označíme ještě $g_j = \varepsilon D_j$, takže můžeme (4.14) a počáteční podmínky zapsat jako

$$\frac{g_{j+1} - 2 g_j + g_{j-1}}{\varepsilon^2} = -\frac{c_{j+1}}{m} g_j \quad ,$$
$$g_0 = 0 \quad , \quad \frac{g_1 - g_0}{\varepsilon} = D_1 - D_0 = 1 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1 \quad . \tag{4.15}$$

V limitě $N \to \infty$, t.j. $\varepsilon \to 0$ přejde (4.15) na

$$\frac{d^2 g(t, t_a)}{dt^2} + \frac{c(t)}{m} g(t, t_a) = 0 \quad , \quad g(t, t_a)\Big|_{t=t_a} = 0 \quad , \quad \left.\frac{d g(t, t_a)}{dt}\right|_{t=t_a} = 1 \tag{4.16}$$

nebo obecněji

$$\frac{d}{dt}\left[a(t) \frac{d g(t, t_a)}{dt}\right] + c(t) g(t, t_a) = 0 \quad , \quad g(t, t_a)\Big|_{t=t_a} = 0 \quad , \quad \left.\frac{d g(t, t_a)}{dt}\right|_{t=t_a} = 1 \tag{4.17}$$

a tedy

$$G(t_b, t_a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar\, g(t_b, t_a)}\right)^{1/2} \quad . \tag{4.18}$$

Jiný způsob výpočtu je založen na rozkladu

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(t) \quad , \tag{4.19}$$

kde z definice (3.7) máme

$$-\left\{\frac{d}{dt}\left[a(t) \frac{d u_n(t)}{dt}\right] + c(t) u_n(t)\right\} = \lambda_n u_n(t) \quad , \quad u_n(t_a) = u_n(t_b) = 0 \quad . \tag{4.20}$$

Potom je podle (3.11) a (3.12)

$$G(t_b, t_a) = \int \exp\left\{\frac{i}{2\hbar} \sum_n \lambda_n c_n^2\right\} J \prod_n d c_n = J \prod_n \left(\frac{2\pi i \hbar}{\lambda_n}\right)^{1/2} \quad . \tag{4.21}$$

5. Harmonický oscilátor

V tomto případě máme

$$a(t)=m \quad , \quad c(t)=m\omega^2 \quad , \quad f(t)=0 \quad . \tag{5.1}$$

Řešení klasické rovnice (4.5) je (s označením $t_b - t_a = T$)

$$x_{cl}(t)=\frac{1}{\sin\omega T}\left[x_a \sin\omega(t_b-t)+x_b \sin\omega(t-t_a)\right] \tag{5.2}$$

a účinek (4.6) je

$$S[x_{cl}]=\frac{m\omega}{\sin\omega T}\left\{\left(x_b^2+x_a^2\right)\cos\omega T-2\,x_a\,x_b\right\} \quad . \tag{5.3}$$

Řešení rovmice (4.16) je

$$g(t,t_a)=\frac{\sin\omega(t-t_a)}{\omega} \quad , \tag{5.4}$$

takže výraz (4.18)

$$G(t_b,t_a)=\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}\right)^{1/2} \quad . \tag{5.5}$$

Propagátor pro harmonický oscilátor jr tedy

$$K(x_b,t_b|x_a,t_a)=\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}\right)^{1/2}\exp\left\{\frac{i\,m\omega}{2\hbar\sin\omega T}\left\{\left(x_b^2+x_a^2\right)\cos\omega T-2\,x_a\,x_b\right\}\right\} \quad . \tag{5.6}$$

Limitním přechodem $\omega\to 0$ získáme z (5.6) propagátor volné částice

$$K(x_b,t_b|x_a,t_a)=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2}\exp\left\{\frac{i\,m(x_b-x_a)^2}{2\hbar T}\right\} \quad . \tag{5.7}$$

Ze základního kursu kvantové mechaniky víme, že pro soustavu s diskretním spektrem energií můžeme zapsat propagátor jako (vlastní vektory hamiltoniánu $\hat{H}|n\rangle=E_n|n\rangle$ jsou ortogonální a normované, tj. $\langle n|k\rangle=\delta_{nk}$)

$$\begin{aligned}K(x,t|y,0)&=\langle x|\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,t\right\}|y\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty}\langle x|n\rangle\langle n|\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,t\right\}|k\rangle\langle k|y\rangle=\\ &\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E_k\,t\right\}\langle x|n\rangle\langle n|k\rangle\langle k|y\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E_n\,t\right\}\langle x|n\rangle\langle n|y\rangle \quad ,\end{aligned} \tag{5.8}$$

takže pro statistickou sumu (imaginární čas $t=-i\tau$) máme

$$Z=\int_{-\infty}^{\infty}K\left(x,-i\tau\middle|x,0\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left\{-\frac{E_n}{\hbar}\tau\right\}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\langle x|n\rangle\right|^2 dx=\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left\{-\frac{E_n}{\hbar}\tau\right\} \quad . \tag{5.9}$$

Podívejme se na vyjádření propagátoru (5.6)

$$Z=\int_{-\infty}^{\infty}K\left(x,-i\tau\,|\,x,0\right)dx=\left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh\omega\tau}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-\frac{m\omega(\cosh\omega\tau-1)}{\hbar\sinh\omega\tau}x^2\right\}dx \quad . \tag{5.10}$$

Integrál vypočteme podle (2.5) a s pomocí identity $\cosh\omega\tau-1=2\left[\sinh\left(\omega\tau/2\right)\right]^2$ máme

$$\begin{aligned}
&Z=\frac{1}{2\sinh\frac{\omega\tau}{2}}=\frac{\exp\left\{-\frac{\omega\tau}{2}\right\}}{1-\exp\{-\omega\tau\}}=\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left\{-\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega\tau\right\} \quad \Rightarrow\\
&E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad .
\end{aligned} \tag{5.11}$$

6. Propagátor ve více dimenzích

Variace účinku je

$$\delta S[x]=\frac{\partial L}{\partial\dot{x}^i}\delta x^i\Big|_{t_a}^{t_b}-\int_{t_a}^{t_b}\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}^i}\right)-\frac{\partial L}{\partial x^i}\right]\delta x^i\,dt \quad . \tag{6.1}$$

Používáme sumační konvenci. V okolí klasické trajektorie píšeme

$$S[x]=S[x_{cl}]+\frac{1}{2}\delta^2 S[\delta x]+\cdots \quad , \tag{6.2}$$

kde $\delta x(t_a)=\delta x(t_b)=0$ a

$$\begin{aligned}
&\delta^2 S[\delta x]=\\
&\int_{t_a}^{t_b}\left[\frac{\partial^2 L}{\partial\dot{x}^i\partial\dot{x}^j}\delta\dot{x}^i\,\delta\dot{x}^j+2\frac{\partial^2 L}{\partial x^i\partial\dot{x}^j}\delta x^i\,\delta\dot{x}^j+\frac{\partial^2 L}{\partial x^i\partial x^j}\delta x^i\,\delta x^j\right]\Bigg|_{x=x_{cl}}dt \quad .
\end{aligned} \tag{6.3}$$

"Rozumné variace" dovolují definovat Hilbertův prostor se skalárním součinem

$$(\xi,\eta)\equiv\int_{t_a}^{t_b}\xi^i(t)\,\eta_i(t)\,dt \quad . \tag{6.4}$$

Druhou variaci pak píšeme jako

$$\delta^2 S[\delta x] = \left(\delta x, \hat{\Lambda}\, \delta x\right) \quad , \tag{6.5}$$

kde

$$\Lambda_{ij} = -\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^i \partial \dot{x}^j}\frac{d}{dt} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^i \partial \dot{x}^j}\right] + \frac{\partial^2 L}{\partial x^i \partial \dot{x}^j}\frac{d}{dt} + \left.\frac{\partial^2 L}{\partial x^i \partial x^j}\right|_{x=x_{cl}} \quad . \tag{6.6}$$

V ortonormální bázi

$$\delta x^i = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n^i(t) \quad , \quad \Lambda_{ij} u_n^j(t) = \lambda_n u_n^i(t) \quad , \quad u_n^i(t_a) = u_n^i(t_b) = 0 \quad . \tag{6.7}$$

Feynmanův integrál se pak snadno spočte ($d\left[\delta x(t)\right] = J \prod_{n=1}^{\infty} d c_n$) jako

$$K\left(x_b, t_b \,|\, x_a, t_a\right) = J \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\left[x_{cl}(t)\right]\right\} \prod_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2\pi i \hbar}{\lambda_n}\right)^{1/2} \quad , \tag{6.8}$$

a po zavedení „volné částice“, charakterizované

$$\begin{gathered} \Lambda_{ij}^{(f)} = -\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^i \partial \dot{x}^j}\frac{d}{dt}\right) \quad , \\ \Lambda_{ij}^{(f)} u_n^{(f)j}(t) = \lambda_n^{(f)} u_n^{(f)i}(t) \quad , \quad u_n^{(f)i}(t_a) = u_n^{(f)i}(t_b) = 0 \end{gathered} \tag{6.9}$$

dostáváme konečný výsledek

$$\begin{gathered} K\left(x_b, t_b \,|\, x_a, t_a\right) = \\ K^{(f)}\left(x_b, t_b \,|\, x_a, t_a\right) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} S\left[x_{cl}^{(f)}(t)\right]\right\} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\left[x_{cl}(t)\right]\right\} \prod_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\lambda_n^{(f)}}{\lambda_n}\right)^{1/2} \quad . \end{gathered} \tag{6.10}$$

Označme $\det\left(\hat{\Lambda}\right) = \prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n$ a zaveďme funkce (*z* je komplexní proměnná)

$$\left(\Lambda_{ij} - z\,\delta_{ij}\right) u_{(k)}^j(z,t) = 0 \quad , \quad u_{(k)}^j(z,t_a) = 0 \quad , \quad \frac{d u_{(k)}^j(z,t_a)}{dt} = \delta_k^j \quad .$$

Potom platí (Coleman, Levit a Smilansky)

$$\det\left(\frac{\hat{\Lambda}^{(f)} - z\hat{1}}{\hat{\Lambda} - z\hat{1}}\right) = \frac{\det\left(u_{(k)}^{(f)\,j}(z,t_b)\right)}{\det\left(u_{(k)}^j(z,t_b)\right)} \quad . \tag{6.11}$$

Pro $z = 0$ je řešením $u_{(k)}^j(0,t)$ Jacobiho pole. S tím pak souvisí množství dalších možných vyjádření.

7. Volná relativistická částice - parametrizace

Značení intervalu ($t=-i\tau$) je $ds=\left(c^2\left(dt\right)^2-\left(d\vec{x}\right)^2\right)^{1/2}=-i\left(c^2\left(d\tau\right)^2+\left(d\vec{x}\right)^2\right)^{1/2}$. Účinek pro volnou částici píšeme jako

$$S=i\int\limits_{\lambda_a}^{\lambda_b}\left[\frac{m}{2\rho(\lambda)}\left(\left(\frac{d\vec{x}}{d\lambda}\right)^2+c^2\left(\frac{d\tau}{d\lambda}\right)^2\right)+\frac{mc^2}{2}\rho(\lambda)\right]d\lambda \quad . \tag{7.1}$$

Výraz (7.1) je invariantní vzhledem k transformaci $\lambda\to f(\lambda)$, $\rho\to\rho f'$. Variace vzhledem k $\rho(\lambda)$ dá

$$\rho(\lambda)=\frac{1}{c}\left[\left(\frac{d\vec{x}}{d\lambda}\right)^2+c^2\left(\frac{d\tau}{d\lambda}\right)^2\right]^{1/2} \quad , \quad S=imc\int\limits_a^b\left[\left(d\vec{x}\right)^2+c^2\left(d\tau\right)^2\right]^{1/2} \quad . \tag{7.2}$$

Zvolíme-li ve (7.1) $\rho(\lambda)=1/c$, dostáváme po obvyklém rozdělení na intervaly a integraci propagátor ve tvaru (dimenze 3+1=4)

$$K_L\left(\vec{x}_b,\tau_b\,|\,\vec{x}_a,\tau_a\right)=\left(\frac{mc}{2\pi\hbar L}\right)^2\exp\left\{-\frac{mc}{2\hbar}\frac{\left(\vec{x}_b-\vec{x}_a\right)^2+c^2\left(\tau_b-\tau_a\right)^2}{L}-\frac{mc}{2\hbar}L\right\} \quad , \tag{7.3}$$

kde $L=\lambda_b-\lambda_a$. Typická situace: integruje se přes nerozlišitelné veličiny, tedy

$$K\left(\vec{x}_b,\tau_b\,|\,\vec{x}_a,\tau_a\right)=\frac{\hbar}{2mc}\int\limits_0^\infty K_L\left(\vec{x}_b,\tau_b\,|\,\vec{x}_a,\tau_a\right)dL \quad , \tag{7.4}$$

odkud

$$K\left(\vec{x}_b,\tau_b\,|\,\vec{x}_a,\tau_a\right)=$$
$$\frac{1}{4\pi^2}\frac{mc}{\hbar\left[\left(\vec{x}_b-\vec{x}_a\right)^2+c^2\left(\tau_b-\tau_a\right)^2\right]^{1/2}}K_1\left(\frac{mc\left[\left(\vec{x}_b-\vec{x}_a\right)^2+c^2\left(\tau_b-\tau_a\right)^2\right]^{1/2}}{\hbar}\right) \quad . \tag{7.5}$$

Vzhledem k asymptotickému vyjádření

$$K_1(z)\approx\left(\frac{\pi}{2z}\right)^{1/2}\exp\{-z\} \tag{7.6}$$

je pro výrazně časupodobné intervaly (nerelativistická teorie)

$$K\left(\vec{x}_b,t_b\,|\,\vec{x}_a,t_a\right)=$$
$$\frac{\hbar}{mc}\exp\left\{-i\frac{mc^2}{\hbar}\left(t_b-t_a\right)\right\}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t_b-t_a\right)}\right)^{3/2}\exp\left\{i\frac{m}{2\hbar}\frac{\left(\vec{x}_b-\vec{x}_a\right)^2}{t_b-t_a}\right\} \quad . \tag{7.7}$$

Interakce mimo světelný kužel – nikoliv, důležité jsou komutátory resp. antikomutátory.

8. Regularizace pomocí Riemannovy ζ funkce

Riemannova ζ funkce je definována jako součet nekonečné řady

$$\zeta(s)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^s} \quad , \quad \mathrm{Re}s>1 \quad . \tag{8.1}$$

Ve fyzice se s ní setkáváme při výpočtu veličin souvisejících se statistikou. Pro Boseho – Einsteinovu statistiku

$$\int_0^{\infty}\frac{x^{s-1}}{\exp(x)-1}dx=\Gamma(s)\zeta(s) \quad . \tag{8.2}$$

Důkaz spočívá ve vyjádření integrandu pomocí nekonečné řady a záměně integrační proměnné

$$\int_0^{\infty}\frac{x^{s-1}}{\exp(x)-1}dx=\int_0^{\infty}x^{s-1}\exp(-x)\sum_{m=0}^{\infty}\exp(-m\,x)\,dx=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^s}\int_0^{\infty}t^{s-1}\exp(-t)\,dt \quad . \tag{8.3}$$

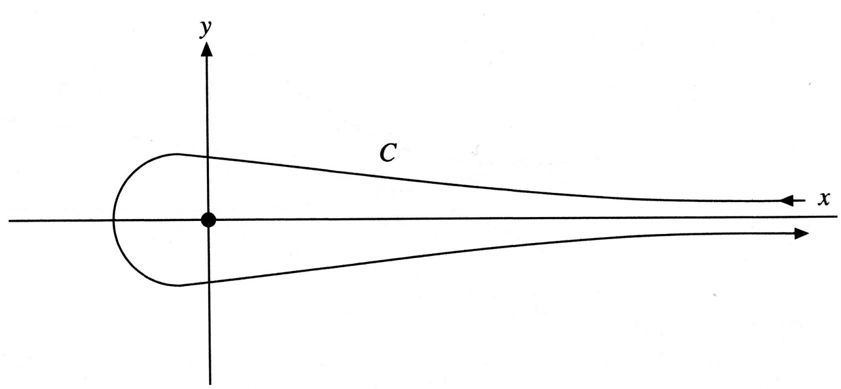
Podobně pro Fermiho – Diracovu statistiku

$$\int_0^{\infty}\frac{x^{s-1}}{\exp(x)+1}dx=\left(1-2^{1-s}\right)\Gamma(s)\zeta(s) \quad . \tag{8.4}$$

Při důkazu rozšíříme integrand v (8.4) výrazem $\exp(x)-1$ a postupujeme jako v předchozím případě.

Při rozšíření definice ζ funkce na celou komplexní rovinu proměnné s postupujeme takto: vezmeme integrál podél křivky v komplexní rovině, znázorněné na obrázku

$$I=\oint_C\frac{(-z)^{s-1}\exp(-z)}{1-\exp(-z)}dz \quad . \tag{8.5}$$



Důležité je, že oblast uzavřená křivkou C neobsahuje body $\pm 2n\pi i,\quad n=1,2,\ldots$ Pokud je $\mathrm{Re}s>1$, můžeme křivku deformovat tak, že integrujeme podél kladné části reálné osy s hodnotou $\arg(-z)=-\pi$, potom po kružnici velmi malého poloměru kolem počátku a opět podél kladné části reálné osy s hodnotou $\arg(-z)=\pi$, dostáváme tak

$$I=\left\{\exp\left[\pi i(s-1)\right]-\exp\left[-\pi i(s-1)\right]\right\}\int_0^\infty \frac{x^{s-1}\exp(-x)}{1-\exp(-x)}dx \quad . \tag{8.6}$$

Porovnání (8.6) s (8.2) a využití vztahu

$$\Gamma(s)\Gamma(1-s)=\frac{\pi}{\sin(\pi s)} \tag{8.7}$$

můžeme tedy psát

$$\zeta(s)=-\frac{\Gamma(1-s)}{2\pi i}\oint_C \frac{(-z)^{s-1}\exp(-z)}{1-\exp(-z)}dz \quad . \tag{8.8}$$

Tato funkce je analytickým prodloužením funkce (8.1) do celé komplexní roviny proměnné *s*. Riemannovu funkci vyjádřil Hermite jako

$$\zeta(s)=\frac{1}{2}+\frac{1}{s-1}+2\int_0^\infty \left(1+t^2\right)^{-s/2}\sin(s\arctan t)\frac{dt}{\exp(2\pi t)-1} \quad . \tag{8.9}$$

Pro $s=0$ máme

$$\zeta(0)=-\frac{1}{2} \quad , \quad \zeta'(0)=-\frac{1}{2}\ln(2\pi) \quad . \tag{8.10}$$

Poněkud obecnější je Hurwitzova ζ funkce

$$\zeta(s,a)=\sum_{n=0}^\infty \frac{1}{(n+a)^s} \quad . \tag{8.11}$$

Je zřejmé, že

$$\zeta(s)=\zeta(s,1) \quad . \tag{8.12}$$

Pro Hurwitzovu funkci má Hermiteova representace tvar

$$\zeta(s,a)=\frac{a^{-s}}{2}+\frac{a^{1-s}}{s-1}+2\int_0^\infty \left(a^2+t^2\right)^{-s/2}\sin\left(s\arctan\frac{t}{a}\right)\frac{dt}{\exp(2\pi t)-1} \quad . \tag{8.13}$$

Zobecněná Riemannova funkce pro operátor $\hat{A}$ s vlastními hodnotami λ_n je definována jako

$$\zeta(s)=\mathrm{Tr}\hat{A}^{-s}=\sum_n \frac{1}{\lambda_n^s} \quad . \tag{8.14}$$

Potom je

$$\det\hat{A}=\prod_n \lambda_n=\prod_n \exp(\ln\lambda_n)=\exp\left(\sum_n \ln\lambda_n\right) \quad . \tag{8.15}$$

S uvážením

$$\left.\frac{d}{ds}\frac{1}{\lambda_n^s}\right|_{s=0}=\left.\frac{d}{ds}\exp(-s\ln\lambda_n)\right|_{s=0}=-\ln\lambda_n \tag{8.16}$$

můžeme ve (8.15) psát

$$\det\hat{A}=\exp\left(-\zeta^{/}(0)\right) \quad . \tag{8.17}$$

Máme-li výraz typu $\det\left(\mu\hat{A}\right)$, píšeme

$$\begin{aligned}\ln\det\left(\mu\hat{A}\right)=\ln\prod_n(\mu\lambda_n)=\ln\left(\prod_n\mu\prod_n\lambda_n\right)=\\ \ln\prod_n\mu+\ln\prod_n\lambda_n=\ln\mu\sum_n 1+\ln\prod_n\lambda_n\end{aligned} \tag{8.18}$$

a s regularizací pomocí zobecněné ζ funkce

$$\ln\mu\det\hat{A}=\zeta(0)\ln\mu-\zeta^{/}(0) \quad . \tag{8.19}$$

9. Funkcionální derivace

Zobecnění pojmu derivace u funkce je u funkcionálu výraz

$$\frac{\delta S[\phi]}{\delta\phi(y)}=\lim_{h\to 0}\frac{S\left[\phi(x)+h\delta(x-y)\right]-S\left[\phi(x)\right]}{h} \quad . \tag{9.1}$$

„Obrazně“ pro funkci N proměnných máme

$$F\left(x_1+\xi_1,\ldots,x_N+\xi_N\right)=\sum_{k=1}^{N}\frac{\partial F}{\partial x_k}\xi_k \tag{9.2}$$

a pro funkcionál

$$F[x+\xi]=\int\frac{\delta F[x]}{\delta x(t)}\xi(t)\,dt \quad . \tag{9.3}$$

Definujme

$$\left\langle F[x]\right\rangle=\int F[x]\exp\left\{\frac{i}{h}S[x]\right\}d[x] \quad . \tag{9.4}$$

Potom rozepsáním identity (odečtení stejných veličin)

$$0=\left\langle F[x+\xi]\right\rangle-\left\langle F[x]\right\rangle=$$
$$\iint\left[\frac{\delta F[x]}{\delta x(t)}+\frac{i}{\hbar}F[x]\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)}\right]\xi(t)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S[x]\right\}dt\,d[x] \quad . \tag{9.5}$$

Protože variace $\xi(t)$ je libovolná, máme

$$\left\langle\frac{\delta F[x]}{\delta x(t)}\right\rangle=-\frac{i}{h}\left\langle F[x]\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)}\right\rangle \tag{9.6}$$

nebo v diskrétním tvaru

$$\left\langle\frac{\partial F}{\partial x_n}\right\rangle=-\frac{i}{h}\left\langle F\frac{\partial S}{\partial x_n}\right\rangle \quad . \tag{9.7}$$

Vezměme ještě jako poslední příklad účinek v klasické mechanice

$$S[x]=\int_{t_a}^{t_b}L\left(\dot{x}(t),x(t),t\right)dt \quad . \tag{9.8}$$

Nezapomeňme, že v koncových bodech integračního intervalu je funkce pevně daná. Je pak obvyklým postupem

$$S[x+\xi]-S[x]=\int_{t_a}^{t_b}L\left(\dot{x}(t)+\dot{\xi}(t),x(t)+\xi(t),t\right)dt-\int_{t_a}^{t_b}L\left(\dot{x}(t),x(t),t\right)dt=$$
$$\int_{t_a}^{t_b}\left\{\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\dot{\xi}(t)+\frac{\partial L}{\partial x}\xi(t)\right\}dt+\cdots=\int_{t_a}^{t_b}\left\{\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right)\right\}\xi(t)\,dt+\cdots \quad \Rightarrow \tag{9.9}$$
$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)}=\frac{\partial L\left(\dot{x}(t),x(t),t\right)}{\partial x}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L\left(\dot{x}(t),x(t),t\right)}{\partial\dot{x}}\right) \quad .$$

Napišme si účinek v diskretizovaném tvaru jako

$$S=$$
$$\tau\sum_{k=0}^{N-1}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\vec{x}_{k+1}-\vec{x}_k}{\tau}\right)^2+\frac{e}{2}\left(\frac{\vec{x}_{k+1}-\vec{x}_k}{\tau}\right)\cdot\left(\vec{A}\left(\vec{x}_{k+1}\right)+\vec{A}\left(\vec{x}_k\right)\right)-\frac{e}{2}\left(\Phi\left(\vec{x}_{k+1}\right)+\Phi\left(\vec{x}_k\right)\right)\right] \quad . \tag{9.10}$$

Potom je

$$\frac{1}{\tau}\frac{\partial S}{\partial\vec{x}_n}=-m\frac{\vec{x}_{n+1}-2\vec{x}_n+\vec{x}_{n-1}}{\tau^2}+e\frac{\vec{x}_{n+1}-\vec{x}_{n-1}}{2\tau}\times\left[\frac{\partial}{\partial\vec{x}_n}\times\vec{A}\left(\vec{x}_n\right)\right]-e\frac{\partial\Phi\left(\vec{x}_n\right)}{\partial\vec{x}_n}$$
$$+e\left[\frac{\vec{x}_{n+1}-\vec{x}_{n-1}}{2\tau}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{x}_n}\right]\vec{A}\left(\vec{x}_n\right)-e\frac{\vec{A}\left(\vec{x}_{n+1}\right)-\vec{A}\left(\vec{x}_{n-1}\right)}{2\tau} \tag{9.11}$$

a tedy s označením

$$\vec{E}(\vec{x}_n) = -\frac{\partial\Phi(\vec{x}_n)}{\partial\vec{x}_n} - \left(\frac{\vec{A}(\vec{x}_{n+1}) - \vec{A}(\vec{x}_{n-1})}{2\tau} - \left[\frac{\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_{n-1}}{2\tau}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{x}_n}\right]\vec{A}(\vec{x}_n)\right) \quad ,$$
$$\vec{B}(\vec{x}_n) = \frac{\partial}{\partial\vec{x}_n}\times\vec{A}(\vec{x}_n) \tag{9.12}$$

dostáváme

$$\left\langle\frac{\partial F(\vec{x}_i)}{\partial\vec{x}_n}\right\rangle = \frac{i\tau}{\hbar}\left\langle F(\vec{x}_i)\cdot\left(m\frac{\vec{x}_{n+1} - 2\vec{x}_n + \vec{x}_{n-1}}{\tau^2} - e\frac{\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_{n-1}}{2\tau}\times\vec{B}(\vec{x}_n) - e\vec{E}(\vec{x}_n)\right)\right\rangle \quad . \tag{9.13}$$

Pro $F = 1$ dostáváme Ehrenfestův teorém

$$m\left\langle\frac{\vec{x}_{n+1} - 2\vec{x}_n + \vec{x}_{n-1}}{\tau^2}\right\rangle = e\left\langle\frac{\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_{n-1}}{2\tau}\times\vec{B}(\vec{x}_n) + \vec{E}(\vec{x}_n)\right\rangle$$
$$\Rightarrow \quad m\left\langle\frac{d\vec{v}}{dt}\right\rangle = e\left\langle\vec{v}\times\vec{B}(\vec{x}) + \vec{E}(\vec{x})\right\rangle \quad . \tag{9.14}$$

Pro $F = \vec{x}_n$ máme komutační relace pro souřadnici a kanonicky sdružený impuls (časové uspořádání, napravo dřívější)

$$\left\langle\frac{\hbar}{i}\right\rangle = \left\langle\left(m\frac{\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n}{\tau} - \frac{e}{2}\vec{x}_{n+1}\times\vec{B}(\vec{x}_n)\right)\vec{x}_n - \vec{x}_n\left(\frac{\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1}}{\tau} - \frac{e}{2}\vec{x}_{n-1}\times\vec{B}(\vec{x}_n)\right)\right\rangle$$
$$\Rightarrow \quad \left\langle\frac{\hbar}{i}\right\rangle = \left\langle\left(m\vec{v} + e\vec{A}\right)\vec{x} - \vec{x}\left(m\vec{v} + e\vec{A}\right)\right\rangle \quad . \tag{9.15}$$

10. Funkcionální derivace podruhé

Hilbertův prostor funkcí kvadraticky integrovatelných na otevřené podmnožině $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ označíme $\mathcal{L}^2(\Omega)$. Prvky $\mathcal{L}^2(\Omega)$ budeme označovat malými písmeny, funkce na $\mathcal{L}^2(\Omega)$ velkými písmeny, tj.

$$f: \quad \mathbb{R}^m \supset \Omega \quad \to \quad R \quad ,$$
$$F: \quad \mathcal{L}^2(\Omega) \quad \to \quad R \quad . \tag{10.1}$$

Skalární součin má obvyklé vyjádření

$$\langle f|u\rangle \equiv \int_\Omega f(\vec{x})u(\vec{x})\,d^m\vec{x} \tag{10.2}$$

a výpočet funkce nad prvkem značíme hranatými závorkami $F[f]$.

Definujeme funkcionální derivaci jako

$$\left\langle \frac{\delta F[f]}{\delta f} \middle| u \right\rangle \equiv \int_{\Omega} \frac{\delta F[f]}{\delta f(\vec{x})} u(\vec{x})\, d^m\vec{x} \equiv \frac{d}{dt} F[f+tu]\Big|_{t=0} \quad . \tag{10.3}$$

Velmi speciální volbou je

$$E_{\vec{y}}[f] = f(\vec{y}) \quad . \tag{10.4}$$

Potom máme ze (10.3)

$$\begin{gathered}\int_{\Omega} \frac{\delta E_{\vec{y}}[f]}{\delta f(\vec{x})} u(\vec{x})\, d^m\vec{x} \equiv \frac{d}{dt}\big(f(\vec{y}) + t\,u(\vec{y})\big)\Big|_{t=0} = u(\vec{y}) \quad \Rightarrow \\ \frac{\delta E_{\vec{y}}[f]}{\delta f(\vec{x})} = \delta(\vec{x}-\vec{y}) \quad .\end{gathered} \tag{10.5}$$

Se stejnou konvencí, jakou píšeme

$$dx^i\left(\frac{\partial}{\partial x^j}\right) = \delta^i_j \quad \approx \quad \frac{\partial x^i}{\partial x^j} = \delta^i_j \tag{10.6}$$

budeme psát

$$\frac{\delta E_{\vec{y}}[f]}{\delta f(\vec{x})} = \delta(\vec{x}-\vec{y}) \quad \approx \quad \frac{\delta f(\vec{y})}{\delta f(\vec{x})} = \delta(\vec{x}-\vec{y}) \quad . \tag{10.7}$$

Zobrazení funkce na její parciální derivaci

$$E_{\vec{y},i}[f] = \frac{\partial f(\vec{y})}{\partial y^i} = \partial_i f(\vec{y}) \tag{10.8}$$

vede k

$$\begin{gathered}\int_{\Omega} \frac{\delta E_{\vec{y},i}[f]}{\delta f(\vec{x})} u(\vec{x})\, d^m\vec{x} \equiv \frac{d}{dt}\big(\partial_i f(\vec{y}) + t\,\partial_i u(\vec{y})\big)\Big|_{t=0} = \partial_i u(\vec{y}) \quad \Rightarrow \\ \frac{\delta E_{\vec{y},i}[f]}{\delta f(\vec{x})} = -\partial_i \delta(\vec{x}-\vec{y}) \quad .\end{gathered} \tag{10.9}$$

Povšimněme si, že ve vztahu (10.9) mlčky předpokládáme $u\big|_{\partial\Omega} = 0$, obecnější chování funkce u na hranici by vedlo k mnohem komplikovanějším výrazům. Dále je důležité při zkráceném značení vždy vědět, podle které proměnné derivujeme, ve (10.9) je v prvním řádku $\partial_i = \partial/\partial y^i$, ve druhém řádku $\partial_i = \partial/\partial x^i$. Ověříme si na jednorozměrném příkladě

$$E_t^n[x]=x^{(n)}(t) \quad , \quad \int \frac{\delta E_t^n[x]}{\delta x(\tau)} u(\tau)\, d\tau =$$
$$\frac{d}{d\xi}\left\{x^{(n)}(t)+\xi u^{(n)}(t)\right\}\Big|_{\xi=0} = u^{(n)}(t) \quad \Rightarrow \tag{10.10}$$
$$\frac{\delta x^{(n)}(t)}{\delta x(\tau)} = (-1)^n \frac{d^{(n)}\delta(t-\tau)}{d\tau^n} \quad .$$

Standardní variační úloha vychází z Lagrangeovy funkce

$$L[f]=L\left(\vec{x}, f(\vec{x}), \partial_i f(\vec{x})\right) \quad . \tag{10.11}$$

Variaci budeme psát jako

$$\frac{\delta L[f]}{\delta f(\vec{y})} = \frac{\partial L}{\partial x^i}\frac{\delta x^i}{\delta f(\vec{y})} + \frac{\partial L}{\partial f(\vec{x})}\frac{\delta f(\vec{x})}{\delta f(\vec{y})} + \frac{\partial L}{\partial \partial_i f(\vec{x})}\frac{\delta \partial_i f(\vec{x})}{\delta f(\vec{y})} =$$
$$\frac{\partial L}{\partial f(\vec{x})}\delta(\vec{x}-\vec{y}) + \frac{\partial L}{\partial\partial_i f(\vec{x})}\frac{\partial\delta(\vec{x}-\vec{y})}{\partial x^i} \quad . \tag{10.12}$$

Dosazením do (10.3) dostáváme

$$\left\langle \frac{\delta F[f]}{\delta f} \middle| u \right\rangle \equiv \int_\Omega \left\{ \frac{\partial L}{\partial f(\vec{x})}\delta(\vec{x}-\vec{y}) + \frac{\partial L}{\partial\partial_i f(\vec{x})}\partial_i \delta(\vec{x}-\vec{y}) \right\} u(\vec{x})\, d^m\vec{x} =$$
$$\int_\Omega \left\{ \frac{\partial L}{\partial f(\vec{x})} - D_i \frac{\partial L}{\partial\partial_i f(\vec{x})} \right\} \delta(\vec{x}-\vec{y}) u(\vec{x})\, d^m\vec{x} = \left\{ \frac{\partial L}{\partial f(\vec{y})} - D_i \frac{\partial L}{\partial\partial_i f(\vec{y})} \right\} u(\vec{y}) \quad . \tag{10.13}$$

V úplné analogii s rozvojem funkce více proměnných máme i pro funkcionály “Taylorův rozvoj”. Píšeme (pro $m=1$)

$$S[f]=S[f_0]+\int_\Omega \frac{\delta S[f]}{\delta f(y_1)}\bigg|_{f=f_0} \left\{f(y_1)-f_0(y_1)\right\} dy_1 +$$
$$\frac{1}{2!}\iint_\Omega \frac{\delta^2 S[f]}{\delta f(y_1)\delta f(y_2)}\bigg|_{f=f_0} \left\{f(y_1)-f_0(y_1)\right\}\left\{f(y_2)-f_0(y_2)\right\} dy_1\, dy_2 + \cdots \tag{10.14}$$

Jako příklad vezměme účinek volné částice

$$S=-mc\int_{t_a}^{t_b} \left\{ c^2 - \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 \right\}^{1/2} dt \quad . \tag{10.15}$$

Podle (10.14)

$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = \int_{t_a}^{t_b} \left\{ \frac{\partial L}{\partial x(t_1)} \delta(t_1 - t) + \frac{\partial L}{\partial x'(t_1)} \frac{d\delta(t_1 - t)}{dt_1} \right\} dt_1 = \\ -\frac{d}{dt} \frac{m c\, x'(t)}{\left\{c^2 - x'^2(t)\right\}^{1/2}} = -\frac{m c^3\, x''(t)}{\left\{c^2 - x'^2(t)\right\}^{3/2}} \quad . \tag{10.16}$$

Pro klasickou trajektorii

$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = 0 \quad \Rightarrow \quad x''_{cl}(t) = 0 \quad \Rightarrow \quad x_{cl}(t) = v\,t + x_0 \quad . \tag{10.17}$$

Dále pak

$$\frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(\bar{t})\,\delta x(t)} = -\frac{m c^3}{\left\{c^2 - x'^2(t)\right\}^{3/2}} \frac{\delta x''(t)}{\delta x(\bar{t})} - m c^3\, x''(t) \frac{\delta}{\delta x(\bar{t})} \frac{1}{\left\{c^2 - x'^2(t)\right\}^{3/2}} = \\ -\frac{m c^3}{\left\{c^2 - x'^2(t)\right\}^{3/2}} \frac{d^2 \delta(t - \bar{t})}{d\bar{t}^2} - m c^3\, x''(t) \frac{\delta}{\delta x(\bar{t})} \frac{1}{\left\{c^2 - x'^2(t)\right\}^{3/2}} \quad . \tag{10.18}$$

Pro klasickou trajektorii

$$\left. \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(\bar{t})\,\delta x(t)} \right|_{x_{cl}} = -\frac{m c^3}{\left(c^2 - v^2\right)^{3/2}} \frac{d^2 \delta(t - \bar{t})}{d\bar{t}^2} \tag{10.19}$$

Přírůstek účinku je

$$\frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b}\int_{t_a}^{t_b} \left. \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(\bar{t})\,\delta x(t)} \right|_{x_{cl}} \left[x(t) - x_{cl}(t)\right]\left[x(\bar{t}) - x_{cl}(\bar{t})\right] d\bar{t}\, dt = \\ -\frac{m c^3}{2\left(c^2 - v^2\right)^{3/2}} \int_{t_a}^{t_b}\int_{t_a}^{t_b} \frac{d^2 \delta(t - \bar{t})}{d\bar{t}^2} \left[x(t) - x_{cl}(t)\right]\left[x(\bar{t}) - x_{cl}(\bar{t})\right] d\bar{t}\, dt = \\ \frac{m c^3}{2\left(c^2 - v^2\right)^{3/2}} \int_{t_a}^{t_b} \left[x'(t) - v\right]^2 dt \quad . \tag{10.20}$$

Klasický účinek je

$$S[x_{cl}] = -m c \left(c^2 - v^2\right)^{1/2} \left(t_b - t_a\right) \quad . \tag{10.21}$$

11. Vytvořující funkcionál

Spočteme amplitudu pravděpodobnosti přechodu pro případ, kdy na soustavu, popsanou původně Lagrangeovou funkcí působí ještě nějaká vnější síla (v kvantové terminologii proud)

$$K^{(J)}\left(q_b,t_b\middle|q_a,t_a\right)=\int \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S^{(J)}\right\}d\left[q(t)\right] \quad ,$$
$$S^{(J)}=S+S_J=\int_{t_a}^{t_b}L\left(q(t),\dot q(t)\right)dt+\int_{t_a}^{t_b}J(t)q(t)\,dt \quad . \tag{11.1}$$

Připomeňme, že pro $J(t)=0$

$$\left\langle q_b,t_b\middle|q_a,t_a\right\rangle=K\left(q_b,t_b\middle|q_a,t_a\right)=\left\langle q_b\right|\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat H\left(t_b-t_a\right)\right\}\left|q_a\right\rangle=$$
$$\sum_{n=0}^{\infty}\left\langle q_b\middle|n\right\rangle\exp\left\{-iE_n\left(t_b-t_a\right)\right\}\left\langle n\middle|q_a\right\rangle \quad . \tag{11.2}$$

Pokud bude $J(t)\neq 0$ pouze v intervalu $t_a\le t\le t_b$, můžeme pro $t_i<t_a$ a $t_f>t_b$ psát

$$K^{(J)}\left(q_f,t_f\middle|q_i,t_i\right)=\iint dq_b\,dq_a\,K\left(q_f,t_f\middle|q_b,t_b\right)K^{(J)}\left(q_b,t_b\middle|q_a,t_a\right)K\left(q_a,t_a\middle|q_i,t_i\right) \quad . \tag{11.3}$$

Vhodný limitní přechod

$$t_i\to-(1-i\varepsilon)\infty \quad , \quad t_f\to(1-i\varepsilon)\infty \quad , \quad \varepsilon>0 \tag{11.4}$$

vybere základní stavy – ostatní členy rychle oscilují, takže

$$\lim_{\substack{t_i\to-(1-i\varepsilon)\infty\\ t_f\to(1-i\varepsilon)\infty}}K\left(q_f,t_f\middle|q_b,t_b\right)K\left(q_a,t_a\middle|q_i,t_i\right)\exp\left\{i\frac{E_0}{\hbar}\left(t_f-t_i\right)\right\}=$$
$$N\psi_0^*\left(q_b,t_b\right)\psi_0\left(q_a,t_a\right) \quad , \quad N=\psi_0^*\left(q_i\right)\psi_0\left(q_f\right) \quad . \tag{11.5}$$

Vytvořující funkcionál definujeme jako

$$W[J]=\lim_{\substack{t_i\to-(1-i\varepsilon)\infty\\ t_f\to(1-i\varepsilon)\infty}}\frac{1}{N}K^{(J)}\left(q_f,t_f\middle|q_i,t_i\right) \tag{11.6}$$

a jeho explicitní vyjádření je tedy

$$W[J]=\iint dq_b\,dq_a\,\psi_0^*\left(q_b,t_b\right)K^{(J)}\left(q_b,t_b\middle|q_a,t_a\right)\psi_0\left(q_a,t_a\right) \quad . \tag{11.7}$$

Přepsáním dostáváme jiný častý výraz pro vytvořující funkcionál

$$W[J]=\iint dq_b\,dq_a\left\langle 0\middle|q_b,t_b\right\rangle\left\langle q_b,t_b\middle|q_a,t_a\right\rangle^{(J)}\left\langle q_a,t_a\middle|0\right\rangle=\left\langle 0\middle|0\right\rangle^{(J)} \quad . \tag{11.8}$$

V dalším uvidíme, že pro funkcionální derivaci $W[J]$ platí

$$\left(\frac{\hbar}{i}\right)^n \frac{\delta^{(n)}W[J]}{\delta J(t_1)\ldots\delta J(t_n)}\bigg|_{J=0} = \langle 0|\hat{T}\{\hat{q}(t_1)\ldots\hat{q}(t_n)\}|0\rangle \quad . \tag{11.9}$$

Operátor chronologického uspořádání $\hat{T}$ působí na operátory jako

$$\hat{T}\left\{\hat{O}(t_1)\hat{O}(t_2)\right\} = \begin{cases} \hat{O}(t_1)\hat{O}(t_2) & t_1 \geq t_2 \\ \hat{O}(t_2)\hat{O}(t_1) & t_2 \geq t_1 \end{cases} \quad . \tag{11.10}$$

Pro důkaz (11.9) postupujeme takto: Platí

$$\int q(t_b)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(t_b,t_a)\right\}d[q(t)] = q_b \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(t_b,t_a)\right\}d[q(t)] = q_b\langle q_b,t_b|q_a,t_a\rangle \tag{11.11}$$

a faktorizací pak (předpokládáme $t_a < t_1 < t_b$)

$$\begin{aligned}
&\int q(t_1)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(t_b,t_a)\right\}d[q(t)] = \\
&\int dq_1\left[\int \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(t_b,t_1)\right\}d[q(t)]\int q(t_1)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(t_1,t_a)\right\}d[q(t)]\right] = \\
&\int dq_1\langle q_b,t_b|q_1,t_1\rangle q_1\langle q_1,t_1|q_a,t_a\rangle = \int dq_1\langle q_b,t_b|\hat{q}(t_1)|q_1,t_1\rangle\langle q_1,t_1|q_a,t_a\rangle \quad .
\end{aligned} \tag{11.12}$$

Vynecháním rozkladu jednotkového operátoru v posledním výrazu dostáváme konečně

$$\int q(t_1)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(t_b,t_a)\right\}d[q(t)] = \langle q_b,t_b|\hat{q}(t_1)|q_a,t_a\rangle \quad . \tag{11.13}$$

Pro více operátorů postupujeme obdobně, pouze faktorizace má více činitelů a je zřejmé, že pořadí operátorů je zleva doprava od nejpozdějšího k nejčasnějšímu okamžiku. Důkaz vztahu (11.9) je dokončen, uvědomíme-li si, že výraz $q(t_1)\ldots q(t_n)$ v integrandu dráhového integrálu vznikne právě uvedenou funkcionální derivací. Greenova funkce je speciálním případem (11.9)

$$G(t_1,t_2) = \frac{\langle 0|\hat{T}\{\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)\}|0\rangle}{\langle 0|0\rangle} = -\frac{\hbar^2}{W[0]}\frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t_1)\delta J(t_2)}\bigg|_{J=0} \quad . \tag{11.14}$$

12. Schwingerova formulace kvantové mechaniky

Vycházíme ze vztahu (9.6), který si zapíšeme jako

$$\int \frac{\delta}{\delta q(\tau)}\left\{F[q]\exp\left(\frac{i}{\hbar}S[q]\right)\right\}d[q(\tau)] = 0 \quad . \tag{12.1}$$

Operátor časového uspořádání rozšíříme na

$$\hat{T}^*\left\{\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)\right\} = \frac{d}{dt_2}\left[\hat{T}\left\{\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)\right\}\right] \quad . \tag{12.2}$$

Tento operátor vzniká přirozeně při zápisu (předpokládáme $t_a < t_1, t_2 < t_b$)

$$\begin{aligned}
&\int q(t_1)\dot{q}(t_2)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(t_b,t_a)\right\}d\left[q(t)\right] = \\
&\lim_{\varepsilon\to 0}\int q(t_1)\frac{q(t_2+\varepsilon)-q(t_2)}{\varepsilon}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(t_b,t_a)\right\}d\left[q(t)\right] = \\
&\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\varepsilon}\left\langle q_b,t_b\right|\hat{T}\left\{\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2+\varepsilon)\right\}-\hat{T}\left\{\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)\right\}\left|q_a,t_a\right\rangle = \\
&\frac{d}{dt_2}\left\langle q_b,t_b\right|\hat{T}\left\{\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)\right\}\left|q_a,t_a\right\rangle \quad .
\end{aligned} \tag{12.3}$$

Rozepsáním (12.1) dostáváme Schwingerovu základní rovnici

$$\frac{i}{\hbar}\left\langle q_b,t_b\right|\hat{T}^*\left\{F[\hat{q}]\frac{\delta S[\hat{q}]}{\delta\hat{q}(\tau)}\right\}\left|q_a,t_a\right\rangle = -\left\langle q_b,t_b\right|\hat{T}^*\left\{\frac{\delta F[\hat{q}]}{\delta\hat{q}(\tau)}\right\}\left|q_a,t_a\right\rangle \quad . \tag{12.4}$$

Pro $F[\hat{q}]=1$ získáme obecné vyjádření Ehrenfestova teorému, pro $F[\hat{q}]=\hat{q}(t_1)$ komutační relace. Máme

$$\begin{aligned}
&\left\langle q_b,t_b\right|\hat{T}^*\left\{\frac{\delta S[\hat{q}]}{\delta\hat{q}(t_1)}\right\}\left|q_a,t_a\right\rangle = 0 \quad , \\
&\left\langle q_b,t_b\right|\hat{T}^*\left\{\hat{q}(t_1)\frac{\delta S[\hat{q}]}{\delta\hat{q}(t_2)}\right\}\left|q_a,t_a\right\rangle = i\hbar\left\langle q_b,t_b\right|\frac{\delta\hat{q}(t_1)}{\delta\hat{q}(t_2)}\left|q_a,t_a\right\rangle
\end{aligned} \tag{12.5}$$

a protože (12.5) platí pro libovolné stavy, musí být

$$\frac{\delta S[\hat{q}]}{\delta\hat{q}(t_1)} = 0 \quad , \quad \hat{T}^*\left\{\hat{q}(t_1)\frac{\delta S[\hat{q}]}{\delta\hat{q}(t_2)}\right\} = i\hbar\,\delta(t_1-t_2) \quad . \tag{12.6}$$

Pro účinek

$$S = \int_{t_a}^{t_b}\left[\frac{m}{2}\dot{q}^2 - U(q)\right]dt \tag{12.7}$$

dostáváme

$$\frac{\delta S[\hat{q}]}{\delta \hat{q}(t_1)} = \int_{t_a}^{t_b} \left[m\dot{\hat{q}}(t) \frac{d\delta(t-t_1)}{dt} - \frac{\partial U(\hat{q}(t))}{\partial \hat{q}(t)} \delta(t-t_1) \right] dt \quad \Rightarrow$$
$$\frac{\delta S[\hat{q}]}{\delta \hat{q}(t_1)} = -\left[m\frac{d^2 \hat{q}(t_1)}{dt_1^2} + \frac{\partial U(\hat{q}(t_1))}{\partial \hat{q}(t_1)} \right] = 0 \quad . \tag{12.8}$$

a

$$\hat{T}^* \left\{ \hat{q}(t_1) \left[m\frac{d^2 \hat{q}(t_2)}{dt_2^2} + \frac{\partial U(\hat{q}(t_2))}{\partial \hat{q}(t_2)} \right] \right\} = -i\hbar\,\delta(t_1 - t_2) \quad . \tag{12.9}$$

Nyní uvidíme rozdíl mezi operátory $\hat{T}$ a $\hat{T}^*$. Máme

$$\hat{T}^* \left\{ \hat{q}(t_1) \frac{d^2 \hat{q}(t_2)}{dt_2^2} \right\} = \frac{d^2}{dt_2^2} \hat{T}\left\{ \hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2) \right\} =$$
$$\frac{d^2}{dt_2^2}\left[\theta(t_1-t_2)\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2) + \theta(t_2-t_1)\hat{q}(t_2)\hat{q}(t_1) \right] =$$
$$\frac{d}{dt_2}\left[\theta(t_1-t_2)\hat{q}(t_1)\frac{d}{dt_2}\hat{q}(t_2) + \theta(t_2-t_1)\frac{d}{dt_2}\hat{q}(t_2)\hat{q}(t_1) \right] =$$
$$\hat{T}\left\{ \hat{q}(t_1)\frac{d^2}{dt_2^2}\hat{q}(t_2) \right\} - \delta(t_1-t_2)\left[\hat{q}(t_1), \frac{d\hat{q}(t_2)}{dt_2} \right] \quad . \tag{12.10}$$

Dosazením z (12.10) a (12.8) do (12.9) dostáváme kanonické komutační relace

$$\left[\hat{q}(t), m\dot{\hat{q}}(t) \right] = \left[\hat{q}(t), \hat{p}(t) \right] = i\hbar \quad . \tag{12.11}$$

13. Vytvořující funkcionál pro harmonický oscilátor

Připomeňme, že pro $J(t)=0$

$$K(q_2,t_2|q_1,t_1) =$$
$$\langle q_2|\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_2-t_1)\right\}|q_1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\langle q_2|n\rangle \exp\left\{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega(t_2-t_1)\right\}\langle n|q_1\rangle \quad . \tag{13.1}$$

Explicitní vyjádření vytvořujícího funkcionálu je

$$W[J] = \iint dq_1\, dq_2\, \psi_0^*(q_2,t_2)\, K^{(J)}(q_2,t_2|q_1,t_1)\psi_0(q_1,t_1) \quad . \tag{13.2}$$

Jednotlivé členy v tomto výrazu jsou (označíme $T=t_2-t_1$)

$$K^{(J)}\left(q_2,t_2|q_1,t_1\right)=\left[\frac{m\,\omega}{2\pi\,i\,\hbar\sin(\omega T)}\right]^{1/2}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S^{(J)}\left(q_2,t_2|q_1,t_1\right)\right\} \quad . \tag{13.3}$$

Účinek je

$$S^{(J)}\left(q_2,t_2|q_1,t_1\right)=\int_{t_1}^{t_2}\left[\frac{m}{2}\dot{q}^2-\frac{m\,\omega^2}{2}q^2+J\,q\right]dt \quad , \tag{13.4}$$

okrajové podmínky jsou $q(t_1)=q_1$, $q(t_2)=q_2$. Vlnové funkce základního stavu harmonického oscilátoru jsou

$$\begin{aligned}\psi_0\left(q_1,t_1\right)&=\left[\frac{m\,\omega}{\pi\,\hbar}\right]^{1/4}\exp\left\{-\frac{m\,\omega}{2\hbar}q_1^2\right\}\exp\left\{-i\frac{\omega}{2}t_1\right\} \quad ,\\ \psi_0^*\left(q_2,t_2\right)&=\left[\frac{m\,\omega}{\pi\,\hbar}\right]^{1/4}\exp\left\{-\frac{m\,\omega}{2\hbar}q_2^2\right\}\exp\left\{i\frac{\omega}{2}t_2\right\} \quad .\end{aligned} \tag{13.5}$$

Při vyjádření integrandu v (13.2) se budeme snažit oddělit v exponentu

$$f=-\frac{m\,\omega}{2\hbar}\left(q_1^2+q_2^2\right)+\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2}\left[\frac{m}{2}\dot{q}^2-\frac{m\,\omega^2}{2}q^2+J\,q\right]dt \tag{13.6}$$

člen, obsahující proud. Rozložíme proto $q(t)$ na $q(t)=x_0(t)+x_J(t)$ a budeme se snažit anulovat příspěvek smíšených členů. Máme

$$\begin{aligned}f=&-\frac{m\,\omega}{2\hbar}\left[x_0^2(t_1)+x_0^2(t_2)\right]+\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2}\left[\frac{m}{2}\dot{x}_0^2-\frac{m\,\omega^2}{2}x_0^2\right]dt-\\ &\frac{m\,\omega}{2\hbar}\left[x_J^2(t_1)+x_J^2(t_2)\right]+\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2}\left[\frac{m}{2}\dot{x}_J^2-\frac{m\,\omega^2}{2}x_J^2+J\,x_J\right]dt-\\ &\frac{m\,\omega}{\hbar}\left[x_0(t_1)\,x_J(t_1)+x_0(t_2)\,x_J(t_2)\right]+\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2}\left[m\,\dot{x}_0\,\dot{x}_J-m\,\omega^2\,x_0\,x_J+J\,x_0\right]dt \quad .\end{aligned} \tag{13.7}$$

Integrujeme první člen integrandu v integrálech per partes a předpokládáme splnění rovnic

$$\frac{d^2x_0}{dt^2}+\omega^2\,x_0=0 \quad , \quad \frac{d^2x_J}{dt^2}+\omega^2\,x_J=\frac{J}{m} \quad . \tag{13.8}$$

Dostáváme tak

$$
\begin{aligned}
f = &-\frac{m\omega}{2\hbar}\left[x_0^2(t_1)+x_0^2(t_2)\right]+\frac{i\,m}{2\hbar}\left[x_0(t_2)\dot{x}_0(t_2)-x_0(t_1)\dot{x}_0(t_1)\right]- \\
&\frac{m\omega}{2\hbar}\left[x_J^2(t_1)+x_J^2(t_2)\right]+\frac{i\,m}{2\hbar}\left[x_J(t_2)\dot{x}_J(t_2)-x_J(t_1)\dot{x}_J(t_1)\right]+\frac{i}{2\hbar}\int_{t_1}^{t_2} J\,x_J\,dt- \\
&\frac{m\omega}{\hbar}\left[x_0(t_1)x_J(t_1)+x_0(t_2)x_J(t_2)\right]+\frac{i\,m}{\hbar}\left[x_0(t_2)\dot{x}_J(t_2)-x_0(t_1)\dot{x}_J(t_1)\right] \quad .
\end{aligned}
\tag{13.9}
$$

Se smíšenými okrajovými podmínkami pro $x_J(t)$

$$
\dot{x}_J(t_1)=i\,\omega\,x_J(t_1) \quad , \quad \dot{x}_J(t_2)=-i\,\omega\,x_J(t_2) \tag{13.10}
$$

dostaneme požadovaný výsledek

$$
f=-\frac{m\omega}{2\hbar}\left[x_0^2(t_1)+x_0^2(t_2)\right]+\frac{i\,m}{2\hbar}\left[x_0(t_2)\dot{x}_0(t_2)-x_0(t_1)\dot{x}_0(t_1)\right]+\frac{i}{2\hbar}\int_{t_1}^{t_2} J\,x_J\,dt \quad . \tag{13.11}
$$

Vytvořující funkcionál tak můžeme psát jako

$$
W[J]=W[0]\exp\left\{\frac{i}{2\hbar}\int_{t_1}^{t_2} J(t)\,x_J(t)\,dt\right\} \quad . \tag{13.12}
$$

Označili jsme

$$
W[0]=\frac{m\omega}{\pi\hbar}\left[\frac{1}{2\,i\sin(\omega T)}\right]^{1/2}\exp\left\{i\frac{\omega}{2}T\right\}\iint dq_1\,dq_2\,\exp\left\{F(q_1,q_2)\right\} \quad , \tag{13.13}
$$

kde

$$
F(q_1,q_2)=-\frac{m\omega}{2\hbar}\left\{x_0(t_1)\left[x_0(t_1)+\frac{i}{\omega}\dot{x}_0(t_1)\right]+x_0(t_2)\left[x_0(t_2)-\frac{i}{\omega}\dot{x}_0(t_2)\right]\right\} \quad . \tag{13.14}
$$

Ukážeme, že pro harmonický oscilátor $W[0]=1$. Řešení druhé rovnice v (13.8) s okrajovými podmínkami (13.10) najdeme pomocí Greenovy funkce

$$
G(t)=\frac{i}{2\omega}\exp\left\{-i\,\omega|t|\right\} \quad , \tag{13.15}
$$

pro kterou platí

$$
\begin{aligned}
&\frac{d^2G(t)}{dt^2}+\omega^2\,G(t)=\delta(t) \quad , \\
&\frac{dG(t<0)}{dt}=i\,\omega\,G(t<0) \quad , \quad \frac{dG(t>0)}{dt}=-i\,\omega\,G(t>0) \quad .
\end{aligned}
\tag{13.16}
$$

Máme tak

$$x_J(t) = \frac{i}{2m\omega}\int_{t_1}^{t_2} \exp\{-i\omega|t-\tau|\} J(\tau)\, d\tau \quad . \tag{13.17}$$

Po dosazení do (13.12) dostáváme

$$W[J] = W[0]\exp\left\{-\frac{1}{4m\omega\hbar}\int_{t_1}^{t_2}\int_{t_1}^{t_2} \exp\{-i\omega|t-\tau|\} J(t) J(\tau)\, dt\, d\tau\right\} \quad . \tag{13.18}$$

Řešení homogenní rovnice je

$$\begin{gathered} x_0(t) = \frac{1}{\sin\omega T}\left[Q_1 \sin\omega(t_2 - t) + Q_2 \sin\omega(t - t_1)\right] \quad , \\ Q_1 = q_1 - x_J(t_1) \quad , \quad Q_2 = q_2 - x_J(t_2) \quad . \end{gathered} \tag{13.19}$$

Dosazením do (13.14) a pak (13.13) dostáváme

$$\begin{gathered} W[0] = \frac{m\omega}{\pi\hbar}\left[\frac{1}{2i\sin(\omega T)}\right]^{1/2} \exp\left\{i\frac{\omega}{2}T\right\} \\ \iint dQ_1\, dQ_2 \exp\left\{\frac{i m\omega}{2\hbar\sin\omega T}\left[\left(Q_1^2 + Q_2^2\right)\exp\{i\omega T\} - 2Q_1 Q_2\right]\right\} \quad . \end{gathered} \tag{13.20}$$

Výpočtem integrálu se přesvědčíme, že pro harmonický oscilátor je skutečně $W[0] = 1$. Funkcionální derivace (předpokládáme $t_1 < t_a, t_b < t_2$) je

$$\begin{gathered} \frac{\hbar}{i}\frac{\delta W[J]}{\delta J(t_a)} = \exp\left\{-\frac{1}{4m\omega\hbar}\int_{t_1}^{t_2}\int_{t_1}^{t_2} \exp\{-i\omega|t-\tau|\} J(t) J(\tau)\, dt\, d\tau\right\} \cdot \\ \cdot \frac{i}{2m\omega}\int_{t_1}^{t_2} \exp\{-i\omega|t_a-\tau|\} J(\tau)\, d\tau \quad , \end{gathered} \tag{13.21}$$

tedy

$$\left.\frac{\hbar}{i}\frac{\delta W[J]}{\delta J(t_a)}\right|_{J=0} = 0 \tag{13.22}$$

a druhá derivace (vypočtená pro $J = 0$)

$$\left.\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t_b)\,\delta J(t_a)}\right|_{J=0} = \frac{\hbar}{2m\omega}\exp\{-i\omega|t_a - t_b|\} \quad . \tag{13.23}$$

Připomeňme, že

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\delta W[J]}{\delta J(t_a)}\bigg|_{J=0} = \langle 0|\hat{q}(t_a)|0\rangle \quad ,$$
$$\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t_b)\delta J(t_a)}\bigg|_{J=0} = \langle 0|\hat{T}\{\hat{q}(t_a)\hat{q}(t_b)\}|0\rangle \quad . \tag{13.24}$$

Pro $t_b = t_a$ dostáváme z (13.23) známý výsledek pro střední hodnotu čtverce operátoru souřadnice v základním stavu harmonického oscilátoru

$$\frac{\hbar}{2m\omega} = \langle 0|\hat{q}^2(t)|0\rangle = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t)^2}\bigg|_{J=0} \quad . \tag{13.25}$$

Pokud potřebujeme počítat s hybností, píšeme

$$\hat{p}(t) = m\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\hat{q}(t+\varepsilon)-\hat{q}(t)}{\varepsilon} \quad . \tag{13.26}$$

Střední hodnotu čtverce operátoru hybnosti v základním stavu harmonického oscilátoru dostaneme jako

$$\frac{m\omega\hbar}{2} = \langle 0|\hat{p}^2(t)|0\rangle =$$
$$\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{m^2}{\varepsilon^2}\left(\frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t+\varepsilon)^2}\bigg|_{J=0} + \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t)^2}\bigg|_{J=0} - 2\frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t+\varepsilon)\delta J(t)}\bigg|_{J=0}\right) \tag{13.27}$$

a komutační relace jako

$$\frac{\hbar}{2} = \langle 0|\left[\hat{q}(t),\hat{p}(t)\right]|0\rangle =$$
$$\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{m}{\varepsilon}\left(2\frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t)^2}\bigg|_{J=0} - \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t+\varepsilon)\delta J(t)}\bigg|_{J=0} - \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t)\delta J(t-\varepsilon)}\bigg|_{J=0}\right) \quad . \tag{13.28}$$

14. Stručný náznak počítaní pro volné skalární pole

Analogicky jako v kvantové mechanice hledáme amplitudu pravděpodobnosti přechodu

$$K\left(\phi(\vec{x}_2,t_2)\middle|\phi(\vec{x}_1,t_1)\right) = \int D[\phi]\exp\{iS[\phi]\} \quad , \tag{14.1}$$

kde účinek je

$$S[\phi] = \int d^4x\left[\frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - \frac{1}{2}m^2\phi^2\right] \quad . \tag{14.2}$$

Budeme počítat vytvořující funkcionál

$$Z[J]=\frac{\langle 0|0\rangle^{(J)}}{\langle 0|0\rangle^{(J=0)}}=\frac{N}{D} \quad , \tag{14.3}$$

kde

$$\begin{aligned} N&=\int D[\phi]\exp\left\{i\int d^4x\left[\frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi-\frac{1}{2}m^2\phi^2+J\phi\right]\right\} \quad , \\ D&=\int D[\phi_0]\exp\left\{i\int d^4x\left[\frac{1}{2}\partial_\mu\phi_0\,\partial^\mu\phi_0-\frac{1}{2}m^2\phi_0^2\right]\right\} \quad . \end{aligned} \tag{14.4}$$

Pole v N rozložíme na dvě části $\phi=\phi_J+\phi_0$, kde pole ϕ_J splňuje klasickou rovnici

$$\left(\partial_\mu\partial^\mu+m^2\right)\phi_J=J \tag{14.5}$$

a zamění integrační proměnnou $D[\phi]=D[\phi_0]$. Pro účinek pak máme

$$\begin{aligned} S[\phi_J+\phi_0]=&\int d^4x\left[\frac{1}{2}\partial_\mu\phi_J\,\partial^\mu\phi_J-\frac{1}{2}m^2\phi_J^2+J\phi_J\right]+ \\ &\int d^4x\left[\frac{1}{2}\partial_\mu\phi_0\,\partial^\mu\phi_0-\frac{1}{2}m^2\phi_0^2\right]+ \\ &\int d^4x\left[\partial_\mu\phi_J\,\partial^\mu\phi_0-m^2\phi_J\,\phi_0+J\phi_0\right] \quad . \end{aligned} \tag{14.6}$$

První člen v třetím integrálu napíšeme jako (pole v nekonečnu vymizí, takže hraniční člen je nulový)

$$\partial_\mu\phi_J\,\partial^\mu\phi_0=-\phi_0\,\partial_\mu\partial^\mu\phi_J \quad , \tag{14.7}$$

takže podle (14.5) tento integrál je roven nule. Zůstává tak pro (14.3)

$$Z[J]=\exp\left\{\frac{i}{2}\int d^4x\,J(x)\phi_J(x)\right\} \quad . \tag{14.8}$$

Známe-li Greenovu funkci rovnice (14.5)

$$\left(\partial_\mu\partial^\mu+m^2\right)\Delta\left(x-x'\right)=-i\,\delta^4\left(x-x'\right) \quad , \tag{14.9}$$

můžeme psát

$$\phi_J(x)=i\int d^4x'\,\Delta\left(x-x'\right)J\left(x'\right) \tag{14.10}$$

a vytvořující funkcionál je

$$Z[J]=\exp\left\{-\frac{1}{2}\iint d^4x'\,d^4x\,J(x)\Delta\left(x-x'\right)J\left(x'\right)\right\} \quad . \tag{14.11}$$

Greenovu funkci snadno vyjádříme jako Fourierovu transformaci

$$\Delta\left(x-x'\right)=\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\frac{1}{k_\mu k^\mu-m^2+i\varepsilon}\exp\left\{-i\,k_\mu\left(x^\mu-x'^\mu\right)\right\} \quad . \tag{14.12}$$

Dvoubodová funkce je

$$G^{(2)}(x_1,x_2)=\left(\frac{1}{i}\right)^2\frac{\delta^2 Z[J]}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)}\bigg|_{J=0}=$$
$$\left(\frac{1}{i}\right)^2\frac{\delta^2}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)}\left[-\frac{1}{2}\iint d^4x'\,d^4x\,J(x)\Delta(x-x')J(x')\right] \tag{14.13}$$
$$=\Delta(x_1-x_2)\quad .$$

Čtyřbodová funkce je pak

$$G^{(4)}(x_1,x_2,x_3,x_4)=\left(\frac{1}{i}\right)^4\frac{\delta^4 Z[J]}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)\delta J(x_3)\delta J(x_4)}\bigg|_{J=0}=$$
$$\left(\frac{1}{i}\right)^4\frac{\delta^4}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)\delta J(x_3)\delta J(x_4)}\frac{1}{2}\left[-\frac{1}{2}\iint d^4x'\,d^4x\,J(x)\Delta(x-x')J(x')\right]^2 \tag{14.14}$$
$$=\Delta(x_1-x_2)\Delta(x_3-x_4)+\Delta(x_1-x_3)\Delta(x_2-x_4)+\Delta(x_1-x_4)\Delta(x_2-x_3)\quad .$$