Feynmanova formulace kvantové mechaniky

Michal Lenc

Poznámky k přednášce Vybrané kapitoly z kvantové mechaniky

jaro 2008

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

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

V limitě $R \to \infty$ je

$$\int_0^\infty \exp\left\{i x^2\right\} d x = \exp\left\{i \frac{\pi}{4}\right\} \int_0^\infty \exp\left\{-x^2\right\} d x \qquad (2.4)$$

Poissonův integrál se počítá například jako

$$\int_0^\infty \exp\left\{-x^2\right\} d x = \left[\int_0^\infty \exp\left\{-x^2\right\} d x \int_0^\infty \exp\left\{-y^2\right\} d y\right]^{1/2} = \left[\frac{\pi}{2} \int_0^\infty r \exp\left\{-r^2\right\} d r\right]^{1/2} = \frac{\pi^{1/2}}{2} \quad . \qquad (2.5)$$

Fresnelův integrál je tedy

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

a počítaný integrál

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

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

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

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

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

a vektor η transformovat na

$$\xi = O \eta \quad , \quad \xi^T = \eta^T O^T \quad . \qquad (2.10)$$

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

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

3. Feynmanův integrál po trajektoriích.

Amplituda pravděpodobnosti přechodu z bodu x_a do bodu x_b je

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

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

$$
\begin{aligned}
&K\left(x_b, t_b \mid x_a, t_a\right) = \lim_{N\to\infty} \left[\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}\right]^{(N+1)/2} \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\left[x(t)\right]\right\} \prod_{k=1}^{N1} d x_k \quad , \\
&\tau = \frac{t_b - t_a}{N+1} \quad , \quad t_k = k\tau \quad , \quad x(t_a) = x_a = x_0 \quad , \quad x(t_k) = x_k \quad , \quad x(t_b) = x_b = x_{N+1} \quad , \\
&S\left[x(t)\right] = \tau \sum_{k=0}^{N} L\left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau}, \frac{x_{k+1} + x_k}{2}, \frac{t_{k+1} + t_k}{2}\right) \quad .
\end{aligned}
\tag{3.2}
$$

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

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

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

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

odkud pak

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

Pro kvantově mechanické kvasiklasické přiblížení je

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

Druhou variaci můžeme upravit integrací per partes do tvaru

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

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

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

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

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

a pro amplitudu přechodu máme

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

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

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

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

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

Klasická trajektorie je řešením Lagrangeovy rovnice

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

S pomocí (4.5) můžeme zjednodušit vyjádření pro klasický účinek

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

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 $t_j=t_a+j(t_b-t_a)/(N+1)$. Je tedy

$$G(t_b,t_a)=\lim_{N\to\infty}\int dy_1\ldots dy_N\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{(N+1)/2}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N}\left[\frac{m}{2\varepsilon}\left(y_{j+1}-y_j\right)^2-\frac{\varepsilon}{2}c_j\,y_j^2\right]\right\} \quad , \tag{4.8}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

nebo obecněji

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

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

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

Potom je podle (3.11) a (3.12)

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

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 $\cosh\omega\tau-1=2\left[\sinh(\omega\tau/2)\right]^2$ 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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$K(\vec{x}_b,\tau_b\,|\,\vec{x}_a,\tau_a)=\frac{\hbar}{2m\,c}\int_0^\infty K_L(\vec{x}_b,\tau_b\,|\,\vec{x}_a,\tau_a)\,d\,L\quad , \tag{7.4}$$

odkud

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

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)

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

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

8. Funkcionální derivace.

Zobecnění pojmu derivace u funkce je u funkcionálu výraz

$$\frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi(y)} = \lim_{h\to 0} \frac{S\left[\phi(x) + h\delta(x-y)\right] - S\left[\phi(x)\right]}{h} \quad . \tag{8.1}$$

„Obrazně“ pro funkci *N* proměnných máme

$$F\left(x_1 + \xi_1, \ldots, x_N + \xi_N\right) = \sum_{k=1}^{N} \frac{\partial F}{\partial x_k} \xi_k \tag{8.2}$$

a pro funkcionál

$$F[x+\xi] = \int \frac{\delta F[x]}{\delta x(t)} \xi(t) dt \quad . \tag{8.3}$$

Definujme

$$\left\langle F[x] \right\rangle = \int F[x] \exp\left\{ \frac{i}{h} S[x] \right\} d[x] \quad . \tag{8.4}$$

Potom rozepsáním identity (odečtení stejných veličin)

$$\begin{aligned} &0 = \left\langle F[x+\xi] \right\rangle - \left\langle F[x] \right\rangle = \\ &\iint \left[\frac{\delta F[x]}{\delta x(t)} + \frac{i}{\hbar} F[x] \frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} \right] \xi(t) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S[x] \right\} dt\, d[x] \quad . \end{aligned} \tag{8.5}$$

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

$$\left\langle \frac{\delta F[x]}{\delta x(t)} \right\rangle = -\frac{i}{h} \left\langle F[x] \frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} \right\rangle \tag{8.6}$$

nebo v diskrétním tvaru

$$\left\langle \frac{\partial F}{\partial x_n} \right\rangle = -\frac{i}{h} \left\langle F \frac{\partial S}{\partial x_n} \right\rangle \quad . \tag{8.7}$$

Vezměme ještě jako poslední příklad účinek v klasické mechanice

$$S[x] = \int_{t_a}^{t_b} L\left(\dot{x}(t), x(t), t\right) dt \quad . \tag{8.8}$$

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

$$S[x+\xi]-S[x]=\int_{t_a}^{t_b} L\left(\dot{x}(t)+\dot{\xi}(t),x(t)+\xi(t),t\right)dt-\int_{t_a}^{t_b} L\left(\dot{x}(t),x(t),t\right)dt=$$
$$\int_{t_a}^{t_b}\left\{\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{\xi}(t)+\frac{\partial L}{\partial x}\xi(t)\right\}dt+\cdots=\int_{t_a}^{t_b}\left\{\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\right\}\xi(t)\,dt+\cdots \quad\Rightarrow \tag{8.9}$$
$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)}=\frac{\partial L\left(\dot{x}(t),x(t),t\right)}{\partial x}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L\left(\dot{x}(t),x(t),t\right)}{\partial \dot{x}}\right) \quad .$$

Napišme si účinek v diskretizovaném tvaru jako

$$S=$$
$$\tau\sum_{k=0}^{N-1}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\vec{x}_{k+1}-\vec{x}_k}{\tau}\right)^2+\frac{e}{2}\left(\frac{\vec{x}_{k+1}-\vec{x}_k}{\tau}\right)\cdot\left(\vec{A}\left(\vec{x}_{k+1}\right)+\vec{A}\left(\vec{x}_k\right)\right)-\frac{e}{2}\left(\Phi\left(\vec{x}_{k+1}\right)+\Phi\left(\vec{x}_k\right)\right)\right] \quad . \tag{8.10}$$

Potom je

$$\frac{1}{\tau}\frac{\partial S}{\partial \vec{x}_n}=-m\frac{\vec{x}_{n+1}-2\vec{x}_n+\vec{x}_{n-1}}{\tau^2}+e\frac{\vec{x}_{n+1}-\vec{x}_{n-1}}{2\tau}\times\left[\frac{\partial}{\partial \vec{x}_n}\times\vec{A}\left(\vec{x}_n\right)\right]-e\frac{\partial\Phi\left(\vec{x}_n\right)}{\partial \vec{x}_n}$$
$$+e\left[\frac{\vec{x}_{n+1}-\vec{x}_{n-1}}{2\tau}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{x}_n}\right]\vec{A}\left(\vec{x}_n\right)-e\frac{\vec{A}\left(\vec{x}_{n+1}\right)-\vec{A}\left(\vec{x}_{n-1}\right)}{2\tau} \tag{8.11}$$

a tedy s označením

$$\vec{E}\left(\vec{x}_n\right)=-\frac{\partial\Phi\left(\vec{x}_n\right)}{\partial \vec{x}_n}-\left(\frac{\vec{A}\left(\vec{x}_{n+1}\right)-\vec{A}\left(\vec{x}_{n-1}\right)}{2\tau}-\left[\frac{\vec{x}_{n+1}-\vec{x}_{n-1}}{2\tau}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{x}_n}\right]\vec{A}\left(\vec{x}_n\right)\right) \quad ,$$
$$\vec{B}\left(\vec{x}_n\right)=\frac{\partial}{\partial \vec{x}_n}\times\vec{A}\left(\vec{x}_n\right) \tag{8.12}$$

dostáváme

$$\left\langle\frac{\partial F\left(\vec{x}_i\right)}{\partial \vec{x}_n}\right\rangle=\frac{i\tau}{\hbar}\left\langle F\left(\vec{x}_i\right)\cdot\left(m\frac{\vec{x}_{n+1}-2\vec{x}_n+\vec{x}_{n-1}}{\tau^2}-e\frac{\vec{x}_{n+1}-\vec{x}_{n-1}}{2\tau}\times\vec{B}\left(\vec{x}_n\right)-e\vec{E}\left(\vec{x}_n\right)\right)\right\rangle \quad . \tag{8.13}$$

Pro $F=1$ dostáváme Ehrenfestův teorém

$$m\left\langle\frac{\vec{x}_{n+1}-2\vec{x}_n+\vec{x}_{n-1}}{\tau^2}\right\rangle=e\left\langle\frac{\vec{x}_{n+1}-\vec{x}_{n-1}}{2\tau}\times\vec{B}\left(\vec{x}_n\right)+\vec{E}\left(\vec{x}_n\right)\right\rangle$$
$$\Rightarrow \quad m\left\langle\frac{d\vec{v}}{dt}\right\rangle=e\left\langle\vec{v}\times\vec{B}\left(\vec{x}\right)+\vec{E}\left(\vec{x}\right)\right\rangle \quad . \tag{8.14}$$

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

$$\left\langle \frac{\hbar}{i} \right\rangle = \left\langle \left(m \frac{\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n}{\tau} - \frac{e}{2} \vec{x}_{n+1} \times \vec{B}(\vec{x}_n) \right) \vec{x}_n - \vec{x}_n \left(\frac{\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1}}{\tau} - \frac{e}{2} \vec{x}_{n-1} \times \vec{B}(\vec{x}_n) \right) \right\rangle$$
$$\Rightarrow \quad \left\langle \frac{\hbar}{i} \right\rangle = \left\langle \left(m\vec{v} + e\vec{A} \right) \vec{x} - \vec{x} \left(m\vec{v} + e\vec{A} \right) \right\rangle \quad . \tag{8.15}$$

9. 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.

$$\begin{aligned} f: &\quad \mathbb{R}^m \supset \Omega \quad \rightarrow \quad R \quad , \\ F: &\quad \mathcal{L}^2(\Omega) \quad \rightarrow \quad R \quad . \end{aligned} \tag{9.1}$$

Skalární součin má obvyklé vyjádření

$$\langle f | u \rangle \equiv \int_\Omega f(\vec{x}) u(\vec{x}) d^m \vec{x} \tag{9.2}$$

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

Definujeme funkcionální derivaci jako

$$\left\langle \frac{\delta F[f]}{\delta f} \middle| u \right\rangle \equiv \int_\Omega \frac{\delta F[f]}{\delta f(\vec{x})} u(\vec{x}) d^m \vec{x} \equiv \frac{d}{dt} F[f + tu] \bigg|_{t=0} \quad . \tag{9.3}$$

Velmi speciální volbou je

$$E_{\vec{y}}[f] = f(\vec{y}) \quad . \tag{9.4}$$

Potom máme ze (9.3)

$$\begin{aligned} &\int_\Omega \frac{\delta E_{\vec{y}}[f]}{\delta f(\vec{x})} u(\vec{x}) d^m \vec{x} \equiv \frac{d}{dt} \left(f(\vec{y}) + t u(\vec{y}) \right) \bigg|_{t=0} = u(\vec{y}) \quad \Rightarrow \\ &\frac{\delta E_{\vec{y}}[f]}{\delta f(\vec{x})} = \delta(\vec{x} - \vec{y}) \quad . \end{aligned} \tag{9.5}$$

Se stejnou konvencí, jakou píšeme

$$d x^i \left(\frac{\partial}{\partial x^j} \right) = \delta^i_j \quad \approx \quad \frac{\partial x^i}{\partial x^j} = \delta^i_j \tag{9.6}$$

budeme psát

$$\frac{\delta E_{\vec{y}}[f]}{\delta f(\vec{x})} = \delta(\vec{x}-\vec{y}) \quad \approx \quad \frac{\delta f(\vec{y})}{\delta f(\vec{x})} = \delta(\vec{x}-\vec{y}) \quad . \tag{9.7}$$

Zobrazení funkce na její parciální derivaci

$$E_{\vec{y},i}[f] = \frac{\partial f(\vec{y})}{\partial y^i} = \partial_i f(\vec{y}) \tag{9.8}$$

vede k

$$\begin{gathered}\int_\Omega \frac{\delta E_{\vec{y},i}[f]}{\delta f(\vec{x})} u(\vec{x})\, d^m\vec{x} \equiv \frac{d}{dt}\left(\partial_i f(\vec{y}) + t\,\partial_i u(\vec{y})\right)\Big|_{t=0} = \partial_i u(\vec{y}) \quad \Rightarrow \\ \frac{\delta E_{\vec{y},i}[f]}{\delta f(\vec{x})} = -\partial_i \delta(\vec{x}-\vec{y}) \quad .\end{gathered} \tag{9.9}$$

Povšimněme si, že ve vztahu (9.9) mlčky předpokládáme $u|_{\partial\Omega} = 0$, 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 (9.9) je v prvním řádku $\partial_i = \partial / \partial y^i$, ve druhém řádku $\partial_i = \partial / \partial x^i$. Ověříme si na jednorozměrném příkladě

$$\begin{gathered} E^n_t[x] = x^{(n)}(t) \quad , \quad \int \frac{\delta E^n_t[x]}{\delta x(\tau)} u(\tau)\, d\tau = \\ \frac{d}{d\xi}\left\{x^{(n)}(t) + \xi\, u^{(n)}(t)\right\}\Big|_{\xi=0} = u^{(n)}(t) \quad \Rightarrow \\ \frac{\delta x^{(n)}(t)}{\delta x(\tau)} = (-1)^n \frac{d^{(n)} \delta(t-\tau)}{d\tau^n} \quad . \end{gathered} \tag{9.10}$$

Standardní variační úloha vychází z Lagrangeovy funkce

$$L[f] = L\left(\vec{x}, f(\vec{x}), \partial_i f(\vec{x})\right) \quad . \tag{9.11}$$

Variaci budeme psát jako

$$\begin{gathered} \frac{\delta L[f]}{\delta f(\vec{y})} = \frac{\partial L}{\partial x^i} \frac{\delta x^i}{\delta f(\vec{y})} + \frac{\partial L}{\partial f(\vec{x})} \frac{\delta f(\vec{x})}{\delta f(\vec{y})} + \frac{\partial L}{\partial \partial_i f(\vec{x})} \frac{\delta \partial_i f(\vec{x})}{\delta f(\vec{y})} = \\ \frac{\partial L}{\partial f(\vec{x})} \delta(\vec{x}-\vec{y}) + \frac{\partial L}{\partial \partial_i f(\vec{x})} \frac{\partial \delta(\vec{x}-\vec{y})}{\partial x^i} \quad . \end{gathered} \tag{9.12}$$

Dosazením do (9.3) dostáváme

$$\left\langle \frac{\delta F[f]}{\delta f} \middle| u \right\rangle \equiv \int_\Omega \left\{ \frac{\partial L}{\partial f(\vec{x})} \delta(\vec{x}-\vec{y}) + \frac{\partial L}{\partial \partial_i f(\vec{x})} \partial_i \delta(\vec{x}-\vec{y}) \right\} u(\vec{x}) d^m \vec{x} =$$
$$\int_\Omega \left\{ \frac{\partial L}{\partial f(\vec{x})} - D_i \frac{\partial L}{\partial \partial_i f(\vec{x})} \right\} \delta(\vec{x}-\vec{y}) u(\vec{x}) d^m \vec{x} = \left\{ \frac{\partial L}{\partial f(\vec{y})} - D_i \frac{\partial L}{\partial \partial_i f(\vec{y})} \right\} u(\vec{y}) \quad . \tag{9.13}$$

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

$$S[f] = S[f_0] + \int_\Omega \left. \frac{\delta S[f]}{\delta f(y_1)} \right|_{f=f_0} \{ f(y_1) - f_0(y_1) \} d y_1 +$$
$$\frac{1}{2!} \iint_\Omega \left. \frac{\delta^2 S[f]}{\delta f(y_1) \delta f(y_2)} \right|_{f=f_0} \{ f(y_1) - f_0(y_1) \} \{ f(y_2) - f_0(y_2) \} d y_1 d y_2 + \cdots \tag{9.14}$$

Jako příklad vezměmě účinek volné částice

$$S = -mc \int_{t_a}^{t_b} \left\{ c^2 - \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \right\}^{1/2} dt \quad . \tag{9.15}$$

Podle (9.14)

$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = \int_{t_a}^{t_b} \left\{ \frac{\partial L}{\partial x(t_1)} \delta(t_1 - t) + \frac{\partial L}{\partial x'(t_1)} \frac{d \delta(t_1 - t)}{d t_1} \right\} d t_1 =$$
$$-\frac{d}{dt} \frac{m c x'(t)}{\{ c^2 - x'^2(t) \}^{1/2}} = -\frac{m c^3 x''(t)}{\{ c^2 - x'^2(t) \}^{3/2}} \quad . \tag{9.16}$$

Pro klasickou trajektorii

$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = 0 \quad \Rightarrow \quad x''_{cl}(t) = 0 \quad \Rightarrow \quad x_{cl}(t) = v t + x_0 \quad . \tag{9.17}$$

Dále pak

$$\frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(\bar{t}) \delta x(t)} = -\frac{m c^3}{\{ c^2 - x'^2(t) \}^{3/2}} \frac{\delta x''(t)}{\delta x(\bar{t})} - m c^3 x''(t) \frac{\delta}{\delta x(\bar{t})} \frac{1}{\{ c^2 - x'^2(t) \}^{3/2}} =$$
$$-\frac{m c^3}{\{ c^2 - x'^2(t) \}^{3/2}} \frac{d^2 \delta(t - \bar{t})}{d \bar{t}^2} - m c^3 x''(t) \frac{\delta}{\delta x(\bar{t})} \frac{1}{\{ c^2 - x'^2(t) \}^{3/2}} \quad . \tag{9.18}$$

Pro klasickou trajektorii

$$\left.\frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(\bar{t})\,\delta x(t)}\right|_{x_{cl}} = -\frac{m c^3}{\left(c^2 - v^2\right)^{3/2}} \frac{d^2 \delta(t-\bar{t})}{d\bar{t}^2} \tag{9.19}$$

Přírůstek účinku je

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b}\int_{t_a}^{t_b} \left.\frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(\bar{t})\,\delta x(t)}\right|_{x_{cl}} \left[x(t) - x_{cl}(t)\right]\left[x(\bar{t}) - x_{cl}(\bar{t})\right] d\bar{t}\, dt = \\
&-\frac{m c^3}{2\left(c^2 - v^2\right)^{3/2}} \int_{t_a}^{t_b}\int_{t_a}^{t_b} \frac{d^2 \delta(t-\bar{t})}{d\bar{t}^2} \left[x(t) - x_{cl}(t)\right]\left[x(\bar{t}) - x_{cl}(\bar{t})\right] d\bar{t}\, dt = \\
&\frac{m c^3}{2\left(c^2 - v^2\right)^{3/2}} \int_{t_a}^{t_b} \left[x'(t) - v\right]^2 dt \quad .
\end{aligned} \tag{9.20}$$

Klasický účinek je

$$S[x_{cl}] = -m c \left(c^2 - v^2\right)^{1/2} \left(t_b - t_a\right) \quad . \tag{9.21}$$