

Feynmanova formulace kvantové mechaniky

Michal Lenc

Poznámky k přednášce Vybrané kapitoly z kvantové mechaniky

jaro 2010

1. Schrödingerova rovnice	2
2. Užitečné integrály	2
3. Feynmanův integrál po trajektoriích	4
4. Propagátor pro kvadratický lagrangián	6
5. Harmonický oscilátor	9
6. Propagátor ve více dimenzích	10
7. Volná relativistická částice - parametrizace	12
8. Regularizace pomocí Riemannovy ζ funkce	13
9. Funkcionální derivace	15
10. Funkcionální derivace podruhé	17
11. Vytvořující funkcionál	21
12. Schwingerova formulace kvantové mechaniky	22
13. Vytvořující funkcionál pro harmonický oscilátor	24
14. Stručný náznak počítání pro volné skalární pole	28

1. Schrödingerova rovnice

Odvodíme nerelativistickou Schrödingerovu rovnici pro jednorozměrný případ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Po doplnění výrazu v exponentu na čtverec a substituci dostáváme

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

Cauchyova věta pro vhodnou křivku v komplexní rovině dává

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

V limitě $R \rightarrow \infty$ je

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

Poissonův integrál se počítá například jako

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

Fresnelův integrál je tedy

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

a počítaný integrál

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

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

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

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

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

$$\Omega = O^T \Omega_D O, \quad \det O = 1, \quad \Omega_D = \text{diag}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N) \quad (2.9)$$

a vektor η transformovat na

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

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

$$I^N = \int_{-\infty}^{\infty} d\eta_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} d\eta_N \exp\{i b \eta^T \Omega \eta\} = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_N \exp\{i b \xi^T \Omega_D \xi\} =$$

$$\prod_{k=1}^N \left(\frac{\pi i}{b \omega_k} \right)^{1/2} = \left(\frac{\pi i}{b} \right)^{N/2} \frac{1}{(\det \Omega_D)^{1/2}} = \left(\frac{\pi i}{b} \right)^{N/2} \frac{1}{(\det \Omega)^{1/2}} . \quad (2.11)$$

3. Feynmanův integrál po trajektoriích

Amplituda pravděpodobnosti přechodu z bodu x_a do bodu x_b je

$$K(x_b, t_b | x_a, t_a) = \int \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right\} d[x(t)] ,$$

$$x(t_a) = x_a , \quad x(t_b) = x_b , \quad S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}(t), x(t), t) dt . \quad (3.1)$$

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

$$K(x_b, t_b | x_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right]^{(N+1)/2} \int \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right\} \prod_{k=1}^N dx_k ,$$

$$\tau = \frac{t_b - t_a}{N+1} , \quad t_k = k\tau , \quad x(t_a) = x_a = x_0 , \quad x(t_k) = x_k , \quad x(t_b) = x_b = x_{N+1} , \quad (3.2)$$

$$S[x(t)] = \tau \sum_{k=0}^N L\left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau}, \frac{x_{k+1} + x_k}{2}, \frac{t_{k+1} + t_k}{2} \right) .$$

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

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

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

$$\delta S = S[x_{cl} + \delta x] - S[x_{cl}] = 0 ,$$

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

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

odkud pak

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

Pro kvantově mechanické kvasiklasické přiblížení je

$$K(x_b, t_b | x_a, t_a) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x_{cl}(t)] \right\} \int \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \delta^2 S[\delta x(t)] \right\} d[\delta x(t)] \quad ,$$

$$\delta x(t_a) = \delta x(t_b) = 0 \quad , \quad (3.6)$$

$$\delta^2 S[\delta x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} (\delta \dot{x})^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} \delta \dot{x} \delta x + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} (\delta x)^2 \right]_{x=x_{cl}} dt \quad .$$

Druhou variaci můžeme upravit integrací per partes do tvaru

$$\delta^2 S[\delta x(t)] = (\delta x, \hat{\Lambda} \delta x) \quad ,$$

$$\hat{\Lambda} = - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \frac{d}{dt} + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} \right] + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} \frac{d}{dt} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \quad , \quad (3.7)$$

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

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

Napišme teď v ortonormální bázi

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

Potom je

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

a pro amplitudu přechodu máme

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

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

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

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

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

pak konečný výsledek je

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

4. Propagátor pro kvadratický lagranián

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

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

Protože můžeme položit

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

$$E(t) = \frac{d}{dt} \int^t E(\tau) d\tau ,$$

stačí uvažovat lagraniány tvaru

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

Podle (3.6) máme

$$K(x_b, t_b | x_a, t_a) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}(t)]\right\} \int \exp\left\{\frac{i}{2\hbar} \mathcal{D}^2 S[y(t)]\right\} d[y(t)] ,$$

$$S[x_{cl}(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left\{ \frac{1}{2}a(t)[\dot{x}_{cl}(t)]^2 - \frac{1}{2}c(t)[x_{cl}(t)]^2 + f(t)x_{cl}(t) \right\} dt , \quad (4.4)$$

$$\mathcal{D}^2 S[y(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left[\left. \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \right|_{x=x_{cl}} y'^2 + \left. \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \right|_{x=x_{cl}} y^2 \right] dt = \int_{t_a}^{t_b} [a(t)y'^2 - c(t)y^2] dt ,$$

$$y(t_a) = y(t_b) = 0 .$$

Klasická trajektorie je řešením Lagrangeovy rovnice

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

S pomocí (4.5) můžeme zjednodušit vyjádření pro klasický účinek

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

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

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

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

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

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

$$\eta = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} , \quad \eta^T = (y_1 \quad \dots \quad y_N) \quad (4.9)$$

a matici Ω

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

Potom můžeme (4.8) zapsat jako

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

Podle (2.11) je

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

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

$$D_0 = 1 \quad , \quad D_1 = 2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1 \quad , \quad D_2 = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1\right) \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_2\right) - 1 = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_2\right) D_1 - D_0 \quad , \quad (4.13)$$

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

Obecně pak

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

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

$$\frac{g_{j+1} - 2g_j + g_{j-1}}{\varepsilon^2} = -\frac{c_{j+1}}{m} g_j \quad , \quad (4.15)$$

$$g_0 = 0 \quad , \quad \frac{g_1 - g_0}{\varepsilon} = D_1 - D_0 = 1 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1 \quad .$$

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

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

nebo obecněji

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

a tedy

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

Jiný způsob výpočtu je založen na rozkladu

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

kde z definice (3.7) máme

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

Potom je podle (3.11) a (3.12)

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

5. Harmonický oscilátor

V tomto případě máme

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

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

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

a účinek (4.6) je

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

Řešení rovnice (4.16) je

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

takže výraz (4.18)

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

Propagátor pro harmonický oscilátor jr tedy

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

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

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

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.

$$\langle n|k\rangle = \delta_{nk}$$

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

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

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

Podívejme se na vyjádření propagátoru (5.6)

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

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

$$Z = \frac{1}{2\sinh\frac{\omega\tau}{2}} = \frac{\exp\left\{-\frac{\omega\tau}{2}\right\}}{1-\exp\{-\omega\tau\}} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left\{-\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega\tau\right\} \Rightarrow \quad (5.11)$$

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega .$$

6. Propagátor ve více dimenzích

Variace účinku je

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

Používáme sumační konvenci. V okolí klasické trajektorie píšeme

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

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

$$\delta^2 S[\delta x] = \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^i \partial \dot{x}^j} \delta \dot{x}^i \delta \dot{x}^j + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial x^i \partial \dot{x}^j} \delta x^i \delta \dot{x}^j + \frac{\partial^2 L}{\partial x^i \partial x^j} \delta x^i \delta x^j \right] \Big|_{x=x_{cl}} dt . \quad (6.3)$$

"Rozumné variace" dovolují definovat Hilbertův prostor se skalárním součinem

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

Druhou variaci pak píšeme jako

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

kde

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

V ortonormální bázi

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

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

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

a po zavedení „volné částice“, charakterizované

$$\Lambda_{ij}^{(f)} = -\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^i \partial \dot{x}^j} \frac{d}{dt} \right) \quad , \quad (6.9)$$

$$\Lambda_{ij}^{(f)} u_n^{(f)j}(t) = \lambda_n^{(f)} u_n^{(f)i}(t) \quad , \quad u_n^{(f)i}(t_a) = u_n^{(f)i}(t_b) = 0$$

dostáváme konečný výsledek

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

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

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

Potom platí (Coleman, Levit a Smilansky)

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

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

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

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

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

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

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

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

$$K(\vec{x}_b, \tau_b | \vec{x}_a, \tau_a) = \frac{\hbar}{2mc} \int_0^\infty K_L(\vec{x}_b, \tau_b | \vec{x}_a, \tau_a) dL, \quad (7.4)$$

odkud

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

Vzhledem k asymptotickému vyjádření

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

je pro výrazně časupodobné intervaly (nerelativistická teorie)

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

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

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}, \quad \text{Res} > 1 \quad (8.1)$$

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

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

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

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

Podobně pro Fermiho – Diracovu statistiku

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

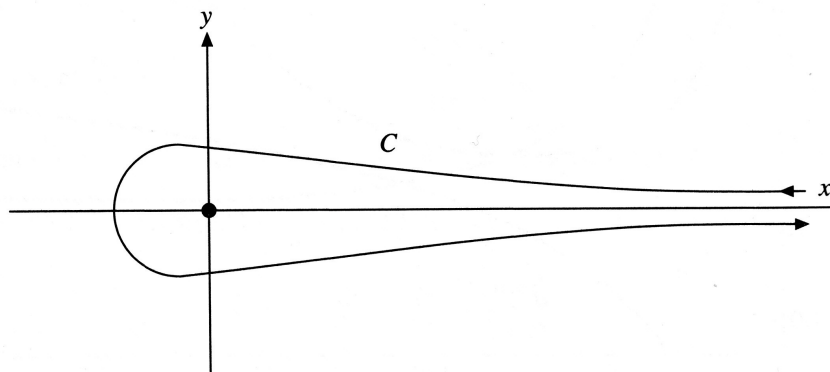
Při důkazu rozšíříme integrand v (8.4) výrazem $\exp(x)-1$ a postupujeme jako v předchozím případě.

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

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

Důležité je, že oblast uzavřená křivkou C neobsahuje body $\pm 2n\pi i, \quad n=1,2,\dots$ je $\text{Res} > 1$, můžeme deformovat tak, že integrujeme podél části reálné osy s

Pokud křivku kladné



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

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

Porovnání (8.6) s (8.2) a využití vztahu

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

můžeme tedy psát

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

Tato funkce je analytickým prodloužením funkce (8.1) do celé komplexní roviny proměnné s .

Riemannovu funkci vyjádřil Hermite jako

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

Pro $s=0$ máme

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

Poněkud obecnější je Hurwitzova ζ funkce

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

Je zřejmé, že

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

Pro Hurwitzovu funkci má Hermiteova reprezentace tvar

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

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

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

Potom je

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

S uvážením

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

můžeme ve (8.15) psát

$$\det \hat{A} = \exp(-\zeta'(0)) . \quad (8.17)$$

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

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

a s regularizací pomocí zobecněné ζ funkce

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

9. Funkcionální derivace

Zobecnění pojmu derivace u funkce je u funkcionálu výraz

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

„Obrazně“ pro funkci N proměnných máme

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

a pro funkcionál

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

Definujme

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

Potom rozepsáním identity (odečtení stejných veličin)

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

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

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

nebo v diskrétním tvaru

$$\left\langle \frac{\partial F}{\partial x_n} \right\rangle = -\frac{i}{\hbar} \left\langle F \frac{\partial S}{\partial x_n} \right\rangle \quad . \quad (9.7)$$

Vezměme ještě jako poslední příklad účinek v klasické mechanice

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

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

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

Napišme si účinek v diskretizovaném tvaru jako

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

Potom je

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} \frac{\partial S}{\partial \bar{x}_n} &= -m \frac{\bar{x}_{n+1} - 2\bar{x}_n + \bar{x}_{n-1}}{\tau^2} + e \frac{\bar{x}_{n+1} - \bar{x}_{n-1}}{2\tau} \times \left[\frac{\partial}{\partial \bar{x}_n} \times \bar{A}(\bar{x}_n) \right] - e \frac{\partial \Phi(\bar{x}_n)}{\partial \bar{x}_n} \\ &+ e \left[\frac{\bar{x}_{n+1} - \bar{x}_{n-1}}{2\tau} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{x}_n} \right] \bar{A}(\bar{x}_n) - e \frac{\bar{A}(\bar{x}_{n+1}) - \bar{A}(\bar{x}_{n-1})}{2\tau} \end{aligned} \quad (9.11)$$

a tedy s označením

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

dostáváme

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

Pro $F = 1$ dostáváme Ehrenfestův teorém

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

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

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

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.

$$\begin{aligned}f: \mathbb{R}^m \supset \Omega &\rightarrow R, \\ F: \mathcal{L}^2(\Omega) &\rightarrow R.\end{aligned}\quad (10.1)$$

Skalární součin má obvyklé vyjádření

$$\langle f | u \rangle \equiv \int_{\Omega} f(\bar{x}) u(\bar{x}) d^m \bar{x} \quad (10.2)$$

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

Definujeme funkcionální derivaci jako

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

Velmi speciální volbou je

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

Potom máme ze (10.3)

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

Se stejnou konvencí, jakou píšeme

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

budeme psát

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

Zobrazení funkce na její parciální derivaci

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

vede k

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

Povšimněme si, že ve vztahu (10.9) 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 (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

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

Standardní variační úloha vychází z Lagrangeovy funkce

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

Variaci budeme psát jako

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

Dosazením do (10.3) dostáváme

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

V úplné analogii s rozvojem funkce více proměnných máme i pro funkcionály “Taylorův rozvoj”.

Píšeme (pro $m=1$)

$$\begin{aligned}
S[f] &= S[f_0] + \int_{\Omega} \frac{\delta S[f]}{\delta f(y_1)} \Big|_{f=f_0} \{f(y_1) - f_0(y_1)\} dy_1 + \\
\frac{1}{2!} \iint_{\Omega} \frac{\delta^2 S[f]}{\delta f(y_1) \delta f(y_2)} \Big|_{f=f_0} &\{f(y_1) - f_0(y_1)\} \{f(y_2) - f_0(y_2)\} dy_1 dy_2 + \dots
\end{aligned} \tag{10.14}$$

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)

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

Pro klasickou trajektorii

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

Dále pak

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(\bar{t}) \delta x(t)} &= -\frac{m c^3}{\{c^2 - x'^2(t)\}^{3/2}} \frac{\delta x''(t)}{\delta x(\bar{t})} - m c^3 x''(t) \frac{\delta}{\delta x(\bar{t})} \frac{1}{\{c^2 - x'^2(t)\}^{3/2}} = \\ &= -\frac{m c^3}{\{c^2 - x'^2(t)\}^{3/2}} \frac{d^2 \delta(t-\bar{t})}{d\bar{t}^2} - m c^3 x''(t) \frac{\delta}{\delta x(\bar{t})} \frac{1}{\{c^2 - x'^2(t)\}^{3/2}} . \end{aligned} \quad (10.18)$$

Pro klasickou trajektorii

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

Přírůstek účinku je

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

Klasický účinek je

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

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)

$$K^{(J)}(q_b, t_b | q_a, t_a) = \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S^{(J)}\right\} d[q(t)] \quad , \quad (11.1)$$

$$S^{(J)} = S + S_J = \int_{t_a}^{t_b} L(q(t), \dot{q}(t)) dt + \int_{t_a}^{t_b} J(t) q(t) dt \quad .$$

Připomeňme, že pro $J(t)=0$

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = K(q_b, t_b | q_a, t_a) = \langle q_b | \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_b - t_a)\right\} | q_a \rangle =$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \langle q_b | n \rangle \exp\{-i E_n (t_b - t_a)\} \langle n | q_a \rangle \quad . \quad (11.2)$$

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

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

Vhodný limitní přechod

$$t_i \rightarrow -(1-i\varepsilon)\infty \quad , \quad t_f \rightarrow (1-i\varepsilon)\infty \quad , \quad \varepsilon > 0 \quad (11.4)$$

vybere základní stavy – ostatní členy rychle oscilují, takže

$$\lim_{\substack{t_i \rightarrow -(1-i\varepsilon)\infty \\ t_f \rightarrow (1-i\varepsilon)\infty}} K(q_f, t_f | q_b, t_b) K(q_a, t_a | q_i, t_i) \exp\left\{i \frac{E_0}{\hbar} (t_f - t_i)\right\} =$$

$$N \psi_0^*(q_b, t_b) \psi_0(q_a, t_a) \quad , \quad N = \psi_0^*(q_i) \psi_0(q_f) \quad . \quad (11.5)$$

Vytvořující funkcionál definujeme jako

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

a jeho explicitní vyjádření je tedy

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

Přepsáním dostáváme jiný častý výraz pro vytvořující funkcionál

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

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

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

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

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

Pro důkaz (11.9) postupujeme takto: Platí

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

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

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

Vynecháním rozkladu jednotkového operátoru v posledním výrazu dostáváme konečně

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

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 $q(t_1) \dots q(t_n)$ v integrandu dráhového integrálu vznikne právě uvedenou funkcionální derivací. Greenova funkce je speciálním případem (11.9)

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

12. Schwingerova formulace kvantové mechaniky

Vycházíme ze vztahu (9.6), který si zapíšeme jako

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

Operátor časového uspořádání rozšíříme na

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

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

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

Rozepsáním (12.1) dostáváme Schwingerovu základní rovnici

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

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

Máme

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

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

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

Pro účinek

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

dostáváme

$$\frac{\delta S[\hat{q}]}{\delta \hat{q}(t_1)} = \int_{t_a}^{t_b} \left[m \hat{q}(t) \frac{d\delta(t-t_1)}{dt} - \frac{\partial U(\hat{q}(t))}{\partial \hat{q}(t)} \delta(t-t_1) \right] dt \Rightarrow$$

$$\frac{\delta S[\hat{q}]}{\delta \hat{q}(t_1)} = - \left[m \frac{d^2 \hat{q}(t_1)}{dt_1^2} + \frac{\partial U(\hat{q}(t_1))}{\partial \hat{q}(t_1)} \right] = 0 \quad . \quad (12.8)$$

a

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

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

$$\hat{T}^* \left\{ \hat{q}(t_1) \frac{d^2 \hat{q}(t_2)}{dt_2^2} \right\} = \frac{d^2}{dt_2^2} \hat{T} \{ \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) \} =$$

$$\frac{d^2}{dt_2^2} \left[\theta(t_1 - t_2) \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) + \theta(t_2 - t_1) \hat{q}(t_2) \hat{q}(t_1) \right] =$$

$$\frac{d}{dt_2} \left[\theta(t_1 - t_2) \hat{q}(t_1) \frac{d}{dt_2} \hat{q}(t_2) + \theta(t_2 - t_1) \frac{d}{dt_2} \hat{q}(t_2) \hat{q}(t_1) \right] =$$

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

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

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

13. Vytvořující funkcionál pro harmonický oscilátor

Připomeňme, že pro $J(t)=0$

$$K(q_2, t_2 | q_1, t_1) =$$

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

Explicitní vyjádření vytvořujícího funkcionálu je

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

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

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

Účinek je

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} f &= -\frac{m\omega}{2\hbar} [x_0^2(t_1) + x_0^2(t_2)] + \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{m}{2} \dot{x}_0^2 - \frac{m\omega^2}{2} x_0^2 \right] dt - \\ &\frac{m\omega}{2\hbar} [x_J^2(t_1) + x_J^2(t_2)] + \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{m}{2} \dot{x}_J^2 - \frac{m\omega^2}{2} x_J^2 + Jx_J \right] dt - \\ &\frac{m\omega}{\hbar} [x_0(t_1)x_J(t_1) + x_0(t_2)x_J(t_2)] + \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} [m\dot{x}_0\dot{x}_J - m\omega^2 x_0 x_J + Jx_0] dt . \end{aligned} \quad (13.7)$$

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

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

Dostáváme tak

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

Se smíšenými okrajovými podmínkami pro $x_J(t)$

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

dostaneme požadovaný výsledek

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

Vytvořující funkcionál tak můžeme psát jako

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

Označili jsme

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

kde

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

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

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

pro kterou platí

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

Máme tak

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

Po dosazení do (13.12) dostáváme

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

Řešení homogenní rovnice je

$$x_0(t) = \frac{1}{\sin\omega T} [Q_1 \sin\omega(t_2-t) + Q_2 \sin\omega(t-t_1)] \quad , \quad (13.19)$$

$$Q_1 = q_1 - x_J(t_1) \quad , \quad Q_2 = q_2 - x_J(t_2) \quad .$$

Dosazením do (13.14) a pak (13.13) dostáváme

$$W[0] = \frac{m\omega}{\pi\hbar} \left[\frac{1}{2i\sin(\omega T)} \right]^{1/2} \exp \left\{ i \frac{\omega T}{2} \right\} \quad (13.20)$$

$$\iint dQ_1 dQ_2 \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T} [(Q_1^2 + Q_2^2) \exp\{i\omega T\} - 2Q_1 Q_2] \right\} \quad .$$

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

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

$$\cdot \frac{i}{2m\omega} \int_{t_1}^{t_2} \exp\{-i\omega|t_a-\tau|\} J(\tau) d\tau \quad ,$$

tedy

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

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

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

Připomeňme, že

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

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

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

Pokud potřebujeme počítat s hybností, píšeme

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

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

$$\begin{aligned} \frac{m\omega\hbar}{2} = \langle 0 | \hat{p}^2(t) | 0 \rangle = \\ \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{m^2}{\varepsilon^2} \left(\left. \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t+\varepsilon)^2} \right|_{J=0} + \left. \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t)^2} \right|_{J=0} - 2 \left. \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(t+\varepsilon) \delta J(t)} \right|_{J=0} \right) \end{aligned} \quad (13.27)$$

a komutační relace jako

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

14. Stručný náznak počítání pro volné skalární pole

Analogicky jako v kvantové mechanice hledáme amplitudu pravděpodobnosti přechodu

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

kde účinek je

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

Budeme počítat vytvořující funkcionál

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

kde

$$N = \int D[\phi] \exp \left\{ i \int d^4 x \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + J \phi \right] \right\} \quad , \quad (14.4)$$

$$D = \int D[\phi_0] \exp \left\{ i \int d^4 x \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \phi_0 \partial^\mu \phi_0 - \frac{1}{2} m^2 \phi_0^2 \right] \right\} \quad .$$

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

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m^2) \phi_J = J \quad (14.5)$$

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

$$S[\phi_J + \phi_0] = \int d^4 x \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \phi_J \partial^\mu \phi_J - \frac{1}{2} m^2 \phi_J^2 + J \phi_J \right] +$$

$$\int d^4 x \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \phi_0 \partial^\mu \phi_0 - \frac{1}{2} m^2 \phi_0^2 \right] +$$

$$\int d^4 x \left[\partial_\mu \phi_J \partial^\mu \phi_0 - m^2 \phi_J \phi_0 + J \phi_0 \right] \quad . \quad (14.6)$$

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

$$\partial_\mu \phi_J \partial^\mu \phi_0 = -\phi_0 \partial_\mu \partial^\mu \phi_J \quad , \quad (14.7)$$

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

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

Známe-li Greenovu funkci rovnice (14.5)

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

můžeme psát

$$\phi_J(x) = i \int d^4 x' \Delta(x-x') J(x') \quad (14.10)$$

a vytvořující funkcionál je

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

Greenovu funkci snadno vyjádříme jako Fourierovu transformaci

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

Dvoubodová funkce je

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

Čtyřbodová funkce je pak

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