Функциональный интеграл

Побойко Игорь

9 апреля 2017 г.

Запаздывающая функция Грина

В данном семинаре мы построим представление запаздывающего пропагатора через функциональный интеграл:

$$G^R(x,y,T>0) \equiv \langle x|\,\hat{U}(T)\,|y\rangle \tag{1}$$

Временная дискретизация и оператор эволюции

Для удобства предположим, что в гамильтониане импульс и координата разделяются; тем самым, гамильтониан имеет вид $H(x,p) = K(p) + V(x)$ (кинетическая и потенциальные энергии)[1]. Разобьём отрезок времени длины T на $N \to \infty$ одинаковых кусочков размера $\epsilon = \frac{T}{N} \to 0$, и представим оператор эволюции в виде $\hat{U}(T) = \prod_{i=1}^{N} \hat{U}(\epsilon)$. В свою очередь, эволюцию на бесконечно малое время ϵ можно записать в виде[2] $\hat{U}(\epsilon \to 0) = e^{-i\hat{H}\epsilon} \simeq e^{-i\hat{V}\epsilon}e^{-i\hat{K}\epsilon}$. Тем самым, мы получаем выражение для оператора эволюции в виде произведения $2N$ множителей. Удобно каждому из них «приписать» своё время $t_k = k\epsilon$ (оно было бы, если бы мы рассматривали гамильтониан, зависящий от времени):

$$\hat{U}(t) \underset{\epsilon\to 0}{=} \underbrace{e^{-i\hat{V}\epsilon}e^{-i\hat{K}\epsilon}}_{t=t_N=T} \cdot \ldots \cdot \underbrace{e^{-i\hat{V}\epsilon}e^{-i\hat{K}\epsilon}}_{t=t_1=0}$$

Вставим после каждого члена $e^{-i\hat{K}\epsilon}$ (при $t = t_k$) единицу в виде разложения по координатному базису $\mathbb{I} = \int dx_k\,|x_k\rangle\langle x_k|$, а после членов $e^{-i\hat{V}\epsilon}$ — по импульсному $\mathbb{I} = \int (dp_k)\,|p_k\rangle\langle p_k|$

$$G^R(x,y,t>0) \underset{\epsilon\to 0}{=} \int \prod_{k=1}^{N-1} dx_k \int \prod_{k=1}^{N} (dp_k) \underbrace{\langle x_N = x|\,e^{-i\hat{V}\epsilon}\,|p_N\rangle\langle p_N|\,e^{-i\hat{K}\epsilon}\,|x_{N-1}\rangle}_{t=t_N} \cdot \ldots \cdot \underbrace{\langle x_1|\,e^{-i\hat{V}\epsilon}\,|p_1\rangle\langle p_1|\,e^{-i\hat{K}\epsilon}\,|x_0 = y\rangle}_{t=t_1} \tag{2}$$

Поскольку операторы $e^{-i\hat{V}\epsilon}$ — собственные для координаты, а $e^{-i\hat{K}\epsilon}$ — для импульса, то блоки вычисляются согласно:

$$\langle x_k|\,e^{-i\hat{V}\epsilon}\,|p_k\rangle\langle p_k|\,e^{-i\hat{K}\epsilon}\,|x_{k-1}\rangle = e^{-iV(x_k)\epsilon}e^{ip_kx_k}e^{-iK(p_k)\epsilon}e^{-ip_kx_{k-1}} \tag{3}$$

Собирая аккуратно члены, мы приходим к выражению:

$$\boxed{G^R(x,y,t>0) \underset{\epsilon\to 0}{=} \int \prod_{k=1}^{N-1} dx_k \int \prod_{k=1}^{N} (dp_k) \exp\left(i\epsilon\sum_{k=1}^{N}\left(p_k\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} - H(x_k,p_k)\right)\right)} \tag{4}$$

Функциональный интеграл

В пределе $N \to \infty$ и $\epsilon \to 0$, набор величин $\{x_k\}_{k=0}^{N}$ и $\{p_k\}_{k=1}^{N}$ можно представлять в виде функций уже непрерывного параметра — времени t, так что $x(t_k = \epsilon k) = x_k$ (и аналогично с импульсом). Поскольку $x_0 = y$ и $x_N = x$ — фиксированы, и по ним не происходит интегрирование, то для соответствующих функций это значит $x(t=0) = y$ и $x(t=T) = x$. Для импульсов никакого такого требования нет.

Забудем на время, что построенные таким образом функции $x(t)$ и $p(t)$, вообще говоря, чаще всего будут оказываться недифференцируемы. В таком случае в экспоненте стоит конечная аппроксимация интеграла, представляющего собой классическое действие $S[x(t),p(t)]$, записанное в гамильтоновом формализме:

---

[1] Случай общего положения — неразделяемый гамильтониан — разбирается в ПШ, глава 9.1 «Интеграл по путям в квантовой механике», стр. 277. В этом случае всё рассказанное тоже будет верно, просто гамильтониан нужно брать *упорядоченным по Вейлю*

[2] Согласно *формуле Бэйкера-Кэмпбела-Хаусдорфа (Baker-Campbell-Hausdorff formula)*, $e^Xe^Y = e^{X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]+\cdots}$; тем самым поправки к этому выражению пропорциональны $[\hat{V}\epsilon,\hat{K}\epsilon] \propto \epsilon^2$, то есть вымирают в пределе $\epsilon \to 0$

$$S[x(t),p(t)] = \int_0^T dt(p(t)\dot{x}(t) - H(x(t),p(t)))$$

Интегрирование по набору промежуточных координат и импульсов записывается через формальный символ "интегрирования по всем функциям"; понимать его пока нужно исключительно в смысле временной и пространственной дискретизации:

$$\int \mathcal{D}[x(t)] \equiv \int \prod_{k=1}^{N-1} dx_k, \quad \int \mathcal{D}[p(t)] \equiv \int \prod_{k=1}^{N} (dp_k) \tag{5}$$

Наконец, поскольку в нашем построении $x_0 = y$ и $x_N = x$, то интегрирование происходит с так называемыми "закреплёнными концами" (то есть с условием $x(0) = y$ и $x(t) = x$). Тем самым, с учётом определения "меры функционального интеграла" (5), мы получаем представление запаздывающего пропагатора через функциональный интеграл:

$$\boxed{G^R(x,y,T>0) = \int\limits_{\substack{x(0)=y \\ x(T)=x}} \mathcal{D}[x(t),p(t)] e^{iS[x(t),p(t)]}} \tag{6}$$

Взятие интеграла по импульсам Обратим внимание, для обычной нерелятивистской частицы кинетическая энергия имеет вид $K(p) = \frac{p^2}{2m}$. Это позволяет нам взять интегралы по p_k в выражении (4), поскольку они все гауссовы:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} (dp_k) \exp\left(i\epsilon\left(p_k \frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} - \frac{p_k^2}{2m}\right)\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\epsilon}} \exp\left(i\epsilon \frac{m}{2}\left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon}\right)^2\right) \tag{7}$$

$$\boxed{G^R(x,y,t>0) \underset{\epsilon\to 0}{=} \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon}\right)^{N/2} \int \prod_{k=1}^{N-1} dx_k \exp\left(i\epsilon \sum_{k=1}^{N} \left(\frac{m}{2}\left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon}\right)^2 - V(x_k)\right)\right)} \tag{8}$$

Если в этом случае модифицировать "меру" согласно $\mathcal{D}[x(t)] \equiv \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon}\right)^{N/2} \prod_{k=1}^{N-1} \int dx_k$, и заметить, что в экспоненте стоит аппроксимация классического действия в лагранжевом формализме — $S[x(t)] = \int dt \left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)\right)$, то мы придём к альтернативному представлению пропагатора через другой функциональный интеграл:

$$\boxed{G^R(x,y,T>0) = \int\limits_{\substack{x(0)=y \\ x(T)=x}} \mathcal{D}[x(t)] e^{iS[x(t)]}} \tag{9}$$

Такое же выражение можно было бы получить на функциональном языке, «взяв» гауссов интеграл по импульсам согласно:

$$\int \mathcal{D}[p(t)] \exp\left(-i \int dt \frac{(p(t) - m\dot{x}(t))^2}{2m}\right) = 1 \tag{10}$$

(в действительности это не единица, а некоторая бесконечная константа — которую мы «спрятали» в переопределение меры $\mathcal{D}[x(t)]$). Обратим внимание на следующие вещи. Во-первых, исходное представление (через интеграл по импульсам и координатам) в каком-то смысле более фундаментально; альтернативное представление работает только в случае квадратичной зависимости кинетической энергии от импульса. Во-вторых, в исходном представлении "мера" определялась приятней, чем в альтернативном; в ней не было неприятных зависимостей от масс и дискретизации ϵ.

У выражения для амплитуды перехода (пропагатора) через функциональны интеграл имеется прозрачный физический смысл. Квантовая частица из точки y в точку x может попасть каким угодно путём - по произвольной траектории, соединяющий эти две точки. При этом каждый путь имеет "вес" e^{iS}. Результирующая амплитуда складывается за счёт интерференции по всем траекториям.

Вообще говоря, каждый раз, когда пишется функциональный интеграл, нужно подразумевать, как именно следует "расшифровывать" меру $\mathcal{D}[x(t)]$; как мы видим, бывают разные варианты. Чаще, однако, это опускают. Два определения меры, которые мы тут получили, отличаются всего лишь на константу (хоть и бесконечную, и зависящую явно от дискретизации) — однако, что существенно, они совершенно не зависят от самой траектории x_k (или, альтернативно, $x(t)$). В практически всех приложениях мы будем иметь дело с выражениями, в которых имеется отношение двух разных функциональных интегралов, в которых эта константа благополучно сокращается и, вообще говоря, может быть выбрана произвольной. В таких (и только таких!) случаях можно себе позволить опускать "расшифровку" меры функционального интегрирования.

Свойства функционального интеграла

- Имея «кратный функциональный интеграл» $\int \mathcal{D}[x(t)]\mathcal{D}[p(t)]\ldots$, можно переходить к «повторному» $\int \mathcal{D}[x(t)]\ldots\int \mathcal{D}[p(t)]\ldots$
- В функциональном интеграле можно сдвигать интеграл на константу[3] $\int \mathcal{D}[x(t)]\cdot I[x(t)] = \int \mathcal{D}[x(t)]\cdot I[x(t)-f(t)]$ для произвольной функции $f(t)$.
- Наконец, функциональный интеграл можно «сшивать»:

$$\int dy \int\limits_{\substack{x_1(t_a)=x_a\\ x_1(t)=y}} \mathcal{D}[x_1(t)] \int\limits_{\substack{x_2(t)=y\\ x_2(t_b)=x_b}} \mathcal{D}[x_2(t)] \equiv \int\limits_{\substack{x(t_a)=x_a\\ x(t_b)=x_b}} \mathcal{D}[x(t)] \tag{11}$$

Это же явно следует из определения пропагатора: $\int dy \, \langle x_b| \hat{U}(t_b,t)\,|y\rangle \,\langle y|\,\hat{U}(t,t_a)\,|x_a\rangle \equiv \langle x_b|\,\hat{U}(t_b,t_a)\,|x_a\rangle$. Остальные свойства тривиально следуют из нашего определения функционального интеграла через дискретизацию.

Квантовый гармонический осциллятор

Давайте вычислим функциональный интеграл для пропагатора квантового гармонического осциллятора: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}$. Изложенный тут рецепт тривиально обобщается на произвольные функциональные интегралы. Во-первых: мы не хотим иметь дело с мерой функционального интеграла, которая как правило содержит бесконечную константу, зависящую от дискретизации. Стандартный трюк для того, чтобы от неё избавиться — это рассмотреть отношение функциональных интегралов; например, пропагатора осциллятора и пропагатора свободной частицы, который нам известен:

$$\frac{G_R(x,y,T)}{G_R^{(0)}(x-y,T)} = \frac{\int_{x(0)=y}^{x(T)=x} \mathcal{D}[x(t)] \exp\left(i\int_0^T \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right] dt\right)}{\int_{x(0)=y}^{x(T)=x} \mathcal{D}[x(t)] \exp\left(i\int_0^T \frac{m\dot{x}^2}{2} dt\right)} \tag{12}$$

В таком случае, покуда мера в числителе и знаменателе выбрана одинаковой, эта константа нас волновать не должна. Во-вторых: мы имеем дело с гауссовым функциональным интегралом — действие квадратично по $x(t)$, и его можно записать в виде

$$S[x(t)] = \frac{m}{2}\int x(t)\cdot \hat{L}x(t)dt \tag{13}$$

с линейным оператором $\hat{L} = -\partial_t^2 - \omega^2$. Этот линейный оператор определяет классические уравнения движения: $\hat{L}x_{cl}(t) = 0$. Давайте найдём классическую траекторию, которая удовлетворяет нашим граничным условиям $x_{cl}(0) = y$ и $x_{cl}(T) = x$, и сделаем подстановку в функциональный интеграл $x(t) = x_{cl}(t) + z(t)$. В таком случае мы будем иметь дело с интегралом по всем функциям $z(t)$, но которые уже будут удовлетворять нулевым граничным условиям. Сдвижка же приведёт к добавке к действию (это верно только потому, что действие квадратично, а траектория x_{cl} удовлетворяет классическим уравнениям движения):

$$S[x_{cl}(t) + z(t)] = S_{cl} + S[z(t)] \tag{14}$$

Для действия записанного в виде $S[x(t)] = \frac{m}{2}\int x(t)\hat{L}x(t)dt$ может показаться, что $S[x_{cl}(t)] = 0$ в силу $\hat{L}x_{cl}(t) = 0$; что, конечно, не так — для того, чтобы привести действие к необходимому виду, мы проинтегрировали по частям, и для классической траектории внеинтегральный член отличен от нуля. Для траектории $z(t)$ с нулевыми граничными условиями внеинтегральный член очевидным образом равен нулю. В частности, для свободной частицы классическая траектория соответствует частице, летящей равномерно и прямолинейно $x(t) = y + \frac{x-y}{T}t$, и действие на такой траектории равно $S_{cl} = \frac{m(x-y)^2}{2T}$. Благодаря этому свойству мы можем искать только пропагатор при $x = y = 0$, что в данной задаче проще:

$$G_R(x,y,T) = G_R(0,0,T)e^{iS_{cl}(x,y,T)} \tag{15}$$

(опять-же, для классической частицы это свойство очевидным образом выполняется). Наконец, последний шаг — произвольную функцию $z(t)$ можно разложить по базису собственных функций оператора $\hat{L}$, который для осциллятора выглядит следующим образом:

$$z(t) = \sum_n c_n z_n(t) \tag{16}$$

$$\hat{L}z_n(t) = \lambda_n z_n(t), \quad z_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}}\sin\frac{\pi n t}{T}, \quad \lambda_n = \frac{\pi^2 n^2}{T^2} - \omega^2 \tag{17}$$

Меру функционального интеграла можно в таком случае выбрать в следующем виде: $\int \mathcal{D}[z(t)] \equiv \mathcal{N}\prod_{n=1}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dc_n$ (с бесконечной константой $\mathcal{N}$, одинаковой для числителя и знаменателя). Очевидно, что при этом мы действительно учтём

[3] Менее тривиальные замены координат могут потребовать вычисления якобиана соответствующего перехода. Конкретный вид якобиана можно построить, выяснив, как будет выглядеть его дискретный аналог

все функции по одному разу; менее очевидно, но тоже верно, что эта замена — просто замена базиса, она даётся ортогональной матрицей (в дискретном случае), и якобиан такого перехода будет единичным. Наконец, в силу ортонормированности набора $z_n(t)$ мы немедленно замечаем, что действие факторизуется:

$$S[\sum_n c_n z_n(t)] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{m}{2} \lambda_n c_n^2 \tag{18}$$

Поэтому мы можем записать (записывая явно бесконечную константу, связанную с мер

$$G_R(0,0,T) = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=1}^{\infty} dc_n \exp\left(i\frac{m}{2}\lambda_n c_n^2\right) = \mathcal{N} \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi i}{m\left(\frac{\pi^2 n^2}{T^2} - \omega^2\right)}} \tag{19}$$

Наконец, заметив, что знаменатель равен числителю с $\omega = 0$, мы получаем, что все «лишние» константы сокращаются и остаётся следующее соотношение:

$$\frac{G_R(0,0,T)}{G_R^{(0)}(0,T)} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2}\right)^{-1/2} = \sqrt{\frac{\omega T}{\sin \omega T}} \tag{20}$$

Вычисление такого бесконечного произведения — отдельная задача; при этом оно хорошо определено, поскольку при $n \to \infty$ члены стремятся к единице. Можно, например, заметить, что функция в левой и правой части обращается в ноль при $\omega T = \pi n, \quad n \in \mathbb{Z}\backslash\{0\}$, и что при $\omega T = 0$ она равна единице. Это не является доказательством этого тождества, но является мнемоническим правилом, позволяющим его запомнить. Таким образом, мы получаем:

$$\boxed{G_R(0,0,T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \sin \omega T}}} \tag{21}$$

(зависимость от координат восстанавливается добавлением классического действия).

Спектр

Из знания запаздывающего пропагатора можно извлечь, например, спектр гамильтониана. Для этого его можно явно вычислить в базисе собственных функций гамильтониана:

$$G_R(x,y,T) = \langle x| e^{-i\hat{H}T} |y\rangle = \sum_n \langle x|n\rangle e^{-iE_nT} \langle n|y\rangle = \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(y)e^{-iE_nT} \tag{22}$$

Полученный пропагатор тоже можно представить в таком виде. Действительно:

$$G_R(0,0,T) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi(e^{i\omega T} - e^{-i\omega T})}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi}} e^{-i\omega T/2}(1 - e^{-2i\omega T})^{-1/2} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n C_{-1/2}^n e^{-i\omega T(2n+\frac{1}{2})} \tag{23}$$

и мы получили часть спектра — $E_{2n} = \omega(2n + \frac{1}{2})$. Можно задаться резонным вопросом — куда же делась половина спектра? Ответ прост: дело в том, что пропагатор $G_R(0,0,T)$ пропорционален волновым функциям в нуле $\psi_n(0)$; а для функций с нечётным n это значение равно нулю, поскольку они сами нечётны. Для того, чтобы получить весь спектр, было бы правильно рассмотреть следующую величину:

$$\boxed{\int dx G_R(x,x,T) = \sum_n e^{-iE_nT}} \tag{24}$$

Эквивалентность интеграла по траекториям и уравнения Шрёдингера

Наконец, обсудим вопрос о том, как из интеграла по траекториям можно было бы в обратную сторону вывести уравнение Шрёдингера. Для этого рассмотрим эволюцию на бесконечно малое время ϵ, и запишем:

$$\psi(x,t+\epsilon) = \langle x| \hat{U}(\epsilon) |\psi(t)\rangle = \int d\eta \langle x| \hat{U}(\epsilon) |x+\eta\rangle \psi(x+\eta,t) \tag{25}$$

Для пропагатора на бесконечно малое время мы можем воспользоваться видом через функциональный интеграл (тут мы восстановили $\hbar$):

$$\langle x| \hat{U}(\epsilon) |x+\eta\rangle = \int_{x(t)=x+\eta}^{x(t+\epsilon)=x} \mathcal{D}[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int dt \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x(t))\right]\right) \approx \mathcal{N} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m\eta^2}{2\epsilon} - \epsilon V(x)\right)\right) \tag{26}$$

В силу малости ϵ, член с потенциальной энергией можно разложить $e^{-i\epsilon V(x)/\hbar} \approx 1 - i\epsilon V(x)/\hbar$. По η происходит интегрирование, и множитель $\exp\left(\frac{im\eta^2}{2\epsilon\hbar}\right)$ говорит, что типичные значения $\eta \propto \sqrt{\epsilon}$. Поэтому подынтегральную волновую функцию можно разложит в ряд по ϵ, оставив первые три члена:

$$\psi(x+\eta,t) \approx \psi(x,t) + \eta\partial_x\psi(x,t) + \frac{1}{2}\eta^2\partial_x^2\psi(x,t) \tag{27}$$

После такого разложения, можно явно проинтегрировать по η и получить:

$$\int d\eta \cdot e^{im\eta^2/2\epsilon\hbar}\psi(x+\eta,t) \approx \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}\left[1 + i\epsilon\frac{\hbar}{2m}\partial_x^2\right]\psi(x,t) \tag{28}$$

Поскольку при $\epsilon = 0$ очевидным образом должно иметь место тождество, мы заключаем, что $\mathcal{N} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}}$ (что, впрочем, известно и из дискретного представления для функционального интеграла (8)). Собирая ведущие по ϵ члены, мы получаем:

$$\psi(x,t+\epsilon) = \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}V(x) + i\epsilon\frac{\hbar}{2m}\partial_x^2\right)\psi(x,t), \tag{29}$$

Наконец, заменяя $\frac{\psi(x,t+\epsilon)-\psi(x,t)}{\epsilon} \simeq \partial_t\psi(x,t)$, мы немедленно воспроизводим уравнение Шрёдингера:

$$i\partial_t\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x,t) \tag{30}$$

Данный пример был достаточно академичен, и ничего нового нам не дал. Однако, например, для диффузии (или, более общо — классической частицы, движущийся в вязкой среде под действием случайных Ланжевеновских сил) представление через функциональный интеграл строится достаточно просто и прямолинейно. Подобным преобразованием можно вывести, например, уравнение Фоккера-Планка для функции распределения $P(x,t)$.