ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

ИФВЭ 2009–2
ОЭФ

В.В. Брагута

КОНТИНУАЛЬНЫЙ ИНТЕГРАЛ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Протвино 2009

УДК 539.182 М–24

Аннотация

Брагута В.В. Континуальный интеграл в квантовой механике: Препринт ИФВЭ 2009–2. – Протвино, 2009. – 7 с., библиогр.: 3.

Основная задача данной статьи в том, чтобы познакомить читателя с математическим методом — континуальным интегралом, который реализует альтернативный подход к квантовой механике, но, что еще важнее, в своем более общем виде является ключом к глубокому пониманию квантовой теории поля и ее применений, простирающихся от физики частиц до фазовых переходов и свойств квантовых газов. В частности, в работе показано, что оператор эволюции квантовомеханической волновой функции можно записать как интеграл по путям, что дает новый взгляд на эволюцию квантовомеханической системы. Используя континуальный интеграл, автор проводит вычисление операторов эволюции простейших квантовомеханических систем: свободной частицы, гармонического осциллятора и квазиклассического движения в произвольном потенциале.

Abstract

Braguta V.V. Path Integrals in Quantum Mechanics: IHEP Preprint 2009–2. – Protvino, 2009. – p. 7, refs.: 3.

The main aim of this preprint is to give brief introduction into the approach - path integral which realizes alternative approach to quantum mechanic and what is more important it has become the key to deep understanding of quantum field theory which extends from particle physics to the physics of phase transition. In particular, it is shown in the preprint that the evolution of wave function in quantum mechanic can be written as the path integral, what gives new insight to the evolution in quantum mechanic. Using the path integral the simplest quantum mechanical problems have been solved: free particle, harmonic oscillator and semiclassical motion in the arbitrary potential.

Введение

Основная задача данной статьи (а вернее, методического пособия) состоит в том, чтобы познакомить читателя с математическим методом — континуальным интегралом, который реализует альтернативный подход к квантовой механике, но, что еще важнее, в своем более общем виде является ключом к глубокому пониманию квантовой теории поля и ее применений, простирающихся от физики частиц до фазовых переходов и свойств квантовых газов.

Континуальные интегралы (интегралы по путям) — это математические объекты, которые можно рассматривать как обобщение обычных интегралов на случай бесконечного числа переменных, представляемых траекториями (путями). У них такие же алгебраические свойства, как и у обычных интегралов, но с точки зрения анализа, они обладают также некоторыми новыми свойствами. Континуальный интеграл — это мощный инструмент для изучения квантовой механики, потому что он особенно четко выделяет соответствие между классической и квантовой механикой. Физические величины являются средними по всем возможным траекториям, но в квазиклассическом приближении $\hbar \to 0$ ведущий вклад дается траекториями, наиболее близкими к классическим. Таким образом, континуальный интеграл способствует интуитивному пониманию и дает возможность сравнительно просто рассчитывать физические величины в квазиклассическом приближении.

Формулировка квантовой механики, основанная на континуальных интегралах, даже если и кажется математически более сложной, чем обычный формализм дифференциальных уравнений в частных производных, тем не менее, она хорошо приспособлена к описанию систем с большим числом степеней свободы, где формализм Шредингерова типа гораздо менее полезен. Поэтому она позволяет легко перейти от квантовой механики с небольшим числом частиц к квантовой теории поля или к статистической физике. В частности, обобщенные континуальные интегралы (полевые интегралы) приводят к пониманию глубоких взаимосвязей между квантовой теорией поля и критическими явлениями в фазовых переходах второго рода.

Основной целью данного пособия является демонстрация метода континуального интеграла применительно к простейшим задачам квантовой механики. В частности, будет

показано, каким образом оператор эволюции волновой функции связан с интегралом по путям. Используя данное представление, будет выведен оператор эволюции для свободной частицы, гармонического осциллятора и квазиклассического движения в произвольном потенциале.

1. Континуальный интеграл по фазовому пространству

В этом разделе будет выведена формула, выражающая оператор эволюции волновой функции в терминах континуального интеграла. Однако прежде чем вывести эту формулу, дадим определение оператора эволюции. В нерелятивистской квантовой механике состояние системы с координатами q в момент времени t определяется волновой функцией $\Psi(q,t)$. Далее будем считать, что мы работаем в одном измерении $q = x$. Изменение волновой функции со временем задается уравнением Шредингера [1]:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x,t), \tag{1}$$

где

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x). \tag{2}$$

В последнем уравнении $\hat{p} = -i\hbar\, d/dx$ — оператор импульса, $U(x)$ — потенциальная энергия. Далее выберем систему единиц, в которой $\hbar = 1$.

Решение уравнения (1) можно записать с помощью оператора эволюции $U(t,t_0)$:

$$\Psi(t,x) = U(t,t_0)\Psi(t_0,x). \tag{3}$$

Нетрудно понять, что оператор эволюции в пределе $\delta t = t - t_0 \to 0$ можно записать в виде

$$U(t_0+\delta t, t_0) = 1 - i\hat{H}\delta t + O(\delta t^2). \tag{4}$$

Перейдем теперь к выводу представления оператора эволюции через интеграл по путям [2]. В дальнейшем нам будут необходимы собственные векторы оператора координаты $\hat{x}$ и импульса $\hat{p}$, которые можно определить следующим образом:

$$\hat{x}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle, \quad \hat{p}|p_0\rangle = p_0|p_0\rangle,$$
$$\langle p|x\rangle = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} e^{-ipx}, \quad \langle x|p\rangle = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} e^{ipx}. \tag{5}$$

Учитывая формулу (4), нетрудно найти матричный элемент $\langle p|U(t+\delta t,t)|x\rangle$:

$$\langle p|U(t+\delta t,t)|x\rangle = \Big(1 - iH(p,x)\delta t\Big) \times \langle p|x\rangle + O(\delta t^2) = \exp\left(-iH(p,x)\delta t\right) \times \langle p|x\rangle + O(\delta t^2), \tag{6}$$

где $H(p,x) = p^2/2m + U(x)$.

Выведем теперь выражение для оператора эволюции за конечное время $U(t_2,t_1)$. Для этого разобьем интервал (t_1,t_2) на N интервалов длиной δt. Тогда ядро оператора эволюции $\langle x'|U(t_2,t_1)|x\rangle$ можно представить в виде

$$\langle x'|U(t_2,t_1)|x\rangle = \langle x'|U(t_2,t_2-\delta t) \times U(t_2-\delta t, t_2-2\delta t)...U(t_1+2\delta t, t_1+\delta t) \times U(t_1+\delta t, t_1)|x\rangle. \tag{7}$$

Между любыми двумя операторами U вставим полный набор собственных векторов

$$\int dx|x\rangle\langle x| = 1. \tag{8}$$

Тогда формулу (7) можно переписать в следующем виде:

$$\langle x'|U(t_2,t_1)|x\rangle = \int \langle x'|U(t_2,t_1)|x_N\rangle \prod_{i=1}^{N} dx_i \langle x_i|U(t_2,t_1)|x_{i-1}\rangle. \tag{9}$$

В последней формуле предполагается, что $x_0 = x$. Далее применим формулу

$$\langle x_i|U(t_2,t_1)|x_{i-1}\rangle = \int dp_i \langle x_i|p_i\rangle\langle p_i|U(t_2,t_1)|x_{i-1}\rangle. \tag{10}$$

Подставляя эту формулу в формулу (9) и учитывая формулу (6), получаем выражение для ядра оператора эволюции:

$$\langle x'|U(t_2,t_1)|x\rangle = \int exp\Big\{i[p_{N+1}(x_{N+1}-x_N)+...+p_1(x_1-x_0)] - \\ -[H(p_{N+1},x_N)\delta t+...+H(p_1,x_0)\delta t]\Big\}\frac{dp_{N+1}}{2\pi}\prod_i \frac{dp_i dx_i}{2\pi}. \tag{11}$$

В последней формуле считается, что $x_{N+1} = x', x_0 = x$.

Перейдем теперь к пределу $N \to \infty,\ \delta t \to 0$. При этом число переменных интегрирования также стремится к бесконечности, и можно считать, что в пределе мы интегрируем по значениям функций $p(t), x(t)$ при всех t из интервала $t \in (t_2, t_1)$. На функцию $x(t)$ наложено условие

$$x(t_2) = x', \quad x(t_1) = x. \tag{12}$$

Показатель экспоненты в этом пределе переходит в интеграл

$$A = \int_{t_1}^{t_2} dt\Big(p(t)x(t) - H(p(t),q(t))\Big), \tag{13}$$

т. е. в классическое действие на интервале (t_1, t_2). Таким образом, мы получаем основной результат: матричный элемент оператора эволюции получается интегрированием фейнмановского функционала iA по всем траекториям $p(t), x(t)$ в фазовом пространстве, имеющем фиксированные значения x', x при $t = t_2, t = t_1$ соответственно. Мера интегрирования формально может быть записана в виде

$$\frac{dp(t_2)}{2\pi}\prod_t \frac{dp(t)dx(t)}{2\pi}\ . \tag{14}$$

Таким образом, если опустить одномерное интегрирование по конечному импульсу $p(t_2)$, то квантовомеханическая амплитуда перехода $\langle x', t_2|x, t_1\rangle$ записывается целиком в канонически инвариантных терминах классической механики функционала действия и меры Лиувилля. Окончательный ответ для оператора эволюции:

$$\langle x', t_2|x, t_1\rangle = \langle x'|U(t_2,t_1)|x\rangle = \int exp\Big\{i\int_{t_1}^{t_2} dt\Big(p(t)\dot{x}(t) - H(p(t),x(t))\Big)\Big\}\prod_t \frac{dpdx}{2\pi}\ . \tag{15}$$

Обратимся теперь к формуле (11). Так как мы использовали оператор Гамильтона квадратичный по импульсам, формулу (11) легко проинтегрировать по p_i. Выражение для функционального интеграла с учетом этого интегрирования можно записать в виде

$$\langle x', t_2 | x, t_1 \rangle = \frac{1}{N} \int exp\Big\{ i \int_{t_1}^{t_2} dt \Big(\frac{m\dot{x}^2(t)}{2} - U(x(t)) \Big) \Big\} \prod_t dx \ , \tag{16}$$

где

$$N^{-1} = \int exp\Big\{ -i \int_{t'}^{t''} dt \frac{p^2}{2m} \Big\} \prod_t \frac{dp}{2\pi} \ . \tag{17}$$

Здесь мы не будем вычислять значение нормировочного множителя. Отметим лишь то, что он не зависит от граничных условий.

2. Явное вычисление: гауссовы континуальные интегралы

Мы определили континуальный интеграл как формальный предел интеграла с дискретными временными интервалами. Поэтому может возникнуть опасение, что любое вычисление с использованием континуального интеграла потребует возвращения к его определению как к пределу интегралов с дискретными временными интервалами. К счастью, это не так — в большинстве вычислений нет необходимости ссылаться на предельный переход, что, с практической точки зрения, оправдывает введение нового математического объекта. Это будет проиллюстрировано в данном разделе сначала на примере свободного движения, а затем на примере гармонического осциллятора, так как обоим случаям соответствуют гауссовы континуальные интегралы [3].

В Заключении будет продемонстрировано применение континуального интеграла к задаче квазиклассического движения в одномерном потенциале.

2.1. Свободное движение

В случае свободного движения (для простоты в одном измерении) $V = 0$ евклидово действие представляет собой квадратичную форму по $x(t)$

$$A = \int_{t_1}^{t_2} dt \ \frac{1}{2} m\dot{x}^2(t), \tag{18}$$

и, следовательно, континуальный интеграл гауссов. Чтобы вычислить это интеграл, сделаем замену переменных $x(t) \to r(t)$ (сдвиг в каждый момент времени t):

$$x(t) = x_c(t) + r(t), \tag{19}$$

где функция $x_c(t)$ удовлетворяет граничным условиям

$$x_c(t_1) = x, \quad x_c(t_2) = x', \quad r(t_1) = 0, \quad r(t_2) = 0. \tag{20}$$

Действие принимает вид

$$A(x_c + r) = A(x_c) + A(r) + m \int_{t_1}^{t_2} dt \ \dot{x}(t)\dot{r}(t). \tag{21}$$

Слагаемое, линейное по r, можно записать в виде

$$\int_{t_1}^{t_2} dt\ \dot{x}(t)\dot{r}(t) = -\int_{t_1}^{t_2} dt\ \ddot{x}(t)r(t), \tag{22}$$

при интегрировании по частям использованы граничные условия (20).

Таким образом, линейный член обращается в нуль, если функция $x_c(t)$ является решением классического уравнения свободного движения:

$$m\ddot{x}_c(t) = 0. \tag{23}$$

Решение, удовлетворяющее условиям (20), есть

$$x_c(t) = x + \frac{t - t_1}{t_2 - t_1}(x' - x). \tag{24}$$

Отсюда получаем

$$A(x_c) = \frac{m}{2}\frac{(x' - x)^2}{t_2 - t_1}\ . \tag{25}$$

Так как замена переменных представляет собой сдвиг, якобиан преобразования равен 1, поэтому

$$\langle x', t_2 | x, t_1 \rangle = N \exp\left[i\frac{m}{2}\frac{(x' - x)^2}{t_2 - t_1} \right], \tag{26}$$

где N — нормировочный множитель, не зависящий от x', x. Чтобы посчитать N, нужно либо вернуться к дискретным временным интервалам, либо использовать какие-либо независимые сведения.

Если потенциал не равен нулю, то в общем случае точное вычисление произвести невозможно. Тем не менее, на коротких временных интервалах доминирует кинетический член. В ведущем порядке в потенциале можно заменить $x(t)$ на классическую траекторию $x_c(t)$.

2.2. Гармонический осциллятор

Гамильтониан одномерного гармонического осциллятора можно записать в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \tag{27}$$

где ω — константа. Действие имеет форму

$$A(q) = \int_{t_1}^{t_2} dt\ \left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2(t) - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2(t) \right] \tag{28}$$

и снова представляет собой квадратичную форму по $x(t)$. Поэтому континуальный интеграл по-прежнему гауссов.

Удобно разделить вычисление на несколько этапов. Простейшая часть, и в некотором отношении наиболее полезная, — это определение явной зависимости от граничных условий, т.е. от x, x'.

Сделаем замену переменных $x(t) \to r(t)$ (трансляция в каждый момент времени t), полагая

$$x(t) = x_c(t) + r(t), \tag{29}$$

где функции x_c и $r(t)$ удовлетворяют граничным условиям (20), и q_c определено ниже. Действие принимает вид

$$A(x_c + r) = A(x_c) + A(r) + m\int_{t_1}^{t_2} dt\ (\dot{x}_c(t)\dot{r}(t) - \omega^2 x_c(t) r(t)). \tag{30}$$

Проинтегрируем по частям слагаемое, линейное по r. Выберем в качестве функции $x_c(t)$ решение уравнения

$$m\ddot{x}_c(t) + m\omega^2 x_c(t) = 0, \tag{31}$$

и член, линейный по $r(t)$, обратится в нуль. Заметим, что $x_c(t)$ удовлетворяет классическому уравнению движения, т.е. уравнению движения в гармоническом потенциале. Действие (30) теперь свелось к сумме двух членов:

$$A(x) = A(x_c) + A(r), \tag{32}$$

где $A(x_c)$ — классическое действие на траектории x_c. Континуальный интеграл принимает следующий вид (якобиан равен 1):

$$\langle x', t_2 | x, t_1 \rangle = N \exp\Big[iA(x_c)\Big], \tag{33}$$

где N — не зависящий от граничных условий нормировочный множитель.

Классическое действие. Полагая $\tau = t_2 - t_1$, можно записать решение уравнения (31) следующим образом:

$$x_c(t) = \frac{1}{\sin\omega\tau}\Big(x\sin\omega(t_2 - t) + x'\sin\omega(t - t_1)\Big). \tag{34}$$

Чтобы облегчить вычисление классического действия, проинтегрируем по частям в выражении (28)

$$\int \dot{q}^2 dt = q\dot{q} - \int q\ddot{q}\ dt \tag{35}$$

и воспользуемся уравнением (31). Находим

$$A(x_c) = \frac{m\omega}{2\sin\omega\tau}[(x^2 + x'^2)\cos\omega\tau - 2xx']. \tag{36}$$

Окончательное выражение для оператора эволюции принимает вид

$$\langle x', t_2 | x, t_1 \rangle = N \exp\Big[i\frac{m\omega}{2\sin\omega\tau}\Big((x^2 + x'^2)\cos\omega\tau - 2xx'\Big)\Big]. \tag{37}$$

2.3. Квазиклассическое движение

Рассмотрим оператор эволюции движения частицы в одномерном произвольном потенциале $U(x)$. Однако, в отличие от предыдущих разделов, будем считать, что $\hbar \neq 1$. Тогда выражение (16) переписывается в виде

$$\langle x', t_2 | x, t_1 \rangle \sim \int exp\Big\{ i \frac{A(x)}{\hbar} \Big\} \prod_t dx, \tag{38}$$

где $A(q)$ — классическое действие:

$$A(x) = \int_{t_1}^{t_2} dt \Big(\frac{\dot{x}^2(t)}{2m} - U(x(t)) \Big). \tag{39}$$

В последней формуле сделаем замену переменных $x(t) = x_c(t) + r(t)$ с граничными условиями $x_c(t) = x,\ x_c(t') = x'$ и разложим действие по степеням $r(t)$. Тогда действие можно записать в виде

$$A(x) = \int_{t_1}^{t_2} dt \Big(\frac{m\dot{x}_c^2(t)}{2} - U(x_c(t)) - m\ddot{x}_c(t) r(t) - U'(x_c(t)) r(t) + O(r^2(t)) \Big). \tag{40}$$

Квазиклассическое движение — это движение в пределе $\hbar \to 0$. В этом пределе лидирующий вклад в интеграл (38) дает траектория, на которой классическое действие $A(q)$ имеет экстремум. Очевидно, что для того чтобы действие имело экстремум, необходимо обращение линейных членов в формуле (40) в ноль. Что приводит к уравнению

$$m\ddot{x}_c(t) + U'(x_c(t)) = 0. \tag{41}$$

Решением этого уравнения является классическая траектория. Член $A(q_c)$ выносится из континуального интеграла и дает лидирующее приближение в квазиклассическом приближении для оператора эволюции:

$$\langle x', t_2 | x, t_1 \rangle \sim exp\Big\{ i \frac{A(x_c)}{\hbar} \Big\}. \tag{42}$$

Список литературы

[1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика. ТIII Квантовая механика (нерелятивистская теория).* – М., Наука, 1989.

[2] Славнов А.А., Фаддеев Л.Д. *Введение в квантовую теорию калибровочных полей.* – М., Наука, 1988.

[3] Ж.Зинн-Жюстен. *Континуальный интеграл в квантовой механике.* – Изд-во ФИЗМАТЛИТ, 2006.

Рукопись поступила 17 марта 2009 г.

В.В. Брагута.
Континуальный интеграл в квантовой механике.

Оригинал-макет подготовлен с помощью системы **LaTeX.**
Редактор Н.В.Ежела.

Подписано к печати 20.03.2009. Формат $60 \times 84/8$. Офсетная печать.
Печ.л. 1,12 Уч.-изд.л. 0,9. Тираж 80. Заказ . Индекс 3649.

ГНЦ РФ Институт физики высоких энергий
142281, Протвино Московской обл.

Индекс 3649

П Р Е П Р И Н Т 2009–2, И Ф В Э, 2009