Квантово-механические заметки

I. Интеграл по траекториям в фазовом пространстве

Задача об эволюции начального состояния

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi(t)\rangle = \hat{H}|\phi(t)\rangle, \quad |\phi(t=0)\rangle = |\phi_0\rangle.$$

Формальное решение

$$|\phi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|\phi_0\rangle.$$

Перейдем в координатное представление ($\phi(Q) = \langle Q\|\phi\rangle,\ \hat{q}\|Q\rangle = Q\|Q\rangle$), тогда

$$\phi(t, Q_f) = \int \mathrm{d}Q_i \, \langle Q_f|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_i\rangle\phi_0(Q_i).$$

Разобьем эволюцию на K равных $\epsilon = t/K$ промежутка.

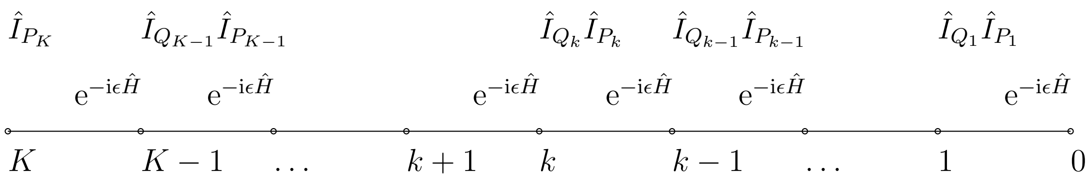
$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}} = \underbrace{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}\ldots\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}\ldots\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}}_{K-\text{раз}}.$$

Определим "разные по происхождению"единичные операторы

$$\hat{I}_{P_k} = \int \mathrm{d}P_k \, \|P_k\rangle\langle P_k\|, \quad \hat{I}_{Q_k} = \int \mathrm{d}Q_k \, \|Q_k\rangle\langle Q_k\|,$$

здесь $\|P_k\rangle, \|Q_k\rangle$ - обобщенные собственные состояния операторов импульса и координаты с собственными значениями P_k, Q_k, соответственно.

Вставим единичные операторы в процесс эволюции как показано на рисунке



Переопределим $Q_f = Q_K, Q_i = Q_0$ и тогда ядро оператора эволюции в координатном представлении можно записать в виде

$$\langle Q_f|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_i\rangle = \langle Q_K|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_0\rangle =$$
$$\langle Q_K|\hat{I}_{P_K}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}\hat{I}_{Q_{K-1}}\hat{I}_{P_{K-1}}\ldots\hat{I}_{Q_k}\hat{I}_{P_k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}\hat{I}_{Q_{k-1}}\hat{I}_{P_{k-1}}\ldots\hat{I}_{Q_1}\hat{I}_{P_1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}|Q_0\rangle =$$
$$\prod_{k=1}^{K}\int \mathrm{d}P_k\ \prod_{k=1}^{K-1}\int \mathrm{d}Q_k$$
$$\langle Q_K|P_K\rangle\langle P_K|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}|Q_{K-1}\rangle \qquad \langle Q_{K-1}|\ldots|Q_k\rangle \qquad \langle Q_k|P_k\rangle\langle P_k|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}|Q_{k-1}\rangle$$
$$\langle Q_{k-1}|\ldots|Q_1\rangle \qquad \langle Q_1|P_1\rangle\langle P_1|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}|Q_0\rangle =$$
$$\prod_{k=1}^{K}\int \mathrm{d}P_k\ \prod_{k=1}^{K-1}\int \mathrm{d}Q_k\ \prod_{k=1}^{K}\langle Q_k|P_k\rangle\langle P_k|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}|Q_{k-1}\rangle.$$

Попытаемся вычислить скалярные произведения, входящие в полученную формулу. Что касается первого, то нет сомнений, что

$$\langle Q_k|P_k\rangle = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}P_kQ_k}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Для вычисления второго проделаем следующую процедуру. Будем считать, что $K\to\infty$ так, что при фиксированном t величина $\epsilon\to 0$. Тогда можно думать, что

$$\langle P_k|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}|Q_{k-1}\rangle = \langle P_k|1-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}|Q_{k-1}\rangle + O(\epsilon^2).$$

Предположим, что гамильтониан $\hat{H} = H(\hat{p},\hat{q})$ с помощью канонических коммутационных соотношений можно привести к виду, когда операторы импульса стоят слева, а операторы координаты справа в выражениях, перепутывающих эти операторы (pq-упорядочение). Тогда

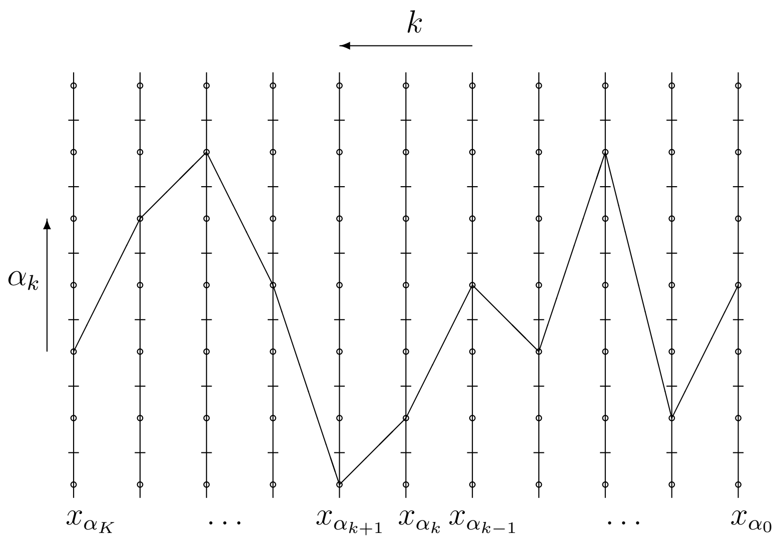
$$\langle P_k|\hat{H}|Q_{k-1}\rangle = \langle P_k|H(\hat{p},\hat{q})|Q_{k-1}\rangle = H(P_k,Q_{k-1})\langle P_k|Q_{k-1}\rangle$$
$$\langle P_k|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}}|Q_{k-1}\rangle = \langle P_k|Q_{k-1}\rangle[1-\mathrm{i}\epsilon H(P_k,Q_{k-1})] + O(\epsilon^2) = \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}P_kQ_{k-1}}}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon H(P_k,Q_{k-1})} + O(\epsilon^2).$$

Таким образом получается следующее выражение для ядра оператора эволюции

$$\boxed{\langle Q_K|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_0\rangle = \prod_{k=1}^{K}\int\frac{\mathrm{d}P_k}{2\pi}\ \prod_{k=1}^{K-1}\int \mathrm{d}Q_k\ \exp\Big[\mathrm{i}\sum_{k=1}^{K}P_k(Q_k-Q_{k-1}) - \frac{t}{K}H(P_k,Q_{k-1})\Big]_{K\to\infty}.}$$

Разобьем фазовое пространство (P_k,Q_k) на клетки и пронумеруем их индексом α_k. Значения импульса и координаты в клетке α_k обозначим $x_{\alpha_k} = (P_{\alpha_k},Q_{\alpha_k})$ и определим величину

$$Y_{\alpha_k}^{\alpha_{k-1}} = \exp\Big[P_{\alpha_k}(Q_{\alpha_k}-Q_{\alpha_{k-1}}) - \epsilon H(P_{\alpha_k},Q_{\alpha_{k-1}})\Big].$$



Тогда, если представить интегралы по $\mathrm{d}P_k$, $\mathrm{d}Q_k$ в виде сумм Римана и провести пересуммирование (см. рис), то можно получить следующее представление для ядра оператора эволюции

$$\langle Q_K|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_0\rangle = \sum_{\alpha_0,\dots,\alpha_k,\dots,\alpha_0} \Delta_x Y^{\alpha_{K-1}}_{\alpha_K}\dots\Delta_x Y^{\alpha_k}_{\alpha_{k+1}}\Delta_x Y^{\alpha_{k-1}}_{\alpha_k}\dots\Delta_x Y^{\alpha_0}_{\alpha_1} =$$
$$= \sum_{\gamma=\{\alpha_0,\dots,\alpha_K\}} \Delta_x^K \exp\Big[P_{\alpha_k}(Q_{\alpha_k}-Q_{\alpha_{k-1}}) - \epsilon H(P_{\alpha_k},Q_{\alpha_{k-1}})\Big],$$

здесь Δ_x - бесконечно малый элементарный объем фазового пространства, γ - конкретная выборка $\{\alpha_0,\dots,\alpha_k,\dots,\alpha_K\}$, а суммирование по γ подразумевает суммирование по всем возможным выборкам.

Предел такой суммы ($K\to\infty, \Delta_x\to 0$, если он существует) определяет интеграл по траекториям в расширенном фазовом пространстве (P,Q,t). Причем, как видно из построения, должны рассматриваться траектории, начинающиеся на подпространстве $Q=Q_i, t=0$ и заканчивающиеся на подпространстве $Q=Q_f, t=t$. Таким образом

$$\boxed{\langle Q_f|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_i\rangle = \int_{Q(t)=Q_f,Q(0)=Q_i} \mathcal{D}P(\tau)\mathcal{D}Q(\tau)\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}\tau\,[P(\tau)\dot{Q}(\tau)-H(P(\tau),Q(\tau))]\Big].}$$

Выражение, стоящее в показателе экспоненты, - действие, заданное на траекториях, по которым идет интегрирование.

II. Интеграл по траекториям в нерелятивистской квантовой механике

Гамильтониан

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

Ядро оператора эволюции

$$\langle Q_K|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_0\rangle = \prod_{k=1}^{K-1}\int \mathrm{d}Q_k \quad \prod_{k=1}^{K}\int\frac{\mathrm{d}P_k}{2\pi}\exp\Big[\mathrm{i}[P_k(Q_k-Q_{k-1}) - \epsilon\frac{P_k^2}{2m} - \epsilon U(Q_{k-1})]\Big]$$

Интеграл по $\mathrm{d}P_k$ квадратичный и поэтому берется

$$\boxed{\langle Q_K|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_0\rangle = \Big[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon}}\Big]^K\prod_{k=1}^{K-1}\int \mathrm{d}Q_k \quad \exp\Big[\mathrm{i}\sum_{k=1}^{K}\epsilon\Big[\frac{m}{2}\Big(\frac{Q_k-Q_{k-1}}{\epsilon}\Big)^2 - U(Q_{k-1})\Big]\Big].}$$

Континуальный предел

$$\boxed{\langle Q_f|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_i\rangle = \int_{Q(t)=Q_f,Q(0)=Q_i}\mathcal{D}Q(\tau)\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}\tau\ \Big[\frac{m}{2}\dot{Q}^2(\tau) - U(Q(\tau))\Big]\Big].}$$

Р.Файнман "Статистическая механика"

Ядро оператора эволюции в мнимом времени ($K = \epsilon\beta$)

$$\langle Q_K|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}|Q_0\rangle = \langle Q_K|\mathrm{e}^{-\epsilon\hat{H}}\ldots\mathrm{e}^{-\epsilon\hat{H}}|Q_0\rangle =$$

$$\langle Q_K|\mathrm{e}^{-\epsilon\hat{H}}\hat{I}_{Q_{K-1}}\ldots\hat{I}_{Q_k}\mathrm{e}^{-\epsilon\hat{H}}\hat{I}_{Q_{k-1}}\ldots\hat{I}_{Q_1}\mathrm{e}^{-\epsilon\hat{H}}|Q_0\rangle = \prod_{k=1}^{K-1}\int\mathrm{d}Q_k \quad \prod_{k=1}^{K}\langle Q_k|\mathrm{e}^{-\epsilon\hat{H}}|Q_{k-1}\rangle$$

Вычислим скалярное произведение для свободной частицы $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$:

$$\langle Q_k|\mathrm{e}^{-\epsilon\hat{H}}|Q_{k-1}\rangle = \int\mathrm{d}P\,\langle Q_k|P\rangle\langle P|\mathrm{e}^{-\epsilon\hat{p}^2/2m}|Q_{k-1}\rangle =$$

$$\int\mathrm{d}P\,\langle Q_k|P\rangle\langle P|Q_{k-1}\rangle\mathrm{e}^{-\epsilon P^2/2m} = \int\frac{\mathrm{d}P}{2\pi}\mathrm{e}^{-\epsilon P^2/2m+\mathrm{i}P(Q_k-Q_{k-1})} =$$

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon}}\exp\Big[-m\frac{(Q_k-Q_{k-1})^2}{2\epsilon}\Big].$$

Так как $\epsilon\to 0$, то основной вклад вносят Q_k очень близкие к Q_{k-1}, см. рис.1. Последнее обстоятельство дает возможность думать, что при вычислении этого же скалярного произведения для частицы во внешнем поле ($\hat{H} = \hat{p}^2/2m + U(\hat{q})$) значение потенциальной энергии можно считать постоянным и равным, например, $U(Q_{k-1})$. Таким образом получается, что

$$\langle Q_K|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}|Q_0\rangle = \Big[\sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon}}\Big]^K\prod_{k=1}^{K-1}\int\mathrm{d}Q_k\ \exp\Big[-\sum_{k=1}^{K}\Big[m\frac{(Q_k-Q_{k-1})^2}{2\epsilon} + \epsilon U(Q_{k-1})\Big]\Big].$$

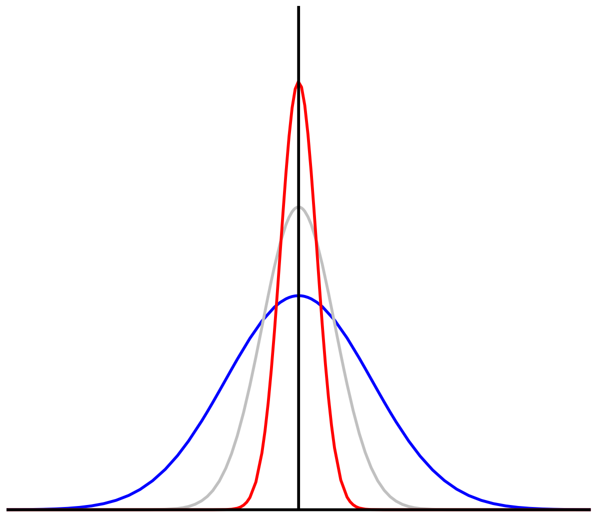


Рис. 1: Функция $\exp(-x^2/2\epsilon)$. Стремление ϵ к нулю означает переход от синего графика к серому и красному.

III. Интеграл по траекториям в нерелятивистской квантовой механике. Преобразование Фурье.

Рассмотрим интеграл по траекториям с $Q_f = Q_i = 0$

$$\int_{Q(t)=Q(0)=0} \mathcal{D}Q(t)\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}\tau\, \Big[\frac{m}{2}\dot{Q}^2(\tau) - U(Q(\tau))\Big]\Big] =$$
$$\Big[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon}}\Big]^K \prod_{k=1}^{K-1}\int \mathrm{d}Q_k\ \exp\Big[\mathrm{i}\sum_{k=1}^{K}\Big[m\frac{(Q_k-Q_{k-1})^2}{2\epsilon} - \epsilon U(Q_{k-1})\Big]\Big]_{Q_K=Q_0=0}$$

Выполним замену переменных, отвечающую в континуальном пределе преобразованию Фурье

$$Q_k = \sum_{n=1}^{K-1} U_{kn} c_n = \sum_{n=1}^{K-1} \sin\frac{\pi n k}{K} c_n, \quad k = 1, \ldots, K-1.$$

Обратное преобразование определяется матрицей $(U^{-1})_{nk} = 2/K\, U_{nk}$.

Перепишем выражение, определяющее кинетическую энергию в виде

$$\sum_{k=1}^{K}(Q_k - Q_{k-1})^2 = -\sum_{k=1}^{K-1} Q_k(Q_{k+1} - 2Q_k + Q_{k-1}).$$

Далее

$$Q_{k+1}-2Q_k+Q_{k-1}=\sum_{n=1}^{K-1}c_n\Big[\sin\frac{\pi n(k+1)}{K}-2\sin\frac{\pi nk}{K}+\sin\frac{\pi n(k-1)}{K}\Big]=$$

$$-2\sum_{n=1}^{K-1}c_n\sin\frac{\pi nk}{K}\Big[1-\cos\frac{\pi n}{K}\Big]=-4\sum_{n=1}^{K-1}c_n\sin^2\frac{\pi n}{2K}U_{nk},$$

и кинетическая энергия (проинтегрированная по времени) записывается в виде

$$\frac{m}{2\epsilon}4\sum_{n,m=1}^{K-1}c_nc_m\sin^2\frac{\pi n}{2K}\sum_{k=1}^{K-1}U_{nk}U_{km}=\frac{mK}{\epsilon}\sum_{n=1}^{K-1}c_n^2\sin^2\frac{\pi n}{2K}.$$

Замена переменных интегрирования

$$\prod_{k=1}^{K-1}\mathrm{d}Q_k=\det U\prod_{n=1}^{K-1}\mathrm{d}c_n=\Big[\sqrt{\frac{K}{2}}\Big]^{K-1}\prod_{n=1}^{K-1}\mathrm{d}c_n.$$

Сделаем еще одну замену переменных

$$C_n=c_n\frac{2K}{\pi n}\sin\frac{\pi n}{2K}.$$

Кинетическая энергия в новых переменных

$$\frac{m}{2}\,\frac{t}{2}\sum_{n=1}\omega_n^2C_n^2,\quad \omega_n=\frac{\pi n}{t}.$$

Интегрирование ведется по переменным C_n

$$\prod_{k=1}^{K-1}\mathrm{d}Q_k=\Big[\frac{\pi}{\sqrt{2K}}\Big]^{K-1}\Big[\prod_{k=1}^{K-1}2\sin\frac{\pi n}{2K}\Big]^{-1}\prod_{n=1}^{K-1}\mathrm{d}C_nn.$$

Можно показать (см. Градштейн, Рыжик, стр.47 (1.392)), что

$$\prod_{k=1}^{K-1}2\sin\frac{\pi n}{2K}=\sqrt{K},$$

поэтому получаем

$$\int_{Q(t)=Q(0)=0}\mathcal{D}Q(\tau)\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^t\mathrm{d}\tau\,\Big[\frac{m}{2}\dot{Q}^2(\tau)-U(Q(\tau))\Big]\Big]=$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\sqrt{\frac{m}{2\pi t}}\prod_{n=1}\mathrm{d}C_n\,\omega_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\sqrt{\frac{tm}{4\pi}}\quad\exp\Big[\mathrm{i}\frac{m}{2}\,\frac{t}{2}\sum_{n=1}\omega_n^2C_n^2-\mathrm{i}W(C_1,\dots,C_n,\dots)\Big].$$

Определим $W(C_1,\dots,C_n,\dots)$. В дискретном варианте

$$W(C_1,\dots,C_n,\dots,C_N)=\sum_{k=1}^{K}\epsilon U(Q_{k-1}),\quad Q_k=\sum_{n=1}^{K-1}C_n\sin\frac{\pi nk}{K}\frac{\pi n/2K}{\sin(\pi n/2K)}.$$

Непрерывный предел (при некоторых предположениях)

$$W(C_1,\dots,C_n,\dots)=\int_0^t \mathrm{d}\tau U(Q(\tau)),\quad Q(\tau)=\sum_{n=1} C_n \sin\frac{\pi n\tau}{t}.$$

Полученные соотношения можно переписать в ином виде, если заметить, что

$$\prod_{n=1} \mathrm{d}C_n\,\omega_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\sqrt{\frac{tm}{4\pi}}\quad \exp\Big[\mathrm{i}\frac{m}{2}\,\frac{t}{2}\sum_{n=1}\omega_n^2 C_n^2)\Big]=1,$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\sqrt{\frac{m}{2\pi t}}=\langle Q_f=0|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}_0}|Q_i=0\rangle,$$

где $\hat{H}_0=\hat{p}^2/2m$ - гамильтониан свободной частицы.

Теперь амплитуду перехода (по отношению к этой же величине для свободной частицы) можно представить следующим образом

$$\boxed{\frac{\langle Q_f=0|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_i=0\rangle}{\langle Q_f=0|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}_0}|Q_i=0\rangle}=\frac{\int_{Q(t)=Q(0)=0}\mathrm{DQ}(\tau)\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^{\mathrm{t}}\mathrm{d}\tau\ \Big[\frac{\mathrm{m}}{2}\dot{\mathrm{Q}}^2(\tau)-\mathrm{U}(\mathrm{Q}(\tau))\Big]_{\mathrm{FT}}\Big]}{\int_{Q(t)=Q(0)=0}\mathrm{DQ}(\tau)\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^{\mathrm{t}}\mathrm{d}\tau\ \Big[\frac{\mathrm{m}}{2}\dot{\mathrm{Q}}^2(\tau)\Big]_{\mathrm{FT}}\Big]}},$$

где индекс FT в лагранжиане означает взятие фурье-образа от траектории, а интегрирование по траекториям $\mathrm{DQ}(\tau)$ - интегрирование по счетному набору коэффициентов Фурье C_n траектории

$$\boxed{\mathrm{DQ}(\tau)=\prod_{\mathrm{n}=1}\mathrm{dC_n}.}$$

Если бы ряд

$$\sum_{n=1} c_n n\sin\frac{\pi n\tau}{t}=\dot{Q}(\tau)$$

сходился, то

$$\prod_{k=1}^{K-1} 2\sin\frac{\pi n}{2K}\Rightarrow\prod_{k=1}^{K-1}\frac{\pi n}{K}=\pi^{K-1}\frac{K!}{K^K}\xrightarrow{K\to\infty}\pi^{K-1}\sqrt{2\pi K}\mathrm{e}^{-K}=\sqrt{K}\sqrt{2/\pi}\left(\frac{\pi}{\mathrm{e}}\right)^K,$$

и континуальный интеграл обращался бы в нуль:

$$\int_{Q(t)=Q(0)=0}\mathcal{D}Q(\tau)\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[Q(\tau),t]}\Big|_{\dot{Q}(\tau)-\mathrm{exist}}=$$

$$=\sqrt{\pi/2}\left(\frac{\mathrm{e}}{\pi}\right)^K\int_{Q(t)=Q(0)=0}\mathcal{D}Q(\tau)\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[Q(\tau),t]}.$$

So:

$$\boxed{\mathrm{e}<\pi}\qquad\equiv\qquad\boxed{\text{Quantum theory}}$$

Переход к другому полному набору

$$\hat{O}u_n(\tau) = \lambda_n u_n(\tau), \quad u_n(0) = u_n(t) = 0,$$

где $\hat{O}$ - самосопряженный оператор.

Путь $Q(\tau)$ представляется теперь в виде

$$Q(\tau) = \sum_{n=1} \eta_n u_n(\tau) = \sum_{n=1} C_n \sin\frac{\pi n \tau}{t}.$$

Последнее равенство позволяет связать C_n с η_n:

$$C_n = \frac{2}{t}\sum_{m=1}\int_0^t \mathrm{d}\tau\, \sin\frac{\pi n\tau}{t} u_m(\tau)\, \eta_m = \sqrt{\frac{2}{t}}\sum_{m=1} U_{nm}\eta_m,$$

здесь U_{nm} - унитарная матрица.

Отсюда получаем

$$\int_{Q(t)=Q(0)=0} \mathcal{D}Q(\tau)\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}\tau\, \Big[\frac{m}{2}\dot{Q}^2(\tau) - U(Q(\tau))\Big]\Big] =$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\sqrt{\frac{m}{2\pi t}}\prod_{n=1}\frac{\pi n}{t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\sqrt{\frac{m}{2\pi}}\mathrm{d}\eta_n\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}\tau\, \Big[\frac{m}{2}\dot{Q}^2(\tau) - U(Q(\tau))\Big]_{Q(\tau)=\sum\limits_{n=1}\eta_n u_n(\tau)}\Big].$$

IV. Гельфанд - Яглом

Осциллятор с переменной частотой

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{\omega^2(t)}{2}\hat{q}^2.$$

Континуальный интеграл

$$\langle Q_f|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_i\rangle = \int_{Q(t)=Q_f,Q(0)=Q_i}\mathcal{D}Q(\tau)\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}\tau\, \Big[\frac{1}{2}\dot{Q}^2(\tau) - \frac{\omega^2(\tau)}{2}Q^2(\tau)\Big]\Big].$$

Найдем экстремальную траекторию $Q_{cl}(\tau)$ с условиями, что $Q_{cl}(t) = Q_f, Q_{cl}(0) = Q_i$:

$$\ddot{Q}_{cl}(\tau) + \omega^2(\tau)Q_{cl}(\tau) = 0. \tag{1}$$

Действие на такой траектории равно

$$S[Q_{cl}(\tau)] = \frac{1}{2}(Q_f\dot{Q}_{cl}(t) - Q_i\dot{Q}_{cl}(0)).$$

Пусть нам известны два решения уравнения (1) с начальными условиями $x(0) = 1, \dot{x}(0) = 0$ и $y(0) = 0, \dot{y}(0) = 1$, тогда

$$Q_{cl}(\tau) = [Q_f y(\tau) + Q_i(y(t)x(\tau) - x(t)y(\tau))]/y(t).$$

Вычисления:

$$\dot{Q}_{cl}(\tau) = [Q_f \dot{y}(\tau) + Q_i(y(t)\dot{x}(\tau) - x(t)\dot{y}(\tau))]/y(t),$$

$$\dot{Q}_{cl}(t) = [Q_f \dot{y}(t) + Q_i(y(t)\dot{x}(t) - x(t)\dot{y}(t))]/y(t) = [Q_f \dot{y}(t) - Q_i]/y(t),$$

$$\dot{Q}_{cl}(0) = [Q_f - Q_i x(t)]/y(t).$$

Действие на классической траектории, выраженное через $x(t), y(t)$, равно

$$S[Q_{cl}(\tau)] = \frac{1}{2y(t)}[\dot{y}(t)Q_f^2 + x(t)Q_i^2 - 2Q_f Q_i].$$

Выполним сдвиг переменных интегрирования

$$q(\tau) = Q(\tau) - Q_{cl}(\tau).$$

Тогда остается вычислить

$$J = \int_{q(t)=q(0)=0} \mathcal{D}q(\tau)\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}\tau \left[\frac{1}{2}\dot{q}^2(\tau) - \frac{\omega^2(\tau)}{2} q^2(\tau)\right]\Big].$$

Воспользуемся дискретной по времени аппроксимацией

$$J = \Big[\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}}{\sqrt{2\pi\epsilon}}\Big]^K \prod_{k=1}^{K-1} \int \mathrm{d}q_k\ \exp\Big[\mathrm{i}\sum_{k=1}^{K} \epsilon\Big[\frac{1}{2}\Big(\frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon}\Big)^2 - \frac{\omega_{k-1}^2}{2} q_{k-1}^2\Big]\Big]_{q_K=q_0=0}.$$

Определим новую переменную

$$u_k = \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}}{\sqrt{2\epsilon}} q_k,$$

тогда

$$J = \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}}{\sqrt{2\pi\epsilon}} \prod_{k=1}^{K-1} \int \frac{\mathrm{d}u_k}{\sqrt{\pi}}\ \exp\big[-\sum_{i,k=1}^{K} u_i D_{ik} u_k\big] = \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}}{\sqrt{2\pi\epsilon\Delta_K}},$$

где $\Delta_K = \det D_{ik}$, а матрица D_{ik}, $i, k = 1, \dots, K-1$, равна

$$D_{ik} = \nu_i \delta_{i,k} - \delta_{i,k+1} - \delta_{i+1,k}, \quad \nu_k = 2 - \epsilon^2 \omega_k^2.$$

Найдем рекуррентные соотношения на детерминант Δ_k матрицы размера $(k-1)\times(k-1)$:

$$\Delta_{k+1} = \begin{Vmatrix} \multicolumn{5}{c}{\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots} \\ \dots & -1 & \nu_{k-2} & -1 & 0 \\ \dots\dots & & -1 & \nu_{k-1} & -1 \\ 0 & \dots\dots & & -1 & \nu_k \end{Vmatrix} = \nu_k \Delta_k + \begin{Vmatrix} \multicolumn{4}{c}{\dots\dots\dots\dots\dots} \\ \dots & -1 & \nu_{k-2} & 0 \\ 0 & \dots & -1 & -1 \end{Vmatrix} = \nu_k \Delta_k - \Delta_{k-1}.$$

Определим $\Delta_0 = 0, \Delta_1 = 1$, тогда правильно воспроизводятся $\Delta_2 = \nu_1, \Delta_3 = \nu_2\nu_1 - 1$. Если теперь ввести величину $y_k = \epsilon\Delta_k$, то для нее рекуррентные соотношения и начальные условия примут вид

$$\frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{\epsilon^2} + \omega_k^2 y_k = 0, \quad \frac{y_1 - y_0}{\epsilon} = 1, y_0 = 0,$$

или в непрерывном пределе

$$\ddot{y}(\tau) + \omega^2(\tau) y(\tau) = 0, \quad y(0) = 0,\, \dot{y}(0) = 1.$$

Следовательно, $\Delta_K = y(t)/\epsilon$, и задача решена:

$$\boxed{\langle Q_f | \mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}} | Q_i \rangle = \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}}{\sqrt{2\pi y(t)}} \exp\Big[\frac{\mathrm{i}}{2y(t)}[\dot{y}(t)Q_f^2 + x(t)Q_i^2 - 2Q_f Q_i]\Big].}$$

Проверка правильности ответа прямой подстановкой в уравнение Шредингера.

$$\Big[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial Q_f^2} - U(Q_f)\Big]\langle Q_f | \mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}} | Q_i \rangle = 0.$$

Вычисления

$$\Big[-\frac{\partial S_{cl}}{\partial t} - \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial S_{cl}}{\partial Q_f}\Big)^2 - U(Q_f)\Big]\langle \dots \rangle + \Big[-\mathrm{i}\frac{\dot{y}(t)}{2y(t)} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial Q_f^2}\Big]\langle \dots \rangle = 0.$$

Первый член обращается в нуль в силу классического уравнения Гамильтона-Якоби, второй - простой подстановкой, Q.E.D.

Заметим, записав $\langle \dots \rangle = f(t)\exp(\mathrm{i}S_{cl})$, *ответ можно было бы получить сразу.*

V. Квазиклассика

Нерелятивистский гамильтониан общего вида

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + U(\hat{q}).$$

Континуальный интеграл

$$\langle Q_f | \mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}} | Q_i \rangle = \int_{Q(t)=Q_f, Q(0)=Q_i} \mathcal{D}Q(\tau)\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}\tau\,\Big[\frac{1}{2}\dot{Q}^2(\tau) - U(Q(\tau))\Big]\Big],$$

будем вычислять методом перевала.

Экстремальная (классическая) траектория $Q_{cl}(\tau)$ с условиями, что $Q_{cl}(t) = Q_f$,$Q_{cl}(0) = Q_i$ определяется уравнением Ньютона:

$$\ddot{Q}_{cl}(\tau) + U'(Q_{cl}(\tau)) = 0. \tag{2}$$

Пусть действие на такой траектории равно $S[Q_{cl}(\tau)]$. Выполним сдвиг переменных интегрирования

$$q(\tau) = Q(\tau) - Q_{cl}(\tau).$$

Тогда амплитуда перехода представима следующим образом

$$\langle Q_f|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_i\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[Q_{cl}(\tau)]}\int_{q(t)=q(0)=0}\mathcal{D}q(\tau)\ \exp\Big[\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}\tau\left[\frac{1}{2}\dot{q}^2(\tau) - u(\tau,q(\tau))\right]\Big],$$

где потенциальная энергия зависит от $Q_{cl}(\tau)$ и имеет вид

$$u(\tau,q) = U(Q_{cl}(\tau)+q) - U(Q_{cl}(\tau)) - qU'(Q_{cl}(\tau)).$$

Приближение: будем считать, что $S[Q_{cl}(\tau)] \gg 1$, тогда можно предположить, что основной вклад в континуальный интеграл вносят траектории, близкие к классической (прямая аналогия с методом перевала). Это означает, что

$$u(\tau,q) = \frac{1}{2}U''(Q_{cl}(\tau))q^2 + \ldots,$$

и задача сводится к задаче об осцилляторе с переменной частотой $\omega^2(\tau) = U''(Q_{cl}(\tau))$. Чтобы вычислить континуальный интеграл в этом случае, нужно решить дифференциальное уравнение

$$\ddot{y}(\tau) + U''(Q_{cl}(\tau))y(\tau) = 0$$

с начальными условиями $y(0) = 0$, $\dot{y}(0) = 1$.

Продифференцируем (2) по времени

$$\dddot{Q}_{cl} + U''(Q_{cl})\dot{Q}_{cl} = 0, \quad U''(Q_{cl}) = -\dddot{Q}_{cl}/\dot{Q}_{cl}.$$

Следовательно,

$$0 = \ddot{y}\dot{Q}_{cl} - \dddot{Q}_{cl}y = (\ddot{y}\dot{Q}_{cl} + \dot{y}\ddot{Q}_{cl}) - (\dddot{Q}_{cl}y + \dot{y}\ddot{Q}_{cl}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}(\dot{y}\dot{Q}_{cl}) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}(y\ddot{Q}_{cl}).$$

Таким образом,

$$\mathrm{const} = \dot{Q}_{cl}(0) = \dot{y}\dot{Q}_{cl} - y\ddot{Q}_{cl} = \dot{Q}_{cl}^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}(y/\dot{Q}_{cl}).$$

So:

$$y(t) = \dot{Q}_{cl}(t)\dot{Q}_{cl}(0)\int_0^t \mathrm{d}\tau/\dot{Q}_{cl}^2(\tau).$$

При данных Q_f, Q_i, t рассматриваемая система (на классическом уровне) находится в состояниях с постоянным значением энергии $E = E[Q_f, Q_i, t] = \dot{Q}_{cl}^2/2 + U(Q_{cl})$. Поэтому

$$\int_0^t \mathrm{d}\tau/\dot{Q}_{cl}^2(\tau) = \int_{Q_i}^{Q_f} \frac{\mathrm{d}Q}{[2(E-U(Q))]^{3/2}} = -\frac{\partial}{\partial E}\int_{Q_i}^{Q_f} \frac{\mathrm{d}Q}{\sqrt{2(E-U(Q))}} =$$
$$-\frac{\partial t(E)}{\partial E} = -\Big[\frac{\partial E[Q_f, Q_i, t]}{\partial t}\Big]^{-1}.$$

Далее $$\frac{\partial^2 S_{cl}[Q_f, Q_i, t]}{\partial Q_f \partial Q_i} = -\frac{\partial}{\partial Q_f} P_i = -\frac{\partial}{\partial Q_f}\sqrt{2(E-U(Q_i))} =$$
$$-\frac{1}{\sqrt{2(E-U(Q_i))}}\frac{\partial E}{\partial Q_f} = \dot{Q}^{-1}(0)\frac{\partial^2 S}{\partial t \partial Q_f} = \dot{Q}^{-1}(0)\frac{\partial}{\partial t}\sqrt{2(E-U(Q_f))} =$$
$$\dot{Q}^{-1}(0)\dot{Q}^{-1}(t)\frac{\partial E[Q_f, Q_i, t]}{\partial t} = -\Big[\dot{Q}_{cl}(t)\dot{Q}_{cl}(0)\int_0^t \mathrm{d}\tau/\dot{Q}_{cl}^2(\tau)\Big]^{-1}.$$

Ответ:

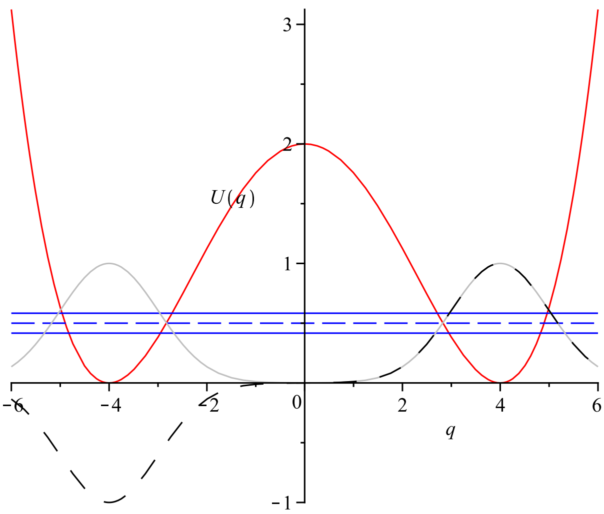
$$\boxed{\langle Q_f|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_i\rangle_{QuasiClassic} = \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{-\frac{\partial^2 S_{cl}[Q_f, Q_i, t]}{\partial Q_f \partial Q_i}}\exp\big[\mathrm{i}S_{cl}[Q_f, Q_i, t]\big].}$$

VI. Инстантон

Рассмотрим движение частицы в потенциале (см. рис.)

$$U(q) = \frac{\omega^2}{8a^2}(q^2 - a^2)^2.$$

Гамильтониан



$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{\omega^2}{8a^2}(\hat{q}^2 - a^2)^2.$$

Если высота барьера достаточно велика $U(0) = \omega^2 a^2/8 \gg \omega/2$, то в нулевом рассмотрении для низко возбужденных состояний должно быть справедливо осцилляторное приближение. То есть, есть два собственных состояния гамильтониана с энергией $\varepsilon = \omega/2$ и волновыми функциями $\phi_0(x-a), \phi_0(x+a)$, где $\phi_0(x) = (\omega/\pi)^{1/4}\exp[-\omega x^2/2]$. Однако, такие волновые функции не допустимы для рассматриваемого гамильтониана: они должны быть либо четными, либо нечетными по отношению к замене $x \to -x$. Эта проблема легко решается устройством линейных комбинаций

$$\phi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_0(x-a)+\phi_0(x+a)], \quad \phi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_0(x-a)-\phi_0(x+a)].$$

Но есть еще одна проблема: в одномерной задаче связанные собственные состояния не вырождены. Поэтому нужно предположить, что эти состояния имеют разные (но близкие) собственные значения энергии (причем, очевидно, что симметричное состояние обладает меньшей энергией):

$$\varepsilon_+ = \frac{\omega}{2} - \delta\varepsilon_+, \quad \varepsilon_- = \frac{\omega}{2} + \delta\varepsilon_-, \quad \delta\varepsilon_\pm \ll \omega.$$

<u>Задача</u>: найти расщепление уровней $\delta\varepsilon = \delta\varepsilon_+ + \delta\varepsilon_-$.

Рассмотрим амплитуду перехода

$$\langle Q_f|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}|Q_i\rangle = \sum_n \Phi(Q_f)\bar{\Phi}(Q_i)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tE_n},$$

где $\hat{H}|\Phi_n\rangle = E_n|\Phi_n\rangle, \Phi(Q) = \langle Q|\Phi_n\rangle$.

Подставим $Q_f = a, Q_i = -a$, сделаем замену $\mathrm{i}t \to \beta$ и выберем $\beta \gg 1/\omega$, но $\beta \ll 1/\quad\delta\epsilon_\pm$, тогда

$$\langle a|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}|-a\rangle \xrightarrow{\beta\gg 1/\omega} \phi_+(a)\phi_+(-a)\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_+} + \phi_-(a)\phi_-(-a)\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_-} =$$
$$\frac{1}{2}\phi_0^2(0)\mathrm{e}^{-\beta\omega/2}(\mathrm{e}^{\beta\,\delta\varepsilon_+} - \mathrm{e}^{-\beta\,\delta\varepsilon_-}) \xrightarrow{\beta\ll 1/\delta\varepsilon_\pm} \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\omega}{\pi}}\,\beta\,\delta\varepsilon\,\mathrm{e}^{-\beta\omega/2},$$

учтено, что $\phi_0(2a) = \phi_0(-2a) \to 0$ при $\omega a^2 \gg 1$.

Таким образом, для того, чтобы найти расщепление уровней, вычислим континуальный интеграл

$$\langle a|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}|-a\rangle = \int_{Q(\beta/2)=-Q(-\beta/2)=a} \mathcal{D}Q(\tau)\ \exp\Big[-\int_{-\beta/2}^{\beta/2}\mathrm{d}\tau\Big[\frac{1}{2}\dot{Q}^2(\tau) + U(Q(\tau))\Big]\Big].$$

Использовано, что амплитуда перехода инвариантна относительно сдвига $\tau_i \to \tau_i + \tau_0, \tau_f \to \tau_f + \tau_0$.

Так как нам потребуются достаточно большие $\beta \gg 1/\omega$, в нулевом приближении рассмотрим ситуацию $\beta \to \infty$. Минимальное действие в этом случае

$$S_E = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \left[\frac{1}{2}\dot{Q}_{cl}^2(\tau) + \frac{\omega^2}{8a^2}(Q_{cl}^2(\tau) - a^2)^2\right] \tag{3}$$

должно быть конечным, поэтому

$$\dot{Q}_{cl}(\pm\infty) = 0, \quad Q_{cl}^2(\pm\infty) = a^2. \tag{4}$$

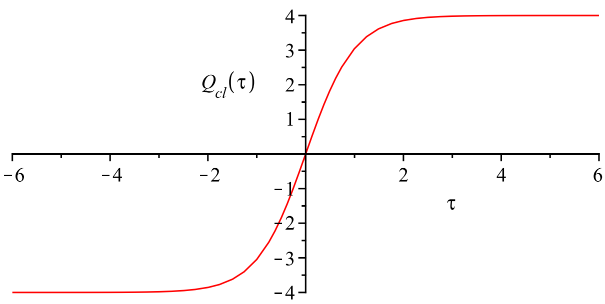
На экстремальной траектории сохраняется энергия (евклидова)

$$E = \frac{1}{2}\dot{Q}_{cl}^2(\tau) - \frac{\omega^2}{8a^2}(Q_{cl}^2(\tau) - a^2)^2,$$

причем из условия (4) следует, что $E = 0$. Отсюда находим экстремальную траекторию

$$\int^{Q_{cl}} \frac{\mathrm{d}Q}{2a}\frac{1}{a^2 - Q^2} = \ln\frac{a + Q_{cl}}{a - Q_{cl}} = \omega(\tau - \tau_0),$$
$$Q_{cl}(\tau) = a\,\mathrm{th}[\omega(\tau - \tau_0)/2],$$

учтено, что $-a \leqslant Q_{cl}(\tau) \leqslant a$.



Евклидово действие на минимальной траектории

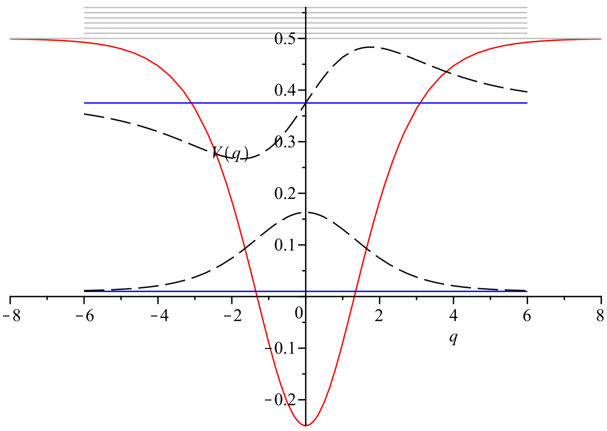
$$S_E = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \dot{Q}_{cl}^2(\tau) = \int_{-a}^{a} \mathrm{d}Q\, \sqrt{2U(Q)} = \frac{\omega}{2a}\int_{-a}^{a} \mathrm{d}Q\, (a^2 - Q^2) = \frac{2}{3}\omega a^2.$$

Выполним разложение вблизи классической траектории с $\tau_0 = 0$

$$\begin{aligned} S_E[Q_{cl}(\tau) + q(\tau)] = S_E + \int \mathrm{d}\tau \Big[\frac{1}{2}\dot{q}^2(\tau) + \frac{1}{2}U''(Q_{cl})(\tau)q^2(\tau) + \\ \frac{1}{3!}U'''(Q_{cl})(\tau)q^3(\tau) + \frac{1}{4!}U''''(Q_{cl})(\tau)q^4(\tau)\Big] = \\ S_E + \int \mathrm{d}\tau \Big[\frac{1}{2}\dot{q}^2(\tau) + \frac{\omega^2}{2}\Big[1 - \frac{3}{2\mathrm{ch}^2(\omega\tau/2)}\Big]q^2(\tau) + \ldots\Big]. \end{aligned}$$

Путь $q(\tau)$ можно представить набором η_n - коэффициентов разложения $q(\tau)$ по собственным функциям самосопряженного оператора, которые определяются решениями задачи на собственные значения

$$\Big[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+\omega^2\Big[1-\frac{3}{2\mathrm{ch}^2(\omega\tau/2)}\Big]\Big]u_n(\tau)=2\lambda_n u_n(\tau), \quad u_n(-\beta/2)=u_n(\beta/2)=0.$$



Сформулированная задача на собственные состояния эквивалентна нахождению собственных значений энергии λ_n частицы в потенциале $V(q) = \omega^2[1 - 3/(2\mathrm{ch}^2(\omega q/2))]/2$ с единичной массой.

В такой задаче есть два связанных состояния с $\lambda_1 = 0$ и $\lambda_2 = 3\omega^2/4$ и непрерывный (по k) континуум уровней с $\lambda_k = \omega^2 + k^2$. Нулевая мода напрямую связана с существованием не одного, а целого однопараметрического семейства классических решений, минимизирующих действие, что в свою очередь отражает инвариантность действия (3) по отношению к замене $\tau \to \tau + \tau_0$. Можно сообразить, что

$$u_0(\tau) = \frac{1}{\sqrt{S_E}}\dot{Q}_{cl}(\tau).$$