Семинары 1–2.
Интегралы по траекториям. Введение

Задача 1. Найдите интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{kx^2}{2}} = \sqrt{\frac{2\pi}{k}}. \tag{1}$$

Задача 2. Найдите интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{kx^2}{2}+vx} = \sqrt{\frac{2\pi}{k}}\, e^{\frac{v^2}{2k}}. \tag{2}$$

Задача 3*. Пусть $x \in \mathbb{R}^n$, а K — симметричная матрица $n \times n$, $(a, b) = a^T b = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i$. Вычислите интеграл

$$\int_{\mathbb{R}^n} d^n x\, e^{-\frac{1}{2}(x, Kx)} = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det K}}. \tag{3}$$

Задач 4*. Пусть также $v \in \mathbb{R}^n$. Вычислите интеграл

$$\int_{\mathbb{R}^n} d^n x\, e^{-\frac{1}{2}(x, Kx)+(v,x)} = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det K}}\, e^{\frac{1}{2}(v, K^{-1}v)}. \tag{4}$$

Для простоты будем рассматривать задачу о движении частицы массы m в одном пространственном измерении в потенциальном поле $U(x)$.
Пусть $x(t)$ — кривая, $t \in [t_A, t_B]$. Действием называется величина

$$S[x] = \int_{t_A}^{t_B} dt \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - U(x) \right). \tag{5}$$

Принцип наименьшего действия

Рассмотрим все кривые $x(t)$, такие что $x(t_A) = x_A$, $x(t_B) = x_B$. Тогда закон движения частицы $X(t)$ из точки A в точку B доставляет действию локальный минимум:

$$\exists \epsilon > 0,\ \forall x,\ |x(t) - X(t)| < \epsilon\ (\forall t \in [t_A, t_B]):\ S[X] \le S[x].$$

Дискретизуем кривые. Пусть $x(t)$ представляет собой ломаную, соединяющую точки $(t_0, x_0) = (t_A, x_A)$, (t_1, x_1), $\ldots$, $(t_N, x_N) = (t_B, x_B)$ с фиксированными промежуточными моментами времени $t_1, t_2, \ldots, t_{N-1}$. Тогда

$$S[x] \simeq S_{\text{д}}(\{t_i, x_i\}) = \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{m(x_{i+1} - x_i)^2}{2(t_{i+1} - t_i)} - U(x_i)(t_{i+1} - t_i) \right). \tag{6}$$

Задача 5. Найдите условие минимума дискретного действия $S_{\text{д}}$.
Получаем дискретную версию второго закона Ньютона:

$$\frac{m}{t_{i+1} - t_i} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{t_{i+1} - t_i} - \frac{x_i - x_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} \right) = -U'(x_i)$$

Пусть некоторый набор измерений позволяет полностью определить состояние системы. Будем называть такой набор измерений полным и обозначим эти состояния A_i.

1. Состояния A_i образуют ортонормированный базис в унитарном векторном пространстве над $\mathbb{C}$: $(A_i, A_j) = \delta_{ij}$. Другой полный набор измерений дает набор состояний B_i, тоже образующий ортонормированный базис. Базисы связаны унитарным преобразованием
$$A_i = \sum_j a(A_i, B_j) B_j.$$
Если система находится в состоянии A_i, то вероятность ее немедленно найти в состоянии B_j равна $|a(A_i, B_j)|^2$. Очевидно, $a(A_i, A_j) = \delta_{ij}$.
2. Пусть система, которая в момент времени t_1 находится в состоянии A_i, может перейти в момент времени t_2 в состояние B_j. Этому переходу отвечает комплексная амплитуда перехода $a_{t_1 t_2}(A_i, B_j)$. При этом $a_{tt}(A_i, B_j) = a(A_i, B_j)$ Вероятность найти систему в состоянии B_j равна $|a_{t_1 t_2}(A_i, B_j)|^2$. Соответственно,
$$\sum_j |a_{t_1 t_2}(A_i, B_j)|^2 = 1. \tag{7}$$
3. Композиция переходов. Пусть $t_1 < t < t_2$. Тогда для амплитуд перехода выполняется правило:
$$a_{t_1 t_2}(A_i, B_j) = \sum_k a_{t_1 t t_2}(A_i, C_k, B_j) = \sum_k a_{t_1 t}(A_i, C_k) a_{t t_2}(C_k, B_j). \tag{8}$$
Иными словами: амплитуды последовательных переходов перемножаются, а амплитуды переходов через различные промежуточные состояния складываются.

Рассмотрим частицу в одном пространственном измерении. В этом случай измерение координаты x является полным измерением. При этом должно быть
$$a(x,x') = \delta(x-x'). \tag{9}$$

Для амплитуды перехода из состояния x_A в состояние x_B через промежуточные состояния $x(t)$ во все моменты времени постулируем:
$$a_{t_A t_B}[x] = Z^{-1}_{t_A t_B} e^{\frac{i}{\hbar} S_{t_A t_B}[x]} \tag{10}$$
с некоторым постоянным множителем $Z^{-1}_{t_A t_B}$.
Действительно, амплитуда удовлетворяет условию перемножения. Пусть $t_A < t < t_B$. Тогда
$$\begin{aligned} a_{t_A t}[x] a_{t t_B}[x] &= Z^{-1}_{t_A t} e^{\frac{i}{\hbar} S_{t_A t}[x]} Z^{-1}_{t t_B} e^{\frac{i}{\hbar} S_{t t_B}[x]} \\ &= Z^{-1}_{t_A t} Z^{-1}_{t t_B} e^{\frac{i}{\hbar}\left(S_{t_A t}[x] + S_{t t_B}[x]\right)} = Z^{-1}_{t_A t_B} e^{\frac{i}{\hbar} S_{t_A t_B}[x]} = a_{t_A t_B}[x]. \end{aligned} \tag{11}$$
Заодно мы выяснили, что $Z_{t_A t_B} = Z_{t_A t} Z_{t t_B}$.
Как же найти постоянные $Z_{t_A t_B}$ и суммарные амплитуды $a_{t_A t_B}(x_A, x_B)$?

Если время наблюдения $t_2 - t_1$ очень короткое, мы можем думать, что частица движется почти по прямой. Тогда

$$a_{t_1 t_2}(x_1, x_2) \simeq z_{t_1 t_2}^{-1} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m(x_2-x_1)^2}{2(t_2-t_1)} - U(x_1)(t_2-t_1)\right)} \simeq z_{t_1 t_2}^{-1} e^{\frac{im(x_2-x_1)^2}{2\hbar(t_2-t_1)}}. \qquad (12)$$

Мы пренебрегли малым вкладом потенциальной энергии.
С другой стороны, должно быть

$$a_{tt}(x_1, x_2) = a(x_1, x_2) = \delta(x_1 - x_2).$$

А значит,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_2\, a_{tt}(x_1, x_2) = 1. \qquad (13)$$

Поэтому потребуем, чтобы при малых $t_2 - t_1$ было

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_2\, a_{t_1 t_2}(x_1, x_2) = 1. \qquad (14)$$

Задача 5. Из (14) и (12) найдите

$$z_{t_1 t_2} = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar(t_2 - t_1)}{m}}. \qquad (15)$$

Композиция двух амплитуд

Задача 6. Перемножьте две амплитуды и просуммируйте произведение по промежуточным состояниям

$$\int dx\, a_{t_1 t}(x_1, x) a_{t t_2}(x, x_2) = a_{t_1 t_2}(x_1, x_2). \tag{16}$$

Отсюда вытекает два следствия:

1. Для свободной частицы имеется точная формула

$$a_{t_A t_B}(x_A, x_B) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_B - t_A)}}\, e^{\frac{im(x_B - x_A)^2}{2\hbar(t_B - t_A)}}. \tag{17}$$

2. Для общего случая мы можем рассмотреть предел

$$a_{t_A t_B}(x_A, x_B) = \lim_{\substack{N\to\infty \\ t_{i+1}-t_i\to 0}} \prod_{i=0}^{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_{i+1} - t_i)}} \int dx_1 \cdots dx_{N-1}\, e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{д}}(\{t_i, x_i\})}. \tag{18}$$

Правую часть мы назовем интегралом по траекториям или функциональным интегралом:

$$a_{t_A t_B}(x_A, x_B) = \int_{x(t_A)=x_A}^{x(t_B)=x_B} Dx\, e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}. \tag{19}$$

Свойства амплитуды перехода для свободной частицы

Рассмотрим решение для свободной частицы. Пусть частицу испустили в момент времени $t_A = 0$ в точке $x_A = 0$. Тогда амплитуда перехода в точку x в момент времени t равна

$$G(t, x) = a_{0t}(0, x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\, e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}}. \tag{20}$$

Очевидно, что вероятность найти частицу в момент времени t в точке x пропорциональна

$$|G(t, x)|^2 = \frac{m}{2\pi\hbar t}. \tag{21}$$

Но это значит, что найти частицу в любой точке пространства равновероятно!!! Очевидно, мы чего-то не учли. Любой прибор имеет некоторую погрешность.

Задача 7. Предположим, прибор в начальный момент времени $t = 0$ может зафиксировать частицу в одной из двух точек $l/2$ и $-l/2$. Найдите амплитуду

$$\psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(G(t, x - l/2) + G(t, x + l/2)\big) = \sqrt{\frac{m}{\pi i\hbar t}}\, e^{\frac{im(x^2 + l^2/4)}{2\hbar t}} \cos\frac{mlx}{2\hbar t}.$$

и величину, пропорциональную плотности вероятности:

$$|\psi(t, x)|^2 = \frac{m}{\pi\hbar t}\cos^2\frac{mlx}{2\hbar t}.$$

Уже лучше, получилась интерференционная картина. В некоторых точках, где фазы одинаковы, амплитуды усиливают друг друга. В других точках ослабляют. Но вероятность все равно ненормируема. Что делать?

Рассмотрим прибор, представляющий собой «щель» ширины l, то есть в момент времени $t = 0$ он пропускает частицы только в интервале $[-l/2, l/2]$ причем амплитуда того, что он пропускает через любую точку этого интервала одинакова и равна A. Отнормируем эту амплитуду так, чтобы полная вероятность была равна единице:

$$\int_{-l/2}^{l/2} dx\,|A|^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \frac{1}{\sqrt{l}}.$$

(Мы приняли, что A вещественное положительное число, но это условность.)
Задача 8. Вычислите амплитуду того, что в момент времени $t \gg ml^2/\hbar$ частица будет в точке x:

$$\psi(t,x) = \frac{1}{\sqrt{l}} \int_{-l/2}^{l/2} dy\, G(t, x-y) = \sqrt{\frac{2\hbar t}{i\pi ml}}\, \frac{e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}}}{x} \sin\frac{mlx}{2\hbar t}. \tag{22}$$

Задача 9. Найдите плотность вероятности

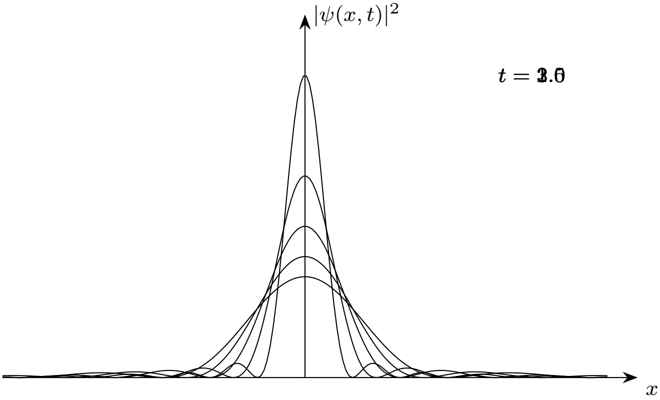
$$|\psi(t,x)|^2 = \frac{2\hbar t}{\pi m l x^2} \sin^2\frac{mlx}{2\hbar t}. \tag{23}$$

и ее интеграл по всей прямой (доведите от интеграла, не содержащего параметров)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(t,x)|^2 = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, \frac{\sin^2\xi}{\xi^2} = 1. \tag{24}$$

График плотности вероятности

График плотности вероятности для свободной частицы, вылетающей из щели в начальный момент времени:



Ширина щели определяет неопределенность координаты $\Delta x \sim l$ частицы, а ширина пика — неопределенность импульса $\Delta p \sim m x_{1\text{st min}}/t$. Имеем соотношение неопределенности Гайзенберга

$$\Delta p\,\Delta x \sim \hbar. \tag{25}$$

Задача 10. Покажите, что функцию $G(t, x)$ можно представить в виде

$$G(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \, e^{ikx - i\omega t} 2\pi\delta\left(\omega - \frac{\hbar k^2}{2m}\right). \tag{26}$$

Задача 11. Покажите, что функция $G(t, x)$ удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} G(t, x). \tag{27}$$

Задача 12. Покажите, что для любой достаточно гладкой функции $\psi_0(x)$ функция

$$\psi(t, x) = \int dy \, G(t, x - y) \psi_0(y)$$

удовлетворяет уравнению Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \tag{28}$$

Любое решение (волновая функция) описывает амплитуду некоторого процесса распространения частицы. Простейшее решение из Задачи 10

$$\psi(t, x) = e^{ikx - i\omega(k)t}, \qquad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m},$$

можно записать в виде $\psi(t, x) = e^{\frac{i}{\hbar} S(t,x)}$, где $S(t, x) = px - Et$ — классическое действие свободной частицы. Поэтому мы можем отождествить

$$E = \hbar\omega, \qquad p = \hbar k. \tag{29}$$

Уравнение Шрёдингера для частицы в поле

Рассмотрим теперь частицу в поле $U(x)$. Пусть $\psi_0(x)$ — гладкая функция и

$$\psi(t,x) = \int dy\, a_{0t}(y,x)\psi_0(y).$$

Пусть Δt — маленький промежуток времени. По нашим правилам

$$\psi(t+\Delta t,x) = \int dy\, a_{t,t+\Delta t}(y,x)\psi(t,y).$$

Вспомним, что

$$a_{t,t+\Delta t}(y,x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\,\Delta t}}\exp\left(\frac{im(x-y)^2}{2\hbar\,\Delta t} - \frac{i}{\hbar}\Delta t\, U(x)\right).$$

Вычислим $\psi(t+\Delta t,x) - \psi(t,x)$, поделим на Δt и возьмем предел $\Delta t \to 0$.
Задача 13. Покажите, что волновая функция $\psi(t,x)$ удовлетворяет уравнению Шрёдингера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U(x)\psi.$$

Подсказка: вам надо будет разложить $\psi(t,y)$ в ряд Тейлора вблизи точки $y=x$ до второго порядка.