Дифференциальные уравнения
и
функциональный интеграл

Ефимов Г.В.

12 октября 2012 г.

- **Интеграл по путям Фейнмана**

$$\Psi(t) = \int \frac{D\eta}{C} e^{\frac{i}{\hbar} S_{t,t_0}[\eta]} \Psi(t_0) \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(t) = H\Psi(t)$$

  ⋆ **Энергия не фиксирована.**

- **Функциональный интеграл**

  $\int D\phi \; e^{S[\phi]} = ?$

- **Функциональный интеграл $\Longrightarrow$ метод решения любых линейных дифференциальных уравнений второго порядка, как неоднородных, так и однородных**

  $i\frac{d}{dt}\Psi(t) = H\Psi(t) \;\Rightarrow$ **Энергия не фиксирована.**

  $H\Psi_E = E\Psi_E \;\Rightarrow$ **Энергия фиксирована.**

$$L_x = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + W(x), \qquad x \in R^d.$$

Уравнение	Формальное решение
$i\frac{d}{dt}\Psi = L_x\Psi,$	$\Psi = e^{-itL_x}\Psi_0 = \int dx' e^{-itL_x}\delta(x-x')\Psi_0(x')$
$L_x\Psi = J,$	$\left\{ \begin{array}{c} \Psi = \frac{1}{L_x}J = \int\limits_0^\infty dv\ e^{-vL_x}J = \int\limits_0^\infty dv \int dx'\ e^{-vL_x}\delta(x-x')J(x') \\ \Psi = \frac{1}{L_x - i0}J = \int\limits_0^\infty dv\ e^{-iv(L_x - i0)}J = \\ = \int\limits_0^\infty dv \int dx'\ e^{-iv(L_x - i0)}\delta(x-x')J(x') \end{array} \right.$

$$G_z(x,x') = e^{-izL_x}\delta(x-x') \quad \rightarrow \qquad z = t + iv \in C$$

Однородное уравнение $L_x u(x) = 0$

$$U_z(x) = U_z\delta(x) = e^{-izL_x}\delta(x), \qquad z = t + iv \in C$$

$$L_x U_z(x) = i\frac{d}{dz}U_z(x)$$

$$u(x) = \int\limits_{z_-}^{z_+} dz\ U_z(x), \quad \text{Contour}: \quad \Gamma = \{z_- < z < z_+ \ \in C\}$$

$$L_x u(x) = i\int\limits_{z_-}^{z_+} dz\ \frac{d}{dz}U_z(x) = i[U_{z_+}(x) - U_{z_-}(x)] = 0$$

Проблема состоит в том, чтобы найти

- аналитические свойства функции $U_z(x)$ в комплексной плоскости $z \in C$
- два контура $\Gamma \in C$ с $U_{z_+}(x) = U_{z_-}(x) = 0$.

Стационарное уравнение Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\Psi(x)=E\Psi(x),\qquad L_x\Psi(x)=0$$

$$L_x=H_x-E=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-T_E(x)\right],\qquad T_E(x)=E-V(x)$$

$$U_z(x)=e^{-i\frac{z}{\hbar}L_x}\delta(x),\qquad L_xU_z(x)=i\hbar\frac{d}{dz}U_z(x)$$

$$\Psi_\Gamma(x)=\int\limits_\Gamma dz\,U_z(x),\qquad \Gamma=\{z=t+iv\in C\}$$

$$U_z(x)=e^{-i\frac{z}{\hbar}L_x}\delta(x)=$$

$$=\sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar}}\cdot\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{mx^2}{2z}+Ez\right)}}{\sqrt{z}}\int\limits_{\eta(0)=\eta(1)=0}\frac{D\eta}{C}e^{\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^1 d\tau\left[\frac{m}{2}\dot\eta^2(\tau)-zV\left(x\tau+\sqrt{z}\ \eta(\tau)\right)\right]}$$

Функция Грина и функциональный интеграл

$$G_z(x-x') = e^{-izL_x}\delta(x-x') = e^{-iz\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+W(x)\right)}\delta(x-x') =$$

$$= \mathrm{T}\exp\left\{\frac{i}{2}\int\limits_0^z d\tau\frac{d^2}{dx_\tau^2} - i\int\limits_0^z d\tau W(x_\tau)\right\}\delta(x-x')$$

$$= \mathrm{T}\int\frac{D\eta}{C}\exp\left\{\frac{i}{2}\int\limits_0^z d\tau\eta^2(\tau) + \int\limits_0^z d\tau\eta(\tau)\frac{d}{dx_\tau} - i\int\limits_0^z d\tau W(x_\tau)\right\}\delta(x-x')$$

$$= \left(\frac{m}{2i\pi\hbar z}\right)^{\frac{d}{2}}\cdot e^{i\frac{(x-x')^2}{2z}}\int\limits_{\xi(0)=\xi(z)=0}\frac{D\xi}{C}e^{i\int\limits_0^z d\tau\left[\frac{1}{2}\dot{\xi}^2(\tau)-W\left(x'\left(1-\frac{\tau}{z}\right)+x\frac{\tau}{z}-\xi(\tau)\right)\right]}$$

$$= \left(\frac{m}{2i\pi\hbar z}\right)^{\frac{d}{2}}\cdot\int\limits_{\xi(0)=x',\ \xi(z)=x}\frac{D\xi}{C}e^{i\int\limits_0^z d\tau\left[\frac{1}{2}\dot{\xi}^2(\tau)-W(\xi(\tau))\right]}$$

Функциональные интегралы по гауссовой мере

- $$\mathbf{I} = \int \frac{\mathbf{D}\phi}{\mathbf{C}} \mathbf{e}^{-\frac{1}{2}(\phi \mathbf{K}^{-1}\phi) + \mathbf{i}(\phi \mathbf{J})} = \mathbf{e}^{-\frac{1}{2}(\mathbf{JKJ})}$$

$$\phi(\mathbf{x}) \in \mathbf{L_2}, \qquad \mathbf{x} \in D \subset \mathbf{R^d}$$

$$\mathbf{K}^{-1}\mathbf{K} = \mathbf{I}, \qquad \int\limits_{\mathbf{y} \in D} \mathbf{dy}\ \mathbf{K}^{-1}(\mathbf{x},\mathbf{y})\mathbf{K}(\mathbf{y},\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

- $$\mathbf{I} = \int \frac{\mathbf{D}\phi}{\mathbf{C}} \mathbf{e}^{-\frac{1}{2}(\phi \mathbf{K}^{-1}\phi) + \mathbf{W}[\phi]} = ?$$

$$\mathbf{W}[\phi] = \int \mathbf{d}\mu_\eta \mathbf{e}^{\mathbf{i}(\eta\phi)} = \begin{cases} \int dx \phi^n(x) \\ \iint dt dt' \frac{e^{-|t-t'|}}{|\phi(t) - \phi(t')|} \\ \int dx \frac{\phi^4(x)}{1+\phi^2(x)} \end{cases}$$

$\mathbf{W}[\phi] = \mathbf{W}[-\phi]$ - четная и имеет максимум при $\phi = 0$.

Вычисление функциональных интегралов

- Теория возмущения
- Вариационные оценки (неравенство Йенсена $\int d\sigma e^{W} \geq e^{\int d\sigma W}$)

$$\mathbf{d\sigma_K = \frac{D\phi}{C_K} e^{-\frac{1}{2}(\phi K^{-1}\phi)}}$$

$$\mathbf{I = \int d\sigma_K e^{gW[\phi]} = \frac{C_D}{C_K}\int d\sigma_D e^{-\frac{1}{2}(\phi[K^{-1}-D^{-1}]\phi)+gW[\phi]}}$$

$$\geq \max_{\mathbf{D}} \exp\left\{\ln\left[\frac{\mathbf{C_D}}{\mathbf{C_K}}\right] + \int \mathbf{d\sigma_D}\left[-\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}(\phi[\mathbf{K^{-1}} - \mathbf{D^{-1}}]\phi) + \mathbf{gW}[\phi]\right]\right\}$$

$$= \max_{\mathbf{D}} \exp\left\{\ln\left[\frac{\mathbf{C_D}}{\mathbf{C_K}}\right] - \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}([\mathbf{K^{-1}} - \mathbf{D^{-1}}]\mathbf{D}) + \mathbf{g}\int \mathbf{d\mu_\eta e^{-\frac{1}{2}i(\eta D\eta)}}\right\}$$

- Поправки к вариационной оценке ?
- Применение к комплексным интегралам ?

Гауссово эквивалентное представление

Нормальная форма функционала

- $$\int d\sigma_D e^{i(b\phi)} = e^{-\frac{1}{2}(bDb)} \quad \Rightarrow \quad \int d\sigma_D e^{i(b\phi)+\frac{1}{2}(bDb)} \equiv 1$$

$$\vdots e^{i(b\phi)} \vdots_D \equiv e^{i(b\phi)+\frac{1}{2}(bDb)} \quad \Rightarrow \quad \int d\sigma_D \vdots e^{i(b\phi)} \vdots_D \equiv 1$$

.

- $$W[\phi] = \int d\mu_\eta e^{i(\eta\phi)} = \int d\mu_\eta \; e^{-\frac{1}{2}(\eta D\eta)} \; \vdots e^{i(\eta\phi)} \vdots_D =$$

$$= \int d\mu_\eta \; e^{-\frac{1}{2}(\eta D\eta)} \; \vdots 1 - \frac{1}{2}(\eta\phi)^2 + \left[e^{i(\eta\phi)} - 1 + \frac{1}{2}(\eta\phi)^2 \right] \vdots_D$$

$$= W_0 - \frac{1}{2} \int d\mu_\eta e^{-\frac{1}{2}(\eta D\eta)} \vdots (\phi\eta)(\eta\phi) \vdots_D + \vdots W_I[\phi] \vdots_D$$

$$\vdots W_I[\phi] \vdots_D = O(\phi^3)$$

Уравнения самосогласования

- $$\mathbf{I(g)} = \int \frac{D\phi}{C_K} e^{-\frac{1}{2}(\phi K^{-1}\phi)+gW[\phi]} = e^{\ln\left(\frac{C_D}{C_K}\right)-\frac{1}{2}([K^{-1}-D^{-1}]D)+gW_0}\cdot$$

$$\cdot \int d\sigma_D\; e^{g\vdots W_I[\phi]\vdots_D} \cdot e^{-\frac{1}{2}\vdots(\phi[K^{-1}-D^{-1}]\phi)\vdots_D - \frac{g}{2}\vdots(\phi W_2\phi)\vdots_D}$$

- $$-\frac{1}{2}\vdots(\phi[K^{-1}-D^{-1}]\phi)\vdots_D - \frac{g}{2}\vdots(\phi W_2\phi)\vdots_D = 0$$

$$K^{-1}(x,x') - D^{-1}(x,x') + g\int d\mu_\eta\; e^{-\frac{1}{2}(\eta D\eta)}\; \eta(x)\eta(x') = 0$$

Гауссово эквивалентное представление:

- $$I(g) = \int \frac{D\phi}{C_K} e^{-\frac{1}{2}(\phi K^{-1}\phi)+gW[\phi]} = e^{E_0}\int d\sigma_D\; e^{g\vdots W_I[\phi]\vdots_D}$$

Теория возмущений по $\vdots W_I[\phi] \vdots_D$

$$\vdots W_I[\phi] \vdots_D = \int d\mu_\eta \; e^{i(\eta\phi) - \frac{1}{2}(\eta D \eta)} \vdots \left[e^{i(\eta\phi)} - 1 + \frac{1}{2}(\eta\phi)^2 \right] \vdots_D$$

- $$I(g) = e^{E_0} \int d\sigma_D \; e^{g \vdots W_I[\phi] \vdots_D} = e^{E_0 + E_1 + E_2 + \ldots}$$

$$E_1 = \int d\sigma_D \; \vdots W_I[\phi] \vdots_D \equiv 0$$

$$E_2 = \frac{1}{2} \int d\sigma_D \vdots W_I[\phi] \vdots_B \; \vdots W_I[\phi] \vdots_D$$

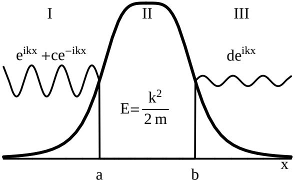
$$= \frac{1}{2} \iint d\mu_{\eta_1} d\mu_{\eta_2} \; e^{-\frac{1}{2}(\eta_1 D \eta_1) - \frac{1}{2}(\eta_2 D \eta_2)} \; \left[e^{-(\eta_1 D \eta_2)} - 1 + (\eta_1 D \eta_2) \right]$$

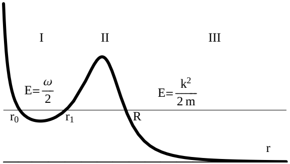
$$I(g) = e^{E_0 + g^2 W_2}, \qquad \delta = g \frac{|W_2|}{|W_0|} = ?$$

Приложения

- Полярон (энергия основного состояния и масса)
- Распространение волн в среде со случайными примесями
- Теория простых жидкостей
- Теория полимеров
- Квантовая механика
  - Распространение квантовых частиц в газе
  - Стационарное уравнение Шредингера
  - Квазиклассическое приближение и туннелирование
  - Амплитуда упругого рассеяния
- Связанные состояния в квантовой теории поля

Квазиклассическое приближение





$$\Psi(x) = \int\limits_{\Gamma} \frac{dz}{\sqrt{z}} e^{\frac{i}{\hbar}Ez} \int\limits_{\chi(0)=0,\chi(z)=x} \frac{D\chi}{C} e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^z d\tau \left[\frac{m\dot{\chi}^2(\tau)}{2} - V(\chi(\tau))\right]}$$

Метод перевала:

1. функциональная переменная χ,
2. комплексная переменная z

Классическое уравнение движения частицы и первый интеграл

$$\mathbf{m}\ddot{\xi}(\tau) + \mathbf{V}'(\xi(\tau)) = \mathbf{0}, \qquad \xi(\mathbf{0}) = \mathbf{0}, \quad \xi(\mathbf{z}) = \mathbf{x}$$

$$\frac{\mathbf{m}}{2}\dot{\xi}^2(\tau) - \mathbf{E} + \mathbf{V}(\xi(\tau)) = \frac{\mathbf{m}}{2}\mathbf{K}(\mathbf{z})$$

$$\boxed{\begin{gathered}\int\limits_0^{\mathbf{x}} \frac{d\xi}{\sqrt{\mathbf{K}(\mathbf{z}) + \frac{2}{\mathbf{m}}[\mathbf{E} - \mathbf{V}(\xi(\tau))]}} = \mathbf{z} \\ \Psi(\mathbf{x}) = \int\limits_\Gamma \frac{d\mathbf{z}}{\sqrt{\phi(\mathbf{z})}} \exp\left\{ \mathbf{i}\frac{\mathbf{m}}{2\hbar} \int\limits_0^{\mathbf{x}} \frac{d\xi\left[\mathbf{K}(\mathbf{z}) + \frac{4}{\mathbf{m}}[\mathbf{E} - \mathbf{V}(\xi)]\right]}{\sqrt{\mathbf{K}(\mathbf{z}) + \frac{2}{\mathbf{m}}[\mathbf{E} - \mathbf{V}(\xi)]}} \right\}\end{gathered}}$$

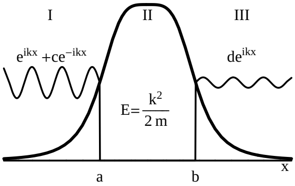
$$\mathbf{m}\ddot{\phi}(\tau) + \mathbf{V}''(\xi(\tau))\phi(\tau) = \mathbf{0}, \qquad \phi(\mathbf{0}) = \mathbf{0}, \qquad \dot{\phi}(\mathbf{0}) = \mathbf{1}.$$

$$\Psi_{\pm}(x) = \frac{C_{\pm}}{\left(e^{\mp i\frac{\pi}{3}}\kappa^2(x) + p^2(x)\right)^{\frac{1}{4}}} e^{\pm \frac{i}{\hbar}\int^{x} dx' \sqrt{e^{\mp i\frac{\pi}{3}}\kappa^2(x') + p^2(x')}}, \quad p^2(x) > 0$$

$$\Psi_{\pm}(x) = \frac{C_{\pm}}{\left(\kappa^2(x) + |p^2(x)|\right)^{\frac{1}{4}}} e^{\pm \frac{1}{\hbar}\int^{x} dx' \sqrt{\kappa^2(x') + |p^2(x')|}}, \quad p^2(x) < 0$$

$$p^2(x) = k^2 - 2mV(x), \qquad \kappa(x) = \left(\frac{mV'(x)\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{3}}$$

Тунелирование



$$w = |d|^2 = 4\left| e^{-\frac{1}{\hbar}\int\limits_a^b dx'\sqrt{-P^2(x')}} \right|^2$$

$$P^2(x) = k^2 - 2mV(x) + \kappa^2(x), \qquad \kappa(x) = e^{-\frac{\pi}{6}i}\left(\frac{mV'(x)\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{3}}$$

Упругое рассеяние

$$\mathbf{H} = \mathbf{H_0} + \mathbf{V}, \qquad \mathbf{G} = \frac{1}{\mathbf{H} - \mathbf{E}}, \qquad \mathbf{G_0} = \frac{1}{\mathbf{H_0} - \mathbf{E}}$$

$$\mathbf{T} = \frac{1}{1 + \mathbf{VG_0}}\mathbf{V} = (\mathbf{H_0} - \mathbf{E})\left[\mathbf{G} - \mathbf{G_0}\right](\mathbf{H_0} - \mathbf{E})$$

$$\mathbf{M_{fi}} = \langle \mathbf{f}|\mathbf{T}|\mathbf{i}\rangle, \qquad \langle \mathbf{f}| = \mathbf{e}^{-\mathbf{ik_f x}}, \qquad |\mathbf{i}\rangle = \mathbf{e}^{\mathbf{ik_i x}}$$

$$\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{x}) = \mathbf{e}^{\mathbf{ikx}} + \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x})$$

$$\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}) = \mathbf{GV}|\mathbf{i}\rangle = \mathbf{G_0 T}|\mathbf{i}\rangle \to \mathbf{f}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\theta})\frac{\mathbf{e}^{\mathbf{ikr}}}{\mathbf{r}}$$

$$\mathbf{G_0}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{1}{4\pi}\frac{\mathbf{e}^{-\mathbf{ik}|\mathbf{x}-\mathbf{y}]}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \to \frac{1}{4\pi}\frac{\mathbf{e}^{-\mathbf{ikr}}}{\mathbf{r}}\mathbf{e}^{-\mathbf{ik_f y}}, \qquad r = |x| \to \infty$$

$$\Phi(x) = -\frac{1}{-\frac{1}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) - \frac{k^2}{2m} - i0} V(x) e^{ik_i x} =$$

$$= -i \int dy V(y) e^{iky} \int\limits_0^\infty \frac{m^{\frac{3}{2}} dt}{(2\pi i t)^{\frac{3}{2}}} \; e^{\frac{i}{2}\left(\frac{tk^2}{m} + \frac{(x-y)^2 m}{t}\right)} I(x, y, t)$$

$$I(x, y, t) = \int \frac{D\xi}{C} e^{i\int\limits_0^t d\tau \left[\frac{m}{2}\dot{\xi}^2(\tau) - V\left(\frac{x}{t}\tau + \left(1 - \frac{\tau}{t}\right)y - \xi(\tau')\right)\right]}$$

$$\xi(0) = \xi(t) = 0$$

$$x = \frac{k_f}{|k|} r, \quad r \longrightarrow \infty$$

Амплитуда рассеяния

$$\mathbf{f}(\mathbf{k},\theta)=\frac{\mathbf{m}}{2\pi}\int \mathbf{dyV(y)e^{iqy}}\int \frac{\mathbf{D}\xi}{\mathbf{C}}\mathbf{e}^{\mathbf{i}\int\limits_0^\infty \mathbf{d}\tau\left[\frac{\mathbf{m}}{2}\dot{\xi}^2(\tau)-\mathbf{V}\left(\mathbf{v_{out}}\tau+\mathbf{y}-\xi(\tau)\right)\right]}$$

,

$$\xi(0)=\xi(\infty)=0$$

$$\mathbf{q}=\mathbf{k_{in}}-\mathbf{k_{out}},\qquad \mathbf{v_{out}}=\frac{\mathbf{k_{out}}}{\mathbf{m}}=\frac{\mathbf{kn}}{\mathbf{m}},\qquad \mathbf{q}^2=4\mathbf{k}^2\sin^2\frac{\theta}{2}$$

Заключение

- Метод функционального интегрирования рассматривается как эффективный способ представления решений линейных дифференциальных уравнений второго порядка.
- Метод применим к решению однородных уравнений.
- Сформулирован метод гауссового эквивалентного представления вычисления функциональных интегралов.
- Метод применен к широкому кругу физических задач:
  - Полярон (энергия основного состояния и масса)
  - Распространение волн в среде со случайными примесями
  - Теория простых жидкостей
  - Теория полимеров
  - Квантовая механика
    - Распространение квантовых частиц в газе
    - Стационарное уравнение Шредингера
    - Квазиклассическое приближение и туннелирование
    - Амплитуда упругого рассеяния
  - Связанные состояния в квантовой теории поля

Публикации

1. Ефимов Г.В., **Метод функционального интегрирования**, (Учебное пособие), Международный университет природы общества и человека "Дубна", Дубна, 2008.
2. Ефимов Г.В., **Квантовая механика (избранные главы)**, (Учебное пособие), Учебно-научный центр ОИЯИ, Дубна, 2012.
3. Ефимов Г.В., **Стационарное уравнение Шредингера нерелятивистской квантовой механики и функциональный интеграл** , ТМФ, **171**, N 3, 452-474, 2012.