

Кафедра теоретической физики и астрофизики  
Физический факультет, БГУ Минск



**Функциональное  
интегрирование в квантовой  
теории поля**

**Я М Шнир**

все вопросы, комментарии, замечания и  
протесты:

*shnir@maths.tcd.ie*

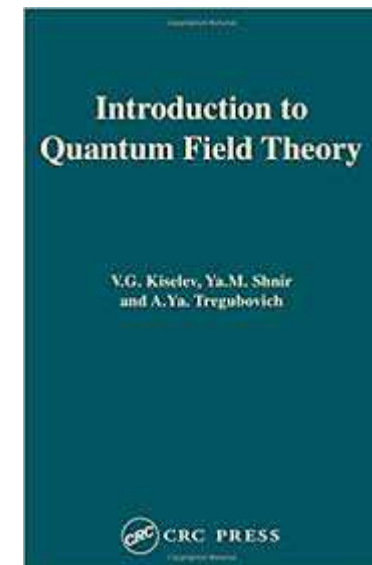
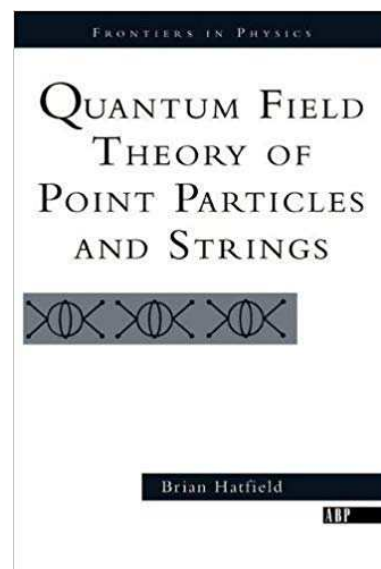
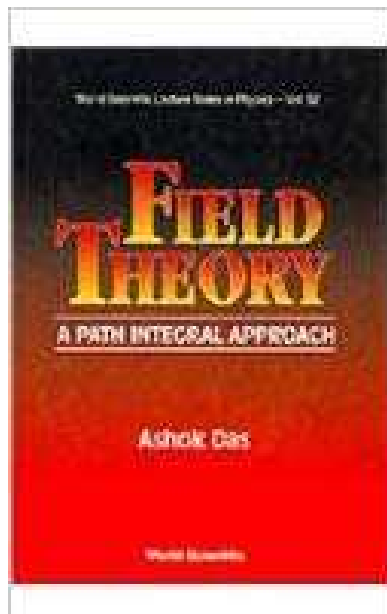
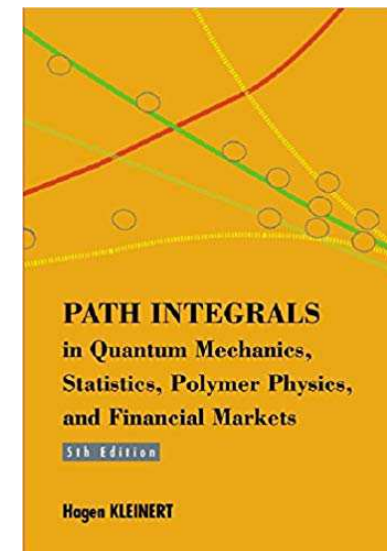
# План лекций

**“Mathematics is the part of physics  
where experiments are cheap”**

*V.I.Arnold*

- **Формализм наименьшего действия в классической механике**
- **Фейнмановская формулировка квантовой механики, основанная на вычислении интегралов по траекториям.**
- **Функции Грина в одночастичной квантовой механике, вычисление функции Грина гармонического осциллятора.**
- **Метод стационарной фазы. Евклидова формулировка.**
- **Задача о двухяйном потенциале. Квантовомеханические инстантоны. Вычисление функционального детерминанта.**
- **Теория свободного скалярного поля, энергия вакуума.**
- **Теория  $\lambda\phi^4$ , вычисление эффективного потенциала.**
- **Регуляризация и перенормировка. Бегущая константа связи**
- **Эффективное действие. Петлевое разложение и диаграммная техника. Разложение по константе связи**
- **Перенормировка**
- **Функциональные интегралы по фермионным полям. Грассмановы переменные.**
- **Суперсимметрия.**

# Литература



# Лекция 1: Действие в классической механике

Свободное одномерное движение частицы

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(x)$$

● Лагранжиан:

$$\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{V}$$

$$\mathcal{T} = \frac{m}{2} \left( \frac{dx}{dt} \right)^2; \quad F(x) = -\frac{d\mathcal{V}}{dx}$$

Кинетическая энергия

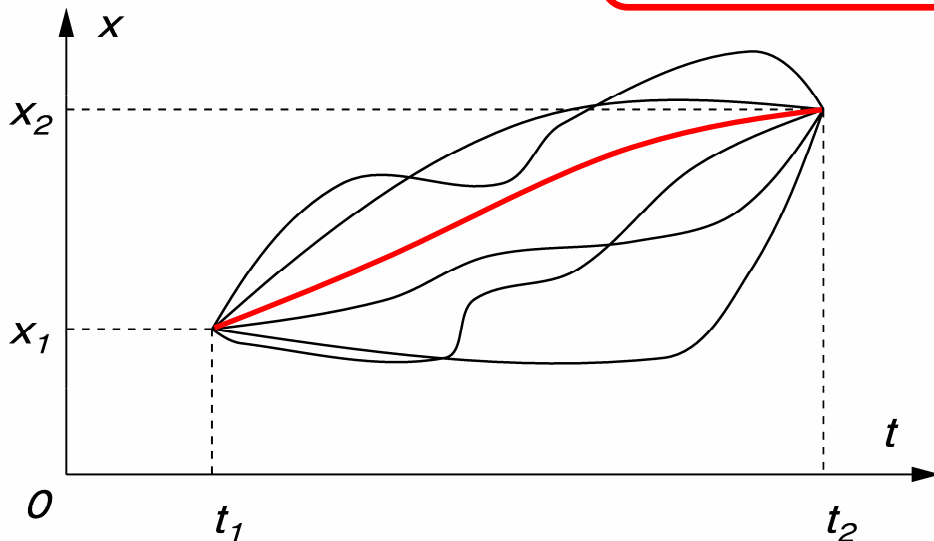
Потенциальная энергия

Уравнение движения

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0$$

Импульс

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}}$$



● Действие:

$$S[x] = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(\dot{x}, x; t) dt$$

Классическая траектория  $\bar{x}(t)$  соответствует стационарной точке действия:  $\delta S = 0$

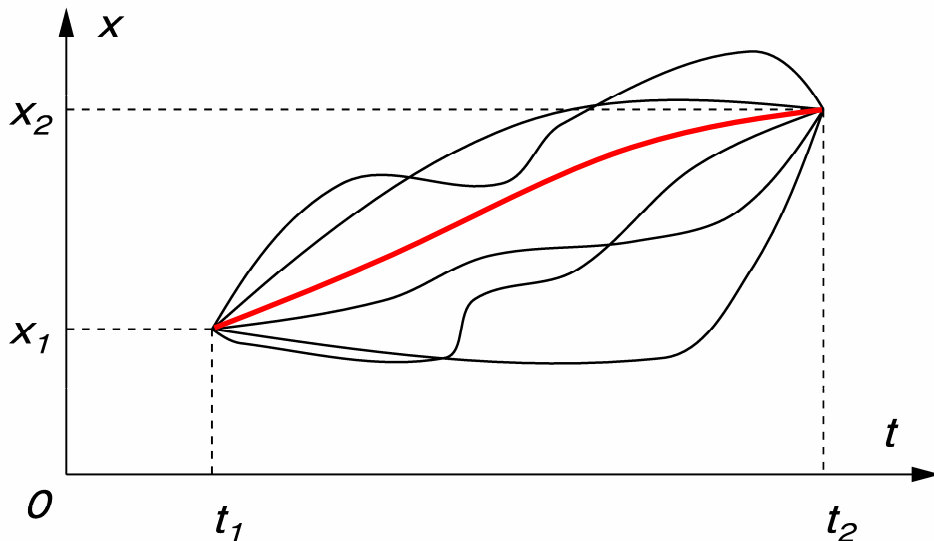
# Вариационный принцип

Пучок траекторий, близких к классической:

$$x(t) = \bar{x}(t) + \delta x(t); \quad \delta x(t_1) = \delta x(t_2) = 0$$

**Вариация действия:**  $\delta S = S[\bar{x} + \delta x] - S[\bar{x}] = \int_{t_1}^{t_2} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \delta x \right) dt$

$$= \delta x \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \right) \delta x dt = - \int_{t_1}^{t_2} \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \right) \delta x dt$$



**Уравнение движения**

$$\delta S = 0 \quad \longrightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0$$

**Замечание:** действие является функционалом траектории  $x(t)$

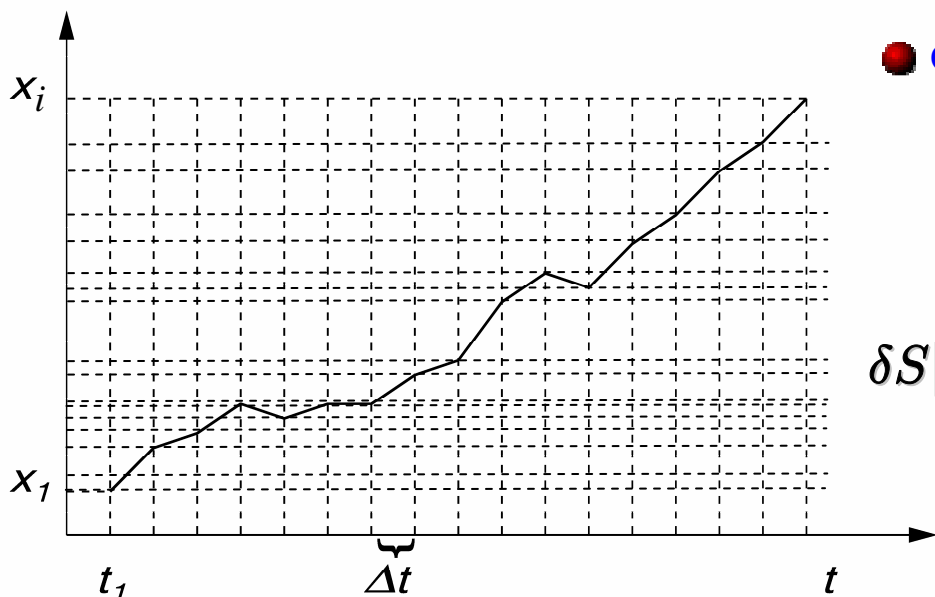
# Функционалы и операции над ними

Функционал – это операция, ставящая в соответствие функции  $x(t)$  некоторое число

**Дискретизация:**  $\Delta t = \frac{t_b - t_a}{N}$ ,  $t_{i+1} - t_i = \Delta t$ ,  $i = 0, 1, \dots, N$ ,  $x(t_1) = x_1$ ,  $x(t_N) = x_N$

**Дискретизованное действие:** 
$$S_N = \Delta t \sum_{n=0}^{N-1} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t} \right)^2 - \mathcal{V}(x_n) \right]$$

**Стационарная точка:** 
$$\frac{\partial S_N}{\partial x_i} = \Delta t \left[ m \left( \frac{x_i - x_{i+1}}{\Delta t^2} - \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t^2} \right) - \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial x_i} \right] = 0$$



● **Функциональная производная**

$$\frac{\delta}{\delta x(t)} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial}{\partial x_i}$$

$$\begin{aligned} \delta S[x(t)] &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} dS_N = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sum_{n=1}^{N-1} \frac{\partial S_N}{\partial x_i} dx_i \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \frac{\delta S}{\delta x(t)} \delta x(t) dt \end{aligned}$$

# Функционалы и операции над ними

- Функциональная производная - более практичное определение:



$$\frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t')} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left( S[x(t) + \epsilon \delta(t - t')] - S[x(t)] \right)$$

**Задача:** проверить что это определение совпадает с  $\frac{\delta}{\delta x(t)} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial}{\partial x_i}$

**Подсказка:** воспользуйтесь формулой  $\delta(t - t') = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \delta_{ij}$

Примеры вычисления функциональной производной  $\frac{\delta F[x(t)]}{\delta x(t')}$

●  $F[x] = C = const$   $\Rightarrow \frac{\delta F[x(t)]}{\delta x(t')} = 0$

●  $F[x] = \int x(t) dt$   $\Rightarrow \frac{\delta F[x(t)]}{\delta x(t')} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \int (x(t) + \epsilon \delta(t - t')) dt - \int x(t) dt \right\}$   
 $= \int \delta(t - t') dt = 1$



$$\bullet F[x] = \int G(t, t'') x(t) dt$$

$t''$  - параметр

$$\begin{aligned} \rightarrow \frac{\delta F[x(t)]}{\delta x(t')} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \int G(t, t'') \left( x(t) + \epsilon \delta(t - t') \right) dt - \int G(t, t'') x(t) dt \right\} \\ &= \int G(t, t'') \delta(t - t') dt = G(t', t'') \end{aligned}$$

$$\bullet F[x] = x(t)$$

Обыкновенная функция, а не функционал

$$F[x] = \int \delta(t' - t) x(t') dt' \quad \rightarrow \quad \frac{\delta F[x(t)]}{\delta x(t')} = \delta(t - t')$$

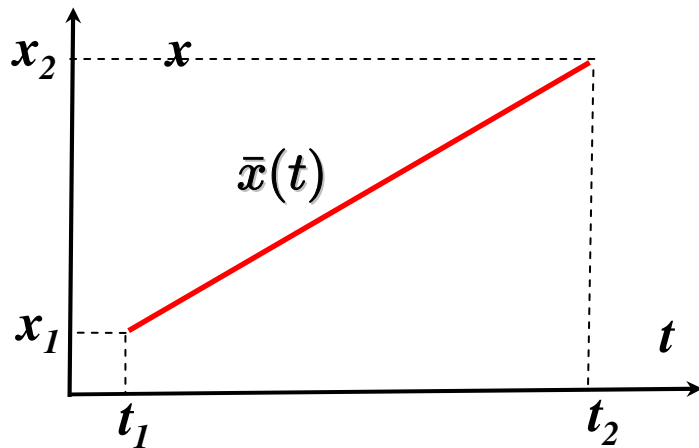
$$\bullet F[x] = \int \dot{x}(t)^2 dt \quad \rightarrow \quad \frac{\delta F[x(t)]}{\delta x(t')} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \int \left( \frac{d(x(t) + \epsilon \delta(t - t'))}{dt} \right)^2 dt - \int \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 dt \right\}$$

$$= 2 \int \frac{dx(t)}{dt} \frac{d}{dt} (\delta(t - t')) dt = 2 \left( \cancel{\dot{x}(t) \delta(t - t')} \Big|_{t_1}^{t_2} - \int \ddot{x}(t) \delta(t - t') dt \right) = -2\ddot{x}(t')$$



# Действие как функция граничных условий

● **Свободное движение:**



$$S[x(t)] = \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} \dot{x}^2 dt$$

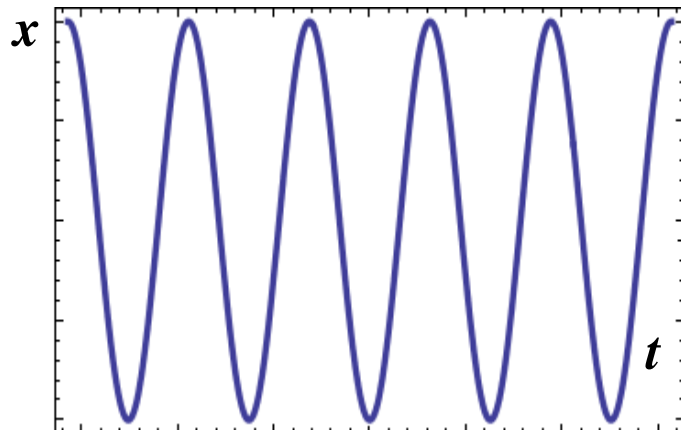
$$x(t_1) = x_1, \quad x(t_2) = x_2$$

$$\bar{x}(t) = vt; \quad \Rightarrow \quad S(x_1, x_2, t_1, t_2) = \frac{mv^2}{2} (t_2 - t_1)$$

$$S(x_1, x_2, t_1, t_2) = \frac{m(x_2 - x_1)^2}{2(t_2 - t_1)}$$

$$v = \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1}$$

● **Гармонический осциллятор:**



$$S[x(t)] = \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt$$

$$\bar{x}(t) = x_1 \cos(\omega t) + (\dot{x}_1/\omega) \sin(\omega t)$$

**Задача:** проверить что  $S(x_1, x_2, t_1, t_2) =$

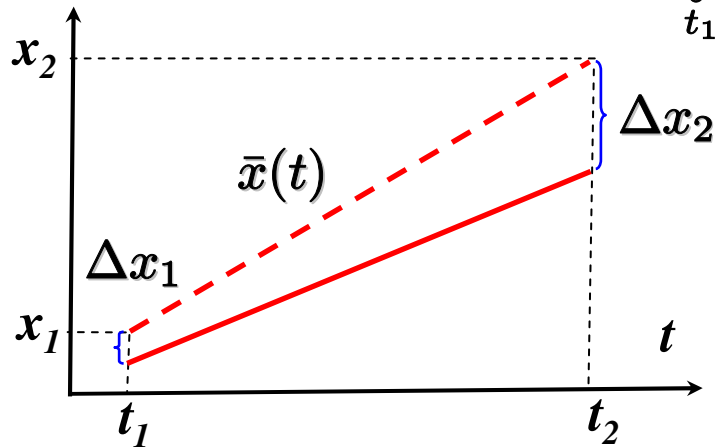
?

$$= \frac{m\omega}{2 \sin \omega(t_2 - t_1)} [(x_1^2 - x_2^2) \cos \omega(t_2 - t_1) - 2x_1 x_2]$$

# Действие как функция граничных условий

● **Свободное движение:**

$$S[x(t)] = \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} \dot{x}^2 dt \quad S(x_1, x_2, t_1, t_2) = \frac{m(x_2 - x_1)^2}{2(t_2 - t_1)}$$



$$x_1 \rightarrow x_1 + \Delta x_1, \quad x_2 \rightarrow x_2 + \Delta x_2$$

$$\delta S = \left. \frac{\partial \mathcal{L}(\bar{x}(t))}{\partial \dot{x}} \delta x(t) \right|_{t_1}^{t_2} -$$

$$- \int_{t_1}^{t_2} \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}(\bar{x}(t))}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}(\bar{x}(t))}{\partial x} \right) \Delta x(t) dt$$

Если  $\Delta x_1 = \Delta x_2$ , то условие  $\delta S = 0$  означает сохранение импульса:

$$\delta S = \left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \Delta x \right|_{t_1}^{t_2} = p(t_2) \Delta x_2 - p(t_1) \Delta x_1$$

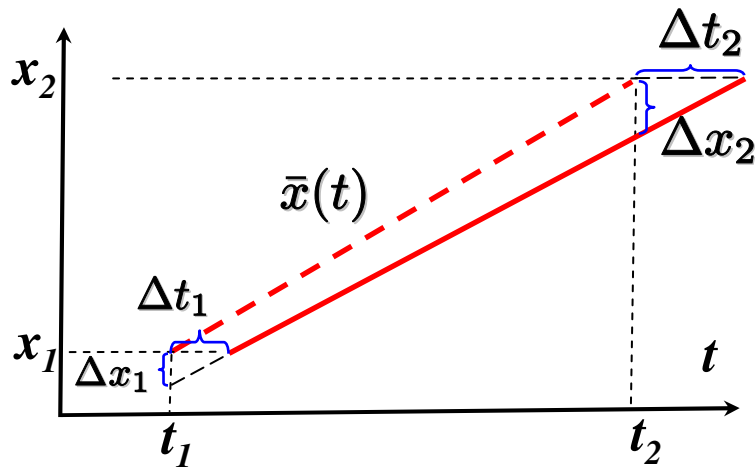
$$\frac{\partial S(x_2, x_1, t_2, t_1)}{\partial x_1} = -p(t_1), \quad \frac{\partial S(x_2, x_1, t_2, t_1)}{\partial x_2} = p(t_2)$$

# Действие как функция граничных условий

## ● Свободное движение:

$$S[x(t)] = \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} \dot{x}^2 dt \quad S(x_1, x_2, t_1, t_2) = \frac{m(x_2 - x_1)^2}{2(t_2 - t_1)}$$

$$t_1 \rightarrow t_1 + \Delta t_1, \quad t_2 \rightarrow t_2 + \Delta t_2$$



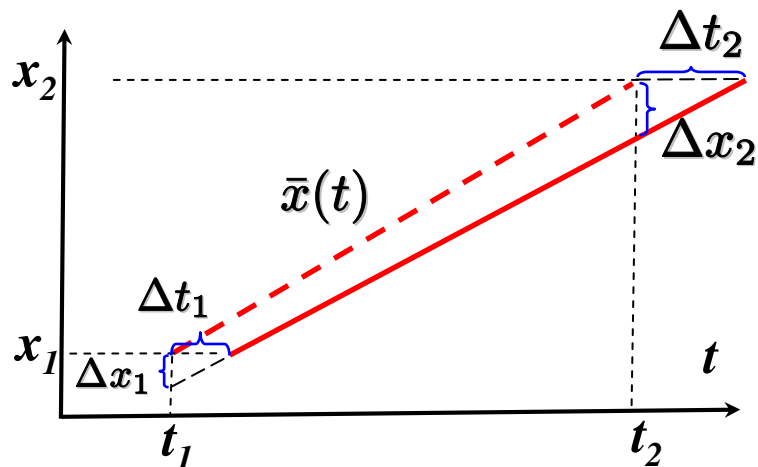
Вариация  $\Delta x$ , связанная с вариацией  $\Delta t$ :

$$\Delta x = \frac{\Delta x}{\Delta t} \Delta t = \dot{x}(t) \Delta t$$

$$S(x_1, x_2, t_1 + \Delta t_1, t_2 + \Delta t_2) = \int_{t_1 + \Delta t_1}^{t_2 + \Delta t_2} \mathcal{L}(\bar{x} + \Delta x, \dot{\bar{x}} + \Delta \dot{x}) dt = \int_{t_1 + \Delta t_1}^{t_1} \mathcal{L} dt + \int_{t_2}^{t_2 + \Delta t_2} \mathcal{L} dt + \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt$$



$$\delta S = \mathcal{L} \Delta t_2 - \mathcal{L} \Delta t_1 + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \Delta x \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \right) \Delta x dt$$



$$\delta S = \mathcal{L} \Delta t_2 - \mathcal{L} \Delta t_1 + \left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \Delta x \right|_{t_1}^{t_2} =$$

$$= \left( \mathcal{L} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right) \Delta t_2 - \left( \mathcal{L} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right) \Delta t_1 = 0$$

Гамильтониан:

$$H = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} - \mathcal{L}$$

Если  $\Delta t_1 = \Delta t_2$ , то условие  $\delta S = 0$  означает сохранение энергии:

$$S(x_1, x_2, t_1, t_2) = \frac{m(x_2 - x_1)^2}{2(t_2 - t_1)}$$



$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial S(x_2, x_1, t_2, t_1)}{\partial t_2} = -\frac{m(x_2 - x_1)^2}{2(t_2 - t_1)^2} = -\left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \dot{x} - \mathcal{L} \right) \Big|_{t_2} \equiv -H(t_2) \\ \frac{\partial S(x_2, x_1, t_2, t_1)}{\partial t_1} = \frac{m(x_2 - x_1)^2}{2(t_2 - t_1)^2} = \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \dot{x} - \mathcal{L} \right) \Big|_{t_1} \equiv H(t_1) \end{array} \right.$$

# Функциональные интегралы в квантовой механике

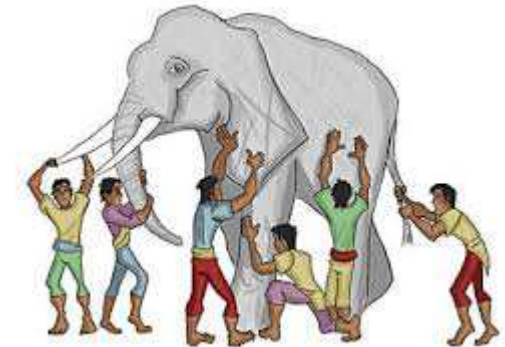
*Daniel F. Styer et al,*  
*Am. J. Phys. 70 (3), March 2002*



9 формулировок  
Квантовой механики

## ● Матричная формулировка Гейзенберга

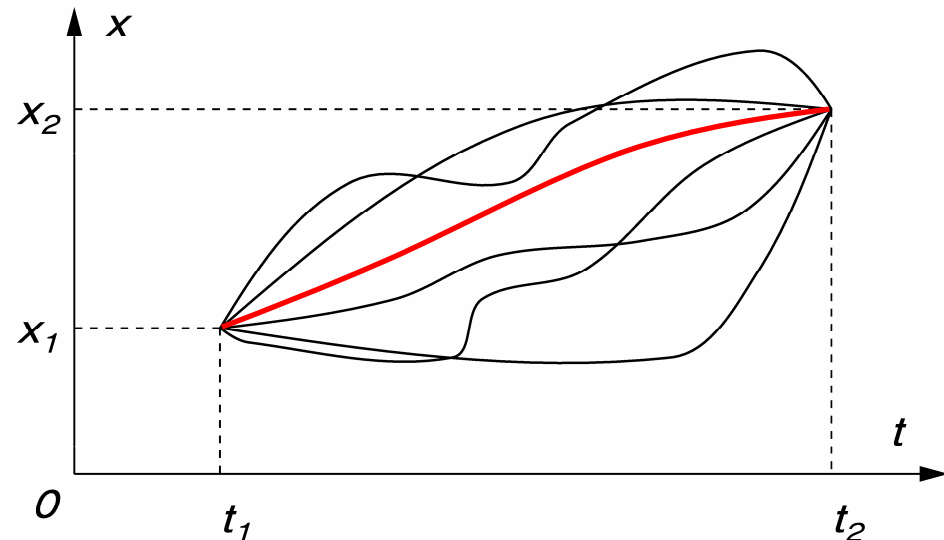
$$\langle \psi | f(\hat{A}) | \psi \rangle; \quad \frac{d\hat{A}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}$$



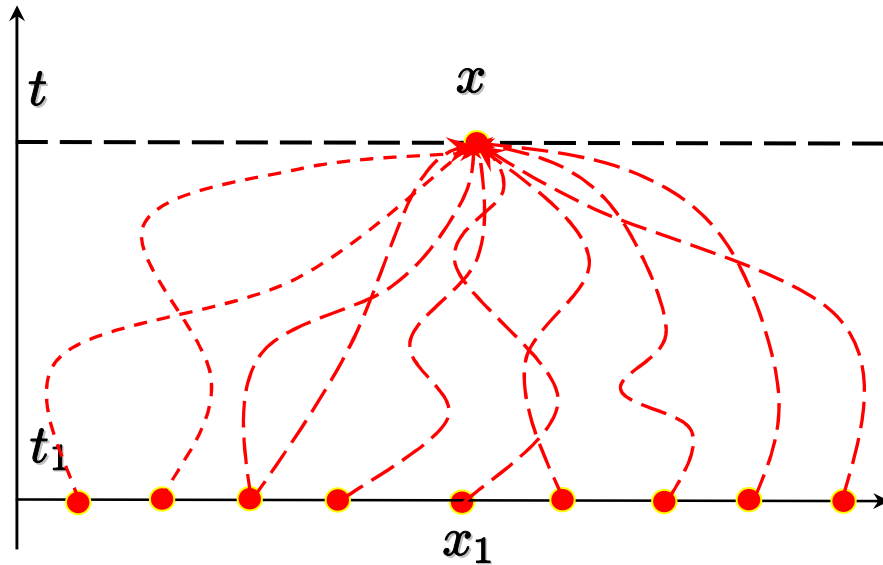
## ● Волновая формулировка Шредингера

$$i\hbar \frac{d\psi(x, t)}{dt} = \hat{H}\psi(x, t)$$

## ● Фейнмановские интегралы по траекториям



# Уравнение Шрёдингера: Функция Грина



$$i\hbar \frac{d\psi(x, t)}{dt} = \hat{H}\psi(x, t)$$

Функция Грина уравнения Шрёдингера

$$G(x, x_1, t, t_1)$$

(пропагатор, резольвента)

$$\psi(x, t) = \int dx_1 G(x, x_1, t, t_1) \psi(x_1, t_1)$$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{dG(x, x_1, t, t_1)}{dt} = \hat{H}G(x, x_1, t, t_1) \\ G(x, x_1, t_1, t_1) = \delta(x - x_1) \end{cases}$$

Стационарная задача:  $\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$

$$\sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(y) = \delta(x - y)$$



**Задача:** проверить что

$$G(x, x_1, t, t_1) = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x_1) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t - t_1)}$$

# Функция Грина свободной частицы

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \\ \hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \\ \hat{P}\psi(x) = p\psi(x) \end{array} \quad \longrightarrow \quad \psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}px} \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

## • Дискретизация спектра:

$$0 \leq x \leq L; \quad \psi(0, t) = \psi(L, t)$$



$$\psi(x) \rightarrow \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}p_n x\right)$$

$$p_n = \frac{2\pi n\hbar}{L}, \quad E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi n}{L}\right)^2 \quad \left\{ \begin{array}{l} n \rightarrow n+1 \\ p \rightarrow p + \Delta p = p + \frac{2\pi\hbar}{L} \end{array} \right.$$

## • Функция Грина:

$$G(x, x_1, t, t_1) = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x_1) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_1)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{L} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ p(x-x_1) - \frac{p^2(t-t_1)}{2m} \right] \right\}$$

$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar}{L}$$



$$G(x, x_1, t, t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left[ -\frac{i}{2m\hbar} p^2(t-t_1) + \frac{i}{\hbar} p(x-x_1) \right]$$



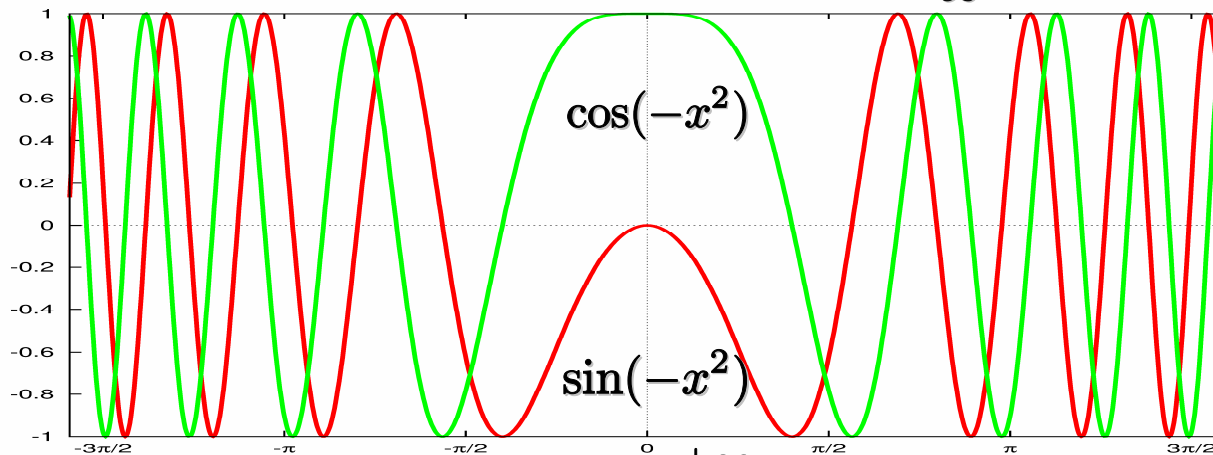
# Гауссовы интегралы

## Тривиальные интегралы:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\pi} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}$$

Похожие интегралы Френеля:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \cos x^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \sin x^2 dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$



$$\cos x^2 + i \sin x^2 = e^{ix^2} \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ix^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}} (1 + i) = \sqrt{\pi} e^{i\pi/4} = \sqrt{i\pi}$$

Гауссов интеграл от чисто мнимой экспоненциальной функции имеет тот же вид, что и интеграл от действительной функции при замене  $-a \rightarrow ia$ ,  $a > 0$

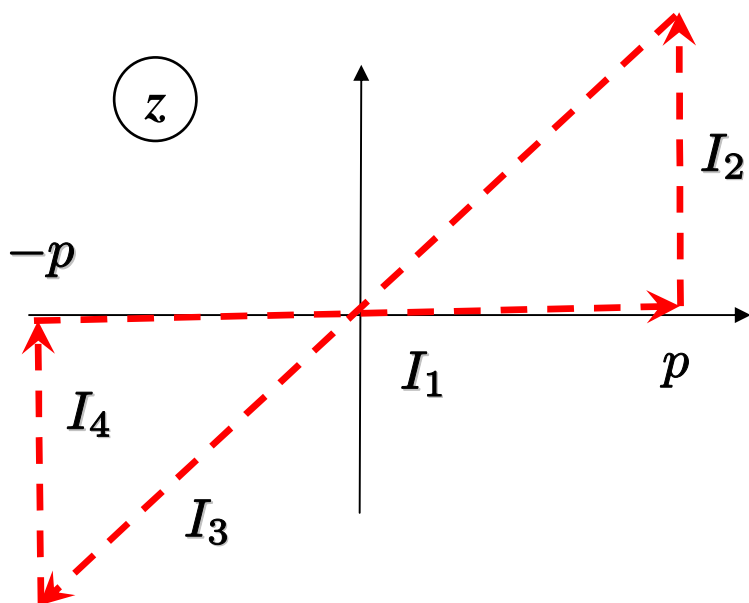
# Гауссовы интегралы

Более детальный анализ:

$$I(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iax^2} dx$$



$$\oint e^{iaz^2} dz = I_1 + I_2 + I_3 + I_4 = 0$$



$$I_1 : z = x \rightarrow I_1 = \lim_{p \rightarrow \infty} \int_{-p}^p e^{iax^2} dx = I(a)$$

$$I_2 : z = p + iy \rightarrow I_2 = \lim_{p \rightarrow \infty} \int_0^p e^{ia(p+iy)^2} idy$$

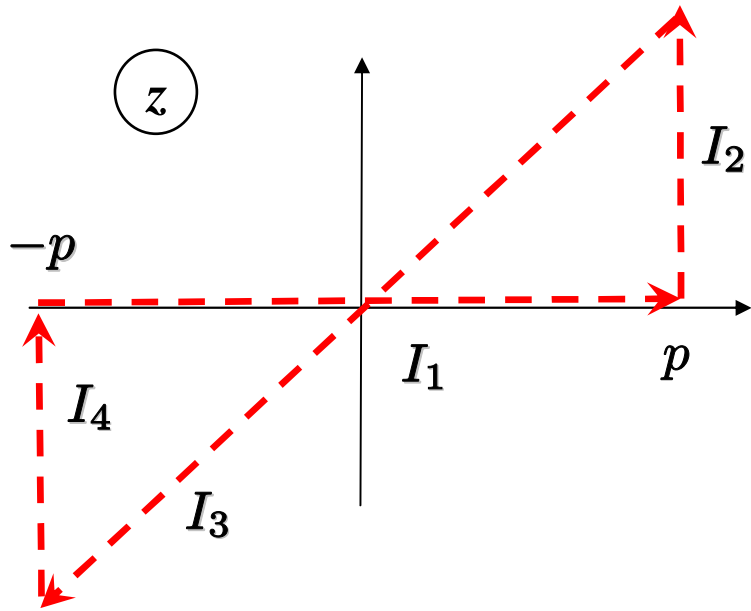
$$I_3 : z = x + iy = (1+i)y = \sqrt{2}e^{i\pi/4}y$$

$$I_3 = e^{i\pi/4} \lim_{p \rightarrow \infty} \int_{\sqrt{2}p}^{-\sqrt{2}p} e^{-ax^2} dx$$

$$I_4 : z = -p + iy \rightarrow I_4 = \lim_{p \rightarrow \infty} \int_{-p}^0 e^{ia(iy-p)^2} idy$$

$$(y \rightarrow -y) \rightarrow I_4 = \lim_{p \rightarrow \infty} \int_0^p e^{ia(iy+p)^2} idy = I_2$$

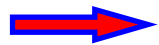
# Гауссовы интегралы



$$|I_2| = |I_4| = \lim_{p \rightarrow \infty} \left| \int_0^p e^{ia(p+iy)^2} i dy \right| =$$

$$= \lim_{p \rightarrow \infty} \left| \int_0^p e^{-2apy} dy \right| = \lim_{p \rightarrow \infty} \frac{1 - e^{-2ap^2}}{2ap} = 0$$

$$I_1 + I_3 = 0$$



$$I(a) = -I_3 = e^{i\pi/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{i\pi}{a}}$$

**• Менее тривиальные интегралы (домашнее задание):**



$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2+ibx} dx ;$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-ax^2+bx} dx ;$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2+bx} dx$$

# Вычисление функции Грина свободной частицы

$$G(x, x_1, t, t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left[ -\frac{i}{2m\hbar} p^2 (t-t_1) + \frac{i}{\hbar} p (x-x_1) \right]$$

$$a = \frac{i(t-t_1)}{2m\hbar}; \quad b = \frac{i}{\hbar} (x-x_1) \quad \rightarrow$$

$$G(x, x_1, t, t_1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t_1)}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_1)^2}{2(t-t_1)}}$$

Классическое действие  
свободной частицы:

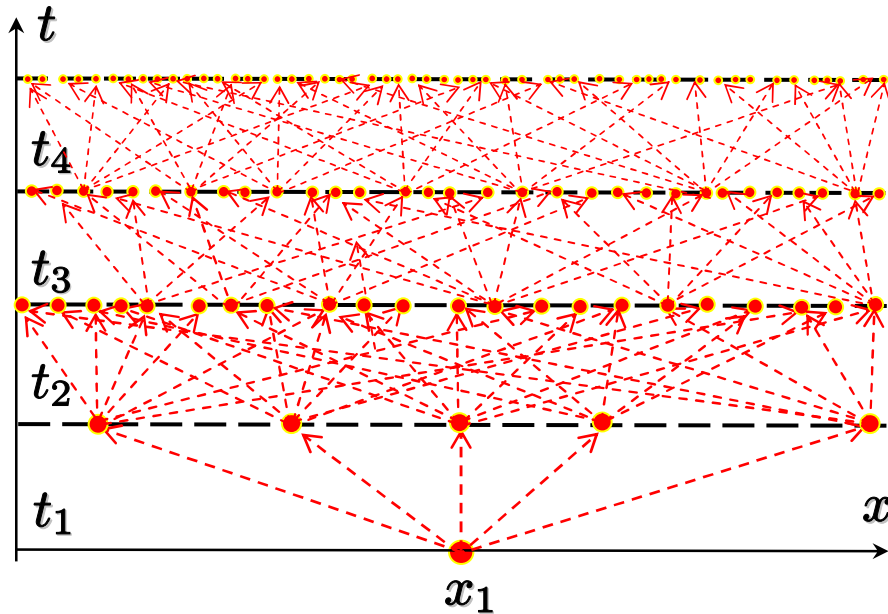
$$S_{cl}(x_1, x_2, t_1, t_2) = \frac{m(x_2 - x_1)^2}{2(t_2 - t_1)}$$

$$G(x, x_1, t, t_1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t_1)}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}(x, x_1, t, t_1)}$$

**Замечание:** этот результат является точным!

# Интеграл по траекториям

$$G(x, x_1, t, t_1) = \int dx_2 dx_3 \dots dx_N G(x, x_N, t, t_N) \dots G(x_3, x_2, t_3, t_2) G(x_2, x_1, t_2, t_1)$$



Дискретизация:

$$\Delta t = \frac{t - t_1}{N}, \quad t_{i+1} - t_i = \Delta t, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$N \rightarrow \infty, \quad \Delta t \rightarrow 0$$

$$G(x, x_1, t + \Delta t, t) \approx G(x, x_1, t, t) + \frac{\partial G}{\partial t} \Delta t = G(x, x_1, t, t) - \frac{i}{\hbar} \hat{H} G(x, x_1, t, t) \Delta t$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

$$G(x, x_1, t, t) = \delta(x - x_1) = \int \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-x_1)}$$

$$G(x, x_1, t + \Delta t, t) \approx \delta(x - x_1) - \frac{i\Delta t}{\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \delta''(x - x_1) + V(x) \delta(x - x_1) \right)$$

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

$$\approx \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{ip}{\hbar}(x-x_1)} \left[ 1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} \left( \frac{p^2}{2m} + V(x) \right) \right]$$

$$G(x, x_1, t + \Delta t, t) \approx \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{ip}{\hbar}(x-x_1)} \left[ 1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} \left( \frac{p^2}{2m} + V(x) \right) \right]$$

$$\approx \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i\Delta t}{\hbar} \left[ p \frac{(x-x_1)}{\Delta t} - \left( \frac{p^2}{2m} + V(x) \right) \right]}$$

↓

Функция Грина уравнения Шредингера:

$$G(x, x_1, t, t_1) = \int dx_2 dx_3 \dots dx_N G(x, x_N, t, t_N) \dots G(x_3, x_2, t_3, t_2) G(x_2, x_1, t_2, t_1)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_2 dx_3 \dots dx_N \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \frac{dp_2}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} e^{\frac{i\Delta t}{\hbar} \sum_{i=1}^N \left[ p_i \frac{(x_{i+1} - x_i)}{\Delta t} - \left( \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i) \right) \right]}$$

- N интегралов по импульсу и по координатам, размерность конфигурационного пространства 2N-1
- Координаты  $x$  и импульсы  $p$  – это классические функции, а не операторы
- Предел  $N \rightarrow \infty$  соответствует обычным траекториям в фазовом пространстве  $x(t), p(t)$
- В этом пределе в экспоненциальной части функции Грина находится

классическое действие:  $S[p(t), x(t)] = \int dt (p\dot{x} - H(p, x))$

# Интеграл по траекториям

$$G(x, x_1, t, t_1) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_2 dx_3 \dots dx_N \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \frac{dp_2}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} e^{\frac{i\Delta t}{\hbar} \sum_{i=1}^N \left[ p_i \frac{(x_{i+1} - x_i)}{\Delta t} - \left( \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i) \right) \right]}$$



$$G(x, x_1, t, t_1) = \int \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}p(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t dt [p(t)\dot{x}(t) - H(p(t), x(t))]} = \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p e^{\frac{i}{\hbar} S[p, x]}$$

Редуцированная форма получается интегрированием по импульсам:

$$\int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{i\Delta t}{\hbar} \left[ p_i \frac{(x_{i+1} - x_i)}{\Delta t} - \frac{p_i^2}{2m} \right]} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar} \frac{m}{2} \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t} \right)^2}$$



$$G(x, x_1, t, t_1) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_2 dx_3 \dots dx_N \left( \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \right)^N e^{\frac{i\Delta t}{\hbar} \sum_{i=1}^N \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t} \right)^2 - V(x_i) \right]}$$

$$\equiv \int \mathcal{D}x(t') e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t dt' \left[ \frac{m}{2} \dot{x}(t')^2 - V(x(t')) \right]} = \int \mathcal{D}x(t') e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t')]}$$



# Функция Грина свободной частицы

- Функция Грина уравнения Шредингера:

$$G(x, x_1; T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_1)^2}{2T}}$$

- Интеграл по траекториям:  $G(x, x_1; T) = \int \mathcal{D}x(t') e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t')]}$

$$\approx \int \prod_{i=2}^N dx_i \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t_i}} e^{\frac{im}{\hbar} \left[ \frac{(x_2-x_1)^2}{2\Delta t_1} + \frac{(x_3-x_2)^2}{2\Delta t_2} + \dots \right]}$$

Бесконечная цепочка Гауссовых интегралов по  $dx_i$  типа:

$$\int dx_2 \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t_1}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t_2}} e^{\frac{im}{2\hbar} \left[ x_2^2 \left( \frac{1}{\Delta t_1} + \frac{1}{\Delta t_2} \right) - 2x_2 \left( \frac{x_1}{\Delta t_1} + \frac{x_3}{\Delta t_2} \right) + \frac{x_1^2}{\Delta t_1} + \frac{x_3^2}{\Delta t_2} \right]}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (\Delta t_1 + \Delta t_2)}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_3-x_1)^2}{\Delta t_1 + \Delta t_2}}$$

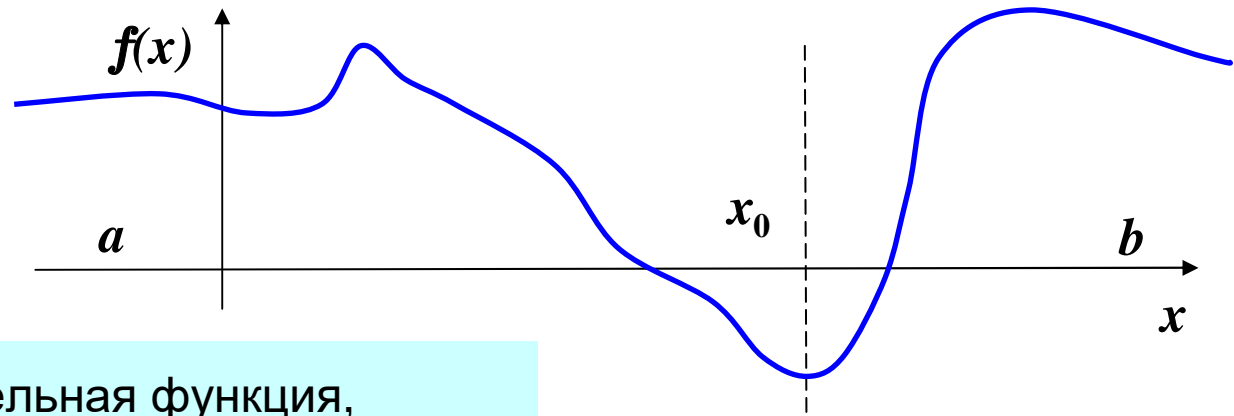
...и так далее для всех последующих интегрирований по  $dx_3, dx_4, \dots$

**Замечание:** прямое вычисление интеграла по траекториям возможно только для свободного движения,  $V(x)=0$

# Метод стационарной фазы

● Простой пример приближенного вычисления обычного интеграла:

$$I = \int_a^b dx e^{-f(x)}$$



$f(x)$  - гладкая действительная функция,  
имеющая минимум  $f(x_0)$ ,  $x_0 \in [a, b]$ ,  $f'(x_0) = 0$

$$I \approx \int_a^b dx e^{-f(x_0) - \frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2 - \frac{1}{3!}f'''(x_0)(x-x_0)^3 - \frac{1}{4!}f^{(4)}(x_0)(x-x_0)^4 - \dots}$$
$$\approx \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-f(x_0) - \frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{f''(x_0)}} e^{-f(x_0)}$$

Основной вклад в интеграл набирается в области  $x - x_0 \sim 1/\sqrt{f''(x_0)}$

# Метод стационарной фазы

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-f(x)} \approx \sqrt{\frac{2\pi}{f''(x_0)}} e^{-f(x_0)}$$

**Замечание:** приближение работает, если поправки 3го и 4го порядка

пренебрежимо малы:  $\frac{f'''(x_0)}{(f''(x_0))^{3/2}} \ll 1$  и  $\frac{f^{(4)}(x_0)}{(f''(x_0))^2} \ll 1$

Это условие автоматически выполняется, если  $f(x) = g(x)/\hbar$ ,  $\hbar \ll 1$

● **Пример: формула Стирлинга:**  $z! = \Gamma(z+1) = \int_0^{\infty} dt t^z e^{-t} = \int_0^{\infty} dt e^{-t+z \ln t}$

$$f(t) = t - z \ln t, \quad \rightarrow f'(t_0) = -1 + z/t_0 = 0, \quad t_0 = z$$
$$f''(t_0) = -z/t_0^2 = -z^{-1}$$



$$z! \approx \sqrt{2\pi z} \left(\frac{z}{e}\right)^z$$


● **Домашнее задание:** получить аналогичную формулу для оценки экспоненциального интеграла от аналитической функции комплексной переменной  $z$

# Функция Грина свободной частицы

## Вычисление интеграла по траекториям методом стационарной фазы

Вариация траектории:

$$x(t) = \bar{x}(t) + \delta x(t) \quad S[\bar{x}(t) + \delta x(t)] \approx S[\bar{x}(t)] + \delta S + \frac{1}{2} \delta^2 S + \dots$$

Классическая траектория  $\bar{x}(t)$    $\delta S[x(t)] = 0$       $S[\bar{x}(t)] = \frac{m(x - x_0)^2}{2(t - t_0)}$

Свободное движение – все вариации действия кроме второй,  $\delta^2 S$ , равны нулю

$$\delta^2 S[x(t)] = \frac{1}{2} \int_0^T dt \left( \frac{d\delta x}{dt} \right)^2 = \frac{1}{2} \int_0^T dt \delta x \left( \frac{-d^2 \delta x}{dt^2} \right) \delta x \equiv \frac{1}{2} \int_0^T dt \delta x (-\partial_t^2) \delta x$$

Функция Грина:

$$G(x, x_0, T) = \int \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} [S[\bar{x}(t)] + \delta^2 S]} = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_0)^2}{2T}} \int \mathcal{D}[\delta x(t)] e^{\frac{im}{2\hbar} \int_0^T dt \delta x (-\partial_t^2) \delta x}$$

Классическая часть

Квантовые поправки

# Оператор второй вариации действия

**Задача:** найти собственные функции и собственные значения оператора  $-\partial_t^2$

$$\delta x(t) = \sum_n C_n \psi_n(t); \quad -\partial_t^2 \psi_n(t) = \lambda_n \psi_n(t)$$

**Граничные условия:**  $0 \leq t \leq T; \quad \psi_n(0) = \psi_n(T) = 0$

• **Ортонормированные моды:**

$$\psi_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \frac{\pi n t}{T}; \quad \lambda_n = \frac{\pi^2 n^2}{T^2} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

• **Вторая вариация действия:**



$$\delta^2 S[x(t)] = \frac{1}{2} \int_0^T dt \sum_{m,n} C_n \psi_n(t) \lambda_m C_m \psi_m(t) = \frac{1}{2} \sum_n \lambda_n C_n^2$$

• **Функциональный интеграл:**

$$G(x, x_0, T) = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_0)^2}{2T}} \int \prod_n dC_n \mathcal{A} e^{\frac{im}{2\hbar} \sum_n C_n^2 \lambda_n}$$

Якобиан преобразования переменных  $\delta x \rightarrow C_n$

$$G(x, x_0, T) = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_0)^2}{2T}} \int \prod_n dC_n \mathcal{A} e^{\frac{im}{2\hbar} \sum_n C_n^2 \lambda_n}$$

Произведение бесконечного числа интегралов вида:

$$\int dC_n \exp\left(\frac{im}{2\hbar} \lambda_n C_n^2\right) = \sqrt{\frac{2i\pi\hbar}{m\lambda_n}}$$

$$G(x, x_0, T) = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_0)^2}{2T}} \mathcal{A} \prod_n \sqrt{\frac{2i\pi\hbar}{m\lambda_n}} = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_0)^2}{2T}} \mathcal{A} \prod_n \sqrt{\frac{2T^2 i\hbar}{\pi n^2 m}}$$

**Замечание:** Ответ уже известен из непосредственного вычисления!

$$G(x, x_1, T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_0)^2}{2T}}$$

$$\mathcal{A} \prod_n \sqrt{\frac{2i\hbar T^2}{\pi n^2 m}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}$$

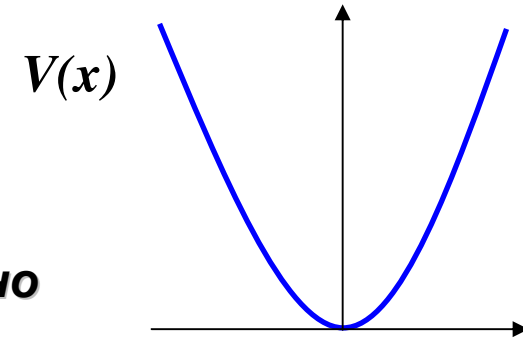
## Рецепт вычисления функционального интеграла

- Найти классическую траекторию  $\bar{x}(t)$  из условия  $\delta S[\bar{x}(t)] = 0$  и вычислить действие на классической траектории.
- Разложить функционал действия в окрестности классической траектории,  $x(t) = \bar{x}(t) + \delta x(t)$
- Перейти к переменным  $\delta x(t)$  и вычислить функциональный интеграл гауссового типа по ним.



# Функция Грина гармонического осциллятора

$$S[x(t)] = \frac{m}{2} \int_0^T dt (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)$$



**Замечание:** Действие осциллятора квадратично по переменной  $x \rightarrow$  все его вариации кроме  $\delta^2 S$  обращаются в ноль.



$$G(x, x_0, T) = e^{\frac{i}{\hbar} S[\bar{x}(t)]} \int \mathcal{D}\delta x(t) e^{\frac{im}{\hbar} \int_0^T dt \delta x(t) (-\partial_t^2 - \omega^2) \delta x(t)}$$

Классическая часть

Квантовые поправки

Классическое действие:

$$S[\bar{x}(t)] = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} [(x^2 - x_0^2) \cos \omega T - 2xx_0]$$

# Оператор второй вариации действия

**Задача:** найти собственные функции и собственные значения оператора

$$\delta x(t) = \sum_n C_n \psi_n(t); \quad -(\partial_t^2 + \omega^2)\psi_n(t) = \lambda_n \psi_n(t)$$

**Граничные условия:**  $0 \leq t \leq T; \quad \psi_n(0) = \psi_n(T) = 0$

• Ортонормированные моды:

$$\psi_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \frac{\pi n t}{T}; \quad \lambda_n = \frac{\pi^2 n^2}{T^2} - \omega^2, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

• **Вторая вариация действия:**

$$\delta^2 S[x(t)] = \frac{1}{2} \int_0^T dt \sum_{m,n} C_n \psi_n(t) \lambda_m C_m \psi_m(t) = \frac{1}{2} \sum_n \lambda_n C_n^2$$

● **Функциональный интеграл:**  $G(x, x_0, T) = e^{\frac{i}{\hbar} S[\bar{x}(t)]} \int \prod_n dC_n \mathcal{A} e^{\frac{im}{2\hbar} \sum_n C_n^2 \lambda_n}$

$$= e^{\frac{i}{\hbar} S[\bar{x}(t)]} \mathcal{A} \prod_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{m}{2i\hbar} \left( \frac{\pi^2 n^2}{T^2} - \omega^2 \right) \right]^{-\frac{1}{2}} = e^{\frac{i}{\hbar} S[\bar{x}(t)]} \mathcal{A} \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2iT^2\hbar}{mn^2\pi}} \prod_{n=1}^{\infty} \left( 1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2\pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

● **Воспользуемся тем, что**

1. Как и для свободной задачи

$$\mathcal{A} \prod_n \sqrt{\frac{2i\hbar T^2}{\pi n^2 m}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}$$

2. Возможно точное вычисление бесконечного произведения вида

$$\prod_{n=1}^{\infty} \left( 1 - \frac{x^2}{n^2\pi^2} \right) = \frac{\sin x}{x}$$

**Точная квантовомеханическая функция Грина гармонического осциллятора**

$$G(x, x_0, T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} ((x_0^2 + x(T)^2) \cos \omega T - 2x_0 x(T))}$$

# Евклидово время и связь со статфизикой

**Физический смысл функции Грина  $G(x, x_0; T)$  :**

**Вероятность перехода частицы из точки  $x_0$  в точку  $x$  за время  $T$**

**Знание функции Грина эквивалентно знанию волновой функции и энергии квантового состояния системы.**

## Вопрос:

а как теперь найти волновую функцию и энергию основного состояния?

• Переход к евклидовому времени:  $\tau = iT$        $dt \rightarrow id\tau$ ;       $\frac{dx}{dt} \rightarrow i\frac{dx}{d\tau}$

$$S[x(t)] = \int_0^T dt \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \right]$$

Обычное действие



$$iS_E[x(\tau)] = i \int_0^T d\tau \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x) \right]$$

Евклидово действие

$$e^{iS[x]/\hbar} \rightarrow e^{-S[x]/\hbar}$$

$$T = -i\tau$$

● Обычная функция Грина:

$$G(x, x_0; T) = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x_0) e^{-iE_n T/\hbar}$$

Уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{d\psi(x, t)}{dt} = \hat{H}\psi(x, t)$$

$$\tau = iT$$

● Евклидова функция Грина:

$$G(x, x_0; \tau) = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x_0) e^{-E_n \tau/\hbar}$$

Уравнение теплопроводности

$$-\hbar \frac{d\psi(x, \tau)}{d\tau} = \hat{H}\psi(x, \tau)$$

$$G(x, x_0; \tau) = \psi_0(x) \psi_0^*(x_0) e^{-\frac{E_0 \tau}{\hbar}} + \psi_1(x) \psi_1^*(x_0) e^{-\frac{E_1 \tau}{\hbar}} + \psi_2(x) \psi_2^*(x_0) e^{-\frac{E_2 \tau}{\hbar}} + \dots$$

$$E_0 < E_1 < E_2 < \dots$$

Статсумма Больцмана:

$$Z = \sum_{n=0}^N e^{-\frac{E_n}{k_B T}} = e^{-\frac{E_0}{k_B T}} + e^{-\frac{E_1}{k_B T}} + \dots$$

$$\frac{1}{k_B T} \longrightarrow \frac{\tau}{\hbar}$$

## Точная квантовомеханическая функция Грина гармонического осциллятора

$$G(x, x_0, T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} ((x_0^2 + x(T)^2) \cos \omega T - 2x_0 x(T))}$$

$$T = -i\tau \quad \sinh(ix) = i \sin x; \quad \cosh(ix) = \cos x$$

● Евклидова функция Грина:



$$G(x, x_0; \tau) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \hbar \sinh(\omega\tau)}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar \sinh(\omega\tau)} [(x^2 + x_0^2) \cosh(\omega\tau) - 2x_0 x]}$$

● В пределе  $\tau \rightarrow \infty$ ,  $\sinh \omega\tau \simeq \cosh \omega\tau \approx \frac{1}{2} e^{\omega\tau}$

$$G(x, x_0, \tau) \approx \sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} e^{-\frac{\omega\tau}{2}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} (x_0^2 + x^2)} = \underbrace{\left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}_{\psi_0(x)} \underbrace{\left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x_0^2}{2\hbar}}}_{\psi_0(x_0)} \underbrace{e^{-\frac{\omega\tau}{2}}}_{E_0}$$

$$G(x, x_0; \tau) \rightarrow \psi_0(x) \psi_0^*(x_0) e^{-\frac{E_0 \tau}{\hbar}}$$

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

## Рецепт вычисления энергии основного состояния

- Вычислить функцию Грина квантовой системы методом стационарной фазы с учетом квантовых поправок
- Перейти к евклидовому времени  $\mathcal{T}$  и рассмотреть предел  $\mathcal{T} \rightarrow \infty$
- Все, что является коэффициентом при  $\mathcal{T}$  в экспоненциальном множителе, интерпретируется как энергия основного состояния (вакуума)
- Предэкспоненциальные множители интерпретируются как волновые функции основного состояния







