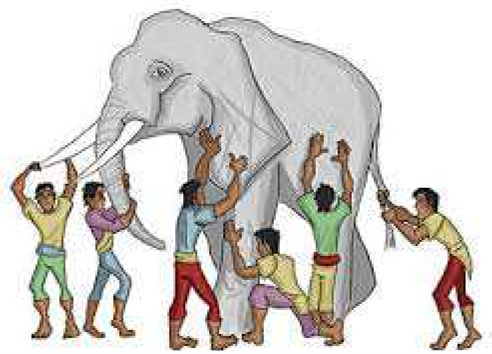
Функциональные интегралы в квантовой механике

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

9 формулировок
Квантовой механики



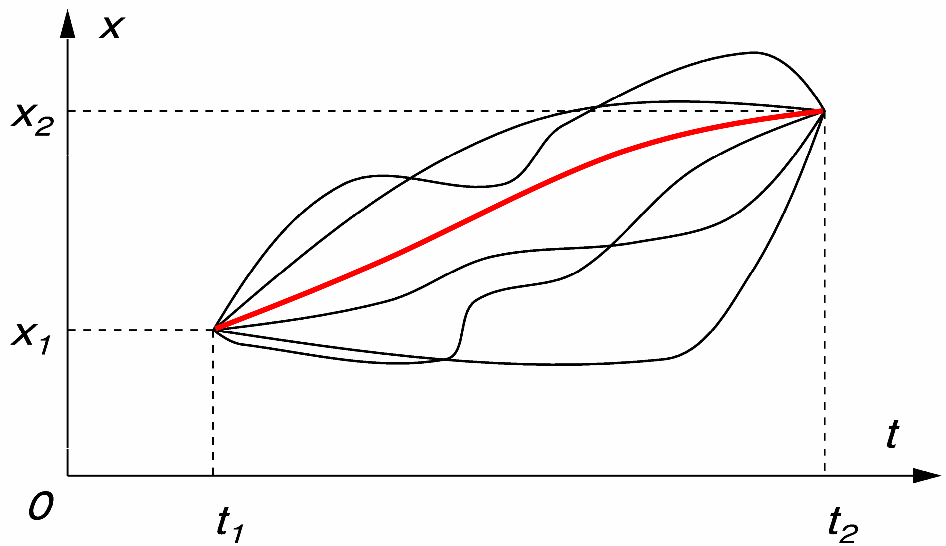
- **Матричная формулировка Гейзенберга**

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

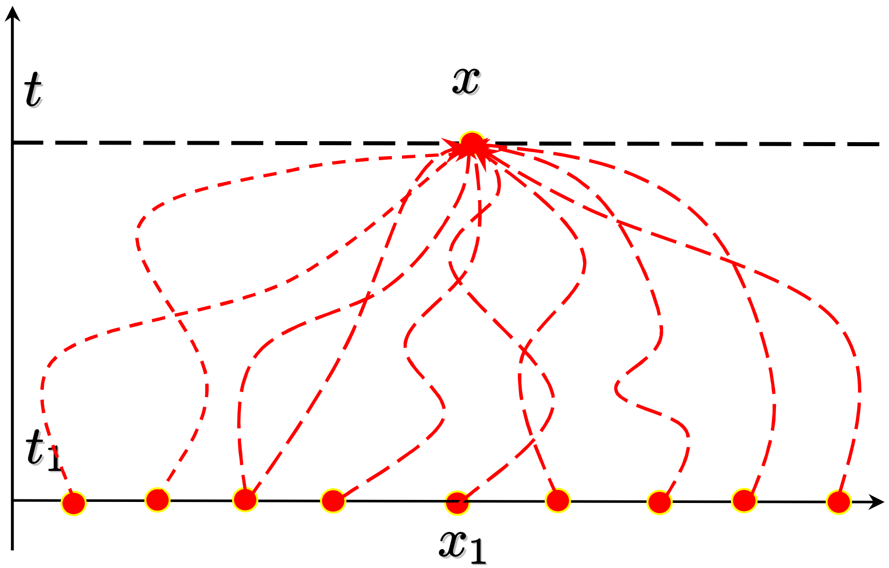
- **Волновая формулировка Шредингера**

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

- **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)

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

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

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

$$\begin{cases} \hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2} & \hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \\ \hat{P} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} & \hat{P}\psi(x) = p\psi(x) \end{cases} \Rightarrow \quad \psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}px} \qquad E = \frac{p^2}{2m}$$

- **Дискретизация спектра:**

$$\boxed{0 \le x \le L; \quad \psi(0,t) = \psi(L,t)} \Rightarrow \boxed{\psi(x) \to \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_n x\right)}$$

$$p_n = \frac{2\pi n\hbar}{L}, \qquad E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi n}{L}\right)^2 \qquad \begin{cases} n \to n+1 \\ p \to p + \Delta p = p + \dfrac{2\pi\hbar}{L} \end{cases}$$

- **Функция Грина:**

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

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

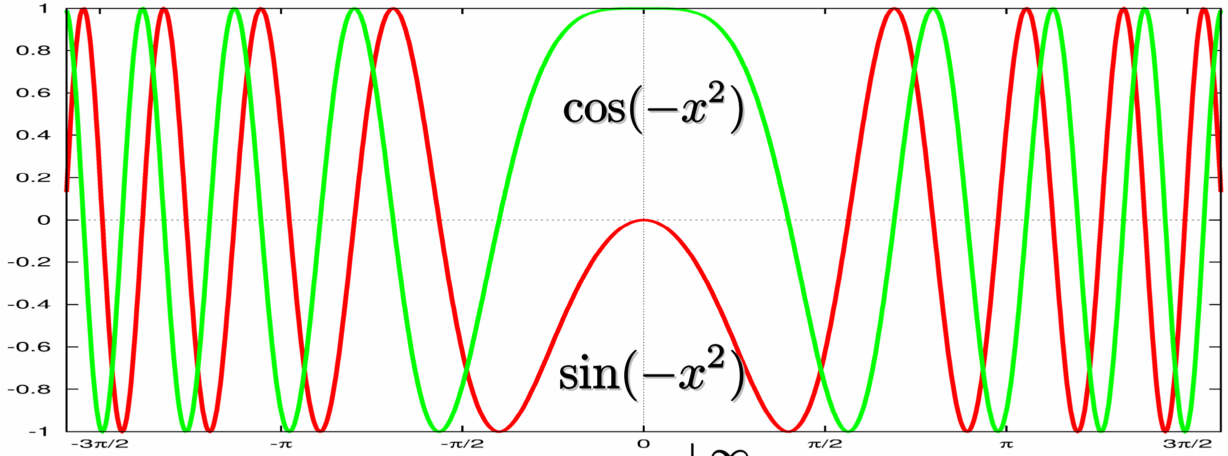
Гауссовы интегралы

- **Тривиальные интегралы:**

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

Похожие интегралы Френеля:

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



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

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

Вычисление функции Грина свободной частицы

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

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

Классическое действие свободной частицы:

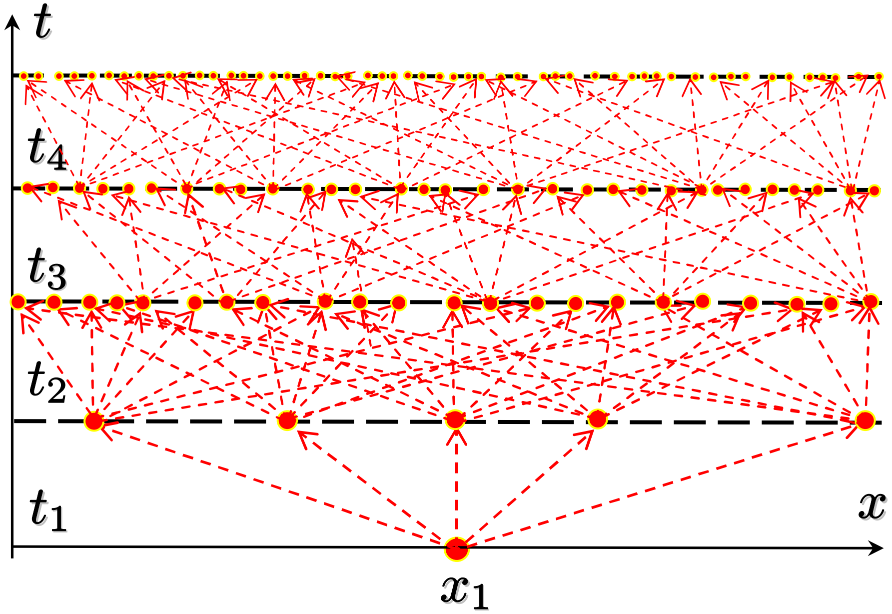
$$S_{cl}(x_1,x_2,t_1,t_2)=\frac{m(x_2-x_1)^2}{2(t_2-t_1)}$$

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$\Downarrow$

Функция Грина уравнения Шредингера:

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

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

- N интегралов по импульсу и по координатам, размерность конфигурационного пространства 2N-1
- Координаты x и импульсы p – это классические функции, а не операторы
- Предел $N \to \infty$ 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

$$G(x,x_1,t,t_1)=\lim_{N\to\infty}\int dx_2dx_3\ldots dx_N\frac{dp_1}{2\pi\hbar}\frac{dp_2}{2\pi\hbar}\cdots\frac{dp_N}{2\pi\hbar}e^{\frac{i\Delta t}{\hbar}\sum\limits_{i=1}^{N}\left[p_i\frac{(x_{i+1}-x_i)}{\Delta t}-\left(\frac{p_i^2}{2m}+V(x_i)\right)\right]}$$

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

Редуцированная форма получается интегрированием по импульсам:

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

$$G(x,x_1,t,t_1)=\lim_{N\to\infty}\int dx_2dx_3\ldots dx_N\left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\right)^N e^{\frac{i\Delta t}{\hbar}\sum\limits_{i=1}^{N}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\Delta t}\right)^2-V(x_i)\right]}$$

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

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

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

Бесконечная цепочка Гауссовых интегралов по dx_i типа:

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

$$=$$

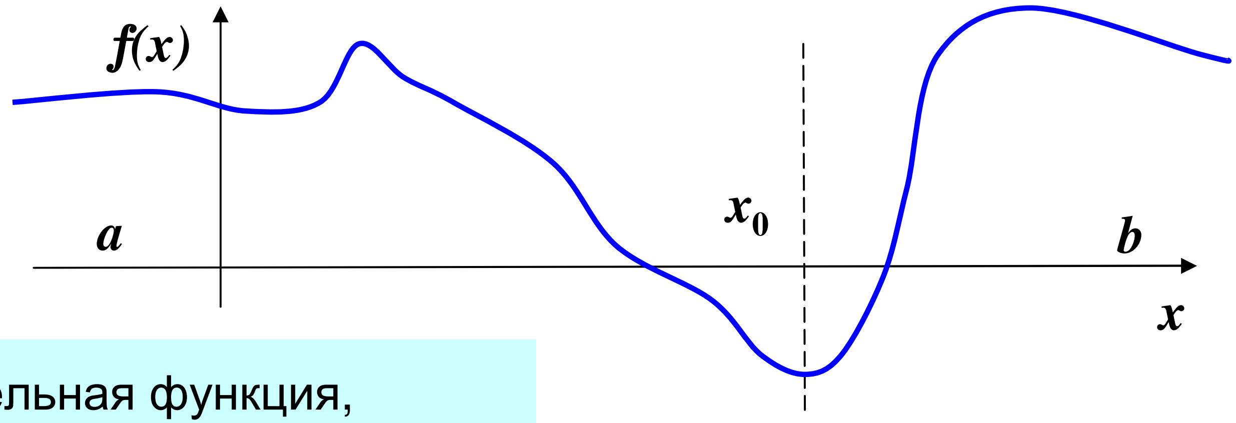
…и так далее для всех последующих интегрирований по $dx_3, dx_4, \ldots$

***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 $f(x_0),\ x_0 \in [a,b],\ f'(x_0) = 0$

$$I \approx \int_a^b dx\, e^{-f(x_0)-\frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2-\frac{1}{3!}f'''(x_0)(x-x_0)^3-\frac{1}{4!}f^{iv}(x_0)(x-x_0)^4-\dots}$$

$$\approx \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-f(x_0)-\frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2} = \boxed{\sqrt{\frac{2\pi}{f''(x_0)}}e^{-f(x_0)}}$$

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

Метод стационарной фазы

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

<u>Замечание:</u>* приближение работает, если поправки 3го и 4го порядка пренебрежимо малы:** $\dfrac{f'''(x_0)}{\left(f''(x_0)\right)^{3/2}} \ll 1$ ***и $\dfrac{f^{iv}(x_0)}{\left(f''(x_0)\right)^{2}} \ll 1$

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

- ***Пример: формула Стирлинга:*** $z! = \Gamma(z+1) = \int\limits_0^\infty dt\; t^z e^{-t} = \int\limits_0^\infty dt\; e^{-t+z\ln t}$

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

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

- **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:

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

Классическая траектория $\overline{x}(t)$ $\Rightarrow$ $\delta S[x(t)] = 0$ $\qquad S[\overline{x}(t)] = \dfrac{m(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}$

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

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

Функция Грина:

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

Классическая часть

Квантовые поправки

Оператор второй вариации действия

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

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

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

- **Ортонормированные моды:** $\boxed{\psi_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \frac{\pi n t}{T}; \qquad \lambda_n = \frac{\pi^2 n^2}{T^2} \quad n = 1, 2, 3 \ldots}$

- **Вторая вариация действия:**

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

- **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 $\delta x \to C_n$

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

Произведение бесконечного числа интералов вида:

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

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

Замечание: Ответ уже известен из непосредственного вычисления!

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

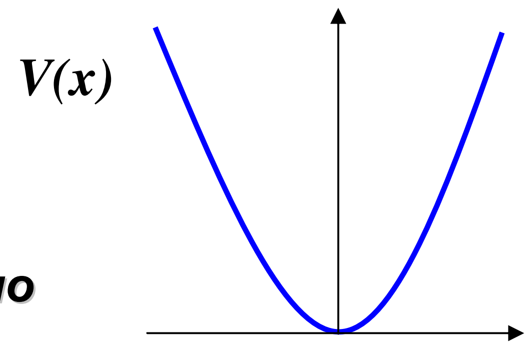
$$\boxed{\mathcal{A}\prod_n\sqrt{\frac{2i\hbar T^2}{\pi n^2 m}}=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}}$$

Рецепт вычисления функционального интеграла

- Найти классическую траекторию $\overline{x}(t)$ из условия $\delta S[\overline{x}(t)] = 0$ и вычислить действие на классической траектории.
- Разложить функционал действия в окрестности классической траектории, $x(t) = \overline{x}(t) + \delta x(t)$
- 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.***

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

Классическая часть

Квантовые поправки

Классическое действие:

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

Оператор второй вариации действия

Задача: найти собственные функции и собственные значения оператора

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

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

- ***Ортонормированные моды:***

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

- ***Вторая вариация действия:***

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

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

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

Воспользуемся тем, что

1. Как и для свободной задачи

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

2. Возможно точное вычисление бесконечного произведения вида

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

Точная квантовомеханическая функция Грина гармонического осциллятора

$$\boxed{G(x,x_0,T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega T)}}\,e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left((x_0^2+x(T)^2)\cos\omega T-2x_0x(T)\right)}}$$

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 функции и энергию основного состояния?

- ***Переход к евклидовому времени:*** $\tau = iT$ $\qquad dt \to i d\tau; \quad \frac{dx}{dt} \to i\frac{dx}{d\tau}$

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

Обычное действие

Евклидово действие

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

$$T = -i\tau$$

Обычная функция Грина:

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

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

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

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

$$\boxed{E_0 < E_1 < E_2 < \ldots}$$

Статсумма Больцмана:

$$Z = \sum_{n=0}^{N} e^{-\frac{E_n}{k_BT}} = e^{-\frac{E_0}{k_BT}} + e^{-\frac{E_1}{k_BT}} + \ldots$$

$$\boxed{\frac{1}{k_BT} \rightarrow \frac{\tau}{\hbar}}$$

Точная квантовомеханическая функция Грина гармонического осциллятора

$$\boxed{G(x,x_0,T)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega T)}}\,e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left((x_0^2+x(T)^2)\cos\omega T-2x_0x(T)\right)}}$$

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

- **Евклидова функция Грина:**

$$\boxed{G(x,x_0;\tau)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\omega\tau)}}\,e^{-\frac{m\omega}{2\hbar\sinh(\omega\tau)}\left[(x^2+x_0^2)\cosh(\omega\tau)-2x_0x\right]}}$$

- ***В пределе*** $\tau\to\infty$ **,** $\sinh\omega\tau\simeq\cosh\omega\tau\approx\frac{1}{2}e^{\omega\tau}$

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

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

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

Рецепт вычисления энергии основного состояния

- Вычислить функцию Грина квантовой системы методом стационарной фазы с учетом квантовых поправок
- Перейти к евклидову времени τ и рассмотреть предел $\tau \to \infty$
- Все, что является коэффициентом при τ в экспоненциальном множителе, интепретируется как энергия основного состояния (вакуума)
- Предэкпоненциальные множители интерпретируются как волновые функции основного состояния