1. Квантова механіка у формалізмі функціональних інтегралів

Якщо хвильова функція $\psi(q_i, t_i)$ задана в момент часу t_i, тоді пропагатор $K(q_f, t_f|q_i, t_i)$ визначає її значення в момент часу t_f у відповідності з принципом Гюйгенса

$$\psi(q_f, t_f) = \int K(q_f, t_f|q_i, t_i)\psi(q_i, t_i)dq_i, \tag{1.1}$$

де $K(q_f, t_f|q_i, t_i)$ називається ядром переходу, або фейманівським пропагатором. Це співвідношення має найбільш загальний вигляд і визначається принципом причиності.

Нехай в початковий момент t_i динамична зміна має точно визначне значення $q_i = q_0$, тоді хвильова функція

$$\psi(q_i, t_i) = \delta(q_i - q_0), \tag{1.2}$$

$$\psi(q_f, t_f) = K(q_f, t_f|q_0, t_i). \tag{1.3}$$

Ймовірність перехода із стану $q_i = q_0$ в стан q_f за час $t_f - t_i$ $(t_f > t_i)$ визначається формулою

$$P(q_f, t_f|q_0, t_i) = |\psi(q_f, t_f)|^2 = |K(q_f, t_f|q_0, t_i)|^2, \tag{1.4}$$

а $K(q_f, t_f|q_0, t_i)$ є амплітуда ймовірності переходу. Для часу $t_i < t < t_f$ маємо

$$\psi(q, t) = \int K(qt|q_it_i)\psi(q_it_i)dq_i, \tag{1.5}$$

і можемо записати

$$\psi(q_ft_f) \quad = \quad \int K(q_ft_f|qt)\psi(qt)dq = \int K(q_ft_f|qt)K(qt|q_it_i)\psi(q_it_i)dq\,dq_i \tag{1.6}$$

$$\Rightarrow \quad K(q_ft_f|q_it_i) = \int K(q_ft_f|qt)K(qt|q_it_i)dq. \tag{1.7}$$

Це одне із найбільш важливих властивостей фейманівського пропагатора.

Експеримент із щілинами (перехід частинки із A в D через щілини B_1 або B_2) представлений на рис.1. Амплітуда ймовірності переходу є суперпозицією двох шляхів від A до D, $A - B_1 - D$ і $A - B_2 - D$:

$$K(D|A) = K(D|B_1)K(B_1|A) + K(D|B_2)K(B_2|A). \tag{1.8}$$

На екрані спостерігаємо інтерференційну картину. Якщо ми зробимо тепер багато щілин (в граничному випадку уберемо проміжний екран), то можна припустити, що

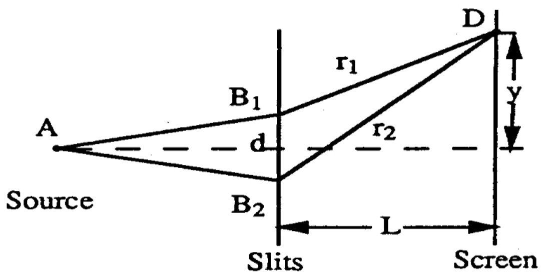

Рис. 1. Два шляхи від джерела A через дві щілини B_1 і B_2 до точки D на екрані.

амплітуда переходу буде даватися сумою по всіх траєкторіях. Фейнман показав, що амплітуду можна записати як

$$K(D|A) = N_{DA} \sum_a \exp\left(iS_a(t_f, t_i)/\hbar\right), \tag{1.9}$$

де $S_a(t_f, t_i)$ - дія порахована для конкретної траєкторії a від точки A до точки D, N_{DA} - нормувальний множник. Квазікласична границя $\hbar \to 0$ виділяє одну класичну траєкторію, яка визначається рівняннями Лагранжа-Ейлера,

$$\delta S = 0.$$

Хвильова функція в квантовій механіці є проекція стану на обрану повну систему станів якогось ермітового оператора, наприклад, оператора координати $|q\rangle$. Квантові стани в представлені Шредінгера і Гейзенберга пов'язані відомим співвідношенням:

$$\psi(q,t) = \langle q|\psi t\rangle_S, \qquad |\psi t\rangle_S = e^{-iHt/\hbar}|\psi\rangle_H, \tag{1.10}$$

і для хвильових функцій маємо

$$\langle q|\psi t\rangle_S = \langle q|e^{-iHt/\hbar}|\psi\rangle_H = \langle qt|\psi\rangle_H. \tag{1.11}$$

Нехай вектори $|q\rangle$ є власними станами оператора шредінгеровського оператора координати $\hat{Q}_S$,

$$\hat{Q}_S|q\rangle = q|q\rangle. \tag{1.12}$$

В представлені Гейзенберга стани залежать від часу,

$$|qt\rangle_H = e^{iHt/\hbar}|q\rangle \text{ — “движущаяся система отсчёта”} \tag{1.13}$$

і є власними векторами гейзенбергівського оператора з тим же самим власним значенням

$$\hat{Q}_H(t) = e^{iHt/\hbar}\hat{Q}_S e^{-iHt/\hbar} \quad \Rightarrow \quad \hat{Q}_H(t)|qt\rangle = q|qt\rangle. \tag{1.14}$$

Використовуючи співвідношення повноти, $\int dq|qt\rangle\langle qt| = 1$, і вставляючи цю одиницю в скалярний добуток, маємо

$$\langle q_f t_f|\psi\rangle = \int \langle q_f t_f|q_i t_i\rangle\langle q_i t_i|\psi\rangle dq_i, \tag{1.15}$$

або

$$\psi(q_f t_f) = \int \langle q_f t_f|q_i t_i\rangle\psi(q_i t_i)dq_i. \tag{1.16}$$

Звідси і з (1.1)

$$K(q_f t_f|q_i t_i) = \langle q_f t_f|q_i t_i\rangle = \langle q_f|e^{-iH(t_f-t_i)/\hbar}|q_i\rangle. \tag{1.17}$$

Феййманівський пропагатор

$$K(x, x', t) \equiv \langle x|e^{-iHt/\hbar}|x'\rangle \tag{1.18}$$

задовольняє рівнянню Щредінгера,

$$i\frac{\partial}{\partial t}K(x, x', t) = HK(x, x', t), \tag{1.19}$$

з граничною умовою

$$K(x, x', 0) = \delta(x - x'). \tag{1.20}$$

Розіб'ємо часовий інтервал на $(n+1)$ рівних відрізки і запишемо: $t_j = t_i + \epsilon j$, $t_f = t_i + (n+1)\epsilon$, $t_f \equiv t_{n+1}$, вставляючи одиницю $\int dq_j|q_j t_j\rangle\langle q_j t_j| = 1$ в кожній точці t_j:

$$\langle q_f t_f|q_i t_i\rangle = \int ... \int dq_1...dq_n\langle q_f t_f|q_n t_n\rangle\langle q_n t_n|q_{n-1}t_{n-1}\rangle...\langle q_1 t_1|q_i t_i\rangle. \tag{1.21}$$

Для скалярного добутку $\langle q_{j+1}t_{j+1}|q_j t_j\rangle$ з врахуванням інфінітезімальності ϵ знаходимо

$$\begin{aligned}\langle q_{j+1}t_{j+1}|q_j t_j\rangle &= \langle q_{j+1}|e^{-iH\epsilon/\hbar}|q_j\rangle \approx \langle q_{j+1}|1 - \frac{iH\epsilon}{\hbar}|q_j\rangle \\ &= \delta(q_{j+1} - q_j) - \frac{i\epsilon}{\hbar}\langle q_{j+1}|H|q_j\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp e^{ip/\hbar(q_{j+1}-q_j)} - \frac{i\epsilon}{\hbar}\langle q_{j+1}|H|q_j\rangle.\end{aligned}$$

нехай гамільтоніан має вигляд $H = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(\hat{q})$, де $\hat{p}$ і $\hat{q}$ оператори імпульса і координати, відповідно, і порахуємо наступний матричний елемент,

$$\langle q_{j+1}|\frac{\hat{p}^2}{2}|q_j\rangle = \int dp'dp\langle q_{j+1}|p'\rangle\langle p'|\frac{\hat{p}^2}{2}|p\rangle\langle p|q_j\rangle. \tag{1.22}$$

Використовуючи нормовану власну хвильову функцію оператора імпульса $\hat{p} = -i\partial/\partial q$ з власним значенням p,

$$\langle q_{j+1}|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipq_{j+1}/\hbar}, \tag{1.23}$$

знаходимо

$$\langle q_{j+1}|\frac{\hat{p}^2}{2}|q_j\rangle = \int \frac{dp' dp}{2\pi\hbar} e^{ip' q_{j+1}/\hbar - ipq_j/\hbar} \delta(p'-p)\frac{p^2}{2} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q_{j+1}-q_j)/\hbar} \frac{p^2}{2}. \tag{1.24}$$

Аналогічно,

$$\langle q_{j+1}|V(\hat{q})|q_j\rangle = V\left(\frac{q_{j+1}+q_j}{2}\right)\langle q_{j+1}|q_j\rangle = V(\bar{q_j})\delta(q_{j+1}-q_j), \quad \bar{q_j} = \frac{q_{j+1}+q_j}{2}. \tag{1.25}$$

Об'єднуючи знаходимо

$$\langle q_{j+1}|H|q_j\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q_{j+1}-q_j)} H(p, \bar{q_j}). \tag{1.26}$$

З точністю до величин порядка ϵ^2 для інфінітезімального матричного елемента маємо

$$\langle q_{j+1}t_{j+1}|q_j t_j\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{ip}{\hbar}(q_{j+1}-q_j) - \frac{i\epsilon}{\hbar} H(p, \bar{q_j})\right]. \tag{1.27}$$

Повний пропагатор дорівнює

$$\langle q_f t_f|q_i t_i\rangle = \lim_{\substack{\epsilon\to 0\\ n\to\infty}} \int \prod_{j=1}^{n} dq_j \prod_{l=0}^{n} \frac{dp_l}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{l=0}^{n}\left[p_l(q_{l+1}-q_l) - \epsilon H(p_l, \bar{q}_l)\right]\right\}, \tag{1.28}$$

де $q_0 \equiv q_i$, $q_{n+1} \equiv q_f$. Зауважимо, що інтегрувань по імпульсним змінним на одиницю більше, чим для координатних.

В символічній формі можно записати при $\epsilon \to 0$,

$$\langle q_f t_f|q_i t_i\rangle = N \int\limits_{\substack{q(t_i)=q_i\\ q(t_f)=q_f}} \mathcal{D}p(t)\, \mathcal{D}q(t) \exp\frac{i}{\hbar}\left(\int_{t_i}^{t_f} dt(p\dot{q} - H(p,q))\right), \tag{1.29}$$

де N - деякий нормировочний множник, який ми обговоримо пізніше. Це і є фейманівський інтеграл по траекторіям в фазовому просторі, де інтегрування ведеться по координам і імпульсах при кожному значені часу t. Причому, для координат маємо граничні умови, в той час як для імпульсів інтегрування йде від $-\infty$ до $+\infty$.

Якщо гамільтоніан квадратичен по імпульсам, то інтегрування можно виконати в явному вигляді, використовуючи наступні гаусові інтеграли,

$$\begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ax^2}{2}} dx = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{1/2}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ax^2+bx}{2}} dx = e^{\frac{b^2}{2a}} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{1/2}. \end{cases} \tag{1.30}$$

Тоді

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \frac{i}{\hbar}(pq - \epsilon p^2/2) = \frac{1}{2\pi\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar}{i\epsilon}\right)^{1/2} e^{-\frac{q^2\hbar}{\hbar^2 2i\epsilon}} = \frac{1}{(2\pi\hbar i\epsilon)^{1/2}} e^{\frac{iq^2}{2\hbar\epsilon}}, \tag{1.31}$$

і для амплітуди переходу

$$\begin{aligned} \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle &= \lim_{\substack{\epsilon\to 0 \\ n\to\infty}} N(\epsilon, n) \int \prod_{j=1}^{n} \frac{dq_j}{(2\pi i\hbar\epsilon)^{(n+1)/2}} \exp \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{l=0}^{n} \frac{(q_{l+1} - q_l)^2}{2\epsilon} - \epsilon V(\bar{q}_l)\right] = \\ &= \lim_{\substack{\epsilon\to 0 \\ n\to\infty}} N(\epsilon, n) \int \prod_{j=1}^{n} \frac{dq_j}{(2\pi i\hbar\epsilon)^{(n+1)/2}} \exp \frac{i\epsilon}{\hbar} \left[\sum_{l=0}^{n} \frac{1}{2} \left(\frac{q_{l+1} - q_l}{\epsilon}\right)^2 - V(\bar{q}_l)\right], \end{aligned} \tag{1.32}$$

де множник $N(\epsilon, n)$ підбирається із умови існування границі. В неперервній границі

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = N \int\limits_{\substack{q(t_i)=q_i \\ q(t_f)=q_f}} \mathcal{D}q(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt L(q, \dot{q})\right] = N \int\limits_{\substack{q(t_i)=q_i \\ q(t_f)=q_f}} \mathcal{D}q(t)\, e^{\frac{i}{\hbar}S(q)}, \tag{1.33}$$

де $L(q, \dot{q})$ - лагранжіан системи, N - скінченний нормувальний множник. Остання формула і є фейманівський інтеграл по траєкторіям. На відміну від звичайного інтеграла Рімана, в якому підсумовуються значення функції на відрізку, в інтегралі вздовж траєкторій підсумовуються значення функції вздовж усіх можливих кривих, які сполучають початкову й кінцеву точку (див. рис.2).

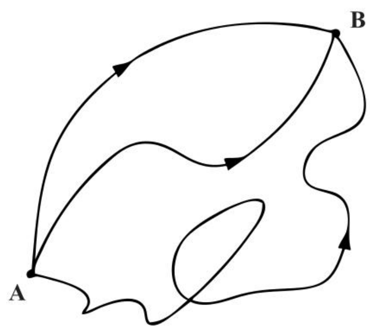

Рис. 2. Ілюстрація шляхів в фейманівському інтегралі, які ведуть з точки A в точку B.

<u>Приклад Лі-Янга: ефективна дія.</u>

У випадку гамільтоніана, не квадратичного по імпульсах, інтегрування по імпульсах може призводити до деякої ефективної дії S_{eff}. В якості приклада розглянемо систему з лагранжіаном (Лі-Янг, 1962 р.)

$$L = \frac{1}{2}\dot{q}^2 f(q). \tag{1.34}$$

Знаходимо імпульс і гамільтонову функцію,

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \dot{q} f(q), \qquad H = p\dot{q} - L = \frac{p^2}{f} - \frac{1}{2}\frac{p^2}{f} = \frac{p^2}{2f(q)}, \tag{1.35}$$

і робимо інтегрування по імпульсах в інтегралі по траєкторіям,

$$\begin{aligned} K(q_f t_f|q_i t_i) &= \int \prod_{j=1}^{n} dq_j \prod_{j=0}^{n} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\frac{i}{\hbar}\sum_{l=0}^{n}[p_l(q_{l+1}-q_l) - \frac{\epsilon}{2}p_l^2 f^{-1}(\bar{q}_l)] \\ &= \int \prod_{j=1}^{n} \frac{dq_j}{(2\pi\hbar\epsilon)^{1/2}} \prod_{j=0}^{n} f^{1/2}(\bar{q}_j) \exp\frac{i}{\hbar}\sum_{l=0}^{n}\frac{\epsilon}{2}\left(\frac{q_{l+1}-q_l}{\epsilon}\right)^2 f\left(\frac{q_{l+1}+q_l}{2}\right), \end{aligned} \tag{1.36}$$

де

$$\begin{aligned} \prod_{j=0}^{n} f^{1/2}\left(\frac{q_{j+1}+q_j}{2}\right) &= \exp\frac{1}{2}\sum_j \ln f\left(\frac{q_{j+1}+q_j}{2}\right) = \exp\frac{1}{2\epsilon}\sum_j \epsilon \ln f\left(\frac{q_{j+1}+q_j}{2}\right) \\ &\to \exp\left[\frac{1}{2}\delta(0)\int dt \ln f(q(t))\right], \quad \frac{1}{\epsilon}\delta_{ij} \to \delta(t_i - t_j). \end{aligned} \tag{1.37}$$

Остаточно фейманівський інтеграл і координатному представлені приймає вигляд

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = N \int \mathcal{D}q(t) e^{iS_{eff}(q)/\hbar}, \tag{1.38}$$

з ефективною дією

$$S_{eff} = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[L(q,\dot{q}) - \frac{i\hbar}{2}\delta(0)\ln f(q)\right]. \tag{1.39}$$

Узагальнення для систем з N ступенями вільності.

Для систем з N ступенями вільності амплітуда переходу (1.29) узагальнується очевидним чином:

$$\begin{aligned} \langle q_{1f}, q_{2f}, \ldots, q_{Nf}, t_f | q_{1i}, q_{2i}, \ldots, q_{Ni}, t_i \rangle &= \tilde{N} \int \prod_{n=1}^{N} [\mathcal{D}p_n(t)\, \mathcal{D}q_n(t)] \\ \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt \left(\sum_{n=1}^{N} p_n(t)\dot{q}_n(t) - H(p_j, q_j)\right)\right], \end{aligned} \tag{1.40}$$

де інтегрування по координатам задовільняє початковій і кінцевій умовам $q_n(t_i) = q_{ni}$, $q_n(t_f) = q_{nf}$.

2. Пропагатор вільної частинки

Обчислимо інтеграл по траєкторіям для пропагатора вільної частинки за допомогою гамільтонного формулювання (1.29). Дискретизовану дію в рівнянні (1.29) запишимо як

$$\sum_{l=0}^{n}\left[p_l(q_{l+1}-q_l)-\epsilon\frac{p_l^2}{2m}\right]=\sum_{l=1}^{n}(p_{l+1}-p_l)q_l+p_nq_{n+1}-p_0q_0-\epsilon\sum_{l=0}^{n}\frac{p_l^2}{2m}, \tag{2.1}$$

і проінтегруємо спочатку по q_l. Це дає n δ-функціq, які дозволяють виконувати інтегрування по p_l: $p_1=p_2=\ldots=p_n=p_{n+1}$. Залишається

$$\langle q_ft_f|q_it_i\rangle=\lim_{\substack{\epsilon\to 0\\ n\to\infty}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_0}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(p_0(q_f-q_i)-\epsilon(n+1)\frac{p_0^2}{2m}\right)\right]. \tag{2.2}$$

$\epsilon(n+1)=t_f-t_i$, то границю можна виконати тривіально, і ми отримуємо

$$\langle q_ft_f|q_it_i\rangle=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_i)}}\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{(q_f-q_i)^2}{t_f-t_i}\right]. \tag{2.3}$$

Пропагатор вільної частинки можна обчислити методом не звертаючись до інтеграла по траєкторіям, порівняємо ці підходи. Матричний елемент

$$K(q_ft_f|q_it_i)=\langle q_ft_f|q_it_i\rangle=\langle q_f|e^{-\frac{iH(t_f-t_i)}{\hbar}}|q_i\rangle \tag{2.4}$$

обчислимо використовуючи власні функції оператора імпульсу

$$\hat{p}\psi(q)=-i\hbar\frac{\partial\psi(q)}{\partial q}=p\psi(q). \tag{2.5}$$

Власні хвильові функції є просто плоскі хвилі

$$\psi_p(q)=\langle q|p\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipq/\hbar} \tag{2.6}$$

Для вільної частинки $H=\frac{\hat{p}^2}{2m}$. Очевидно,

$$H\psi_p(q)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\psi_q(p)=\frac{p^2}{2m}\psi_q(p). \tag{2.7}$$

$$\begin{aligned}K(q_ft_f|q_it_i)&=\int dp'dp\,\langle q_f|p'\rangle\langle p'|e^{-\frac{iH(t_f-t_i)}{\hbar}}|p\rangle\langle p|q_i\rangle=\\&=\int dp'dp\,\langle q_f|p'\rangle\langle p|q_i\rangle\delta(p'-p)e^{-\frac{ip^2(t_f-t_i)}{2m\hbar}}=\\&=\int_{-\infty}^{\infty}dp\,\langle q_f|p\rangle\langle p|q_i\rangle e^{-\frac{ip^2(t_f-t_i)}{2m\hbar}}=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar}e^{\frac{ip(q_f-q_i)}{\hbar}-\frac{ip^2(t_f-t_i)}{2m\hbar}}=\\&=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_i)}}\exp\left[\frac{im(q_f-q_i)^2}{2\hbar(t_f-t_i)}\right].\end{aligned} \tag{2.8}$$

Очевидно, обидва методи дають тотожні результати.

3. Точне обчислення феймanівського пропагатора у випадку лагранжіанів квадратичних по координатам і швидкостям

Ми отримали в формалізмі інтеграла по шляхах

$$K(q_f t_f|q_i t_i) = N \int\limits_{\substack{q(t_i)=q_i \\ q(t_f)=q_f}} \mathcal{D}q(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f} dt\, L(q,\dot{q})\right].$$

Покажемо тепер, що фейнмановськiй пропагатор може бути обчислений точно у випадку коли $L(q,\dot{q})$ є квадратичною по $q,\dot{q}$ функцією.

Нехай $q = q_{cl}(t)$ є класичною траекторією, тобто є розв'язком рівнянь Лагранжа-Ейлера

$$\frac{\delta L}{\delta q} = \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0 \tag{3.1}$$

з граничними умовами $q_{cl}(t_f) = q_f$, $q_{cl}(t_i) = q_i$. Довільний шлях запишемо у вигляді $q(t) = q_{cl}(t) + y(t)$, де $y(t_i) = y(t_f) = 0$.

Розвинемо L в ряд Тейлора по $y(t)$

$$L(q_{cl}+y, \dot{q}_{cl}+\dot{y}(t)) = L(q_{cl},\dot{q}_{cl}) + \frac{\partial L}{\partial q}y + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{y} + \frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 L}{\partial q\partial q}y^2 + 2\frac{\partial^2 L}{\partial q\partial \dot{q}}y\dot{y} + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}\partial \dot{q}}\dot{y}^2\right]. \tag{3.2}$$

Похідні обчислюються при $y = \dot{y} = 0$.

Цей розклад є точним (!) тому що L квадратична. Для дії маємо

$$S = \int\limits_{t_i}^{t_f} L(q_{cl},\dot{q_{cl}})dt + \int\limits_{t_i}^{t_f}\left(\frac{\partial L}{\partial q}y + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{y}\right)dt + \frac{1}{2}\int\limits_{t_i}^{t_f}\left[\frac{\partial^2 L}{\partial q\partial q}y^2 + 2\frac{\partial^2 L}{\partial q\partial \dot{q}}y\dot{y} + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}\partial \dot{q}}\dot{y}^2\right]. \tag{3.3}$$

Средній доданок зникає

$$\int\limits_{t_i}^{t_f}\left(\frac{\partial L}{\partial q}y + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{y}\right)dt = \int\limits_{t_i}^{t_f}\left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)y\,dt = 0,$$

тому що $q_{cl}(t)$ задовольняє рівнянню Лагранжа-Ейлера.

Другі похідні від L є просто функціями від t (не залежними від y), тоді

$$S = \int\limits_{t_i}^{t_f} L(q_{cl},\dot{q}_{cl};t)dt + \int\limits_{t_i}^{t_f}[a(t)y^2 + b(t)\dot{y}^2 + c(t)y\dot{y}]dt.$$

В результаті

$$K(q_f t_f|q_i t_i) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(q_{cl},\dot{q}_{cl})\right) \int\limits_{y(t_i)=y(t_f)=0} \mathcal{D}y(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f}(a(t)y^2 + b(t)\dot{y}^2 + c(t)y\dot{y})dt\right] \quad (3.4)$$

Тому що q_f, q_i тепер не входять в інтеграл по траекторіям, останній залежить тільки від t_i, t_f. Таким чином, мы показали, що пропагатор має вигляд

$$K(q_f, t_f|q_i t_i) = A(t_i, t_f) \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(q_{cl},\dot{q}_{cl})\right). \quad (3.5)$$

Більш того, якщо $a(t), b(t), c(t)$ не залежать від часу, то $A(t_i, t_f) = A(t_f - t_i)$. Дійсно,

$$\int\limits_{t_i}^{t_f}[ay^2 + b\dot{y}^2 + cy\dot{y}] = \int\limits_{t_i+\Delta t}^{t_f+\Delta t}[ay^2(t-\Delta t) + b\dot{y}^2(t-\Delta t) + cy(t-\Delta t)\dot{y}(t-\Delta t)]dt =$$

$$= \int\limits_{t_i+\Delta t}^{t_f+\Delta t}[ay'^2(t) + b\dot{y}'^2 + cy'\dot{y}'(t)]dt, \quad (3.6)$$

де $y'(t) = y(t-\Delta t)$. Тому

$$\begin{aligned} A(t_i, t_f) &= \int\limits_{y(t_i)=0}^{y(t_f)=0} \mathcal{D}y(t) \exp\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f}[ay^2(t) + b\dot{y}^2(t) + cy(t)\dot{y}(t)]dt \\ &= \int\limits_{y(t_i+\Delta t)=0}^{y(t_f+\Delta t)=0} \mathcal{D}y'(t) \exp\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i+\Delta t}^{t_f+\Delta t}[ay'^2(t) + b\dot{y}'^2(t) + cy'(t)\dot{y}'(t)]dt \\ &= A(t_i+\Delta t, t_f+\Delta t). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Вибираючи $\Delta t = -t_i$, приходимо до бажаного результата. Квадратичні L включають наступні випадки

а) вільна частинка $L = \frac{m\dot{q}^2}{2}$,

б) гармонійний осцилятор $L = \frac{m\dot{q}^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$,

в) осцилятор під дією зовнішньої сили $L = \frac{m\dot{q}^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 - f(t)q$.

Повернемося до вільної частинки.

$$L = \frac{m\dot{q}^2}{2}, \qquad \frac{\delta L}{\delta q} = m\ddot{q} = 0 \quad \Rightarrow \quad \dot{q}_{cl}(t) = \frac{q_f - q_i}{t_f - t_i} \text{ — constant.}$$

Зразу знаходимо

$$K(q_f t_f|q_i t_i) = A(t_f - t_i) \exp\left[\frac{im(q_f - q_i)^2}{2\hbar(t_f - t_i)}\right]. \quad (3.8)$$

Для визначення використуємо важливою груповою властивостю пропагатора

$$K(q_3t_3|q_1t_1) = \int K(q_3t_3|q_2t_2)K(q_2t_2|q_1t_1)dq_2.$$

Підставляя K у вигляді (3.8) маємо

$$A(t_3-t_1)\exp\frac{i(q_3-q_1)^2m}{2\hbar(t_3-t_1)} = A(t_3-t_2)A(t_2-t_1)\int\limits_{-\infty}^{\infty}\exp\frac{im}{2\hbar}\left[\frac{(q_3-q_2)^2}{t_3-t_2}+\frac{(q_2-q_1)^2}{t_2-t_1}\right]dq_2$$

$$= A(t_3-t_2)A(t_2-t_1)\left[\frac{2\pi i\hbar}{m}\cdot\frac{(t_3-t_2)(t_2-t_1)}{t_3-t_1}\right]^{1/2}\exp\left[\frac{im(q_3-q_1)^2}{2\hbar(t_3-t_1)}\right], \tag{3.9}$$

тобто маємо функціональне рівняння для $A(t)$

$$\frac{A(t_3-t_1)}{A(t_3-t_2)A(t_2-t_1)} = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar}{m}\cdot\frac{(t_3-t_2)(t_2-t_1)}{t_3-t_1}}. \tag{3.10}$$

Його розв'язок

$$A(t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}. \tag{3.11}$$

Таким чином, ми знайшли предекспоненційний множник в (3.5). Пізніше ми познайомимося і з іншими, більш прямими, методами знаходження цього множника. Цей множник не відіграє важливу роль у випадку коли треба рахувати відношення інтегралів, де він скорочується.

4. Генеруючий функціонал

Ми показали, що амплітуда перехода має вигляд

$$\langle q_f t_f|q_i t_i\rangle = N\int \mathcal{D}q(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f}dtL(q,\dot{q})\right], \tag{4.1}$$

интегрування відбувається по всім траекторіям з граничними умовами

$$q(t_f) = q_f, \quad q(t_i) = q_i.$$

Розглянемо тепер ситуацію коли включено джерело

$$L \to L + \hbar J(t)q(t). \tag{4.2}$$

Нехай джерело відміне від нуля для проміжку часу від t до t' ($T < t < t' < T'$), тоді

$$\langle Q'T'|QT\rangle^J = N \int \mathcal{D}q(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int\limits_T^{T'} dt\,(L + \hbar J(t)q(t))\right]. \tag{4.3}$$

Ми можемо записати

$$\langle Q'T'|QT\rangle^J = \int dq'dq\langle Q'T'|q't'\rangle\langle q't'|qt\rangle^J\langle qt|QT\rangle. \tag{4.4}$$

Тоді

$$\langle Q'T'|q't'\rangle = \langle Q'|e^{-\frac{i}{\hbar}HT'}e^{\frac{i}{\hbar}Ht'}|q'\rangle =$$

(вставляємо одиницу $1 = \sum_m |\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|$, де φ_m — власні стани H : $H|\varphi_m\rangle = E_m|\varphi_m\rangle$)

$$\begin{aligned} &= \sum_m \langle Q'|e^{-\frac{i}{\hbar}HT'}|\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|e^{\frac{i}{\hbar}Ht'}|q'\rangle = \\ &= \sum_m e^{\frac{i}{\hbar}E_m(t'-T')}\langle Q'|\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|q'\rangle = \\ &= \sum_m e^{\frac{i}{\hbar}E_m(t'-T')}\varphi_m(Q')\varphi_m^*(q'). \end{aligned} \tag{4.5}$$

Квантове число m включає сукупність всіх квантових чисел, як дискретних, так і неперервних, і власні значення впорядковані в порядку зростання знчень енергії: $E_0 < E_1 < E_2 < \ldots$ (ми вважаємо, що основний стан відділений щілиною від першого збудженого рівня).

Аналогічно,

$$\langle qt|QT\rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-T)}\varphi_n(q)\varphi_n^*(Q),$$

тоді

$$\langle Q'T'|QT\rangle^J = \sum_{m,n} e^{\frac{i}{\hbar}E_m(t'-T')-\frac{i}{\hbar}E_n(t-T)}\int dq\,dq'\varphi_m(Q')\varphi_m^*(q')\varphi_n(q)\varphi_n^*(Q)\langle q't'|qt\rangle^J. \tag{4.6}$$

Розглянемо тепер границю в комплексній площині змінних T і T': $T \to -\infty e^{-i\delta}$, $\quad T' \to \infty e^{-i\delta}$. Аналітичне продовження до комплексних T і T' тривіально, так як вони входять тільки в показники експонент. Тоді в суму будут давати внесок тільки члени $n = 0$, $m = 0$, тобто основний (вакуумний) стан, оскільки члени з $n \geq 1, m \geq 1$ експоненціально малі відносно внеску основного стану.

$$\langle Q'T'|QT\rangle^J \approx_{\substack{T'\to\infty e^{-i\delta}\\ T\to-\infty e^{-i\delta}}} e^{-\frac{i}{\hbar}E_0(T'-T)}\varphi_0(Q')\varphi_0^*(Q)\int dq\,dq'\varphi_0^*(q')\langle q't'|qt\rangle^J\varphi_0(q), \tag{4.7}$$

$\varphi_0(q)$ — хвильова функція вакуумного стану.

Запишемо

$$\int dq\, dq' \varphi_0^*(q') \langle q't'|qt\rangle^J \varphi_0(q) = \frac{\langle Q'T'|QT\rangle^J}{\varphi_0(Q')\varphi_0^*(Q)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_0(T'-T)\right]}. \tag{4.8}$$

Ліва частина — не що інше, як амплітуда переходу вакуум-вакуум, вона не залежить від T, T', і має існувати границя коли $T' \to \infty e^{-i\delta}, T \to -\infty e^{-i\delta}$. Змінні t' и $-t$ можна після границі вибрати як завгодно великими. Тоді будемо мати

$$\langle 0, \infty|0, -\infty\rangle^J = N \int \mathcal{D}Q \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt(L(Q,\dot{Q}) + \hbar J(Q))\right]. \tag{4.9}$$

Генерируючий функціонал або амплітуда переходу вакуум-вакуум в присутності джерел визначаємо як

$$Z(J) = \langle 0, \infty|0, -\infty\rangle^J. \tag{4.10}$$

Розглянемо тепер матричний елемент оператора координати в заданий час t_{n_1}, $\langle q_f t_f|\hat{q}(t_{n_1})|q_i t_i\rangle$, де $t_f > t_{n_1} > t_i$. Тоді

$$\begin{aligned}\langle q_f t_f|\hat{q}(t_{n_1})|q_i t_i\rangle &= N\int dq_1 \dots dq_n \langle q_f t_f|q_n t_n\rangle \dots \langle q_{n_1} t_{n_1}|\hat{q}(t_{n_1})|q_{n_1-1}t_{n_1-1}\rangle \dots \langle q_1 t_1|q_i t_i\rangle \\ &= N\int \mathcal{D}q(t)\,\mathcal{D}p(t)\, q(t_{n_1}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f} dt(p\dot{q} - H(p,q))\right]. \end{aligned} \tag{4.11}$$

В останьому виразі під інтегралом $q(t_{n_1})$ - вже число, а не оператор.

Так само, якщо $t_f > t_{n_1} > t_{n_2} > t_i$, тоді матричний елемент добутку двох операторів

$$\langle q_f t_f|\hat{q}(t_{n_1})\hat{q}(t_{n_2})|q_i t_i\rangle = N\int \mathcal{D}q(t)\,\mathcal{D}p(t)\, q(t_{n_1})q(t_{n_2})e^{iS(q,p)}. \tag{4.12}$$

Очевидно, що якщо $t_f > t_{n_2} > t_{n_1} > t_i$, тоді

$$\langle q_f t_f|\hat{q}(t_{n_2})\hat{q}(t_{n_1})|q_i t_i\rangle = N\int \mathcal{D}q(t)\,\mathcal{D}p(t)\, q(t_{n_2})q(t_{n_1})e^{iS(q,p)}. \tag{4.13}$$

Таким чином, маємо

$$\langle q_f t_f|T[\hat{q}(t_{n_2})\hat{q}(t_{n_1})]|q_i t_i\rangle = N\int \mathcal{D}q(t)\,\mathcal{D}p(t)\, q(t_1)q(t_2)e^{iS(q,p)}, \tag{4.14}$$

де ми ввели оператор хронологічного впорядкування T. Його можна записати через θ-функції:

$$T[\hat{q}(t_{n_2})\hat{q}(t_{n_1})] = \theta\left(t_{n_2} - t_{n_1}\right)\hat{q}(t_{n_2})\hat{q}(t_{n_1}) + \theta\left(t_{n_1} - t_{n_2}\right)\hat{q}(t_{n_1})\hat{q}(t_{n_2}). \tag{4.15}$$

Результат очевидно узагальнуєтся на будь-яке число операторів. Неважко побачити, що похідні функціоналу (4.9)

$$\frac{\delta Z(J)}{\delta J(t_1)} = iN \int \mathcal{D}q(t)\, q(t_1) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt(L + \hbar J(t) q(t))\right], \tag{4.16}$$

і, таким чином

$$\left.\frac{\delta^n Z(J(t))}{\delta J(t_1)...\delta J(t_n)}\right|_{J=0} = i^n N \int \mathcal{D}q\, q(t_1)...q(t_n) e^{iS} =$$
$$= i^n \langle 0, \infty | T q(t_1)...q(t_n) | 0, -\infty \rangle.$$

Для збіжності інтеграла можна добавити до L додати $\frac{i\epsilon q^2}{2}$. Функціонал $Z(J(t))$ (4.9) таким чином генерує кореляційні функції $\langle 0, \infty | T q(t_1)...q(t_n) | 0, -\infty \rangle$. Звичайно функціонал нормують так, що $Z(J = 0) = 1$, тому

$$N^{-1} = \int \mathcal{D}q(t) \, \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt \, L(q, \dot{q})\right]. \tag{4.17}$$

Зауважимо, що вираз (4.9) для генеруючого функціоналу не залежить від граничних значень q_i, q_f, тому інтегрування по $q(t)$ іде по всім значенням від $-\infty$ до ∞.

У фазовому просторі функціонал

$$Z(J, K) = N \int \mathcal{D}q(t) \mathcal{D}p(t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S(q, p) + i \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt [J(t) q(t) + K(t) p(t)]\right\} \tag{4.18}$$

є генеруючим для функцій Гріна

$$G\left(t_1, \ldots, t_j, t_{j+1}, \ldots, t_n\right) = \langle 0 | T\left[\hat{q}(t_1), \ldots, \hat{q}(t_j), \hat{p}(t_{j+1}), \ldots, \hat{p}(t_n)\right] | 0 \rangle, \tag{4.19}$$

які отримуються за допомогою диференціювання

$$G\left(t_1, \ldots, t_j, t_{j+1}, \ldots, t_n\right) = \frac{1}{i^n} \frac{\delta^j}{\delta J(t_1) \ldots \delta J(t_j)} \frac{\delta^{n-j}}{\delta K(t_{j+1}) \ldots \delta K(t_n)} \left.\frac{Z(J, K)}{Z(0, 0)}\right|_{J=K=0}. \tag{4.20}$$

Приклади генеруючих функцій в математиці.

Функція

$$h(x, t) = \exp(2xt - t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}$$

є генеруючої функцією для поліномів Ерміта,

$$H_n(x) = \frac{\partial^n}{\partial t^n} h(x,t)\Big|_{t=0}.$$

Генеруюча функція для поліномів Лежандра

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n, \quad |t|,|x|<1, \tag{4.21}$$

важлива для отримання мультіпольного розкладу кулонівського потенціалу,

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \frac{1}{\sqrt{r^2+r'^2-2rr'\cos\theta}} = \frac{1}{r}\frac{1}{\sqrt{1-2(r'/r)\cos\theta+(r'/r)^2}}. \tag{4.22}$$

5. Фейманівський пропагатор у енергетичному представленні.

Фейманівський пропагатор містить важливу інформацію про систему. Розглянемо його представлення в енергетичному просторі:

$$G\left(q_f, q_i; E\right) = \int\limits_0^{\infty} d\left(t_f - t_i\right)\left(-\frac{i}{\hbar}\right) K(q_f, t_f|q_i, t_i) e^{iE(t_f-t_i)/\hbar}, \tag{5.1}$$

у випадку коли ядро залежить від різниці $t_f - t_i$. Використовуючи власні функції гамільтоніану, $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$, та розклад одиниці, $\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1$, представимо фейманівський пропагатор у вигляді:

$$K(q_f, t_f|q_i, t_i) = \langle q_f|e^{-iH(t_f-t_i)/\hbar}|q_i\rangle = \sum_{n,m=0} \langle q_f|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|e^{-iH(t_f-t_i)/\hbar}|\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|q_i\rangle. \tag{5.2}$$

Система власних енергетичних станів ортонормована : $\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}$. Інтегруючи по R в (5.1), отримуємо

$$G\left(q_f, q_i; E\right) = \sum_n \frac{\varphi_n(q_f)\varphi_n^*(q_i)}{E - E_n + i\epsilon}, \tag{5.3}$$

і для сліда

$$\mathrm{Tr}\, G(E) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dq G\left(q, q; E\right) = \sum_n \frac{1}{E - E_n + i\epsilon}. \tag{5.4}$$

Густина станів визначається формулою

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\mathrm{Tr}\, G(E+i\epsilon) = \frac{1}{\pi}\sum_n \delta(E-E_n), \tag{5.5}$$

і локальна густина станів, яка залежить також від координати,

$$\rho(q, E) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\, G(q, q; E+i\epsilon) = \frac{1}{\pi}\sum_n |\varphi_n(q)|^2\delta(E-E_n). \tag{5.6}$$

6. Генеруючий функціонал в квантовій теорії поля (скалярні поля)

Квантова механіка описує динаміку класичних нерелятивістських точкових частинок, де координати частинок представляють ступені вільності системи. Класичні теорії поля - це узагальнення точкової механіки на системи з нескінченним числом ступенів вільності - задане число для кожної просторової точки $\mathbf{x}$. У цьому випадку ступенями вільності є значення поля $\varphi(\mathbf{x})$. У випадку нейтрального скалярного поля φ - дійсне число, що представляє одну ступінь свободи в заданій просторовій точці. З іншого боку, заряджене скалярне поле описується комплексним числом і, отже, представляє дві ступені вільності в просторовій точці. Класичні рівняння руху випливають з екстремума функціоналу дії

$$S[\varphi] = \int d^4x \mathcal{L}(\varphi, \partial_\mu \varphi), \quad \partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}. \tag{6.1}$$

Інтеграл за часом у механиці точки тепер замінюється інтегралом за простором і часом ($x = (\mathbf{x}, \mathbf{t} \equiv \mathbf{x_0})$), а функція Лагранжа точкової механіки замінюється на Лагранжеву функцію густини (або лагранжева густина). У випадку нейтрального скалярного поля

$$\mathcal{L}(\varphi, \partial_\mu \varphi) = \frac{1}{2} \partial_\mu \varphi \partial^\mu \varphi - V(\varphi). \tag{6.2}$$

Найпростішим прикладом теорії із взаємодією є теорія φ^4 з потенціалом

$$V(\varphi) = \frac{1}{2} m^2 \varphi^2 + \frac{\lambda}{4!} \varphi^4, \tag{6.3}$$

де m - маса скалярного поля, а λ - константа зв'язку самовзаємодії. Масовий доданок є аналогом гармонійного потенціалу в точковій механіці, тоді як взаємодія $\frac{\lambda}{4!}\varphi^4$ відповідає ангармонічному збуренню. Рівняння Лагранжа-Ейлера

$$\partial_\mu \frac{\delta L}{\delta \partial_\mu \varphi} - \frac{\delta L}{\delta \varphi} = 0, \quad L[\varphi] = \int d^3x \mathcal{L}(\varphi, \partial_\mu \varphi) \tag{6.4}$$

є класичними рівняннями руху поля. У випадку $\lambda = 0$ (відсутність взаємодії) це є рівняння Клейна-Гордона

$$(\Box + m^2)\varphi(x) = 0, \quad \Box = \partial_0^2 - \partial_{\mathbf{x}}^2. \tag{6.5}$$

Інтеграл по траєкторіям в квантовій механіці замінюється функціональним (або континуальним) інтегралом в квантовій теорії поля. Для генеруючого функціоналу маємо

$$Z(J) = N \int \mathcal{D}\varphi(x) \exp\left\{ i \int d^4x [\mathcal{L}(\varphi) + J(x)\varphi(x) + \frac{i}{2}\epsilon\varphi^2] \right\} = \langle 0, \infty | 0, -\infty \rangle^J, \tag{6.6}$$

де уявний доданок $\frac{i}{2}\epsilon\varphi^2$ ($\epsilon > 0$) доданий для збіжності інтеграла (границя $\epsilon \to 0$ береться в кінці обчислень). Інтегрування по значенням поля φ йде від $-\infty$ до $+\infty$.

Обчислемо його для дійсного вільного скалярного поля ($\lambda = 0$) з лагранжіаном

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2}(\partial^\mu\varphi\partial_\mu\varphi - m^2\varphi^2). \tag{6.7}$$

Генеруючий функціонал очевідно має вигляд

$$Z(J) = N\int\mathcal{D}\varphi\exp\left\{i\int d^4x[\frac{1}{2}(\partial_\mu\varphi\partial^\mu\varphi - (m^2 - i\epsilon)\varphi^2) + \varphi J]\right\} \tag{6.8}$$

$$= N\int\mathcal{D}\varphi\exp\left\{-i\int d^4x[\frac{1}{2}\varphi(\Box + m^2 - i\epsilon)\varphi - J\varphi]\right\}, \tag{6.9}$$

де в останньому виразі ми зробили інтегрування за частинами і знехтували поверхневим доданком оскільки фізичні поля прямують до нуля на нескінченності за часовій і просторових координатам. Зробимо в інтегралі заміну $\varphi(x) \to \varphi(x) + \varphi_0(x)$, де $\varphi_0(x)$ - деяка конкретна функція. Тоді

$$\begin{aligned}Z(J) = N\int\mathcal{D}\varphi\exp\{-i\int d^4x[&\frac{1}{2}\varphi(\Box + m^2 - i\epsilon)\varphi + \frac{1}{2}\varphi_0(\Box + m^2 - i\epsilon)\varphi\\
&+ \frac{1}{2}\varphi(\Box + m^2 - i\epsilon)\varphi_0 + \frac{1}{2}\varphi_0(\Box + m^2 - i\epsilon)\varphi_0 - J\varphi - J\varphi_0]\}\\
= N\int\mathcal{D}\varphi\exp\{-i\int d^4x[&\frac{1}{2}\varphi(\Box + m^2 - i\epsilon)\varphi + \varphi(\Box + m^2 - i\epsilon)\varphi_0 - J\varphi\\
&+ \frac{1}{2}\varphi_0(\Box + m^2 - i\epsilon)\varphi_0 - J\varphi_0]\}.\end{aligned} \tag{6.10}$$

Виберемо в якості $\varphi_0(x)$ частинний розв'язок рівняння

$$(\Box + m^2 - i\epsilon)\varphi_0(x) = J(x) \quad \Rightarrow \quad \varphi_0(x) = \int D^c(x-y)J(y), \tag{6.11}$$

де $D^c(x-y)$ - функція Гріна, тобто є розв'язком рівняння Клейна-Гордона з дельта функцією в правої частині,

$$(\Box + m^2 - i\epsilon)D^c(x-y) = \delta(x-y). \tag{6.12}$$

Це рівняння з частинними похідними і постійними коефіцієнтами і розв'язується за допомогою Фур'є перетворення, знаходимо

$$D^c(x) = \int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\frac{e^{-ikx}}{m^2 - k^2 - i\epsilon}. \tag{6.13}$$

Уявний доданок $i\epsilon$ зміщує полюса в подинтегральному виразі в комплексну площину. Тоді

$$\begin{aligned} Z(J) &= N \exp\left(\frac{i}{2}\int d^4x\varphi_0(x)J(x)\right)\int \mathcal{D}\varphi \exp\left\{\frac{i}{2}\int d^4x\varphi(\Box + m^2 - i\epsilon)\varphi\right\} \\ &= N' \exp\frac{i}{2}\int d^4x\, d^4yJ(x)D_c(x-y)J(y), \end{aligned} \tag{6.14}$$

тобто, ми знайшли явну залежність функціоналу $Z(J)$ від J. В останьому виразі ми використали розв'язок (6.11) для $\varphi_0(x)$, і включили інтеграл по φ, який не залежить від джерела $J(x)$, в константу N'. Якщо нормувати функціонал таким чином, що $Z(J = 0) = 1$, то

$$Z(J) = \exp\frac{i}{2}\int d^4x\, d^4yJ(x)D_c(x-y)J(y). \tag{6.15}$$

В функціональному інтегралі (6.8) можна зробити поворот в евклідовий простір (віковський поворот)

$$x_4 = ix_0 \quad \Rightarrow \quad (\partial_0\varphi)^2 - (\partial_i\varphi)^2 = -(\partial_4\varphi)^2 - (\partial_i\varphi)^2 = -(\partial_\mu\varphi)^2.$$

Відповідний генеруючий функціонал дорівнює

$$Z(J) = \int \mathcal{D}\varphi \exp\left\{-\int\left(\frac{1}{2}[(\partial_\mu\varphi)^2 + m^2\varphi^2] - \varphi J\right)d^4x_E\right\}, \tag{6.16}$$

де інтегрування йде за евклідовими координатами x_E. Це вінеровський інтеграл (застосовується в статистичній фізиці). Наприклад, статистична сума записується як

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H} = \int\limits_{\varphi(0,\mathbf{x})=\varphi(\beta,\mathbf{x})} \mathcal{D}\varphi(\tau,\mathbf{x}) \exp\left[-\int\limits_0^\beta d\tau\, d^3x\, \mathcal{L}_E(\varphi(t,\mathbf{x}))\right], \tag{6.17}$$

і інтегрування йде за конфігураціями поля, які задовольняють умови $\varphi(0,\mathbf{x}) = \varphi(\beta,\mathbf{x})$. Відповідна лагранжева густина має вигляд

$$\mathcal{L}_E(\varphi(t,\mathbf{x})) = \frac{1}{2}\partial_\mu\varphi\partial_\mu\varphi + V(\varphi). \tag{6.18}$$

Звернемо увагу, що кінетичний доданок $\frac{1}{2}(\partial_\mu\varphi)^2$ є тепер позитивно визначена величина, а потенційна функція $V(\varphi)$ входить зі знаком плюс, і у випадку поненціалу (6.3) увесь вираз $\mathcal{L}_E(\varphi(t,\mathbf{x}))$ є позитивна величина. Таким чином, збіжність вінеровського інтегралу є набагато краще за фейманівського інтегралу.

7. Інтеграли від багатьох змінних

Добре відомий гаусовий інтеграл

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}ax^2} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{1/2}.$$

Розглянемо добуток таких інтегралів

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\sum\limits_{i=i}^{N} a_i x_i^2} dx_1 \dots dx_N = \frac{(2\pi)^{N/2}}{\left(\prod\limits_{i=1}^{N} a_i\right)^{1/2}}.$$

Нехай A — діагональна матрица з елементами $a_1, a_2, \dots, a_n$, а x — вектор $(x_1, \dots, x_n)$. Тоді

$$(x, Ax) = \sum_{i=1}^{N} a_i x_i^2, \qquad \det A = \prod_{i=1}^{N} a_i.$$

Можна записати

$$\int e^{-\frac{1}{2}(x,Ax)} d^N x = (2\pi)^{N/2} (\det A)^{-1/2}, \qquad d^N x \equiv \prod_{i=1}^{N} dx_i. \tag{7.1}$$

Очевидно, ця рівність справедлива для будь-якої дійсної симетричної матриці (такі матриці диагоналізуються за допомогою ортогонального перетворення $x \to Ox$, $O^T O = 1$, $\det O = 1$).

$$\int e^{-\frac{1}{2}(x,Ax)} dx = (\det A)^{-1/2}, \qquad dx = \prod_{i=1}^{N} \frac{dx_i}{\sqrt{2\pi}}.$$

Формула легко узагальнюється для квадратичних форм

$$Q(x) = \frac{1}{2}(x, Ax) + (b, x), \qquad Q'(x) = Ax + b = 0 \ \Rightarrow \bar{x} = -A^{-1}b, \ Q''(x) = A. \tag{7.2}$$

Квадратичну форму можна переписати у вигляді розкладу відносно точки $\bar{x}$:

$$\begin{aligned} Q(x) &= Q(\bar{x}) + Q'(\bar{x})(x - \bar{x}) + \frac{1}{2}(x - \bar{x}) Q''(x)(x - \bar{x}) \\ &= \frac{1}{2}(\bar{x}, A\bar{x}) + (b, \bar{x}) + \frac{1}{2}(x - \bar{x}, A(x - \bar{x})) \\ &= \frac{1}{2}(A^{-1}b, A \cdot A^{-1}b) - (A^{-1}b, b) + \frac{1}{2}(x - \bar{x}, A(x - \bar{x})) \\ &= -\frac{1}{2}(b, A^{-1}b) + \frac{1}{2}(x - \bar{x}, A(x - \bar{x})). \end{aligned} \tag{7.3}$$

Для гаусового інтегралу від багатьох змінних отримуємо загальну формулу

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-Q(x)}dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(x-\bar{x},A(x-\bar{x}))}dx \times e^{\frac{1}{2}b\cdot A^{-1}\cdot b} = (\det A)^{-1/2}e^{\frac{1}{2}b\cdot A^{-1}\cdot b}. \tag{7.4}$$

Розглянемо узагальнення на комплексні числа. Для двох дійсних змінних

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x^2+y^2)}dx\,dy = \frac{\pi}{a}. \tag{7.5}$$

Вводячи комплексні змінні, і здійснюючи елементарні перетворення

$$z = x+iy, \quad z^* = x-iy, \quad dz^*dz = \frac{\partial(z^*,z)}{\partial(x,y)}dx\,dy,$$

$$\frac{\partial(z^*,z)}{\partial(x,y)} = \begin{vmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{vmatrix} = 2i, \quad dx\,dy = \frac{dz^*dz}{2i},$$

перепишимо інтеграл у вигляді

$$\int e^{-az^*z}\frac{dz^*}{(2\pi i)^{1/2}}\frac{dz}{(2\pi i)^{1/2}} = \frac{1}{a}. \tag{7.6}$$

Для додатньо-визначених ермітових матриць гаусовий інтеграл від комплексних змінних

$$\int e^{-(z^*,Az)}dz^*dz = (\det A)^{-1}, \quad dz^*dz \equiv \prod_{i=1}^{N}\frac{dz_i^*dz_i}{2\pi i}. \tag{7.7}$$

Або, у випадку присутності лінійного доданку

$$\int e^{-(z^*,Az)+b\cdot z}dz^*dz = (\det A)^{-1}\exp(bA^{-1}b), \quad b\cdot z \equiv \sum_{i=1}^{N} b_i z_i. \tag{7.8}$$

Узагальнення на випадок функціональних інтегралів є (формальне узагальнення в границі $N\to\infty$)

$$\int \mathcal{D}\varphi \exp\left[-\frac{1}{2}\int d^4x\varphi(x)A\varphi(x)\right] = (\det A)^{-1/2},$$

$$\int \mathcal{D}\varphi^*\,\mathcal{D}\varphi \exp\left[-\int d^4x\varphi^*(x)A\varphi(x)\right] = (\det A)^{-1}.$$

Повертаючись до обчислення генеруючого функціонала для вільного поля, знаходимо

$$Z_0(J) = N\exp\left[\frac{i}{2}\int d^4x\,d^4y\,J(x)D^c(x-y)J(y)\right][\det i(\Box + m^2 - i\epsilon)]^{-1/2}.$$

Оператор $A = i(\Box + m^2 - i\epsilon)$ грає роль матриці в (7.2), $b = -iJ$, і обернений оператор є функція Гріна,

$$A^{-1} = \frac{1}{i} D^c(x-y).$$

Ми обчислили, таким чином, константу $N' = N[\det i(\Box + m^2 - i\epsilon)]^{-1/2}$.

Обчислимо тепер гаусовий інтеграл типу

$$I_{r_1 \dots r_{2n}} \equiv \int\limits_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{N} dx_i \, x_{r_1} x_{r_2} \dots x_{r_{2n}} e^{-\frac{1}{2}(xAx)}, \tag{7.9}$$

де є парне число предекспоненційних множників (для непарного числа множників інтеграл очевидно дорівнює нулеві). Ми маємо

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{N} dx_i \, e^{-\frac{1}{2}\sum\limits_{i,j}^{N} x_i A_{ij} x_j - \sum\limits_{i=1}^{N} b_i x_i} = \left(\det \frac{A}{2\pi}\right)^{-1/2} e^{\frac{1}{2}\sum\limits_{i,j}^{N} b_i A_{ij}^{-1} b_j}. \tag{7.10}$$

В останьому виразі розкладемо в ряд експоненти, які містять b_i,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{r_1 \dots r_{2n}} \frac{1}{(2n)!} I_{r_1 \dots r_{2n}} b_{r_1 \dots r_{2n}} = I_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! 2^n} \left(\sum_{i,j} b_i A_{ij}^{-1} b_j \right)^n, \quad I_0 = \left(\det \frac{A}{2\pi}\right)^{-1/2}. \tag{7.11}$$

Порівнюючи ступені “джерел” b, маємо

$$\sum_{r_1 \dots r_{2n}} I_{r_1 \dots r_{2n}} b_{r_1} \dots b_{r_{2n}} = I_0 \frac{(2n)!}{n! 2^n} \left(\sum_{i,j} b_i A_{ij}^{-1} b_j \right)^n. \tag{7.12}$$

Для окремих випадків

$$n = 1 \quad \Rightarrow \quad \sum_{r_1 r_2} I_{r_1 r_2} b_{r_1} b_{r_2} = I_0 \sum_{ij} b_i A_{ij}^{-1} b_j \quad \Rightarrow \quad I_{r_1 r_2} = I_0 (A^{-1})_{r_1 r_2},$$

$$n = 2 \quad \Rightarrow \quad \sum_{r_1 \dots r_4} I_{r_1 \dots r_4} b_{r_1} \dots b_{r_4} = I_0 \sum_{ij} (b_i A_{ij}^{-1} b_j)^2 \cdot 3.$$

Диференциючи по b_1, b_2, b_3, b_4, знаходимо

$$I_{r_1 \dots r_4} = I_0 \left[A_{r_1 r_2}^{-1} A_{r_3 r_4}^{-1} + A_{r_1 r_3}^{-1} A_{r_2 r_4}^{-1} + A_{r_1 r_4}^{-1} A_{r_2 r_3}^{-1} \right]. \tag{7.13}$$

Це аналог теореми Віка для бозоних полів. Формули інтегрування справедливі, коли детермінант відмінний від нуля, тобто відсутні нульові власні значення матриці A.

8. Функціональне інтегрування по грасмановим змінним

Алгебра Грасмана антікомутуючих змінних.

$\{\theta, \theta\} = 0$, або $\theta^2 = 0$ — випадок однієї грасманової змінної $\{A, B\} = AB + BA$. Таких чисел не існує, але таку алгебру можна, наприклад, реалізувати на матрицях. Зокрема, в цьому випадку

$$\theta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{8.1}$$

Для грасманових змінних не існує операції ділення на нуль, яке притаманно для всіх числових систем. Тому грасманові змінні не є, строго говоря, числами, але найчастіше ми будемо використовувати і для них це слово, маючи, звичайно на увазі їхню відмінність від загальновідомих числових систем. Очевидно, звичайне визначення похідної, яке використовує таку операцію, не може існувати. Визначимо диференційний оператор алгебраїчним співвідношенням

$$\{\frac{d}{d\theta}, \theta\} = 1. \tag{8.2}$$

Дійсно, загальний вигляд функції однієї грасманової змінної

$$f(\theta) = f_0 + f_1 \cdot \theta \quad \Rightarrow \quad \theta f = f_0 \theta. \tag{8.3}$$

Тоді, для довільної функції грасманової змінної $f(\theta)$, має виконуватися тотожність (8.2):

$$\frac{d}{d\theta}(\theta f) + \theta \frac{d}{d\theta} f = f(\theta) = f_0 + f_1 \theta. \tag{8.4}$$

Звідси випливає, що для тотожного виконання цього співвідношення треба покласти

$$\frac{d\theta}{d\theta} = 1, \qquad \frac{df}{d\theta} = f_1, \tag{8.5}$$

де ми вважаємо, що f_1 — звичайне число. З іншого боку, записуючи тотожність у виглялі

$$\frac{d}{d\theta}(\theta f) = f - \theta \frac{d}{d\theta} f, \tag{8.6}$$

ми отримуємо правило Лейбніца для диференціювання добутків грасманових змінних. Для другої похідної

$$\frac{df}{d\theta} = f_1, \qquad \frac{d^2 f}{d^2\theta} = 0 \quad \Rightarrow \quad \left\{\frac{d}{d\theta}, \frac{d}{d\theta}\right\} = 0.$$

Це означає, що для диференцування немає зворотньої операції. Вище коефіцієнти f_1, f_2 були звичайними числами, але можна їх також розглядати як как грасманові змінні. Тоді

$$\frac{df(\theta)}{d\theta} = -f_1.$$

Можна розглядати ліві та праві похідні

$$\frac{\vec{d}}{d\theta} f(\theta) = -f_1, \qquad \frac{\overleftarrow{d}}{d\theta} f(\theta) = f_1. \tag{8.7}$$

(Ф.Березин, Метод вторичного квантования)

Із-за того, що для диференцювання немає зворотньої операції, виникають незручності при визначенні операції інтегрування, про яку ми звичайно і думаємо як о зворотньої операції. Визначимо формально операцію інтегрування так, щоб вона була інвариантна відносно зсуву змінних, тобто

$$\int d\theta f(\theta) = \int d\theta f(\theta + \xi), \tag{8.8}$$

тобто

$$\int d\theta (f_0 + f_1 \theta) = \int d\theta (f_0 + f_1 \theta + f_1 \xi). \tag{8.9}$$

Тоді необхідно покласти

$$\int d\theta = 0, \qquad \int d\theta\, \theta = 1 \quad \Rightarrow \quad \int d\theta\, f(\theta) = f_1, \tag{8.10}$$

тобто операція інтегрування діє в точності як диференціювання, тобто

$$\int d\theta\, f(\theta) = \frac{d}{d\theta} f(\theta). \tag{8.11}$$

Звідси

$$\int d\theta\, \frac{d}{d\theta} f(\theta) = 0, \tag{8.12}$$

тобто, інтеграл від повної похідної дорівнює нулеві, і показує, що операція інтегрування не є зворотною до операції диференціювання. Операція інтегрування має властивості характерні для інтегрування в разі визначених інтегралів:

1. Інтеграл від повної похідної дорівнює нулю.

2. В результаті інтегрування по одній із змінних отриманий вираз не залежить від цієї змінної.

3.Множник в добутку, незалежний від змінних інтегрувань, може бути винесений з під знака інтегрування.

Світ однієї грасманової змінної бідний, тому розглянемо N грасманових змінних $\theta_1, \dots \theta_N$, які задовольняють

$$\{\theta_i, \theta_j\} = 0, \qquad i, j = 1 \dots N. \tag{8.13}$$

Також оператори похідних задовольняють

$$\left\{\frac{\partial}{\partial\theta_i}, \theta_j\right\} = \delta_{ij}, \qquad \left\{\frac{\partial}{\partial\theta_i}, \frac{\partial}{\partial\theta_j}\right\} = 0. \tag{8.14}$$

Довільна функція грасманових змінних має вигляд

$$f(\theta_i) = \alpha + \beta_i\theta_i + c_{ij}\theta_i\theta_j + \ldots + c\theta_1\theta_2 \ldots \theta_N,$$

де, очевидно, коефіціенти c_{ij}, c_{ijk} і так далі, антісиметричні по всіх індексах. Очевидно також, що ряд обривається на останньому доданку, оскільки наступні доданки будуть містити ступені θ_i, які зануляються.

Інтегрування по грасмановим змінним Маємо правила інтегрування

$$\int d\theta_i = 0, \qquad \int d\theta_i\theta_i = 1,$$

$$\int d\theta_1\, d\theta_2\, \theta_1\theta_2 = -\int d\theta_1(d\theta_2\theta_2)\theta_1 = -1.$$

Розглянемо гаусовий інтеграл

$$I_N(M) = \int d\theta_1 \ldots d\theta_N e^{-\frac{1}{2}\theta^T M\theta}, \tag{8.15}$$

де N — парне, M — антисиметрична $N \times N$ матриця. У випадку $N = 2$ матриця має M вигляд

$$M = \begin{pmatrix} 0 & m_{12} \\ -m_{12} & 0 \end{pmatrix}, \tag{8.16}$$

тоді

$$\begin{aligned} I_2(M) &= \int d\theta_1 d\theta_2 \exp\left[-\frac{1}{2}(\theta_1 m_{12}\theta_2 - m_{12}\theta_2\theta_1)\right] \\ &= \int d\theta_1 d\theta_2[1 - m_{12}\theta_1\theta_2] = m_{12} = (\det M)^{1/2}, \end{aligned} \tag{8.17}$$

де ми ввели 1×1 матрицю $M = m_{12}$. Отримуємо загальну формулу

$$I_N(M) = (\det M)^{1/2}, \tag{8.18}$$

звідки очевидно, що N повинно бути парним. Порівнюючи з відповідним інтегралом для звичайних дійсних змінних (7.1), де детермінант входить зі ступенем $-1/2$, бачимо, що у відповіді для інтегралу по грасмановим змінним детермінант входить зі ступенем $+1/2$. Це суттєва відмінність двох інтегралів.

Розглянемо тепер інтеграл з лінійним доданком в квадратичній формі

$$I_N(M, \chi) = \int d\theta_1 \dots d\theta_N e^{-\frac{1}{2}\theta^T M\theta + \chi_i\theta_i} = (\det M)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\chi^T M^{-1}\chi}, \tag{8.19}$$

де χ_i — також грасманові числа ($\{\chi_i, \chi_j\} = 0,\ \{\chi_i, \theta_j\} = 0$). При $N = 2$, беручи до уваги, що $\theta_i^2 = 0$, ряд для експоненти обривається,

$$\begin{aligned} &\exp\left(-\frac{1}{2}\theta^T M\theta + \chi_i\theta_i\right) = \exp(-\theta_1 m_{12}\theta_2 + \chi_1\theta_1 + \chi_2\theta_2) \\ &= 1 - \theta_1 m_{12}\theta_2 + \frac{1}{2}(\chi_1\theta_1 + \chi_2\theta_2)(\chi_1\theta_1 + \chi_2\theta_2) = 1 - \theta_1 m_{12}\theta_2 - \chi_1\chi_2\theta_1\theta_2, \end{aligned} \tag{8.20}$$

і інтегрування по θ_i дає

$$I_2(M, \chi) = m_{12} + \chi_1\chi_2 = (\det M)^{1/2} \exp\left[-\frac{1}{2}\chi^T M^{-1}\chi\right], \tag{8.21}$$

Перевіримо, що останню рівність дійсно можна записати у такому вигляді. Для антісиметричної матриці

$$M = \begin{pmatrix} 0 & m_{12} \\ -m_{12} & 0 \end{pmatrix},$$

знаходимо обернену матрицю

$$\begin{pmatrix} 0 & m_{12} \\ -m_{12} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & a \\ -a & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -am_{12} & 0 \\ 0 & -am_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad a = -\frac{1}{m_{12}}.$$

$$\exp\left[-\frac{1}{2}\chi^T M^{-1}\chi\right] = \exp\left[-\frac{1}{2}(\chi_1, \chi_2) \begin{pmatrix} 0 & -1/m_{12} \\ 1/m_{12} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}\right] = \tag{8.22}$$

$$= \exp\left[\chi_1 \frac{1}{m_{12}} \chi_2\right] = 1 + \frac{1}{m_{12}}\chi_1\chi_2. \tag{8.23}$$

Цей же результат можна отримати також, виконуючи зсув змінної

$$\theta = \theta' - M^{-1}\chi.$$

Дійсно, використовуючи антисиметрію оберненої матриці M^{-1}, проведемо ланцюжок перетворень,

$$\begin{aligned}
I_N(M,\chi) &= \int d\theta'_1 \ldots d\theta'_N \exp\left[-\frac{1}{2}(\theta' - M^{-1}\chi)^T M(\theta' - M^{-1}\chi) + \chi(\theta' - M^{-1}\chi)\right] \\
&= \int d\theta_1 \ldots d\theta_N \exp\left[-\frac{1}{2}\theta^T M\theta - \frac{1}{2}\chi^T M^{-1} M\theta \right.\\
&\left. + \frac{1}{2}\theta^T M M^{-1}\chi + \frac{1}{2}\chi^T M^{-1} M M^{-1}\chi + \chi\theta - \chi M^{-1}\chi\right] \\
&= \int d\theta_1 ... d\theta_N e^{-\frac{1}{2}\theta^T M\theta} e^{-\frac{1}{2}\chi^T M^{-1}\chi} = (\det M)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\chi^T M^{-1}\chi}. \qquad (8.24)
\end{aligned}$$

Розглянемо заміну змінних $\theta \to \theta = f(\theta')$ в інтегралі по одній грасмановій змінній $\int d\theta\theta = 1$,

$$\int d\theta' J f(\theta') = J f_1 \quad \Rightarrow \quad J = \frac{1}{f_1}, \quad f_1 = \frac{\partial f(\theta')}{\partial\theta'},$$

Бачимо, що якобіан має форму відмінну від заміни змінних в звичайному інтегралі. Для двох змінних зробимо заміну

$$\begin{pmatrix}\theta_1\\ \theta_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\theta'_1\\ \theta'_2\end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned}\theta_1 &= a_{11}\theta'_1 + a_{12}\theta'_2\\ \theta_2 &= a_{21}\theta'_1 + a_{22}\theta'_2\end{aligned}$$

З інтегралу

$$\begin{aligned}
\int d\theta_1 d\theta_2\, \theta_2\theta_1 = 1 \quad \Rightarrow \quad & \int d\theta'_1 d\theta'_2\, J(a_{21}\theta'_1 + a_{22}\theta'_2)(a_{11}\theta'_1 + a_{12}\theta'_2) \\
= \quad & \int d\theta'_1 d\theta'_2\, J(a_{22}a_{11} - a_{12}a_{21})\theta'_2\theta'_1 \qquad (8.25)
\end{aligned}$$

знаходимо відповідний якобіан переходу

$$J = \det{}^{-1}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{vmatrix}. \qquad (8.26)$$

Він також відмінний від випадку інтегрування по звичайним числам, де детермінант з'являється у позитивної степені. Якобіан переходу для грасманових змінних зветься березініаном на честь Ф. Березіна, який вперше отримав таке правило заміни змінних. Цей вивід легко узагальнюється на випадок N змінних, тобто, якщо зробити заміну

$$\theta_i = \sum_{j=1}^{N} a_{ij}\theta'_j, \qquad (8.27)$$

то якобіан переходу J буде

$$J^{-1} = \text{det}a_{ij} = \det\frac{\partial\theta_i}{\partial\theta'_j}. \tag{8.28}$$

Формули можна узагальнити на випадок інтегрування по комплексним грасмановим змінним. Перейдемо до нових змінних

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{2}}(\theta_1 + i\theta_2),\ \eta^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\theta_1 - i\theta_2) \quad \Rightarrow \quad \theta_1 = \frac{\eta+\eta^*}{\sqrt{2}}, \theta_2 = \frac{\eta-\eta^*}{i\sqrt{2}}.$$

Цю зміну запишимо як

$$\begin{pmatrix}\theta_1\\ \theta_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{i\sqrt{2}} & -\frac{1}{i\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\eta\\ \eta^*\end{pmatrix}.$$

Тоді зміна міри інтегрування

$$d\theta_1 d\theta_2 = \det{}^{-1}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{i\sqrt{2}} & -\frac{1}{i\sqrt{2}}\end{pmatrix} d\eta d\eta^* = \frac{1}{i}d\eta d\eta^*. \tag{8.29}$$

Квадратична форма перетворюється у

$$\frac{1}{2}\theta^T M\theta = \theta_1 m_{12}\theta_2 = -\frac{i}{2}(\eta+\eta^*)m_{12}(\eta-\eta^*) = -i\eta^* m_{12}\eta,$$

і інтеграл по двом грасмановим змінним приймає вигляд

$$\int d\theta_1 d\theta_2\, e^{-\frac{1}{2}\theta^T M\theta} = \int\frac{d\eta d\eta^*}{i}e^{i\eta^* m_{12}\eta} = m_{12},$$

тобто

$$\int\frac{d\eta d\eta^*}{i}e^{i\eta^* M\eta} = \det M.$$

Далі, лінійний доданок запишимо як

$$\begin{aligned}
&\chi_1\theta_1 + \chi_2\theta_2 = \chi_1\frac{\eta+\eta^*}{\sqrt{2}} + \chi_2\frac{\eta-\eta^*}{i\sqrt{2}} = \frac{\chi_1 - i\chi_2}{\sqrt{2}}\eta + \frac{\chi_1+i\chi_2}{\sqrt{2}}\eta^*\\
&= -\eta^*\frac{\chi_1+i\chi_2}{\sqrt{2}} + \frac{\chi_1-i\chi_2}{\sqrt{2}}\eta \equiv -\eta^*\xi + \xi^*\eta\\
&\xi = \frac{\chi_1+i\chi_2}{\sqrt{2}}, \quad \xi^* = \frac{\chi_1-i\chi_2}{\sqrt{2}} \quad \Rightarrow \quad \xi^*\xi = i\chi_1\chi_2,
\end{aligned} \tag{8.30}$$

де ми ввели нові "джерела"ξ і комплексно спряжене ξ^*. Отримуємо запис інтеграла в термінах комплексних грасманових змінних

$$\begin{aligned}
&\int d\theta_1 d\theta_2\, e^{-\frac{1}{2}\theta^T M\theta + \chi\cdot\theta} = (\det M)e^{-\frac{1}{2}\chi M^{-1}\chi} \quad \Rightarrow\\
&= \int\frac{d\eta d\eta^*}{i}e^{i\eta^* m_{12}\eta + \xi^*\eta - \eta^*\xi} = m_{12}e^{\chi_1\frac{1}{m_{12}}\chi_2} = m_{12}e^{-i\xi^*\frac{1}{m_{12}}\xi}.
\end{aligned} \tag{8.31}$$

Позначаючи $\xi \to -i\xi$, $\xi^* \to i\xi^*$, можемо це записати як

$$\int \frac{d\eta d\eta^*}{i} e^{i\eta^* m_{12}\eta + i\xi^*\eta + i\eta^*\xi} = \det M e^{-i\xi^* M^{-1}\xi}. \tag{8.32}$$

Позначаючи $m_{12} \to im_{12}$ отримуємо дещо іншу форму

$$\int d\eta^* d\eta \, e^{-\eta^* m_{12}\eta + i\xi^*\eta + i\eta^*\xi} = \det M e^{-\xi^* M^{-1}\xi}. \tag{8.33}$$

Ці формули для гаусового інтеграла по двом грасмановим змінним природним чином узагальнюються на випадок $2N$ змінних, наприклад,

$$\int \prod_{i=1}^{N} [d\eta_i^* d\eta_i] \, e^{-\eta^* M\eta + i\xi^*\eta + i\eta^*\xi} = \det M e^{-\xi^* M^{-1}\xi}, \tag{8.34}$$

де M — матриця розміром $N \times N$.

9. Інтеграли по шляхам і детермінанти

Ми показали, що для гармонійного осцилятора

$$K(q_f t_f | q_i t_i) = A(t_i, t_f) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(q_{cl})\right),$$

де

$$A(t = t_f - t_i) = \int \mathcal{D}x(t) \exp \frac{im}{2\pi} \int_{t_i}^{t_f} dt \, x(t) \left[-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2\right] x(t)$$

і оператор $-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2$ діє на функції, які задовольняють граничним умовам $x(t_i) = x(t_f) = 0$.

Знайдемо повний набір ортонормованих хвильових функцій $\Phi_n(t)$, які визначаються рівнянням на власні значення

$$\left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2\right) \Phi_n(t) = \lambda_n(t) \Phi_n(t), \tag{9.1}$$

і мають властивості

$$\Phi_n(t_i) = \Phi_n(t_f) = 0, \quad \int_{t_i}^{t_f} \Phi_n(t)\Phi_m(t) dt = \delta_{nm}, \quad \sum_n \Phi_n(t)\Phi_n(t') = \delta(t - t'). \tag{9.2}$$

Розкладемо функцію $x(t)$ в Фур'є-подібний ряд по цій системе

$$x(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \Phi_n(t). \tag{9.3}$$

Для дії, використовуючи ортонормованість, знаходимо

$$S[x(t)] = \frac{m}{2}\sum_{n=1}^{\infty}\lambda_n a_n^2. \tag{9.4}$$

Інтеграл по траєкторіям можна записати як багатократний інтеграл по Фур'є компонентам a_n і порахувати відповідний гаусовий інтеграл

$$\lim_{N\to\infty}\int\dots\int\exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x(t)]\right)da_1\dots da_N = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{2\pi i\hbar}{m}\right)^{N/2}\frac{1}{\sqrt{\lambda_1\dots\lambda_N}}. \tag{9.5}$$

Таким чином, інтеграл по шляхам, який відповідає квадратичному лагранжіану, визначається детермінантом відповідного диференційного оператора, тобто

$$\int\limits_{x(t_i)=0}^{x(t_f)=0}\mathcal{D}x(t)\exp\frac{im}{2\pi}\int\limits_{t_i}^{t_f}dtx(t)\left[-\frac{d^2}{dt^2}-\omega^2\right]x(t) = \Delta\left\{\det\left[-\frac{d^2}{dx^2}-\omega^2\right]\right\}^{-1/2}, \tag{9.6}$$

де праву частина потрібну інтерпретувати як граничну процедуру

$$\lim_{N\to\infty}\Delta(N)\left[\prod_{n=1}^{N}\lambda_n\right]^{-1/2} = \lim_{N\to\infty}\Delta(N)\int\dots\int\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\sum_{n=1}^{N}\lambda_n a_n^2\right]\prod_{n=1}^{N}\frac{da_n}{(2\pi i\hbar/m)^{1/2}}. \tag{9.7}$$

Відзначимо, що ми включили фактор $\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{N/2}$ в меру інтегрування. Тем не менш, необхідно зберегти якусь скінченну константу Δ, тому що детермінант тільки пропорційний інтегралу. Можна вибрати Δ так, щоб нормувати $A(t_f - t_i)$ на випадок вільної частинки,

$$K(q_f t_f|q_i t_i) = \left[\frac{\det\left(-\frac{d^2}{dt^2}-\omega^2\right)}{\det\left(-\frac{d^2}{dt^2}\right)}\right]^{-1/2} K_0(0t_f|0t_i)\exp\left(\frac{i}{\hbar}S[q_{cl}]\right). \tag{9.8}$$

$$K_0(0t_f|0t_i) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_i)}\right)^{1/2}.$$

При $\omega = 0$ вираз (9.8) перетворюється у пропагатор вільної частинки.

Детермінант оператора визначимо як добуток його власних значень. У більшості випадків цей добуток розбігається і його треба регуляризувати, тобто, зробити скінченним. Ми розглянемо регуляризацію за допомогою так званої узагальненої дзета-функції. Спочатку

$$\begin{aligned}\det A &= \lim_{N\to\infty}\prod_{n=1}^{N}\lambda_n = \lim_{N\to\infty}\prod_{n=1}^{N}\exp(\log\lambda_n) = \lim_{N\to\infty}\exp\left[\sum_{n=1}^{N}\log\lambda_n\right]\\ &= \lim_{N\to\infty}\exp\left[-\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\partial\lambda_n^{-s}}{\partial s}\right)_{s=0}\right] = \exp\left[-\frac{\partial\zeta}{\partial s}(s,A)|_{s=0}\right],\end{aligned} \tag{9.9}$$

де

$$\zeta(s;A) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n^s} = \mathrm{Tr}\, A^{-s} \tag{9.10}$$

— узагальнена дзета-функція для деякого оператора A. В останній рівності в (9.9) ми поміняли порядок сумування і переходу до границі. Зазвічай сума в (9.10) збігається для значень $\mathrm{Re}\, s > \sigma$ більше за деяке число σ, і визначає в цій області аналітичну функцію, яка може бути подовжена в область $\mathrm{Re}\, s < \sigma$ і є аналітичною в точці $s = 0$.

Повернемось до фейманівського пропагатора

$$\langle q_f | e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | q_i \rangle = K(q_f t_f | q_i 0) = N \int\limits_{q(0)=q_i}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}q(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int\limits_0^{t_f} dt \left[\frac{\dot{q}^2}{2m} - V(q) \right] \right),$$

в якому зробимо заміну $t = -i\tau$, тоді в підінтегральному виразі

$$\exp() \to \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int\limits_0^{+it} d\tau \left[\frac{\dot{q}^2}{2m} + V(q) \right] \right],$$

а матричний елемент перепишеться

$$\langle q_f | e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | q_i \rangle = \langle q_f | e^{-H\beta} | q_i \rangle,$$

де ми позначили $it/\hbar = \beta$. Останній матричний елемент використовується у статистияної фізиці, якщо покласти $\beta = \frac{1}{k_B T}$ (k_B — константа Больцмана). Якщо прирівняти початкову і кінцеву координати, $q_i = q_f \equiv q$, і проінтегрувати по q, то отримуємо вже відомий вираз для статистичної суми

$$\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H} = N \int\limits_{q(0)=q(\beta)} \mathcal{D}q(\tau) e^{-\int\limits_0^{\hbar\beta} d\tau L_E(q(\tau))}.$$

Перехід від осцилятора в операторі еволюції дає матричний елемент

$$\langle q_f | e^{-\beta H} | q_i \rangle = \left[\frac{\det\left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2\right)}{\det\left(-\frac{d^2}{d\tau^2}\right)} \right]^{-1/2} \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\,\mathrm{sh}\,\beta\omega} [(q_f^2 + q_i^2)\,\mathrm{ch}\,\beta\omega - 2q_f q_i] \right], \tag{9.11}$$

де ми використали відомий матричний елемент для оператора еволюції гармонійного осцилятора.

10. Обчислення детермінантов

$$\left[-\frac{d^2}{d\tau^2}+\omega^2\right]\varphi(\tau)=\lambda\varphi(\tau),\quad \varphi(0)=\varphi(\beta)=0.$$

Власні функції

$$\sin\frac{\pi n\tau}{\beta},\quad \lambda_n=\omega^2+\frac{\pi^2 n^2}{\beta^2},\quad n=1,2,\dots$$

$$\zeta(s|\theta)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{\left(\frac{\pi^2n^2}{\beta^2}+\omega^2\right)^s}=\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{2s}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n^2+\nu^2)^s},$$

$\nu=\frac{\beta\omega}{\pi}$. Збіжність потребует $s>1/2$.

$$\frac{1}{a^s}=\frac{1}{\Gamma(s)}\int\limits_0^\infty dt\, t^{s-1}e^{-at},\quad \operatorname{Re}a>0,\operatorname{Re}s>0,$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n^2+\nu^2)^s}=\frac{1}{\Gamma(s)}\int\limits_0^\infty dt\, t^{s-1}e^{-\nu^2 t}\sum_{n=1}^{\infty}e^{-n^2t}.$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}e^{-n^2t}=-\frac12+\frac12\sqrt{\frac{\pi}{t}}+\sqrt{\frac{\pi}{t}}\sum_{n=1}^{\infty}e^{-\frac{\pi^2n^2}{t}}$$

— це формула сумування Пуасона.

$$\theta_3(v|\tau)=1+2\sum_{n=1}^{\infty}q^{n^2}\cos(2\pi n v),\quad q=e^{i\pi\tau},\quad \operatorname{Im}\tau>0,$$

$$v=0,\quad \tau=\frac{it}{\pi},$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}e^{-n^2t}=\frac12\left[\theta_3\left(0\left|\frac{it}{\pi}\right.\right)-1\right],$$

$$\theta_3\left(\frac{v}{\tau}\left|-\frac{1}{\tau}\right.\right)=\sqrt{\frac{\tau}{i}}e^{i\tau v^2/\tau}\theta_3(v|\tau)$$

— перетворення Якобі.

$$\theta_3(0|\tau)=\sqrt{\frac{i}{\tau}}\theta_3\left(0\left|-\frac{1}{\tau}\right.\right),$$

$$\theta_3\left(0\left|\frac{it}{\pi}\right.\right)=\sqrt{\frac{\pi}{t}}\theta_3\left(0\left|-\frac{\pi}{it}\right.\right),$$

Таким чином,

$$\sum_{n=1}^{\infty}e^{-n^2t}=-\frac12+\frac12\sqrt{\frac{\pi}{t}}\theta_3\left(0\left|\frac{i\pi}{t}\right.\right)=-\frac12+\frac12\sqrt{\frac{\pi}{t}}+\sqrt{\frac{\pi}{t}}\sum_{n=1}^{\infty}e^{-\frac{\pi^2n^2}{t}}.$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n^2+\nu^2)^s}=-\frac{1}{2\Gamma(s)}\int\limits_0^{\infty}dt\,t^{s-1}e^{-\nu^2 t}+\frac{\sqrt{\pi}}{2\Gamma(s)}\int\limits_0^{\infty}dt\,t^{s-3/2}e^{-\nu^2 t}+\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(s)}\cdot$$
$$\cdot\sum_{k=1}^{\infty}\int\limits_0^{\infty}dt\,t^{s-3/2}e^{-\nu^2 t-\frac{\pi^2 n^2}{t}}.$$

$$\int\limits_0^{\infty}dx\,x^{\alpha-1}x^{-\gamma x-\frac{\beta}{x}}=2\left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^{\alpha/2}K_\alpha(2\sqrt{\beta\gamma}),\quad \operatorname{Re}\beta,\gamma>0,$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n^2+\nu^2)^s}=-\frac{1}{2\nu^{2s}}+\frac{\sqrt{\pi}\Gamma(s-1/2)}{2\Gamma(s)\nu^{2s-1}}+\frac{2\sqrt{\pi}}{\Gamma(s)}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{\pi n}{\nu}\right)^{s-1/2}K_{s-1/2}(2\pi n\nu).$$

Запишемо

$$\zeta(s|\theta)=-\frac{1}{2}\left(\frac{\beta}{\pi\nu}\right)^{2s}+\frac{F(s)}{\Gamma(s)},$$

$$F(s)=\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{2s}\left\{\frac{\sqrt{\pi}}{2\nu^{2s-1}}\Gamma(s-1/2)+2\sqrt{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{\pi n}{\nu}\right)^{s-1/2}K_{s-1/2}(2\pi n\nu)\right\}.$$

$\zeta(s|\theta)$ — аналітичная функція, яка має полюси в точках $s=\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2},\ -\frac{3}{2},\dots$

Вона аналітична в точці $s=0$, тому

$$\zeta'(s|\theta)|_{s=0}=\ln\frac{\pi\nu}{\beta}+F(0),$$

$$F(0)=\frac{\sqrt{\pi}\Gamma(-1/2)\nu}{2}+2\sqrt{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\sqrt{\frac{\nu}{\pi n}}K_{-1/2}(2\pi n\nu),$$

$$\Gamma(-1/2)=-2\sqrt{\pi},\quad K_{-1/2}(z)=\sqrt{\frac{\pi}{2z}}e^{-z},$$

$$F(0)=-\pi\nu+2\sqrt{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\sqrt{\frac{\nu}{\pi n}}\sqrt{\frac{\pi}{4\pi n\nu}}e^{-2\pi n\nu}=-\pi\nu+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}e^{-2\pi\nu n},$$

$$\begin{aligned}\zeta'(s|\theta)|_{s=0}&=\ln\frac{\pi\nu}{\beta}-\pi\nu-\ln(1-e^{-2\pi\nu})=\\&=\ln\frac{\pi\nu}{\beta}-\ln[2\operatorname{sh}\pi\nu]=\ln\left[\frac{\pi\nu}{2\beta\operatorname{sh}(\pi\nu)}\right]=\ln\left[\frac{\omega}{2\operatorname{sh}(\beta\omega)}\right],\end{aligned}$$

$$\det\theta=\left(\frac{\omega}{2\operatorname{sh}(\beta\omega)}\right)^{-1},\quad \det\theta_0\overset{\omega\to 0}{=}2\beta,$$

$$\langle q_f|e^{-\beta H}|q_i\rangle=\left[\frac{\omega\beta}{\operatorname{sh}\beta\omega}\right]\left(\frac{m}{2\pi\beta}\right)^{1/2}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\operatorname{sh}\beta\omega}[(q_f^2+q_i^2)\operatorname{ch}\beta\omega-2q_fq_i]\right],$$

$$Z = \operatorname{Tr} e^{-\beta H} = \left(\frac{m\omega}{2\pi \operatorname{sh} \beta\omega}\right)^{1/2} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dq \exp\left[-\frac{m\omega q^2}{\operatorname{sh} \beta\omega}(\operatorname{ch} \beta\omega - 1)\right] =$$

$$= \left(\frac{m\omega}{2\pi \operatorname{sh} \beta\omega}\right)^{1/2} \left[\frac{\pi}{m\omega}\frac{\operatorname{sh} \beta\omega}{\operatorname{ch} \beta\omega - 1}\right]^{1/2} = \left(\frac{1}{2 \operatorname{sh} \beta\omega}\frac{\operatorname{sh} \beta\omega}{\operatorname{ch} \beta\omega - 1}\right)^{1/2} = \frac{1}{2 \operatorname{sh} \frac{\beta\omega}{2}}.$$

Статистична сума для осцилятора

$$\operatorname{Tr} e^{-\beta H} = \frac{1}{2 \operatorname{sh} \frac{\beta\omega}{2}}.$$

$$\operatorname{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\omega(n+1/2)} = \frac{1}{2 \operatorname{sh} \frac{\beta\omega}{2}}$$

$\beta \to \infty$ $(T \to 0)$:

$$\langle q_f | e^{-\beta H} | q_i \rangle \sim \varphi_0(q_f)\varphi_0^*(q_i) e^{-\beta E_0} \sim \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\beta\omega/2} \exp\left[-\frac{m\omega(q_f^2 + q_i^2)}{2}\right]$$

$$\Rightarrow \quad E_0 = \frac{\omega}{2}, \qquad \varphi(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{1/2} e^{-m\omega q^2/2}.$$