

FEYNMANOV INTEGRAL PO POTI

MAŠA KOTNIK

Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

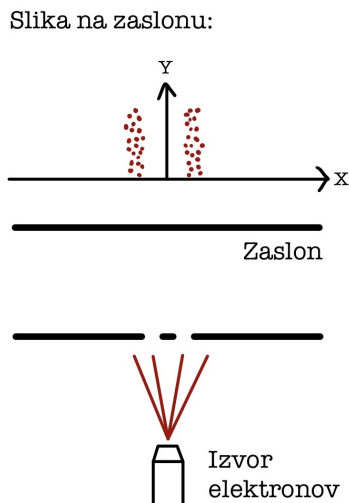
V članku so obravnavani osrednji koncepti Feynmanove formulacije kvantne mehanike, za katere na dodiplomskem študiju fizike občasno zmanjka časa. Izhajajoč iz dobro poznane poskusa z dvojno režo je po zgledu iz klasične mehanike predstavljen Lagrangev formalizem za kvantne sisteme. Na koncu je prikazana ekvivalenca med Feynmanovo in Schrödingerjevo sliko z izpeljavo Schrödingerjeve enačbe iz popotnega integrala.

FEYNMAN PATH INTEGRAL

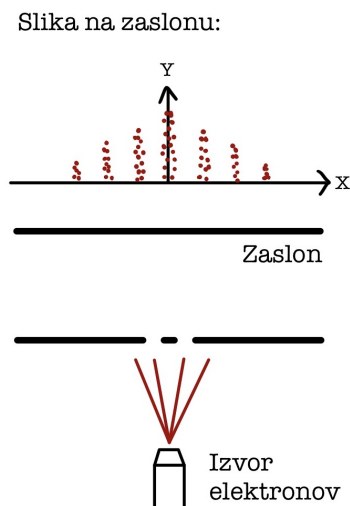
The article delves into the fundamental concepts of Feynman's formulation of quantum mechanics, often neglected due to time constraints in the undergraduate physics course. Beginning with the well-known double-slit experiment and drawing inspiration from classical mechanics, it introduces the Lagrangian formalism for quantum systems. Furthermore, the article demonstrates the equivalence between Feynman and Schrödinger interpretation of quantum mechanics by deriving the Schrödinger equation from the path integral.

1. Uvod

Eden izmed najbolj presenetljivih poskusov moderne fizike, ki je začrtal začetke kvantne mehanike, je poskus z dvojno režo. Ko elektroni in fotoni iz izvora prehajajo skozi reži, pričakujemo, da bomo na zaslonu za režama dobili dva pasova, kot če bi na steno z dvema linama streljali s šibrovko (slika 1). V resnici pa na zaslonu za režama dobimo interferenčni vzorec, kot če bi v ribnik hkrati vrgli dva kamenčka, ki bi ustvarila koncentrične krožne valove. Še bolj presenetljivo je, da takšen vzorec dobimo, tudi če elektrone streljamo posamično in med streli počakamo poljubno dolgo (slika 2).



Slika 1. Pričakovani rezultat poskusa z dvojno režo. Tak vzorec dobimo, če na steno z dvema linama streljamo s šibrovko.



Slika 2. Dejanski rezultat poskusa z dvojno režo. Interferenčni vzorec je enak kot pri valovanju na vodi.

Interferenčni vzorec na zaslonu za režo lahko razložimo le, če vpadne fotone ali elektrone obravnavamo kot valovanje, ki interferira samo s seboj [1], [2]. Gostoto verjetnosti na zaslonu dobimo kot linearno superpozicijo verjetnostnih amplitud za različne poti, po katerih lahko delec pride do

zaslona. Sedaj razmislimo, kaj dobimo, če imamo namesto dveh tri ali štiri reže? Ustrezni interferenčni vzorec bomo dobili, če bomo sešteli amplitude treh ali štirih izvorov valovanja. Če bomo imeli n -rež, bomo torej seštevali n -amplitud. Kaj pa, če je teh rež neskončno? In če za ta zaslon postavimo še en zaslon z neskončno režami? Ali pa kar neskončno zaslonov z neskončno režami?

Takšno vprašanje si je zastavil Richard Feynman v svoji doktorski disertaciji leta 1942 [3]. Za primer zaslona z dvema režama izračunamo verjetnostno amplitudo na mestu detektorja tako, da seštejemo verjetnostni amplitudi za *dve* možni poti (čez eno in drugo režo). Za prazen prostor bi potem lahko verjetnostno amplitudo delca, ki potuje od točke A do točke B, izračunali kot vsoto verjetnostnih amplitud *vseh* možnih poti, po katerih lahko delec to pot opravi. To je glavna ideja za Feynmanovim popotnim integralom, ki je ob svoji uvedbi predstavljal povsem novo formulacijo kvantne mehanike.

2. Prehod iz Hamiltonovega na Lagrangev formalizem

2.1 V klasični mehaniki

V klasični mehaniki je osnovni pristop k fizikalnim problemom reševanje 2. Newtonovega zakona ob začetnih pogojih. Rešitve so časovno odvisne funkcije $(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$, ki predstavljajo trajektorije po faznem prostoru. Obstaja pa tudi alternativni način, in sicer z Lagrangevim formalizmom. Imejmo sistem, ki ga lahko opišemo z n posplošenimi koordinatami. Klasično akcijo definiramo kot:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt,$$

pri čemer je L Lagrangeva funkcija:

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = T(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) - V(\mathbf{q}, t).$$

Pri tem je T kinetična energija sistema in V potencialna energija. V klasični mehaniki so rešitve problema le tiste funkcije $\{\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)\}$, za katere je akcija S minimalna. Za njih veljajo Euler-Lagrangeve enačbe:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad \forall i = 1, \dots, n,$$

ki smo jih izpeljali z variacijo S .

Iz Lagrangevega formalizma pa lahko preidemo na Hamiltonov formalizem tako, da definiramo posplošen impulz $p = dL/d\dot{q}$ in raje kot z Lagrangevo delamo s Hamiltonovo funkcijo:

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = T(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + V(\mathbf{q}, t),$$

ki predstavlja celotno energijo sistema. Ekvivalentne Euler-Lagrangevim enačbam so Hamiltonove enačbe:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (1)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (2)$$

V jeziku Newtonovih enačb gibanja nam enačba (1) pove, da je kinetična energija enaka $W_k = p^2/2m$. Časovni odvod posplošenega impulza v enačbi (2) je ekvivalenten časovnemu odvodu gibalne količine, ki je enak Newtonski sili. Enačba (2) nam torej pove, da je sila enaka negativnemu gradientu potenciala.

2.2 V kvantni mehaniki

V kvantni mehaniki namesto 2. Newtonovega zakona rešujemo Schrödingerjevo enačbo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (3)$$

pri čemer je $\hat{H} = H$ Hamiltonov operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V,$$

ki tako kot v klasični mehaniki predstavlja celotno energijo, z razliko, da v kvantni mehaniki vsem opazljivim fizikalnim količinam ustrezajo hermitski operatorji. Rešitev Schrödingerjeve enačbe je valovna funkcija oz. verjetnostna amplituda $\psi(\mathbf{r}, t)$, katere kvadrat predstavlja verjetnostno gostoto $\rho = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$. Ta nam pove verjetnost, da bomo delec, ki ga opisuje $\psi(\mathbf{r}, t)$, ob nekem trenutku t detektirali na mestu \mathbf{r} . Od tu naprej se omejimo na enodimenzionalno obravnavo prostega delca. Če poznamo valovno funkcijo delca ob nekem času t_a in nas zanima, kakšna je valovna funkcija ob nekem kasnejšem času t_b , jo poiščemo tako, da na ψ delujemo z operatorjem časovnega razvoja:

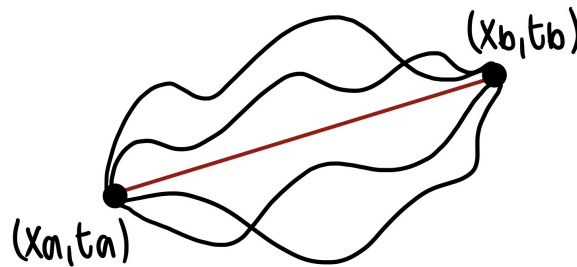
$$\psi(x, t_b) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t_b-t_a)} \psi(x, t_a).$$

Schrödingerjeva slika ustreza Hamiltonovem formalizmu v klasični mehaniki. Po zgledu iz 2.1 mora tudi v kvantni mehaniki obstajati alternativna obravnava z Lagrangevim formalizmom. Omejimo se na obravnavo prostega delca (tj. $V = 0$). Spomnimo, da je rešitev Schrödingerjeve enačbe (3) za $V = 0$ ravni val, ki ga zapišemo kot:

$$\psi(x, t) = C e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}. \quad (4)$$

Imejmo delec, ki s konstantno hitrostjo v prepotuje razdaljo $x = x_b - x_a$ v času $t = t_b - t_a$ (slika 3). Tir gibanja z minimalno akcijo je v tem primeru kar premica $x(t) = x_a + v(t - t_a)$, akcija pa je enaka

$$S = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2} m \dot{x}^2 dt = \frac{1}{2} m \left(\frac{x_b - x_a}{t_b - t_a} \right)^2 (t_b - t_a). \quad (5)$$



Slika 3. Delec lahko med točkama (x_a, t_a) in (x_b, t_b) pride po različnih poteh. Pot, katere klasična akcija je minimalna, je rdeča daljica.

Sedaj si pogledjmo fazo v eksponentu enačbe (4) in izraz malce preuredimo:

$$px - Et = m \left(\frac{x}{t} \right) x - \frac{1}{2} m \left(\frac{x}{t} \right)^2 t = \frac{1}{2} m \left(\frac{x}{t} \right)^2 t.$$

Ko primerjamo dobljeni izraz, vidimo, da je enak akciji v enačbi (5). Enačbo (4) zato lahko prepišemo v

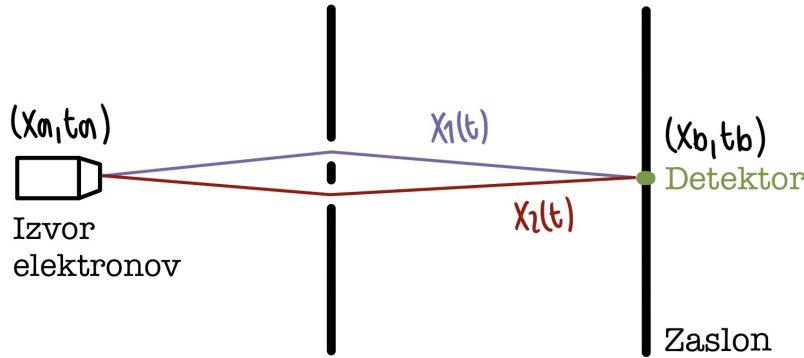
$$\psi(x_b, t_b) = C e^{i \frac{m}{2\hbar} \frac{x^2}{t}} = C e^{i \frac{S[x(t)]}{\hbar}}, \quad (6)$$

pri čemer je $x(t)$ rdeča daljica s slike 3, ki se začne v točki (x_a, t_a) in konča v točki (x_b, t_b) . Vidimo, da smo uspeli povezati kvantni zapis stanja za prost delec z akcijo, ki je povsem klasična količina. Naj opozorimo, da je zveza med valovno funkcijo $\psi(x_b, t_b)$ in akcijo v splošnem bolj zapletena, kot v izrazu (6) za prost delec.

3. Seštevanje po poteh

Sedaj se zopet spomnimo poskusa z dvema režama (slika 4). Verjetnostna amplituda na mestu detektorja je enaka linearni superpoziciji verjetnostnih amplitud za pot skozi prvo ali drugo režo. Uporabimo lahko zapis iz enačbe (6), torej je skupna verjetnostna amplituda enaka

$$\psi(x_b, t_b) = \psi_1 + \psi_2 = C e^{i \frac{S[x_1(t)]}{\hbar}} + C e^{i \frac{S[x_2(t)]}{\hbar}}, \quad (7)$$

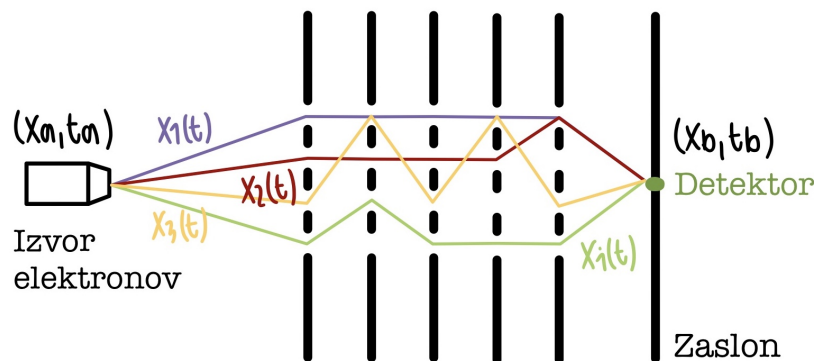


Slika 4. Delec od izvora na mestu (x_a, t_a) do detektorja na mestu (x_b, t_b) pride po poti $x_1(t)$ skozi prvo režo ali po poti $x_2(t)$ skozi drugo režo. Valovna funkcija na mestu detektorja bo enaka linearni superpoziciji valovnih funkcij ψ_1 in ψ_2 za prvo in za drugo pot.

pri čemer sta $x_1(t)$ in $x_2(t)$ poti skozi prvo in drugo režo, kot na sliki 4. To smemo narediti, saj so delci prosti, pot med izvorom in detektorjem pa je odsekoma ravna. Če bi želeli biti bolj natančni, bi ψ_1 in ψ_2 lahko najprej zapisali kot vsoto dveh prispevkov ravnih poti, enega od izvora do reže in drugega od reže do detektorja.

Obravnavajmo vedno več zaslonov z vedno več režami (slika 5). Vsaka možna kombinacija rež, skozi katere bo lahko delec prišel od izvora k detektorju, bo prispevala k izrazu za skupno verjetnostno amplitudo dodaten člen oblike $C \exp(iS[x_i(t)]/\hbar)$. Pri tem je $x_i(t)$ pot skozi i -to možno kombinacijo rež. Pri m -zaslonih z n -režami dobimo v enačbi (7) $N = n^m$ členov. V limiti $n, m \rightarrow \infty$ dobimo prazen prostor. Lahko si zamislimo, da seštevamo prispevke vseh možnih poti $x(t)$, ki vodijo od x_a do x_b v času $t = t_b - t_a$:

$$\psi(x_b, t_b) = C \sum_{i=1}^N \psi[x_i(t)] \xrightarrow{n, m \rightarrow \infty} C \sum_{\text{vse poti}} e^{i \frac{S[x(t)]}{\hbar}}. \quad (8)$$

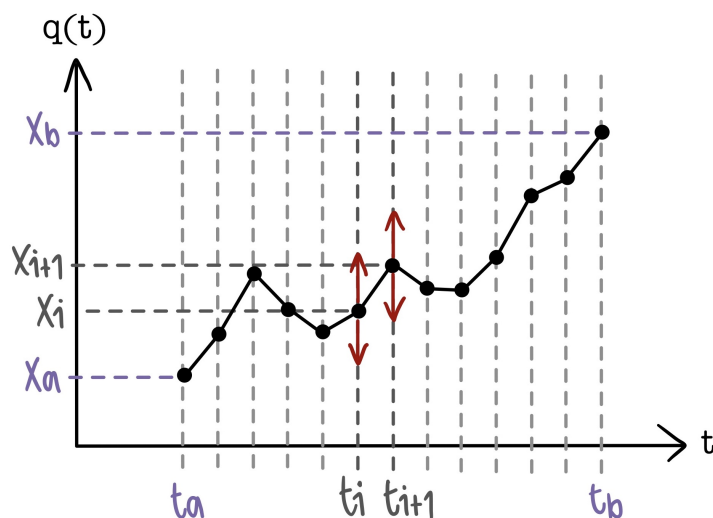


Slika 5. Ko med izvor in detektor postavljamo vedno več zaslonov z vedno več režami, dobimo veliko možnih poti, po katerih lahko delec pride od točke (x_a, t_a) do (x_b, t_b) . Pot $x_i(t)$ predstavlja i -to možno kombinacijo rež. Valovna funkcija na mestu detektorja bo enaka linearni superpoziciji valovnih funkcij za vse možne kombinacije rež.

3.1 Matematični problem izvrednotenja vsote

V enačbi (8) smo prišli do matematične vsote, katere izvrednotenje ni trivialno. Seštevamo namreč funkcionalne vseh možnih poti, po katerih delec lahko potuje od točke x_a do x_b . Spomnimo se, da funkcionali slikajo iz množice funkcij v množico realnih števil oz. z drugimi besedami so to preslikave, ki vsaki funkciji iz dane množice priredijo število. Slutimo, da se nam bo vsota funkcionalov prevedla na integral, zato poskusimo to še matematično utemeljiti.

Imejmo časovni interval $[t_a, t_b]$ ter takšno pot $q(t)$, da je $q(t_a) = x_a$ in $q(t_b) = x_b$. Imejmo tudi splošen funkcional $F(q) : \mathbb{R}^{\mathbb{R}} \rightarrow \mathbb{R}$. Postopali bomo v n -korakih, kjer bomo v vsakem koraku časovni interval $[t_a, t_b]$ razdelili na n -enakih delov. S tem dobimo množico delilnih točk $\{t_i\}$, pri čemer velja še, da je $t_0 = t_a$ in $t_n = t_b$. V vsakem koraku imamo definirano tudi množico točk $\{x_i\}$, ki jih dobimo kot $x_i = q(t_i)$. Sedaj naredimo n -ti približek naše poti, tako da $q(t)$ za čase različne od t_i definiramo kot enakomerno gibanje med dvema zaporednima točkama x_i in x_{i+1} . To pomeni, da je hitrost med časoma t_i in t_{i+1} konstantna oz. da je pot sestavljena iz n -premic, kot je prikazano na sliki 6.



Slika 6. Pot $q(t)$ v n -tem koraku opredelimo tako, da časovni interval $[t_a, t_b]$ razdelimo na n -enakih delov ter točke x_i določimo z izvrednotenjem $q(t)$ v delilnih točkah intervala t_i , med njimi pa naredimo linearni približek poti.

V n -tem koraku bomo torej vsoto za neko specifično pot izračunali tako, da bomo sešteli prispevke funkcionala, izvrednotenega v vseh vrednostih x_i za $i = 1, 2, \dots, n-1$. Da bomo dobili vse poti, si predstavljajmo, da je na vsaki izmed točk x_i drsnik, s katerim lahko vsako izmed točk pomikamo vzdolž osi x (rdeče puščice na sliki 6). Vse možne poti bomo torej dobili, če bomo za *vsako* izmed točk x_i upoštevali *vse možne* vrednosti, ki jih lahko zavzame. Od tod sledi, da bomo vsoto za vsak x_i izračunali z integralom po x_i . Pravi rezultat bomo dobili v limiti $n \rightarrow \infty$ in tako lahko definiramo integral po poti kot:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} F(q) \frac{dx_1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_2}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \frac{dx_{n-1}}{A} =: \int_{a'}^{b'} F(q) \mathcal{D}q. \quad (9)$$

Pri tem sta točki $a' = (x_a, t_a)$ in $b' = (x_b, t_b)$, A pa je normalizacijska konstanta, ki zagotavlja, da limita na levi strani enačaja obstaja.

3.2 Propagator

Preden zapišemo Feynmanov popotni integral v končni obliki, izpeljimo še nekaj zvez kvantne mehanike. Definirajmo *propagator* kvantnega stanja kot

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b | \hat{U}(t_b, t_a) | x_a \rangle,$$

pri čemer je $\hat{U}(t_b, t_a)$ operator časovnega razvoja valovne funkcije med časoma t_a in t_b :

$$\hat{U}(t_b, t_a) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t_b-t_a)} = e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar}(t_b-t_a)}.$$

Zadnja enakost velja za prost delec. Da bomo dobili koordinatno reprezentacijo, si pomagajmo z vstavitvijo kompletnega sistema lastnih stanj gibalne količine:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar}(t_b-t_a)} | x_a \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| \langle x_b | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar}(t_b-t_a)} | x_a \rangle.$$

To smemo narediti, saj vemo, da velja

$$I = \int dp |p\rangle \langle p|.$$

Nadaljujemo z izpeljavo:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| \langle x_b | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar}(t_b-t_a)} | x_a \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x_b | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar}(t_b-t_a)} | p \rangle \langle p | x_a \rangle dp = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{p^2}{2m\hbar}(t_b-t_a)} \langle x_b | p \rangle \langle p | x_a \rangle dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{p^2}{2m\hbar}(t_b-t_a)} e^{i\frac{p}{\hbar}(x_b-x_a)} dp = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ap^2+bp} dp. \end{aligned}$$

V zadnjem koraku smo uvedli $a = i(t_b - t_a)/2m\hbar$ in $b = i(x_b - x_a)/\hbar$. Integralu takšne oblike pravimo Gaussov integral, zanj pa velja

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

zato propagator za *prost delec* v koordinatni reprezentaciji napišemo kot:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b - t_a)}} \exp \left[i \frac{m(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)} \right]. \quad (10)$$

Pri izpeljavi smo upoštevali, da je $|p\rangle$ lastno stanje operatorja gibalne količine, zato je

$$e^{-i\frac{p^2}{2m\hbar}(t_b - t_a)} |p\rangle = e^{-i\frac{p^2}{2m\hbar}(t_b - t_a)} |p\rangle,$$

hkrati pa je $\langle x|p\rangle = \langle p|x\rangle^\dagger$ to lastno stanje zapisano v reprezentaciji x , torej ravni val:

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}.$$

3.3 Feynmanov popotni integral

Sedaj lahko, s pomočjo vseh pomožnih izpeljav, definicij in matematičnih zvez, končno v celoti zapišemo popotni integral za primer prostega delca. Popotni integral smo v enačbi (9) zapisali za splošen funkcional. Če vanjo vstavimo naš specifičen funkcional iz enačbe (6), dobimo:

$$\int_{a'}^{b'} e^{i\frac{S[x(t)]}{\hbar}} \mathcal{D}x = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{S[x(t)]}{\hbar}} \frac{dx_1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_2}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \frac{dx_{n-1}}{A}.$$

Da vidimo, k čemu ta izraz konvergira v limiti $n \rightarrow \infty$, razbijemo integrand na produkt

$$e^{i\frac{S[x(t)]}{\hbar}} = \prod_{i=1}^{n-1} e^{i\frac{m}{2\hbar} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{t_{i+1} - t_i}},$$

ter vsak faktor nesemo pod svoj integral:

$$\int_{a'}^{b'} e^{i\frac{S[x(t)]}{\hbar}} \mathcal{D}x = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{m}{2\hbar} \frac{(x_2 - x_1)^2}{t_2 - t_1}} \frac{dx_1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{m}{2\hbar} \frac{(x_3 - x_2)^2}{t_3 - t_2}} \frac{dx_2}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \dots e^{i\frac{m}{2\hbar} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{t_n - t_{n-1}}} \frac{dx_{n-1}}{A}. \quad (11)$$

Pri vsakem od integrandov v izrazu (11) za A izberimo $\sqrt{2\pi i\hbar(t_i - t_{i-1})/m}$. Tedaj v integrandih prepoznamo propagator iz enačbe (10) med časoma t_{i-1} in t_i . V primeru prostega delca namreč v izrazu za propagator, do katerega smo prišli s pomočjo Schrödingerjeve slike, nastopa ravno izraz za minimalno akcijo. Ker za propagatorje velja [4]

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x_b, t_b; x_c, t_c) G(x_c, t_c; x_a, t_a) dx_c; \quad t_a < t_c < t_b,$$

enačba (11) v limiti $n \rightarrow \infty$ konvergira k propagatorju med točkama (x_a, t_a) in (x_b, t_b) . Celotni Feynmanov popotni integral lahko torej zapišemo kot:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{a'}^{b'} e^{i\frac{S[x(t)]}{\hbar}} \mathcal{D}x. \quad (12)$$

Izkaže se, da izraz (12) velja v splošnem, tudi ko imamo neničeln potencial. Propagator je tedaj različen od izraza (10) za prost delec, ki predstavlja poseben primer, saj v njem nastopa le akcija klasične poti.

4. Greenove funkcije

Izkaže se, da je desna stran v enačbi (10) enaka Greenovi funkciji Hamiltonovega operatorja za prost delec. Ker Greenove funkcije igrajo pomembno vlogo v kvantni mehaniki in tudi na drugih področjih fizike, se je na tej točki vredno za trenutek ustaviti in o njih povedati nekaj več [5].

Naj bo $\mathcal{L} = \mathcal{L}(x)$ linearen diferencialen operator, ki deluje na naboru porazdelitev na podmnožici $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Greenova funkcija $G = G(x, x_0)$ operatorja $\mathcal{L}(x)$, kjer je $x_0 \in \Omega$, je katerakoli rešitev enačbe

$$\mathcal{L}G(x, x_0) = \delta(x - x_0).$$

V splošnem je Greenova funkcija integralsko jedro, s katerim lahko rešujemo diferencialne enačbe iz velikega nabora družin, med drugim navadne diferencialne enačbe z začetnimi ali robnimi pogoji ter homogene parcialne diferencialne enačbe, kakršna je Schrödingerjeva. Če namreč za nek linearen diferencialen operator \mathcal{L} že poznamo rešitev $G(x, x_0)$ enačbe za delta funkcijo, tedaj tudi za poljubno funkcijo $f(x)$

$$\mathcal{L}u(x) = f(x)$$

poznamo rešitev $u(x)$, ki je podana kot

$$u(x) = \int G(x, x')f(x')dx'.$$

To pomeni, da če poznamo valovno funkcijo na neki točki x_a ob času t_a , lahko do funkcije ob nekem kasnejšem času t_b na mestu x_b pridemo, če izvednotimo

$$\psi(x_b, t_b) = \int G(x_b, t_b; x_a, t_a)\psi(x_a, t_a)dx_a. \quad (13)$$

Pri tem je $G(x_b, t_b; x_a, t_a)$ Greenova funkcija Hamiltonovega operatorja za prost delec. Od tod tudi vidimo, kako sta povezana propagator kvantnega stanja ter valovna funkcija delca. Če je valovna funkcija delca v začetni točki enaka delta funkciji $\psi(x_a, t_a) = \delta(x - x_a)$, potem je valovna funkcija delca v končni točki kar enaka propagatorju med začetno in končno točko $\psi(x_b, t_b) = G(x_b, t_b; x_a, t_a)$.

5. Ekvivalenca med formulacijami

Da je Feynmanova formulacija zares ekvivalentna Schrödingerjevi sliki, je najlažje razvidno, če s pomočjo popotnih integralov izpeljemo Schrödingerjevo enačbo. Pri izpeljavi sledimo [6]. Zanimalo nas bo, kako se spremeni valovna funkcija delca (izraz (13)) za infinitezimalno kratke čase. Začnemo z enačbo (12) in jo uporabimo za primer, ko se t_b zelo malo razlikuje od t_a , torej ko propagiramo delec med časoma (x', t) in $(x, t + \varepsilon)$ za infinitezimalno majhen ε . Propagator je v tem primeru enak:

$$G(x, t + \varepsilon; x', t) = \int_{x'}^x \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\varepsilon} L(x(t'), \dot{x}(t'), t') dt' \right] \mathcal{D}x(t). \quad (14)$$

Ker integriramo po infinitezimalno kratkem časovnem intervalu, lahko naredimo približek, da je L na tem intervalu konstanten in je posledično

$$\int_t^{t+\varepsilon} L dt' \approx \varepsilon L.$$

Enačbo (14) lahko prepišemo v

$$G(x, t + \varepsilon; x', t) = \int_{x'}^x \exp \left[\frac{i}{\hbar} \varepsilon L \right] \mathcal{D}x(t) = \int_{x'}^x \exp \left[\frac{i}{\hbar} \varepsilon \left(\frac{m}{2} \frac{(x - x')^2}{\varepsilon^2} - V \left(\frac{x + x'}{2}, t \right) \right) \right] \mathcal{D}x(t).$$

Ker je ε infinitezimalno majhen, bo eksponent divje osciliral za x' , ki bodo zelo različni od x . Ti prispevki se bodo med sabo izpovprečili in prispevek k integralu bomo dobili le za majhne $\eta = x' - x$. Tedaj integracija po vseh poteh $\mathcal{D}x(t)$ sploh ni potrebna:

$$\begin{aligned} G(x, t + \varepsilon; x', t) &= \int_{x'}^x \exp \left[\frac{i}{\hbar} \varepsilon \left(\frac{m}{2} \frac{(-\eta)^2}{\varepsilon} - \varepsilon V \left(x + \frac{\eta}{2}, t \right) \right) \right] \mathcal{D}x(t) \approx \\ &\approx \frac{1}{A} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \varepsilon \left(\frac{m}{2} \frac{\eta^2}{\varepsilon} - \varepsilon V \left(x + \frac{\eta}{2}, t \right) \right) \right]. \end{aligned}$$

Z znanim propagatorjem lahko določimo $\psi(x, t + \varepsilon)$ z uporabo konvolucije (13):

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \varepsilon \left(\frac{m}{2} \frac{\eta^2}{\varepsilon} - \varepsilon V \left(x + \frac{\eta}{2}, t \right) \right) \right] \psi(x + \eta, t) d\eta. \quad (15)$$

Ker je ε majhen, lahko vse funkcije v enačbi (15) razvijemo do prvega reda v ε oz. do drugega reda v η :

$$\begin{aligned} \psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} + \dots &= \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[i \frac{m\eta^2}{2\hbar\varepsilon} \right] \cdot \left[1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(x, t) + \dots \right] \cdot \\ &\cdot \left[\psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \dots \right] d\eta. \end{aligned} \quad (16)$$

Če na desni strani enačbe (16) vzamemo vodilni člen, dobimo funkcijo $\psi(x, t)$, ki je neodvisna od η , pomnoženo z integralom

$$\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[i \frac{m\eta^2}{2\hbar\varepsilon} \right] d\eta = \frac{1}{A} \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m} \right)^{1/2}.$$

Da bo veljala enakost v limiti $\varepsilon \rightarrow 0$, mora torej veljati

$$A = \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m} \right)^{1/2},$$

kar je ravno konstanta, ki smo jo privzeli v enačbi (11) za prost delec, zdaj pa vidimo, da je enaka tudi za primer s poljubnim potencialom. Da bomo lahko izvrednotili vse člene na desni strani enačbe (16), si moramo pomagati z integraloma

$$\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \eta \cdot \exp \left[i \frac{m\eta^2}{2\hbar\varepsilon} \right] d\eta = 0 \quad \text{in} \quad \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \eta^2 \cdot \exp \left[i \frac{m\eta^2}{2\hbar\varepsilon} \right] d\eta = \frac{i\hbar\varepsilon}{m},$$

in dobimo

$$\psi + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V \psi + \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \underbrace{\frac{\varepsilon^2}{2m} V \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}}. \quad (17)$$

Lahko zanemarimo zaradi ε^2

V redu $\mathcal{O}(\varepsilon)$ bo enakost v (17) veljala, če bo funkcija $\psi(x, t)$ rešitev diferencialne enačbe

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

ki ustreza Schrödingerjevi enačbi (3). Iz konvolucije valovne funkcije v Feynmanovi sliki smo preko Taylorjevega razvoja torej prišli do Schrödingerjeve enačbe, s čimer smo pokazali, da sta si Feynmanova in Schrödingerjeva formulacija kvantne mehanike ekvivalentni.

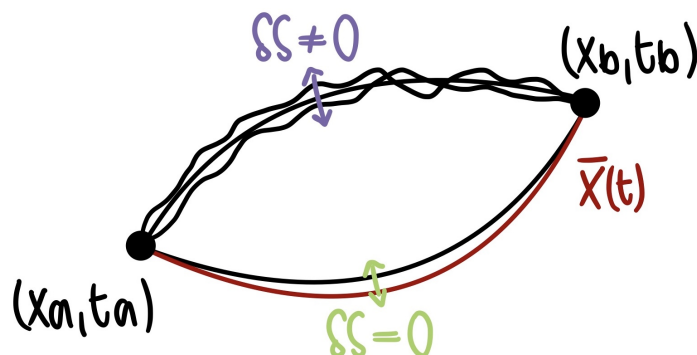
6. Klasična limita

Že iz Schrödingerjeve slike vemo, da moramo v makroskopski limiti (tj. limita velikih mas, dimenzij, časov ipd.) priti do klasičnih izrazov. Če v enačbo (13) na mesto propagatorja vstavimo definicijo Feynmanovega popotnega integrala iz enačbe (12), dobimo sledeč izraz za valovno funkcijo v končni točki:

$$\psi(x_b, t_b) = \int \left(\int_{a'}^{b'} e^{i \frac{S[x(t)]}{\hbar}} \mathcal{D}x \right) \psi(x_a, t_a) dx_a. \quad (18)$$

Iz tega izraza ni povsem razvidno, zakaj v klasični limiti določena pot postane bolj pomembna od ostalih, zato to bolj podrobno utemeljimo.

V našem primeru se makroskopska limita nanaša na primer, ko je akcija mnogo večja od reducirane Planckove konstante, ki je enaka $\hbar \approx 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ m}^2\text{kg/s}$, torej ko je $S \gg \hbar$. V tem primeru je faza v eksponentu v enačbi (18) zelo velika. Neko pot $x(t)$ spremenimo za nek majhen $\delta x(t)$ na klasični skali, kot je prikazano na sliki 7. V tem primeru se tudi akcija spremeni za nek majhen δS , ki je majhen v klasični skali, ne pa tudi, ko ga merimo v enotah \hbar . Že zelo majhne spremembe δS bodo namreč pomenile ogromno spremembo v fazi, kar pomeni, da bo eksponent v enačbi (18) divje osciliral. Infinitezimalno blizu poti $x(t)$ torej leži neka druga pot, ki bo imela glede na $x(t)$ negativno fazo, zato se bodo vsi prispevki med sabo izpovprečili [6].



Slika 7. V makroskopski limiti se bližnje poti med sabo izpovprečijo, razen če so v bližini rdeče poti $\bar{x}(t)$, ki predstavlja klasično trajektorijo delca.

Edina izjema je pot $\bar{x}(t)$, ki predstavlja klasično trajektorijo delca in v kateri ima funkcija akcije S svoj minimum. Bližnje poti vsaj v prvem redu ne bodo pomenile spremembe v akciji, kar pomeni, da bodo poti blizu klasične trajektorije imele podobno fazo in bodo edine prispevale k integralu v (18). Z drugimi besedami bodo k izrazu za valovno funkcijo v končni točki prispevale vse poti, katerih akcija je reda velikosti \hbar .

7. Uporaba Feynmanovega integrala

V prejšnjem poglavju smo spoznali, da sta si Feynmanova in Schrödingerjeva formulacija kvantne mehanike ekvivalentni. Vsakemu študentu dodiplomskega študija pa je že iz razmeroma neformalne

izpeljave, ki smo jo naredili, jasno razvidno, da je Feynmanova slika matematično občutno zahtevnejša. Povsem opravičljivo je vprašanje, čemu bi se torej trudili z zahtevnimi izračuni funkcionalne integracije, če imamo na voljo mnogo preprostejši standardni postopek s kvantnimi operatorji, ki so nam že dodobra poznani?

Prvi razlog je, da Feynmanova formulacija za razliko od Schrödingerjeve prostor in čas obravnava simetrično in je zato združljiva s posebno in splošno teorijo relativnosti. Schrödingerjevo formulacijo je moral z relativističnimi popravki leta 1928 dopolniti Paul Dirac, v nasprotju pa popotni integral ponuja naravno razširitev, kar je v svojem članku komentiral Feynman [7]:

By forsaking the Hamiltonian method, the wedding of relativity and quantum mechanics can be accomplished most naturally.

Popotni integrali pa so nepogrešljivi v kvantni teoriji polja, kjer ponujajo razmeroma enostavno pot do kvantizacije in izrazov za Greenove funkcije, ki so tesno povezane z amplitudami za sipanje ali razpad delcev [8]. Poenostavljena razlaga je sledeča: tako kot obravnavamo vse možne poti, po katerih lahko delec pride od točke A do točke B, lahko obravnavamo vse možne dogodke, ki se delcu lahko pripetijo med opazovanim začetnim in končnim stanjem. Od "preprostega" izsevanja in ponovne absorpcije fotona, do zahtevnejših procesov - upoštevati moramo vse možnosti. Namesto da seštevamo vse možne poti, v kvantni teoriji polja seštevamo vse možne zgodovine oz. oblike kvantnih polj.

Za konec omenimo še uporabo Feynmanovega formalizma v statistični fiziki. S statistično fiziko ga povežemo preko Wickove rotacije [9], ki realne čase t spremeni v imaginarne $-it$ in operator časovnega razvoja iz $\exp[-it\hat{H}/\hbar]$ v $\exp[-t\hat{H}/\hbar]$. Propagator je v tem primeru enak [10]:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{a'}^{b'} e^{-\frac{S_E[x(t)]}{\hbar}} \mathcal{D}x, \quad (19)$$

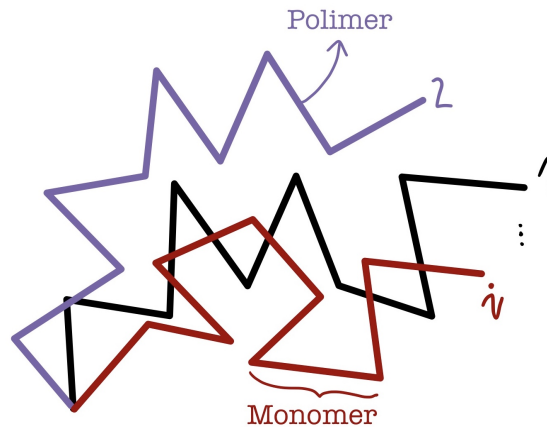
pri čemer je S_E Evklidska akcija, podana z

$$S_E(x(t), \dot{x}(t)) = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2} [\dot{x}(t)]^2 + V(x(t)) \right) dt$$

in se od klasične akcije razlikuje le v predznaku pred potencialom $V(x)$. Če obravnavamo le poti, ki se začnejo in končajo v isti točki oz. konfiguraciji, popotni integral v enačbi (19) spominja na particijsko funkcijo za kanonični ansambel, kjer je inverz temperature proporcionalen imaginarnemu času $1/k_B T = it/\hbar$. Kanonična particijska funkcija (oz. fazna vsota) je namreč definirana kot:

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i},$$

pri čemer je i indeks mikrostanja v sistemu, $\beta = 1/k_B T$ in E_i skupna energija sistema v posameznem mikrostanju. Specifičen primer uporabe popotnega integrala v statistični fiziki so na primer polimeri. To so makromolekule, sestavljene iz več enakih ali podobnih podenot, imenovanih monomeri [11]. Popotni integral v študiju polimerov predstavlja matematično orodje, ki opiše in statistično obteži vse možne konfiguracije polimera v prostoru v danem potencialu in temperaturnih pogojih. "Poti" po katerih seštevamo so v tem primeru torej oblike polimerov (slika 8).



Slika 8. Polimer je makromolekula, sestavljena iz manjših molekul (monomerov). S Feynmanovim popotnim integralom seštevamo vse možne konfiguracije polimerov.

8. Zaključek

Spoznali smo, da Feynmanov popotni integral izrazi verjetnostno amplitudo za prehod med začetno in končno točko z vsoto po vseh možnih poteh med tema dvema točkama. V Schrödingerjevi formulaciji kvantne mehanike smo valovno funkcijo v končni točki dobili z delovanjem operatorja časovnega razvoja na valovno funkcijo v začetni točki, v Feynmanovi formulaciji pa enak rezultat dobimo s konvolucijo začetne valovne funkcije in propagatorja. Spoznali smo tudi, da Feynmanovi popotni integrali predstavljajo pomembno orodje na mnogo področjih sodobne teoretične fizike. Čeprav njihova uporaba zahteva malce več matematičnih veščin, je glavna ideja za njimi preprosta in izpeljava za enodimenzionalno obravnavo prostega delca ne presega znanja študentov dodiplomskega študija fizike. Do funkcionalnega integrala smo po zgledu Riemannovih delnih vsot prišli v nekaj neformalnih korakih, pri čemer je bil poudarek na intuitivni predstavi. Pokazali smo tudi, da sta si Schrödingerjeva in Feynmanova formulacija kvantne mehanike ekvivalentni, tako da smo s propagatorjem za infinitezimalno majhne čase prišli do Schrödingerjeve enačbe. Pri tem smo ugotovili, da se veliki krajevni odmiki med sabo izpovprečijo in da k popotnemu integralu največ prispevajo poti, ki so podobne klasični rešitvi, katere akcija je minimalna.

Prav slednje pa je ena izmed glavnih odlik Feynmanove formulacije, saj nam ponuja intuitivno povezavo med kvantnim in klasičnim svetom. Še zadnjič spomnimo na poskus z dvema režama, ki mnogim predstavlja prvi korak v svet moderne fizike. Interpretacija interferenčnega vzorca in ostalih kvantnomehanskih pojavov je že od samega začetka burila duhove med največjimi fiziki prve polovice 20. stoletja. Kvantni operatorji in Schrödingerjeva enačba so matematično utemeljili rezultate eksperimentov, niso pa nudili razlage, ki bi te rezultate intuitivno razložila, tako da se je še sam Schrödinger opravičil za svoje delo [12]:

I don't like it, and I'm sorry I ever had anything to do with it.

Integral po poti pa je nekaj, kar si lahko predstavljamo in kar nam omogoča vpogled v dogajanje med izstopom elektrona iz izvora in njegovo detekcijo. Oporo nam nudi v glavnih principih klasične mehanike, ki veljajo tudi v kvantnem svetu. Čeprav kvantne mehanike najbrž ne bomo nikoli zares v celoti intuitivno razumeli, smo s Feynmanovo formulacijo dobili novo orodje za reševanje problemov moderne fizike, s katerim je naše razumevanje strukture subatomskega sveta in pojavov v njem vsaj za odtenek jasnejše.

LITERATURA

- [1] R. L. Pfleeger and L. Mandel, *Interference of independent photon beams*, Phys. Rev. **159** (1967), 1084–1088.
- [2] Sandra Eibenberger, Stefan Gerlich, Markus Arndt, Marcel Mayor, and Jens Tüxen, *Matter-wave interference of particles selected from a molecular library with masses exceeding 10 000 amu*, Phys. Chem. Chem. Phys. **15** (2013), 14696–14700.
- [3] R.P. Feynman, *Principles of least action in quantum mechanics*, Doktorska disertacija, Princeton, 1942.
- [4] Anton Ramšak, *Kvantna mehanika*, Založba Univerze v Ljubljani, 2021.
- [5] K.F. Riley, M.P. Hobson, and S.J. Bence, *Mathematical methods for physics and engineering: A comprehensive guide*, Cambridge University Press, 2006.
- [6] R.P Feynman and A.R. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals*, McGraw - Hill, 1965.
- [7] R. P. Feynman, *Space-time approach to quantum electrodynamics*, Phys. Rev. **76** (1949), 769–789.
- [8] Richard MacKenzie, *Path integral methods and applications*, 2000.
- [9] *Wick rotation*, *Wikipedia, the free encyclopedia*, [Dostopano dne 28. 2. 2023], url: https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Wick_rotation&oldid=1100690893.
- [10] *Path integral formulation*, *Wikipedia, the free encyclopedia*, [Datum ogleda 28. 2. 2023], url: https://en.wikipedia.org/wiki/Path_integral_formulation.
- [11] *Path integrals in polymer science*, *Wikipedia, the free encyclopedia*, [Datum ogleda 28. 2. 2023], url: https://en.wikipedia.org/wiki/Path_integrals_in_polymer_science.
- [12] J. Gribbin, *In search of schrödinger's cat: Quantum physics and reality*, Bantam Books, 1984.