

FEYNMANOV PRISTOP H KVANTNI MEHANIKI

ANŽE KREJAN

Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

Feynmanova formulacija kvantne mehanike s popotnim integralom je modrejši pristop h kvantni mehaniki. Ta posploši koncept klasične akcije na vsoto po vseh možnih poteh, s katero lahko izračunamo kvantne verjetnostne amplitude. Najprej bo predstavljena izpeljava popotnega integrala ter postopek uporabe na primeru harmonskega potenciala. Temu sledi komentar o tem, kako se lahko uporabi popotni integral za formulacijo kvazi-klasičnih limit kvantnih problemov. Na koncu bo prikazana še ekvivalentnost tega formalizma s Schrödingerjevo sliko preko izpeljave Schrödingerjeve enačbe iz Feynmanovega formalizma.

FEYNMAN'S APPROACH TO QUANTUM MECHANICS

Feynman's path integral formulation of quantum mechanics is a wiser approach to quantum mechanics. It generalizes the concept of classical action to a sum over all possible paths, which can be used to calculate quantum probability amplitudes. First, the derivation of the path integral and its application to the harmonic potential will be presented. This will be followed by a discussion on how the path integral can be used to formulate quasi-classical limits of quantum problems. Finally, the equivalence of this formalism with the Schrödinger's picture will be demonstrated through the derivation of the Schrödinger equation from Feynman's formalism.

1. Uvod

1.1 Klasični sistemi

V fiziki opisujemo klasične sisteme predvsem z Newtonovo, Hamiltonovo in Lagrangeovo mehaniko. V Newtonovi mehaniki nam drugi zakon

$$\mathbf{F} = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2}$$

služi kot diferencialna enačba, iz katere skupaj z začetnimi pogoji izračunamo tire delcev $\mathbf{r}(t)$. V Hamiltonovi mehaniki iz posplošenih koordinat q_i in momentov p_i zapišemo Hamiltonovo funkcijo

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

kjer sta $T(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ kinetična in $V(\mathbf{q}, t)$ potencialna energija. Iz formalizma sledita diferencialni enačbi

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

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

Če interpretiramo enačbi z Newtonovo mehaniko, ugotovimo, da nam enačba (1) pove, da je $T = \frac{p^2}{2m}$, (2) sila pa je enaka negativnemu gradientu potenciala.

V Lagrangeovi mehaniki delamo z Lagrangeovo funkcijo

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

in principom minimalne akcije, ki pravi, da bo sistem vedno sledil taki poti, da bo funkcional

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

vedno zasedel minimalno vrednost. Iz tega sledi Euler-Lagrangeova enačba

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0.$$

1.2 Kvantni sistemi

V kvantni mehaniki sistemov zaradi Heisenbergovega načela nedoločenosti ne moremo več opisovati s klasičnimi tiri, zato uporabimo valovne funkcije $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Valovne funkcije dobimo z reševanjem Schrödingerjeve enačbe

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Fizikalne količine opisujemo s hermitskimi operatorji, $\rho = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ pa nam pove verjetnost, da najdemo delec na neki lokaciji oziroma sistem v nekem stanju. Če obravnavamo prosti delec ($V(\mathbf{r}, t) = 0$) in se omejimo na eno dimenzijo, dobimo za rešitev ravni val

$$\Psi(x, t) = C e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)},$$

kjer je p gibalna količina in E energija. Zamislimo si, da naš delec v času t prepotuje razdaljo x . Tedaj njegova kompleksna faza znaša

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

Če izračunamo funkcional akcije na enaki poti

$$S = \int_0^t \frac{p^2}{2m} dt' = \frac{mx^2}{2t}$$

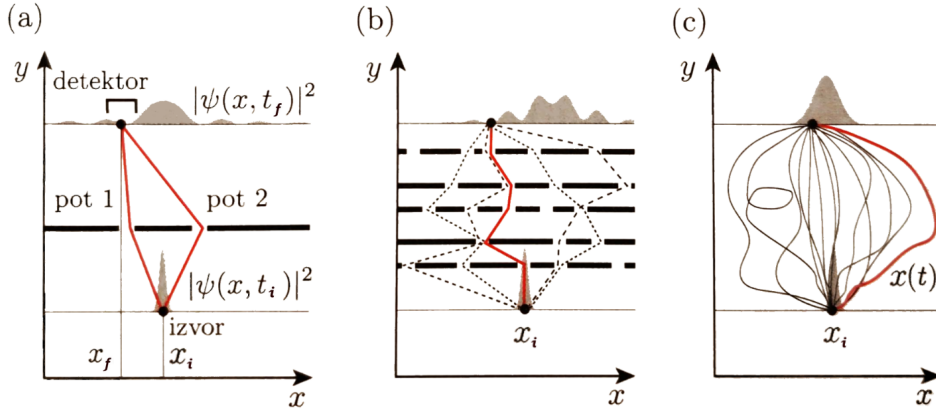
in rezultata primerjamo, ugotovimo, da se ujemata. Za prosti delec lahko torej zapišemo

$$\Psi(x, t) = C e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}.$$

Poglejmo zdaj poskus z dvojno režo na sliki 1 (a). Valovna funkcija na detektorju je enaka linearni kombinaciji prispevkov možnih poti skozi vsako režo posebej

$$\Psi(x, t_f) = C \left(e^{\frac{i}{\hbar} S[x_1(t)]} + e^{\frac{i}{\hbar} S[x_2(t)]} \right),$$

kjer sta $x_1(t)$ in $x_2(t)$ poti 1 in 2. Če med izvor in detektor postavimo več pregrad z režami, kot je prikazano na sliki 1 (b), moramo pri izračunu valovne funkcije upoštevati prispevke novih možnih poti. Nato med izvor in detektor postavljamo še več pregrad in vanje vrtamo še več rež, dokler na neki točki s pregradami ne zapolnimo celotnega prostora, hkrati pa vanje izvrtamo toliko rež, da te povsem izginejo in ostane le prazen prostor z neskončnim številom poti, ki jih moramo upoštevati pri izračunu valovne funkcije (slika 1 (c)). Richard Feynman je leta 1948 razvil naprednejši pristop h kvantni mehaniki. V njem se razvoj valovnih funkcij iz začetnega stanja opisuje s prispevki vseh možnih poti med začetno in končno točko, ti prispevki pa so obteženi s kompleksnimi fazami, odvisnimi od klasične akcije teh poti [1].



Slika 1. Shema miselnega poskusa z rastočim številom rež in pregrad, ki vodi v idejo popotnega integrala. (a) Pri dveh režah moramo upoštevati prispevek dveh možnih poti. (b) Pri več pregradah z več režami moramo upoštevati prispevke mnogih poti. (c) V limitnem primeru pregrad več ni, upoštevati pa moramo prispevke vseh možnih poti. Vir: [2]

2. Feynmanov formalizem

2.1 Izpeljava popotnega integrala

Poglejmo si, kako lahko na najbolj splošen način razvijemo neko začetno stanje $\Psi(x_i, t_i)$ v končno stanje $\Psi(x_f, t_f)$

$$\Psi(x_f, t_f) = \langle x_f | \Psi(t_f) \rangle = \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i)} | \Psi(t_i) \rangle.$$

Med operator časovnega razvoja in $|\Psi(t_i)\rangle$ vrinemo identiteto

$$\int |x_i\rangle \langle x_i| dx_i = 1,$$

kjer integral teče po lastnih stanjih pozicije. Tako dobimo splošno Diracovo integralno enačbo za razvoj začetnega stanja valovne funkcije $\Psi(x_i, t_i)$, kot jo najdemo v viru [2]

$$\Psi(x_f, t_f) = \int \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i)} | x_i \rangle \Psi(x_i, t_i) dx_i. \quad (3)$$

Opazimo lahko, da se informacija o tem, kaj se zgodi med začetno in končno točko in s tem naš seštevek po poteh, skriva v propagatorju $\langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i)} | x_i \rangle$. Propagator v kvantni mehaniki je analogen Greenovi funkciji pri parcialnih diferencialnih enačbah v smislu, da opiše, kako se sistem razvije ob neki začetni motnji. Da propagator spremenimo v obliko, s katero lahko delamo, najprej razdelimo časovni interval $t_f - t_i$ na N krajših intervalov dolžine $\delta t = (t_f - t_i)/N$, tako da propagator sedaj lahko prepisemo v

$$\langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i)} | x_i \rangle = \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} | x_i \rangle.$$

Nato med vsakega od novih operatorjev vstavimo identiteto

$$\int |x\rangle \langle x| dx = 1,$$

kjer integral teče po lastnih stanjih gibalne količine in dobimo izraz

$$\int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} | x_{N-2} \rangle \dots \langle x_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} | x_i \rangle.$$

Ker operatorja \hat{p} in \hat{V} ne komutirata, smo primorani v posameznih členih $\langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} | x_j \rangle$ uporabiti približek za delitev Hamiltoniana v eksponentu na kinetični in potencialni del

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \delta t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{V} \delta t} + \mathcal{O}(\delta t^2).$$

Med produkt vrinemo identiteto gibalne količine

$$\int |p\rangle \langle p| dp = 1$$

in dobimo

$$\int dp \langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \delta t} | p \rangle \langle p | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{V} \delta t} | x_j \rangle.$$

S tem smo dosegli, da operator gibalne količine deluje na lastno stanje $|p\rangle$, operator potenciala pa na lastno stanje $|x\rangle$, kar pomeni, da lahko zamenjamo \hat{p} in \hat{V} s p in $V(x_j)$ in dobimo

$$\int dp \langle x_{j+1} | p \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \delta t} \langle p | x_j \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} V(x_j) \delta t}.$$

Na tej točki uporabimo zvezo

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

in pridemo do Gaussovega integrala, ki ga izračunamo kot

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} + V(x_j) \right) \delta t} e^{\frac{ip}{\hbar} (x_{j+1} - x_j)} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{im(x_{j+1} - x_j)^2}{2\hbar \delta t} - \frac{i\delta t V(x_j)}{\hbar}}. \quad (4)$$

To vstavimo v propagator in ko upoštevamo, da sta $x_i = x_0$ in $x_f = x_N$, dobimo

$$\langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t_f - t_i)} | x_i \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t} \right)^{\frac{N-1}{2}} \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \exp \left(\frac{i\delta t}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{m(x_{j+1} - x_j)^2}{2\delta t^2} - V(x_j) \right).$$

Na tej točki limitiramo $N \rightarrow \infty$, kar pomeni, da lahko uporabimo zvezi

$$\frac{m(x_{j+1} - x_j)^2}{2\delta t^2} = \frac{m\dot{x}^2}{2}$$

in

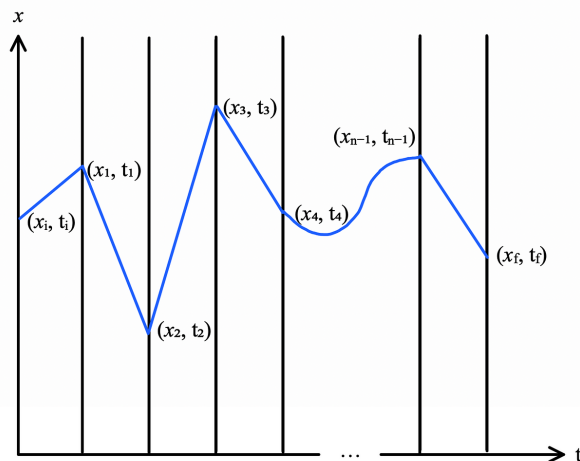
$$\sum_{j=0}^{N-1} \delta t \rightarrow \int_{t_i}^{t_f} dt.$$

V eksponentu opazimo izraz $\int_{t_i}^{t_f} (m\dot{x}^2/2 - V(x)) dt$, ki ustreza klasični akciji, izračunani po poti $x(t)$, kar označimo s $S[x(t)]$.

Ob uporabi limite uvedemo oznako za neskončnodimenzionalen integral

$$\int Dx(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t} \right)^{\frac{N-1}{2}} \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j.$$

Izraz $Dx(t)$ lahko interpretiramo kot neko pot, ki se začne v začetni točki x_i in nato za vsak infinitezimalni časovni interval dt skoči na neko drugo koordinato x_j , na koncu pa se konča v x_f , kot je prikazano na sliki 2. Integral prek $Dx(t)$ pokriva vse možne kombinacije koordinat x_j in s tem vse možne poti med x_i in x_f .



Slika 2. Prikaz, kako iz izbire leg ob časih dobimo eno izmed možnih poti.

S tem dobimo končni izraz za propagator:

$$\langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i)} | x_i \rangle = \int Dx(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x)) dt} = \int Dx(t) e^{\frac{iS[x(t)]}{\hbar}}.$$

2.2 Izračun integrala po poti v semiklasični limiti

Zdaj, ko smo dobili formulo za propagator, nas zanima, kako sploh izračunamo takšen integral. Najprej si pogledjmo večdimenzionalni Gaussov integral

$$\int_{\mathbb{R}^N} e^{-\frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{u}} d\mathbf{u},$$

kjer je \mathbf{u} N -razsežen realen vektor, \mathbf{A} pa $N \times N$ pozitivno definitna realna simetrična matrika. Ker je \mathbf{A} simetrična, jo lahko diagonaliziramo kot $\mathbf{A} = \mathbf{O}^T \mathbf{D} \mathbf{O}$, kjer so d_i diagonalni elementi diagonalne matrike \mathbf{D} . Nato uvedemo novo spremenljivko $\mathbf{O} \mathbf{u}$. Ker je \mathbf{O} ortogonalna, bo Jacobijeva determinanta enaka ena. Iz tega dobimo zmnožek N enodimenzionalnih Gaussovih integralov

$$\int_{\mathbb{R}^N} e^{-\frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{u}} d\mathbf{u} = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N e^{-\frac{1}{2} d_j u_j^2} du_j = (2\pi)^{\frac{N}{2}} \det \mathbf{A}^{-\frac{1}{2}}. \quad (5)$$

Lahko si zamislimo, da v limiti $N \rightarrow \infty$ posamične komponente vektorja \mathbf{u} predstavljajo vrednosti časovno odvisne skalarne količine $u(t)$, matrika \mathbf{A} pa operator $\hat{A}(t, t')$. Večdimenzionalen Gaussov integral se tako pretvori v popotni integral, za katerega lahko še vedno uporabimo formulo (5)

$$\int Du(t) \exp\left(-\frac{1}{2} \int dt dt' u(t) \hat{A}(t, t') u(t')\right) \propto \det \hat{A}^{-\frac{1}{2}}. \quad (6)$$

Tukaj drugi integral teče po času, kjer je funkcija $u(t)$ definirana.

Opremljeni z novo formulo se namenimo izračunati popotni integral po splošnem funkcionalu $F[x]$. V splošnem je to težka naloga. Začnemo lahko s tem, da preko variacijskega računa poiščemo ekstrem funkcionala. Označimo ga lahko z x_{KL} , saj za funkcional akcije, ki nas pravzaprav zanima, ta ustreza poti klasičnega delca. Funkcional nato razvijemo okoli ekstrema za variacijo r po Taylorju do drugega reda, in ker gre za ekstrem, linearni red odpade:

$$F[x] = F[x_{KL} + r] = F[x_{KL}] + \frac{1}{2} \int dt \int dt' r(t') \hat{A}(t, t') r(t) + \dots$$

Po formuli za Taylorjev razvoj funkcionala, vir [3] funkcija $\hat{A}(t, t')$ ustreza

$$A(t, t') = \frac{\delta^2 F[x]}{\delta x(t)\delta x(t')} \Big|_{x=x_{KL}}.$$

To lahko vstavimo v enačbo (6) in dobimo

$$\int Dx(t) e^{-F[x]} \propto e^{-F[x_{KL}]} \det \left(\frac{\hat{A}}{2\pi} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (7)$$

S tem smo si pripravili vse potrebno za izračun popotnega integrala in propagatorja:

$$\begin{aligned} \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i)} | x_i \rangle &\approx e^{\frac{iS[x_{KL}]}{\hbar}} \int Dr(t) \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \int dt' r(t) \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t)\delta x(t')} \Big|_{x=x_{KL}} r(t') \right) \\ &= e^{\frac{iS[x_{KL}]}{\hbar}} \int Dr(t) \exp \left(-\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt r(t) [m\partial_t^2 + V''(x_{KL}(t))] r(t) \right), \end{aligned} \quad (8)$$

kjer je $V''(x_{KL}(t))r(t) = \partial^2 V(x)/\partial x^2|_{x=x_{KL}}$.

Tukaj gre za kvaziklasični približek, ki pa omogoča nekatere analitične vpoglede v kvantne probleme. Smiselnost takega razvoja je odvisna od fluktuacij okrog klasične poti. Značilne amplitude fluktuacij so reda $r \sim (\hbar/\delta_x^2 S)^{1/2}$, kjer $\delta_x^2 S$ predstavlja funkcionalno variacijo akcije. Gredo torej proti 0, ko gre $\hbar \rightarrow 0$.

2.3 Uporaba popotnega integrala

2.3.1 Prost delec

Najprej obravnavajmo propagator za prost delec. Tukaj zaradi preglednosti nastavimo t_i na 0 in enačbo (3) prepisemo v

$$\Psi(x_f, t_f) = \int \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t_f} | x_i \rangle \Psi(x_i, 0) dx_i.$$

V takšnem zapisu se propagator obnaša kot Greenova funkcija Schrödingerjeve enačbe brez potenciala, ki se glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} = i\hbar \frac{d\Psi}{dt}. \quad (9)$$

Enačba (9) je difuzijske oblike, kar pomeni, da njeno Greenovo funkcijo in s tem propagator že poznamo [3], in sicer

$$G_{prost}(x_f, x_i; t_f) = \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} (t_f)} | x_i \rangle \Theta(t_f) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t_f} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t_f} (x_f - x_i)^2} \Theta(t_f).$$

Tukaj Heavisideova funkcija skrbi za ohranjanje vzročnosti, saj zagotavlja, da je Greenova funkcija, ki opisuje odziv sistema na motnjo ob času $t_i = 0$, enaka nič pred tem trenutkom.

Ta propagator bomo uporabili za normalizacijo in regularizacijo drugih, bolj kompleksnih propagatorjev, z uporabo trivialne a uporabne zveze

$$G(x_f, x_i; t_f) = \frac{G(x_f, x_i; t_f)}{G_{prost}(x_f, x_i; t_f)} G_{prost}(x_f, x_i; t_f). \quad (10)$$

2.3.2 Harmonski potencial

Poglejmo si zdaj scenarij s harmonskim potencialom $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, kjer je ω konstanta. Na primer, vprašamo se lahko, kolikšna je verjetnost, da se delec, ki ga postavimo v izhodišče, po času t_f vrne vanj. Iščemo torej $G(0, 0; t)$, ki je po enačbi (8) enak

$$G(0, 0; t_f) = e^{\frac{iS[x_{KL}]}{\hbar}} \int Dx(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_f} dt x(t) \frac{m}{2} [\partial_t^2 + \omega^2] x(t)\right).$$

Tudi brez reševanja Euler-Lagrangevih enačb vidimo, da takšen delec na klasični poti le stoji v izhodišču, torej $S[x_{KL}] = 0$, in prvi faktor enačbe (8) postane ena. Po enačbi (7) dobimo

$$G(0, 0; t_f) \propto \det\left(-\frac{m}{2} (\partial_t^2 + \omega^2)\right)^{-\frac{1}{2}}.$$

Determinanto takšnega operatorja še najlažje izračunamo s produktom lastnih vrednosti, ki jih določa enačba

$$-\frac{m}{2} (\partial_t^2 + \omega^2) x_n = \varepsilon_n x_n$$

z robnimi pogoji $x_n(t_f) = x_n(0) = 0$. Tako dobimo rešitve $x_n(t) = \sin(n\pi t/t_f)$, $n = 1, 2, \dots$, in lastne vrednosti $\varepsilon_n = m \left[(n\pi/t_f)^2 - \omega^2 \right] / 2$. Te vstavimo v determinanto in dobimo

$$\det\left(-\frac{m}{2} (\partial_t^2 + \omega^2)\right)^{-\frac{1}{2}} = \prod_{n=1}^{\infty} \left[\frac{m}{2} \left(\left(\frac{n\pi}{t_f} \right)^2 - \omega^2 \right) \right]^{-\frac{1}{2}}.$$

Prišli smo do produkta, ki ga težko interpretiramo, ker je še vedno le proporcionalen propagatorju zaradi enačbe (7). Do enake težave pridemo, če nastavimo $\omega = 0$ in delamo s prostim delcem. Tukaj lahko izkoristimo enačbo (10) in pokrajšamo neznan faktor proporcionalnosti ter regulariziramo izraz

$$\begin{aligned} G(0, 0; t_f) &= \frac{G(0, 0; t_f)}{G_{prost}(0, 0; t_f)} G_{prost}(0, 0; t_f) = \frac{\prod_{n=1}^{\infty} \left[\frac{m}{2} \left(\left(\frac{n\pi}{t_f} \right)^2 - \omega^2 \right) \right]^{-\frac{1}{2}}}{\prod_{n=1}^{\infty} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{n\pi}{t_f} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}} G_{prost}(0, 0; t_f) \\ &= \prod_{n=1}^{\infty} \left[1 - \left(\frac{\omega t_f}{n\pi} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t_f} \right)^{\frac{1}{2}} \Theta(t_f), \end{aligned}$$

upoštevamo matematično identiteto $\prod_{n=1}^{\infty} \left[1 - (x/n\pi)^2 \right]^{-1} = x/\sin x$ in končno dobimo

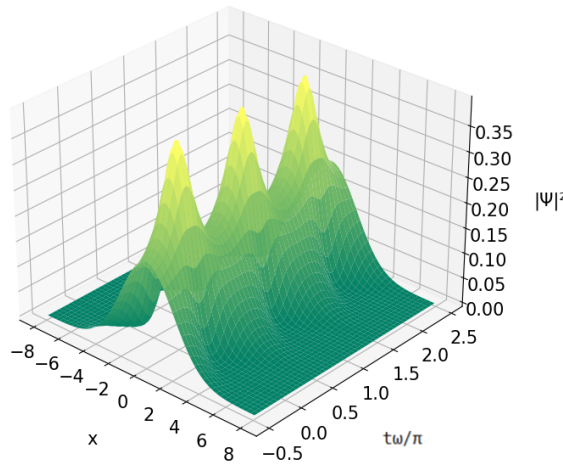
$$G(0, 0; t_f) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t_f)}} \Theta(t_f).$$

Pomen polov pri $\omega t_f = n\pi$ postane bolj jasen, če izračunamo splošno Greenovo funkcijo $G(x_f, x_i; t_f)$ in jo uporabimo za razvoj Gaussovega valovnega paketa $\Psi(x_i, t = 0) = (2\pi a)^{-1/4} \exp[-x_i^2/4a]$, kjer je a konstanta. Dobimo

$$\Psi(x_f, t_f) = \int \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t_f} | x_i \rangle \Psi(x_i, 0) dx_i = (2\pi a(t_f))^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x_f^2}{4a(t_f)} + i\phi(x_f, t_f)},$$

kjer je $a(t_f) = a [\cos^2(\omega t_f) + \kappa^{-2} \sin^2(\omega t_f)]$, $\kappa = \frac{2m a \omega}{\hbar}$. Vidimo, da če v $\Psi(x_f, t_f)$ vstavimo $t_f \omega = n\pi$, dobimo nazaj verjetnostno amplitudo začetnega stanja $|\Psi(x_i, 0)|^2$. Lahko si predstavljamo, da se delec, ki je začetno lokaliziran v Gaussovem valovnem paketu, začne z različnimi hitrostmi premikati

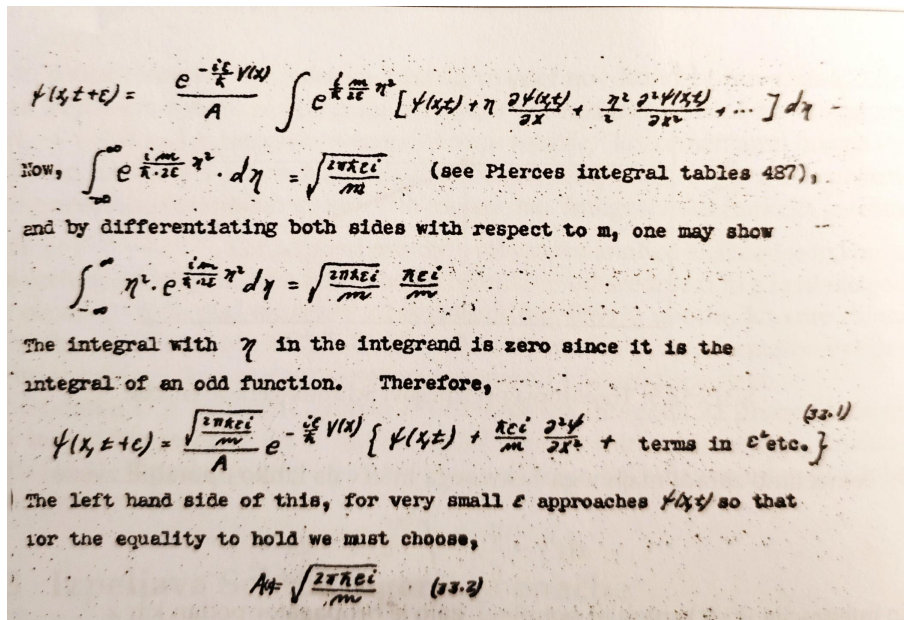
v potencialu. Po polovici amplitude se vrne z nasprotnimi hitrostmi in verjetnostna amplituda je enaka začetni, kot je prikazano na sliki 3.



Slika 3. Časovni razvoj Gaussovega valovnega paketa v harmoničnem potencial, izpeljan iz Greenove funkcije za tak potencial. Na navpični osi je nanešena verjetnostna amplituda $|\Psi(x_i, 0)|^2$, na vodoravnih oseh pa reskaliran čas $t\omega/\pi$ in lega x

2.4 Izpeljava Schrödingerjeve enačbe

Glede na to, da je Feynmanov formalizem konsistenten s Schrödingerjevo enačbo, sklepamo, da jo je mogoče izpeljati iz popotnega integrala [4]. Prav to je leta 1942 Feynman pokazal v svoji doktorski disertaciji, kot vidimo na sliki 4.



Slika 4. Faksimile dela Feynmanove doktorske disertacije, v kateri je leta 1942 podal osnove svoje formulacije kvantne fizike. Vir: [2].

Začnemo tako, da zapišemo razvoj začetne valovne funkcije za majhen časovni korak ϵ slika 5:

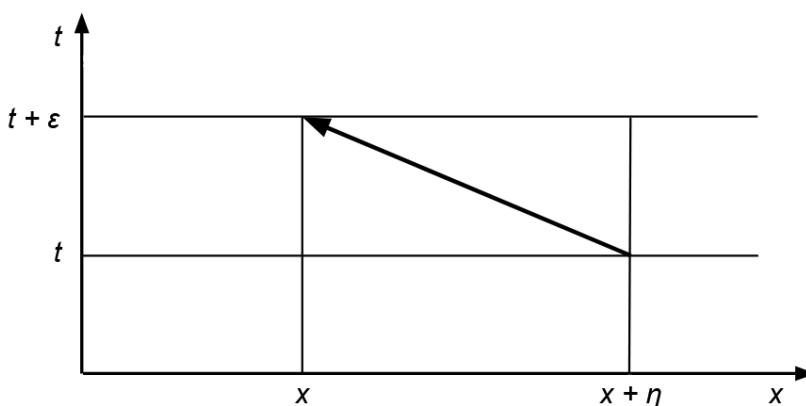
$$\Psi(x, t + \epsilon) = \int G(x, x + \eta; t + \epsilon, t) \Psi(x + \eta, t) d\eta . \quad (11)$$

Nato zapišemo Greenovo funkcijo s popotnim integralom in zaradi majhnega časovnega intervala uporabimo približka za trenutno hitrost $\dot{x} \approx \eta/\varepsilon$ in $\int_t^{t+\varepsilon} L dt' \approx L\varepsilon$, kjer L predstavlja Lagrangian, da dobimo

$$\int_t^{t+\varepsilon} \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \right) dt' = \left(\frac{m}{2} \left(\frac{\eta}{\varepsilon} \right)^2 - V(x) \right) \varepsilon.$$

S tema približkoma si že izberemo pot, kar pomeni, da se izognemo integralu po poteh in približek za Greenovo funkcijo postane

$$G(x, x + \eta; t + \varepsilon, t) \approx \frac{1}{A} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{\eta}{\varepsilon} \right)^2 - V(x) \right) \varepsilon \right].$$



Slika 5. Skica edine poti, po kateri integriramo zaradi približka majhnih premikov v kratkem času. Vir: [2].

Zgoraj A predstavlja konstanto, ki se pojavi pri vsakem integralu po momentu v enačbi (4) in znaša $\sqrt{2\pi i \hbar \varepsilon / m}$. Nadaljujemo tako, da dobljeno Greenovo funkcijo vstavimo v enačbo (11), valovne funkcije pa razvijemo po ε in η :

$$\begin{aligned} \Psi + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2) &= \frac{e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar} V(x)}}{A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\varepsilon} \eta^2} \left[\Psi + \eta \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{1}{2} \eta^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\eta^3) \right] d\eta = \\ &= \frac{1}{A} \left(1 - \frac{i}{\hbar} V \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right) \left[\sqrt{\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}} \Psi + \frac{1}{2} \frac{i \hbar \varepsilon}{m} \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right]. \end{aligned}$$

Ker bomo poslali ε proti 0, so pomembni le prvi neničelni členi razvoja. Zdaj vstavimo vrednost konstante A in dobimo

$$\Psi + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \varepsilon = \left(1 - \frac{i}{\hbar} V \varepsilon \right) \left(\Psi + i \frac{\hbar \varepsilon}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right).$$

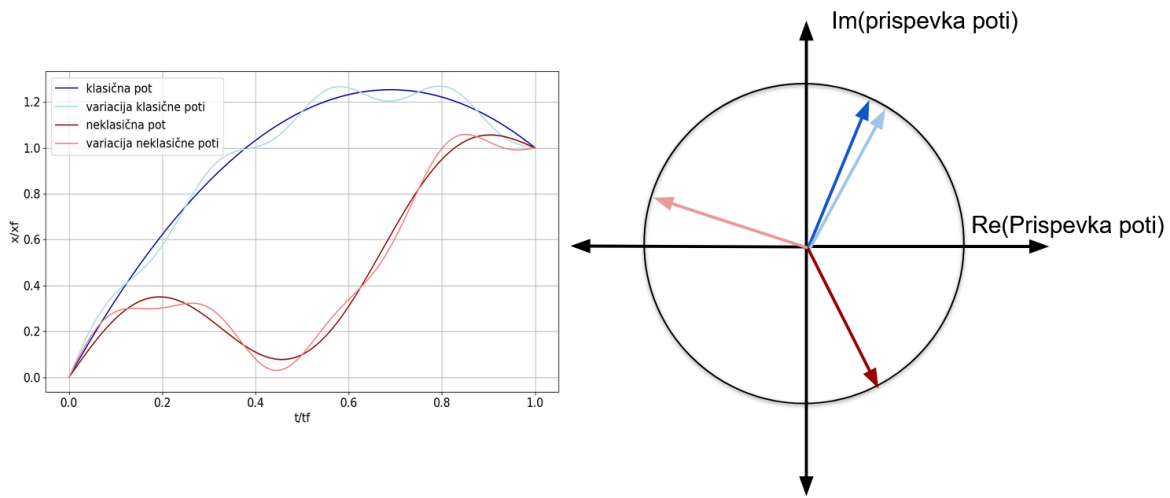
Valovna funkcija Ψ se odšteje, preostali členi, linearni v ε , pa nam podajo ravno Schrödingerjevo enačbo

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

Na ta način eksplicitno pokažemo ekvivalentnost Schrödingerjeve slike in pristopa s popotnim integralom.

2.5 Klasična limita

Ena izmed prednosti Feynmanove formulacije v primerjavi z operatorskim pristopom je, da je zaradi zanašanja na koncept akcije klasična limita veliko bolj očitna. Pri popotnem integralu seštevamo prispevke različnih poti, kjer vsaka prispeva kompleksno število na enotskem krogu s fazo $S[x(t)]/\hbar$. Ker je stacionarna pot ekstrem funkcionala akcije, majhne variacije v tej poti povzročajo le relativno majhne variacije v akciji in s tem faze, kot vidimo na sliki 6. To pa pomeni, da je stacionarna pot s svojo okolico edina, ki znatno vpliva na popotni integral. Ampak če si zamislimo klasičen scenarij, kot je met žoge, kjer akcija znaša na primer 1 Js, bodo faze posamičnih poti reda 10^{34} , kar pomeni, da bo že minimalna variacija v poti fazo spremenila navidezno naključno. Ker nestacionarne poti prispevajo navidezno naključne faze, se njihovi prispevki v popotnem integralu izpovprečijo [5].



Slika 6. Prikaz klasične poti in njene variacije ter naključne neklasične poti in njene variacije skupaj z njihovimi kompleksnimi fazami $S[x(t)]/\hbar$.

3. Zaključek

Feynmanova formulacija predstavlja zanimiv, čeprav matematično nekoliko zahtevnejši pristop h kvantni mehaniki, ki nam odpira drugačno in morda bolj intuitivno perspektivo na dogajanje v kvantnem svetu. Popotni integral je uporaben v kvantni teoriji polja ter pri stohastičnih procesih v statistični fiziki, kar je imelo globoke posledice za razumevanje pojavov v trdni in mehki snovi, ter v teoriji osnovnih delcev. Pristop razkrije lažjo pot do semiklasične limite, ki je ponavadi v Schrödingerjevi sliki veliko bolj skrita.

LITERATURA

- [1] Steven Weinberg, *The quantum theory of fields: Foundations*, vol. 1, Cambridge University Press, Cambridge, 2002, [1995].
- [2] Anton Ramšak, *Kvantna mehanika*, Založba ZRC, Ljubljana, 2020.
- [3] Alexander Altland and Ben Simons, *Condensed matter field theory*, Cambridge University Press, Cambridge, 2010.
- [4] Richard P. Feynman and Albert R. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [5] Maša Kotnik, *Feynmanov integral po poti*, Matrika (2023), 13.