Приложение 1. Единственный путь в квантовом интеграле.

Построение квантового интеграла по путям для описания квантовой эволюции в современном виде основано на двух основных положениях:

– отсутствии «памяти» о предыстории изменения волновой функции [1];

– о гамильтониане, как об операторе, определяющем скорость изменения волновой функции в точке на оси времени. [2].

Первое из исходных положений позволяет представить изменение волновой функции за конечный промежуток времени в виде совокупности изменений в течение последовательности любого количества более коротких временных интервалов. Это, в свою очередь, позволяет решить уравнение Шрёдингера для этих коротких интервалов и записать решение для конечного промежутка времени в виде предела кратного интеграла

$$\Big\langle x_n \Big| U(t_n,t_0) \Big| x_0 \Big\rangle = \lim_{\varepsilon\to 0} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \dots \int\limits_{-\infty}^{\infty} \prod_{k=1}^{n} \Big\langle x_k \Big| U(t_k,t_{k-1}) \Big| x_{k-1} \Big\rangle \prod_{k=1}^{n-1} dx_k,$$

где число равных временных интервалов $n\to\infty$, а их длительность $\varepsilon=(t_n-t_0)/n\to 0$. Уравнение Шрёдингера определяет некоторые свойства матричного элемента оператора эволюции в координатном представлении для короткого промежутка времени, которые позволяют интерпретировать этот математический объект принципиально иным образом.

Выберем матричный элемент оператора эволюции за малый промежуток времени ε со значениями координат x_k и x_{k-1} в соответствующие моменты времени t_k и t_{k-1} и рассмотрим его, как функцию начальных значений координаты и времени при условии, что в конечный момент времени t_k значение координаты будет x_k. Благодаря этому условию координата из независимой переменной превращается в функцию времени, которая, как показал Ж.Зинн-Жюстен, исходя из решения уравнения Шрёдингера для коротких промежутков времени, является линейной. Такой вид зависимости мог бы быть представлен, как результат движения некоторого материального носителя волновой функции с постоянной скоростью на коротком интервале, определяемой как $(x_k-x_{k-1})/(t_k-t_{k-1})$. Однако с учётом сделанного ранее предположения о сплошной среде в виде материального поля, для этого необходимо, чтобы в каждой точке пространства в любой момент времени находилась единственная индивидуальная точка. Тогда при фиксации x_k в момент времени t_k необходимо, чтобы она в момент времени t_{k-1} находилась в единственной точке пространства x_{k-1}, то есть отличным от нуля при предельном переходе к бесконечно малому интервалу времени должен остаться единственный матричный элемент. Чтобы убедиться, что дело обстоит именно так, рассмотрим множество всех матричных элементов, имеющих одинаковые конечные координаты x_k в момент времени t_k, и различные x_{k-1} в момент времени t_{k-1}. Затем выразим значение волновой функции в точке x_k в момент времени t_k через все её значения в более ранний близкий момент времени t_{k-1}. Воспользовавшись отсутствием памяти у квантовой эволюции, согласно Ж.Зинн-Жюстену, имеем

$$\Psi_{t_k}(x_k) = \lim_{\varepsilon\to 0} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Big\langle x_k \Big| U(t_k,t_{k-1}) \Big| x_{k-1} \Big\rangle \Psi_{t_{k-1}}(x_{k-1}) dx_{k-1} =$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left(m\frac{(x_k-x_{k-1})^2}{2\varepsilon} + \frac{V(x_k)+V(x_{k-1})}{2}\varepsilon\right)\right) \Psi_{t_{k-1}}(x_{k-1}) dx_{k-1},$$

где $\varepsilon=t_k-t_{k-1}$. Учтём, что характерный размер неоднородности волновой функции порядка длины волны де-Бройля, и перейдём к интервалам времени для которых «ширина» гауссовской функции в подынтегральном выражении много меньше этой неоднородности. Тогда последнее выражение примет вид

$$\Psi_{t_k}(x_k) = \Psi^m_{t_{k-1}}(x_{k-1}) \lim_{\varepsilon\to 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left(m\frac{(x_k-x_{k-1})^2}{2\varepsilon} + \frac{V(x_k)+V(x_k)}{2}\varepsilon\right)\right) dx_{k-1}, \qquad (1)$$

где $\Psi^m_{t_{k-1}}(x_{k-1})$ среднее значение волновой функции в области, где подынтегральная гауссова функция отлична от нуля. Последний интеграл — гауссов интеграл вида

[1]Здесь и далее удобный и довольно часто применяемый термин марковский процесс по отношению к квантовой эволюции использоваться не будет, поскольку шрёдингеровская эволюция — процесс детерминистический и относить его к одному из типов стохастических процессов некорректно.

[2]Оба эти положения отражены в уравнении Шрёдингера, которое чаще всего рассматривается в качестве одного из постулатов нерелятивистской квантовой механики

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{ax^2}{2}+bx\right)dx = \sqrt{\frac{2\pi}{a}}\exp\frac{b^2}{2a},$$

Полагая $\partial V/\partial x = const$, имеем

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left(m\frac{(x_k-x_{k-1})^2}{2\varepsilon}+\frac{V(x_{k-1})+V(x_k)}{2}\varepsilon\right)\right)dx_{k-1} =$$
$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left(m\frac{(x_k-x_{k-1})^2}{2\varepsilon}-\frac{1}{2}\frac{\partial V}{\partial x}(x_k-x_{k-1})\varepsilon+V(x_k)\varepsilon\right)\right)dx_{k-1} =$$
$$= \exp\left(\frac{\varepsilon^3}{8\hbar m}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2 - V(x_k)\frac{\varepsilon}{\hbar}\right).$$

Далее воспользуемся теоремой о среднем в виде

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)g(x)dx = f(c)\int_{-\infty}^{\infty} g(x)dx.$$

Предположим теперь, что искомый путь, определяющий матричный элемент оператора эволюции для коротких интервалов времени, соотвествует координате x_{k-1}^m максимума гауссовой кривой и определим эту координату из условия

$$\frac{\partial}{\partial x_{k-1}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left(m\frac{(x_k-x_{k-1})^2}{2\varepsilon}-\frac{1}{2}\frac{\partial V}{\partial x}(x_k-x_{k-1})\varepsilon+V(x_k)\varepsilon\right)\right) = 0.$$

В результате получим

$$x_{k-1}^m = x_k + \frac{1}{2m}\frac{\partial V}{\partial x}\varepsilon^2. \tag{2}$$

Выразив x_k через x_{k-1}^m из (2) и подставив в подынтегральную гауссову функцию (1), для функции $f(c)$, которую можно интерпретировать как наибольшую плотность амплитуды перехода в пространстве путей, получим следующее выражение:

$$f(c) = f(x_{x-1}^m) = \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left(m\frac{(x_k-x_{k-1}^m)^2}{2\varepsilon}-\frac{1}{2}\frac{\partial V}{\partial x}(x_k-x_{k-1}^m)\varepsilon+V(x_k)\varepsilon\right)\right) =$$
$$= \exp\left(\frac{\varepsilon^3}{8\hbar m}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2 - V(x_k)\frac{\varepsilon}{\hbar}\right),$$

Амплитуду перехода (1) для короткого интервала времени после аналогичной замены, можно переписать в виде

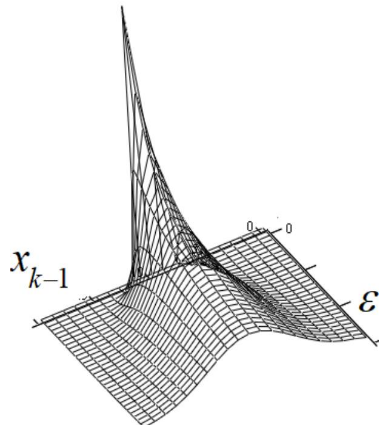
$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\left(x_{k-1}^m+\frac{1}{2m}\frac{\partial V}{\partial x}\varepsilon^2-x_{k-1}\right)^2+\frac{1}{2\hbar}\frac{\partial V}{\partial x}\left(x_{k-1}^m+\frac{1}{2m}\frac{\partial V}{\partial x}\varepsilon^2-x_{k-1}\right)\varepsilon - V(x_k)\frac{\varepsilon}{\hbar}\right)dx =$$
$$= \exp\left(\frac{\varepsilon^3}{8\hbar m}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2 - V(x_k)\frac{\varepsilon}{\hbar}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}}\exp\left(-\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\left(x_{k-1}-x_{k-1}^m\right)^2\right)dx = f(c)\int_{-\infty}^{\infty} g(x)dx,$$

где

$$g(x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}}\exp\left(-\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\left(x_{k-1}-x_{k-1}^m\right)^2\right).$$

Кроме того, что последнее выражение доказывает состоятельность нашего анзаца, оно делает наглядным то, каким образом возникает единственный путь в континуальном интеграле. Эту задачу «решает» функция $g(x)$[3], которая при предельном переходе $\varepsilon \to 0$ «сужается», сохраняя при этом единичную площадь (см.рисунок), и в пределе равная

[3] Грубо говоря, эта функция показывает во сколько раз плотность амлитуд других путей меньше максимальной.



$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\exp\left(-\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\Big(x_{k-1}-x^{m}_{k-1}\Big)^{2}\right)\right]=\begin{cases}0 & \text{при } x_{k-1}\neq x^{m}_{k-1},\\ \infty & \text{при } x_{k-1}=x^{m}_{k-1}.\end{cases}$$

При этом

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left[\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\exp\left(-\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\Big(x_{k-1}-x^{m}_{k-1}\Big)^{2}\right)\right]=1,$$

то есть

$$\lim_{\substack{\varepsilon\to 0\\ n\to\infty}}\left[\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\exp\left(-\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\Big(x_{k-1}-x^{m}_{k-1}\Big)^{2}\right)\right]=\delta\Big(x_{k-1}-x^{m}_{k-1}\Big).$$

Тогда предел

$$\lim_{\substack{\varepsilon\to 0\\ n\to\infty}}\prod_{k=1}^{n}\left[\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\exp\left(-\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\Big(x_{k-1}-x^{m}_{k-1}\Big)^{2}\right)\right]=\delta\Big(x(\tau)-x^{m}(\tau)\Big)$$

представляет собой функционал пути, задающий бесконечную плотность пути $x^{m}(\tau)$ в соответствующем пространстве, и приравнивает нулю плотности всех остальных, то есть

$$\delta\Big(x(\tau)-x^{m}(\tau)\Big)=\begin{cases}\infty & \text{при } x(\tau)\equiv x^{m}(\tau),\\ 0 & \text{в противном случае.}\end{cases}$$

Очевидны следующие свойства δ-функционала, непосредственно следующие из аналогичных свойств δ-функции

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\delta\Big(x(\tau)-x^{m}(\tau)\Big)[dx(\tau)]=1;$$
$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\delta\Big(x(\tau)-x^{m}(\tau)\Big)F[x(\tau)][dx(\tau)]=F[x^{m}(\tau)].$$

Выражение для амплитуды перехода для произвольного временного интервала примет вид

$$\Big\langle x_n\Big|U(t_n,t_0)\Big|x_0\Big\rangle=\int\cdots\int\prod_{k=1}^{n}\Big\langle x_k\Big|U(t_k,t_{k-1})\Big|x_{k-1}\Big\rangle\prod_{k=1}^{n-1}dx_k,=$$
$$\lim_{\substack{\varepsilon\to 0\\ n\to\infty}}\prod_{k=1}^{n}\left[\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\exp\left(-\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\Big(x_{k-1}-x^{max}_{k-1}\Big)^{2}\right)\right]\left[\lim_{\substack{\varepsilon\to 0\\ n\to\infty}}\prod_{k=1}^{n}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}dS^{E}(x^{m}_{k-1}\right)\right]\prod_{k=1}^{n-1}dx_k=$$
$$=\int\delta\Big(x(\tau)-x^{m}(\tau)\Big)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}S^{[}x^{E}(\tau)]\right)[dx[\tau]]=\delta\Big(x(t_0)-x^{m}(t_0)\Big)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}S^{E}[x^{m}(\tau)]\right).$$

В результате интегральное волновое уравнение

$$\Psi_t(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} K_{t,t_0}(x, x_0)\Psi_{t_0}(x_0)\, dx_0,$$

примет вид

$$\Psi_t(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta\Big(x_0 - x_0^m(x)\Big) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S^E[x^m(\tau)]\right) \Psi_{t_0}(x_0) dx_0,$$

где $x_0^m = x - s^m(x, t, t_0))$ — координата пространства для которой амплитуда перехода в фиксированную точку пространства за промежуток времени от t_0 до t отлична от нуля; $s^m(x, t, t_0)$ — соответствующий путь, для которого эвклидово действие минимально. Перепишем последнее выражение в более наглядном с физической точки зрения виде

$$\Psi_t(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta\Big(x - (x_0 + s^m(x_0, t, t_0)\Big) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S^E[x^m(\tau)]\right) \Psi_{t_0}(x_0) dx_0.$$

Поскольку аргумент дельта-функции содержит функциональную зависимость от переменных x_0 и x, а волновая функция является характеристикой, относящейся к бесконечно малому индивидуальному объёму, непосредственно взять последний интеграл без учёта изменения объёма пространства, занимаемого индивидуальным объёмом нельзя.