ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ



ԳԻՏԱԿԱՆ ՀԱՂՈՐԴՈՒՄ НАУЧНОЕ СООБЩЕНИЕ

ЕФИ–51(74)



*И.И.Гольдман*


# ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К ФЕЙНМАНОВСКОЙ ФОРМУЛИРОВКЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ


ԵՐԵՎԱՆ 1974 ЕРЕВАН

ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Научное сообщение ЕФИ- 51(74)

И.И.ГОЛЬДМАН

# ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К ФЕЙНМАНОВСКОЙ ФОРМУЛИРОВКЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Ереван 1974

УДК 530.145.6 Научное сообщение ЕФИ-51(74)

И.И.ГОЛЬДМАН

ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К ФЕЙНМАНОВСКОЙ ФОРМУЛИРОВКЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

В работе показано, что возможно введение независимых координат и импульсов при описании виртуального квантового процесса; при этом упрощается выражение для меры интеграла по путям. Получено простое выражение для амплитуды через фурье-компоненты координат и импульсов.

Ереванский физический институт
Ереван 1974

Scientific Report ЕФИ-51(74)

GOLDMAN I.I.

ON THE APPROACH TO FEIJNMAN FORMULATION OF QUANTUM MECHANICS

Possibility of introduction independently of coordinates and impulses for description of virtual quantum process is demonstrated; this simplifies expression for the measure of path integral. Simple expression for the amplitude in terms of Fourie components of coordinates and impulses is established.

Yerevan Physics Institute
Yerevan 1974

Фейнманом дана очень наглядная формулировка квантовой механики, в которой полная амплитуда процесса определяется как сумма амплитуд, соответствующих всевозможным траекториям (интегралы по путям). Амплитуда, сопоставляемая траектории частицы $q(t)$, имеет вид $\sim e^{iS/\hbar}$, где $S=\int_{t'}^{t''}[\frac{m\dot{q}^2}{2}-U(q)]dt$ –действие. Фейнман показывает, что мера, которую надо сопоставить каждой траектории, зависит от способа разбиения интервала $(t',t'')$. Выражение для меры существенно упрощается, если возможное движение характеризовать двумя независимыми функциями $q(t)$ и $p(t)$, а действие писать в виде

$$S=\int_{t'}^{t''}[p\dot{q}-\frac{p^2}{2m}-U(q)]\,dt.$$

В работе рассмотрено два способа задания функций $q(t), p(t)$–путем разбиения $(t',t'')$ на большое число интервалов с заданием значений $q$ и $p$ в каждом интервале и путем задания их фурье-компонент. Последний подход позволяет сформулировать теорию весьма просто. Обсуждаются способы и возможности описания начального и конечного состояний.

I. Механика . Пусть возможное движение характеризуется функциями $q(t)$ и $p(t)$ и действие

$$S=\int_{t'}^{t''}\Lambda[t,q(t),p(t)]\,dt$$

является функционалом от траектории $q(t)$ и $p(t)$, причем

$$\Lambda = p\dot{q} - H(t,q,p);$$

$H$ – функция Гамильтона задачи. В простейшем случае одной частицы

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(q),$$

и обобщение на случай нескольких частиц и трех измерений очевидно.

Варьируя независимо по $\delta q$ и $\delta p$ находим

$$\delta S = \int_{t'}^{t''} \{\delta p(t)[\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p}] - \delta q(t)[\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial q}]\} dt + p\,\delta q \Big|_{t'}^{t''}.$$

Считая, что $\delta q(t)$ и $\delta p(t)$ произвольны, получаем уравнения движения классической механики в форме уравнений Гамильтона.

Последний член обратится в нуль, если подлежащие варьированию $q(t)$ принимают фиксированные значения в начальный и конечный моменты времени

$$q(t') = q', \quad q(t'') = q''.$$

Возможные $p(t)$ ничем не ограничены.

В отличие от обычной трактовки, когда связь $p = m\dot{q}$ считается заданной, здесь возможное движение описывается произвольным [illegible] $(t)$, а лишь как требование обращения в нуль вариации действия получается эта связь $p$ и $\dot{q}$.

3. Переходя к квантовой механике и следуя идеям Фейнмана рассматриваем не только движения, осуществляющие экстремум действия, но все движения, удовлетворяющие начальным и конечным условиям.

Итак, принимается, что допустимы любые $p(t)$ и $q(t)$ – в отличие от фейнмановской трактовки, в которой связь $p = m\dot{q}$ считается фиксированной. Покажем, что этот подход приводит к упрощению выражения для меры континуального интеграла, а интегрирование по $\mathcal{D}p$ приводит к результату Фейнмена.

Запишем амплитуду перехода частицы из $q'$ в $q''$ в виде

$$K(q'',q') = \int\ldots\int \prod \frac{dq\,dp}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t''}[p\dot{q} - p^2/2m - U(q)]\,dt\right\}.$$

Эту символическую запись необходимо разъяснить, определив предельный процесс. Разобьем интервал $t', t''$ на $N$ отрезков $t' = t_0 < t_1 < t_2 < \ldots < t_{N-1} < t_N = t''$. Функцию $q(t)$ считаем заданной значениями в $N$ -1точках $q(t_1) = q_1, \ldots q(t_{N-1}) = q_{N-1}$. Функцию $p(t)$ зададим в средних точках интервалов $p_{1/2}, p_{3/2}, \ldots, p_{N-\frac{1}{2}}$ (всего $N$ значений).

Удобно записать амплитуду в виде

$$K(q'', q')\sqrt{dq'dq''} = \underbrace{\int\ldots\int}_{2N-1} \frac{dp_{1/2}\,dq_1\,dp_{3/2}\ldots dp_{N-1/2}\,dq_N}{(2\pi\hbar)^N} e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t''}[p\dot{q} - \frac{p^2}{2m} - U(q)]\,dt},$$

где введено условное обозначение $dq_N = \sqrt{dq'dq''}$ ; каждая граничная точка считается по 1/2 раза.

Действие запишем в виде

$$S = p_{1/2}(q_1 - q') + p_{3/2}(q_2 - q_1) + \ldots + p_{N-1/2}(q'' - q_{N-1}) - \sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{p^2_{n-1/2}}{2m} + U(q_n)\right\}(t_n - t_{n-1}).$$

Если теперь интегрирование произвести сначала по всем $dp_n$ , получаем

$$K(q'', q')\sqrt{dq'dq''} = \underbrace{\int\ldots\int}_{N-1} \prod_{n=1}^{N}\left[\frac{2\pi i\hbar(t_n - t_{n-1})}{m}\right]^{-1/2} dq_n\, e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}\left[\frac{m}{2}\frac{(q_n - q_{n-1})^2}{t_n - t_{n-1}} + U(q_n)(t_n - t_{n-1})\right]}$$

(интегрирование по $dq_N = \sqrt{dq'dq''}$ не проводится). Это в точности результат Фейнмана, что и доказывает правильность исходной формулы с простой мерой $\prod \frac{dq\,dp}{2\pi\hbar}$

3. Определяющие движение функции $q(t)$ и $p(t)$ можно задать при помощи их коэффициентов Фурье; поскольку значения $q(t)$ на концах интервала $t', t''$ заданы, запишем $q(t)$ в следующем виде

$$q(t) = q' + (q''-q')\frac{t-t'}{t''-t'} + \sum_{k=1}^{\infty} Q_k \sin\frac{\pi k(t-t')}{t''-t'}.$$

Подобно этому представим $p(t)$ в виде

$$p(t) = \sum_{k=0}^{\infty} P_k \cos\frac{\pi k(t-t')}{t''-t'}.$$

Основываясь на этих формулах произведем замену переменных в интеграле, определяющем амплитуду $K(q'', q')$:

$$K(q'', q') = \underbrace{\int\ldots\int}_{2N-1} \frac{dp_{1/2}\, dq_1\, dp_{3/2}\, dq_2 \ldots dp_{N-1/2}}{(2\pi\hbar)^N}\, e^{\frac{i}{\hbar}\left[p_{1/2}(q_1-q')+p_{3/2}(q_2-q_1)+\right.}$$

$$\left.\ldots + p_{N-1/2}(q''-q_{N-1}) - \sum_{n=1}^{N}\frac{p^2_{n-1/2}}{2m}(t_n-t_{n-1})\right].$$

Из бесконечного (счетного) множества коэффициентов Фурье оставим первые $N$ -I переменных $Q_k$ $(k=1,\ldots N-1)$ и первые $N$ переменных $P_k$ $(k=0,1,\ldots N-1)$, интервалы времени выберем равными:

$$t_n = t' + \frac{n}{N}(t''-t'), \quad (n = 0, 1, \ldots, N),$$

и запишем формулы преобразования в виде

$$q_n = q' + (q''-q')\frac{n}{N} + \sum_{k=1}^{N-1} Q_k \sin\frac{\pi k n}{N}, \quad (n=1,\ldots,N-1)$$

$$p_{n+1/2} = P_0 + \sum_{k=1}^{N-1} P_k \cos\frac{\pi k(n+1/2)}{N}, \qquad (n=0,1,\ldots,N-1).$$

Эти линейные преобразования - неособенные (имеют обратные), поскольку определители

$$\frac{\partial(q_1\ldots q_{N-1})}{\partial(Q_1\ldots Q_{N-1})} = \begin{vmatrix} \sin\frac{\pi}{N} & \ldots & \sin\frac{(N-1)\pi}{N} \\ \sin\frac{2\pi}{N} & \ldots & \sin\frac{2(N-1)\pi}{N} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \sin\frac{(N-1)\pi}{N} & \ldots & \sin\frac{(N-1)^2\pi}{N} \end{vmatrix}, \quad \frac{\partial(p_{1/2},\ldots p_{N-1/2})}{\partial(P_0,\ldots P_{N-1})} = \begin{vmatrix} 1 & \cos\frac{\pi}{2N} & \ldots & \cos\frac{(2N-1)\pi}{2N} \\ 1 & \cos\frac{3\pi}{2N} & \ldots & \cos\frac{3(N-1)\pi}{2N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & \cos\frac{(N-1)\pi}{2N} & \ldots & \cos\frac{(N-1)(2N-1)\pi}{2N} \end{vmatrix}$$

отличны от нуля. Геометрический смысл определителя-это объём, построенный на векторах, образуемых строками: Векторы

$$V_K = \left(\sin\frac{\pi K}{N},\ \sin\frac{2K\pi}{N},\ \dots\ \sin\frac{(N-1)K\pi}{N}\right), \quad (K=1,\dots,N-1)$$

ортогональны

$$V_K \cdot V_S = \sum_{n=1}^{N-1} \sin\frac{Kn\pi}{N}\sin\frac{Sn\pi}{N} = \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{N-1}\left(\cos\frac{n(K-S)\pi}{N} - \cos\frac{n(K+S)\pi}{N}\right) = \frac{N}{2}\delta_{KS},$$

поскольку

$$\sum_{n=0}^{N-1}\cos\frac{\pi \ell n}{N} = \begin{cases} N & (\ell=0) \\ \frac{1-\cos\pi\ell}{2} & (\ell\neq 0)\end{cases}$$

и $K+S, K-S$ имеют одинаковую четность. Итак, норма $V_S$ равна $\sqrt{N/2}$ и объём параллелепипеда

$$\left|\frac{\partial(q_1,\dots q_{N-1})}{\partial(Q_1\dots Q_{N-1})}\right| = \left(\frac{N}{2}\right)^{\frac{N-1}{2}}.$$

Подобно этому находим, что векторы

$$W_K = \left(\cos\frac{\pi K}{2N}, \cos\frac{3\pi K}{2N}, \cos\frac{5\pi K}{2N}, \dots, \cos\frac{(2N-1)\pi K}{2N}\right), \quad (K=0,1,\dots N-1)$$

ортогональны и норма $W_K$ равна $\sqrt{N/2}$, если $K\neq 0$ и равна $\sqrt{N}$ для $W_0$. Отсюда находим

$$\left|\frac{\partial(p_{1/2}, p_{3/2},\dots,p_{N-1/2})}{\partial(P_0, P_1,\dots,P_{N-1})}\right| = \sqrt{N}\left(\frac{N}{2}\right)^{\frac{N-1}{2}}.$$

Вычислим выражение для действия:

$$\sum_{n=1}^{N} p_{n-1/2}(q_n - q_{n-1}) = (q''-q')P_0 + \sum_{K=1}^{N-1} N Q_K P_K \sin\frac{K\pi}{2N},$$

$$\sum_{n=1}^{N} p_{n-1/2}^2 = P_0^2 + \frac{1}{2}\sum_{K=1}^{N-1} P_K^2,$$

и найдем $K(q'', q')$ в виде интеграла по $Q, P$ :

$$K(q'', q') = \sqrt{N} \left(\frac{N}{2}\right)^{N-1} \underbrace{\int \dots \int}_{2N-1} \frac{dQ_1 \dots dQ_{N-1}\, dP_0\, dP_1 \dots dP_{N-1}}{(2\pi\hbar)^N} \,.$$

$$\cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[(q''-q')P_0 - \frac{t''-t'}{4m}\left(2P_0^2 + \sum_{k=1}^{N-1} P_k^2\right) + N\sum_{k=1}^{N} Q_k P_k \sin\frac{k\pi}{2N}\right]\right\}.$$

Интегрируем сначала по $Q_k$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dQ_k\, e^{\frac{iN}{\hbar}\sin\frac{k\pi}{2N} P_k Q_k} = \frac{2\pi\hbar}{N\sin\frac{k\pi}{2N}}\,\delta(P_k),$$

затем по $P_k$ $(k \neq 0)$ , причем используем формулу

$$\sin\frac{\pi}{2N}\cdot\sin\frac{2\pi}{2N}\dots\sin\frac{(N-1)\pi}{2N} = \frac{\sqrt{N}}{2^{N-1}},$$

находим

$$K(q'', q') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dP_0 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[(q''-q')P_0 - \frac{t''-t'}{2m}P_0^2\right]\right\}.$$

После интегрирования по $P_0$ получаем $K(q'', q') = \left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t''-t')}\right]^{1/2} e^{\frac{im(q''-q')^2}{2\hbar(t''-t')}}$ , т.е. верный результат.

Если вычислить действие по формуле

$$\tilde{S} = \int_{t'}^{t''}\left[p(t)\dot{q}(t) - \frac{p^2(t)}{2m}\right]dt,$$

подставив сюда выражения для $p(t), q(t)$ через конечное число параметров $Q_k, P_k$ :

$$q(t) = q' + \frac{q''-q'}{t''-t'}(t-t') + \sum_{k=1}^{N-1} Q_k \sin\frac{\pi k(t-t')}{t''-t'}$$

$$p(t) = P_0 + \sum_{k=1}^{N-1} P_k \cos\frac{\pi k(t-t')}{t''-t'},$$

то получим

$$\tilde{S} = P_0(q''-q') + \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\pi k}{2} P_k Q_k - \frac{t''-t'}{4m}\left(2P_0^2 + \sum_{k=1}^{N-1} P_k^2\right).$$

С такой экспонентой вычисление $K(q'',q')$ после интегрирования по $Q_k$, $P_k$ даёт:

$$\tilde{K}(q'',q') = \frac{\pi^N (N-1)!}{N^{N-1/2}} K(q'',q') \simeq \sqrt{2\pi}\left(\frac{\pi}{e}\right)^N K(q'',q')$$

(использована формула Стирлинга). Вид функции $K$ оказывается правильным, но требуется бесконечная перенормировка (при $N \to \infty$). Чтобы избежать перенормировки, попытаемся исправить выражение для $\tilde{K}$. Отличие $\tilde{S}$ от $S$ имеется лишь в коэффициенте при $P_k Q_k$: $\frac{\pi k}{2}$ в выражении для $\tilde{S}$ и $N \sin\frac{\pi k}{2N}$ в выражении для $S$. Интегрирование по каждому $dQ_k\, dP_k$ вносит дополнительный множитель $\pi k / 2N \sin\frac{\pi k}{2N}$ и общий фактор имеет вид

$$A = \prod_{k=1}^{N-1}\left(\frac{\pi k}{2N} \Big/ \sin\frac{\pi k}{2N}\right) = \exp\left\{\sum_{k=1}^{N-1} \ln\left(\frac{\pi k}{2N} \Big/ \sin\frac{\pi k}{2N}\right)\right\}.$$

Заменим сумму на интеграл

$$A \simeq \exp \int_0^N dk\, \ln\left(\frac{\pi k}{2N} \Big/ \sin\frac{\pi k}{2N}\right) = \exp \frac{2N}{\pi}\int_0^{\pi/2} dx\, \ln\frac{x}{\sin x} = \left(\frac{\pi}{e}\right)^N.$$

Область не слишком больших $K$ даёт пренебрежимый вклад: если $x \ll 1$, $k \ll N$

$$\int_0^{x_0} dx\, \ln\frac{x}{\sin x} \simeq \int_0^{x_0} dx\, \frac{x^2}{6} = \frac{x_0^3}{18}$$

и если $N x_0^3 \ll 1$ т.е. $N k_0^3 \ll 1$ перенормировочный множитель близок к I. Таким образом номера гармоник

$$k \ll N^{2/3}$$

учитываются правильно, следовательно если сделать такое преобразование переменных интегрирования, чтобы каждый интеграл давал единичный множитель, например, положив

$$Q_K = \frac{4\hbar}{K} \tilde{Q}_K ,$$

тогда каждое интегрирование по $Q_K, P_K$ в выражении

$$K(q'',q') = \int\limits_{\dots}\int \frac{dP_0}{2\pi\hbar}\, dP_1 \dots dP_{N-1}\, d\tilde{Q}_1 \dots d\tilde{Q}_{N-1} \exp\Big\{\frac{i}{\hbar}\Big[(q''-q')P_0 -$$

$$- \frac{t''-t'}{4m}\Big(2P_0^2 + \sum_{K=1}^{N-1} P_K^2\Big) + 2\pi\hbar \sum_{K=1}^{N-1} \tilde{Q}_K P_K\Big]\Big\}.$$

будет давать множитель, равный единице и можно ожидать, что и при включении потенциальной энергии ответ для амплитуды будет получаться правильный, поскольку высокие гармоники $K \gtrsim N^{2/3}$ не должны проявиться в потенциале.

4. Более детально рассмотрим описание состояния в начальный и конечный моменты времени. Если исходить из выражения для действия

$$S = -\int\limits_{t'}^{t''} [\dot{p} q + H(t,q,p)]\, dt ,$$

варьирование даёт:

$$\delta S = \int\limits_{t'}^{t''} \Big\{ \delta p \Big[\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p}\Big] - \delta q \Big[\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial q}\Big]\Big\} dt - q\, \delta p \Big|_{t'}^{t''} .$$

Классические уравнения имеют прежний вид, но теперь для обращения в нуль последнего члена надо положить, что фиксированы значения $p(t)$ :

$$p(t') = p' \; ; \quad p(t'') = p''$$

а значения $q(t)$ - произвольны ,

Вычисления амплитуды в квантовой задаче аналогичны предыдущим и для свободного движения дают

$$K(p'',p') \sim \delta(p''-p')\, e^{-\frac{ip'^2}{2m\hbar}(t''-t')}.$$

Чтобы получить амплитуду перехода типа $K(p'',q')$ возьмем $S$ в виде

$$S = \int_{t'}^{t''} [p\dot{q} - H(t,q,p)]\,dt - p(t'')q(t'').$$

Теперь

$$\delta S = \ldots - p(t')\,\delta q(t') - \delta p(t'')\cdot q(t'')$$

и следует считать, что заданы значения координаты вначале и импульса в конце процесса

$$q(t') = q', \quad p(t'') = p''.$$

В случае нескольких частиц и трех пространственных измерений ситуация аналогична, но возникают различные возможности в описании состояний в начале и конце. Наиболее адекватное описание состояния системы в моменты $t'$ и $t''$ получается если считать импульсы и координаты - некоммутирующими величинами (в моменты начала и конца процесса ). Амплитуда процесса вычисляется как континуальный интеграл при определенных условиях вначале и в конце процесса.

Рукопись поступила 19-го сентября 1973г.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям, М., "Мир", 1968.

Редактор Л.П.Мукаян

Заказ 0545 ВФ-03472 Тираж 300

Подписано к печати 16/I-74г. Формат издания 30х40
0,7 уч.изд.л. Ц.5 к.

Отпечатано на ротапринте
Ереванского физического института, Ереван 36, пер.Маркаряна 2

[redacted]