МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ УКРАЇНИ
ЛЬВІВСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ім. І. ФРАНКА

Л. Ф. Блажиєвський

ОПЕРАТОРНІ МЕТОДИ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ

Текст лекцій

Львів ЛДУ 1993

Міністерство освіти України

Львівський державний університет ім.І.Франка

Л.Ф.БЛАЖИЄВСЬКИЙ

ОПЕРАТОРНІ МЕТОДИ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ

Текст лекцій

Затверджено
на засіданні кафедри теоретичної фізики
як текст лекцій із спецкурсу
«Функціональні методи квантової теорії»
Протокол № 10/92

Львів ЛДУ 1993

УДК. 530.1:51-72.

Операторні методи квантової теорії: Текст лекцій /Л.Ф.Блажиєвський.— Львів:ЛДУ, 1993. — 64 с.

У тексті лекцій описані операторні методи сучасної теоретичної фізики. Особлива увага приділена функціям Гріна для типових рівнянь квантової механіки і статистичної фізики. Теоретичний матеріал ілюструється конкретними прикладами та вправами.

Призначено для студентів старших курсів фізичних спеціальностей університетів, аспірантів, наукових працівників.

Рецензенти: Р.П.Гайда, д-р фіз-мат. наук, проф.
І.І.Тальянський, канд. фіз-мат. наук, доц.

ISBN 5-8238-0188-2

На замовних засадах © Л.Ф.Блажиєвський, 1993

Навчальне видання

Блажиєвський Лаврентій Федорович

ОПЕРАТОРНІ МЕТОДИ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ

Текст лекцій

Редактор В.Г.Шевельова
Коректор М.К.Гомельський

Підп. до друку 20.08.93. Формат 60×84 1/16. Папір друк. № 3. Друк офсетний. Ум. др. арк. 3,72. Ум. фарбо-відб. 3,83. Облік.-вид. арк. 3,42. Тираж 150. Зам. № 1110. Ціна 1 крб.

Львівський державний університет ім. І.Я.Франка
290000, Львів, вул. Університетська 1.

Фірма «ВІПОЛ»
252151, Київ, вул. Волинська, 60.

ПЕРЕДМОВА

Текст лекцій є стислим викладом операторних методів, які широко застосовуються в сучасній теоретичній і математичній фізиці. Основна увага приділена побудові функцій Гріна для ряду важливих рівнянь квантової і статистичної механік (розд.1, 4), викладу основних понять і правил, а також нетрадиційних співвідношень операторного числення (розд.2, 3).

Функції Гріна добре висвітлені в навчальних посібниках математчиного і фізичного профілів. У лекціях зроблена спроба подати матеріал з точки зору фізика-теоретика. Другий розділ є коротким оглядом матеріалу, який міститься лише в монографічній і журнальній літературі, але є тим, що важливо знати кожному теоретикові. Третій розділ присвячений ілюстраціям. Наведені в ньому задачі дозволяють глибше засвоїти і закріпити основні поняття теорії. Крім загальновідомих положень у пропонованих лекціях відображені деякі результати, отримані автором, але не опубліковані (окремі співвідношення з підрозд. 2.6, 4.1, а також 3.3).

Цей текст лекцій є першою частиною спецкурсу «Функціональні методи квантової теорії» (36 год лекцій та 36 год семінарських занять), який читається автором в осінньому семестрі для студентів 4 курсу фізичного факультету Львівського університету. Друга і третя частини спецкурсу будуть викладені окремо.

Автор висловлює щиру подяку студентам-теоретикам Гаврилюку Ю., Блажиєвському Ю. і Криницькому Ю. за працю над технічним оформленням рукопису.

Львів,
1993р.

1. ФУНКЦІЯ ГРІНА ДЛЯ РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА

1.1. Інтегральна форма рівняння Шредінгера

У квантовій механіці стан системи описується хвильовою функцією ψ. Якщо обмежитись нерелятивістською теорією і не враховувати спінових змінних, то ψ буде функцією часу t і сукупності деяких величин x, число яких збігається з числом ступенів вільності відповідної класичної системи, тобто $\psi = \psi(x, t)$. Будемо користуватись координатним формулюванням квантової механіки. Тоді під x слід розуміти сукупність координат системи. Одне з головних положень квантової механіки полягає у стверджуванні, що динаміка системи описується рівнянням Шредінгера

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}_x(t)\psi(x,t), \tag{1.1}$$

де $\hat{H}_x(t)$ — оператор Гамільтона, який отримують з класичного гамільтоніана шляхом заміни імпульсів їх операторами[1].

Поки що явного вигляду $\hat{H}_x(t)$ конкретизувати не будемо. Зазначимо лише, що індекс x вказує, на які змінні діє оператор, а аргумент t підкреслює нестаціонарність системи. Рівняння (1.1) є диференціальним рівнянням у частинних похідних першого порядку за часом і другого (для реальних фізичних систем) — за координатами. Тому його необхідно доповнити додатковими умовами: граничною (її вигляд залежить від специфіки системи) і початковою. Остання означає, що у деякий момент часу t_0 стан системи відомий, тобто

$$\psi(x,t)_{|t=t_0} = \varphi(x,t_0). \tag{1.2}$$

Формули (1.1), (1.2) дають можливість виразити $\psi(x,t)$ при $t > t_0$ через $\varphi(x, t_0)$. Для нашої мети зручно об'єднати ці два співвідношення в одне. Замінимо для цього в (1.1) t на t' і проінтегруємо обидві сторони рівності за t' у межах (t_0, t). Враховуючи (1.2), неважко побачити, що для ψ маємо таке рівняння:

$$\psi(x,t) = \varphi(x,t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H_x(t')\psi(x,t'). \tag{1.3}$$

Співвідношення (1.3) називається рівнянням Шредінгера в інтегральній формі. Воно повністю еквівалентне формулам (1.1), (1.2). Зауважимо, що (1.3) має інтегральний характер лише відносно часової змінної, тоді як відносно координат рівняння залишається диференціальним.

[1] Тут і далі буквою h позначається стала Планка, поділена на 2π.

Розв'яжемо тепер рівняння (1.3) методом послідовних наближень. У нульовому наближенні знехтуємо інтегральним доданком. Тоді

$$\psi^{(0)}(x,t) = \varphi(x,t_0).$$

Щоб знайти розв'язок у першому наближенні, потрібно у праву частину (1.3) підставити нульове наближення. Дістанемо

$$\psi^{(1)}(x,t) = \varphi(x,t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H_x(t')\varphi(x,t_0).$$

Замінимо тут t на t', а t' — на t'' і підставимо результат в (1.3). Матимемо

$$\psi^{(2)}(x,t) = \varphi(x,t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H_x(t')\varphi(x,t_0) +$$

$$+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, H_x(t')H_x(t'')\varphi(x,t_0).$$

Цей процес можна продовжити. Неважко побачити, що n-те наближення пов'язане з $(n-1)$-м співвідношенням

$$\psi^{(n)}(x,t) = \psi^{(n-1)}(x,t) +$$

$$+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, H_x(t_1)\ldots H_x(t_n)\varphi(x,t_0). \tag{1.4}$$

Спрямувавши n до нескінченності і ототожнивши ψ_∞ з ψ, дістанемо формальний розв'язок рівняння (1.3) у вигляді нескінченного ряду

$$\psi(x,t) = \varphi(x,t_0) +$$

$$+\sum_{n\geq 1}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, H_x(t_1)\ldots H_x(t_n)\varphi(x,t_0). \tag{1.5}$$

1.2. Оператор еволюції і функція Гріна

Як видно з (1.5), у кожному з доданків можна винести $\varphi(x, t_0)$ з-під знаку інтеграла. Оскільки момент часу t_0 є хоч і фіксованим, але довільним, то значок «тильда» можемо не виписувати. Після цього формула (1.5) перепишеться у вигляді

$$\psi(x,t) = \hat{G}_x(t,t_0)\psi(x,t_0); \tag{1.6}$$

$$\hat{G}_x(t,t_0) = 1 +$$

2 - 1110

$$+\sum_{n\geq 1}\left(+\frac{1}{i\hbar}\right)^{n}\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2\dots\int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\,\hat H_x(t_1)\,\hat H_x(t_2)\dots\hat H_x(t_n). \tag{1.7}$$

Фізичний зміст цих співвідношень очевидний. Хвильова функція системи у момент часу t є результатом дії оператора $\hat G_x(t, t_0)$ на хвильову функцію початкового стану, тобто оператор $\hat G_x(t, t_0)$ описує перехід системи за проміжок часу $t-t_0$ зі стану $\psi(x, t_0)$ у стан $\psi(x, t)$, причому $t-t_0 > 0$. Тому оператор $\hat G_x(t, t_0)$ називається оператором еволюції. Зазначимо, що в (1.7) оператори $\hat H_x(t_i)$ впорядковані за часовими аргументами t_i у міру їх спадання ($t > t_1 > \dots > t_n$). Оскільки $\hat H_x(t)$ і $\hat H_x(t')$ при $t \neq t'$ не комутують між собою, то міняти їх порядок в (1.7) не можна.

Формулу (1.6) зручно записати інакше. Використаємо співвідношення

$$\psi(x, t_0) = \int dx_0\,\delta(x-x_0)\,\psi(x_0, t_0), \tag{1.8}$$

де $\delta(x-x_0)$ — δ - функція Дірака. Тоді

$$\psi(x, t) = \int dx_0\,\hat G_x(t-t_0)\,\delta(x-x_0)\,\psi(x_0, t_0). \tag{1.9}$$

Увівши позначення

$$G(x\,t; x_0\,t_0) = \hat G_x(t, t_0)\,\delta(x-x_0), \tag{1.10}$$

перепишемо (1.9) у вигляді

$$\psi(x, t) = \int dx_0\,G(x\,t; x_0\,t_0)\,\psi(x_0, t_0). \tag{1.11}$$

Звідси видно, що величина $G(x\,t; x_0\,t_0)$ має зміст функції Гріна для рівняння, яке описує еволюцію функції $\psi(x, t)$. У нашому випадку це рівняння Шредінгера. Як видно з (1.10), функція Гріна отримується в результаті дії оператора еволюції на δ - функцію.

У літературі іноді використовується інше зображення функції Гріна. Запишемо δ - функцію у вигляді ряду

$$\delta(x-x_0) = \sum_{\alpha} \psi^{*}_{\alpha}(x_0)\,\psi_{\alpha}(x), \tag{1.12}$$

де $\psi_\alpha(x)$ — власні функції деякого оператора.

Підставляючи (1.12) в (1.10), знаходимо

$$G(x\,t; x_0\,t_0) = \sum_{\alpha} \psi^{*}_{\alpha}(x_0)\,\hat G_x(t, t_0)\,\psi_{\alpha}(x). \tag{1.13}$$

Права частина рівності має звичайний вигляд квантово-механічного матричного елемента $\langle x_0 \mid \dots \mid x \rangle$ (у координатному зображенні), тобто функція Гріна є не що інше, як матричний елемент оператора еволюції:

$$G(x\,t; x_0\,t_0) = \langle x_0 \mid \hat G_x(t, t_0) \mid x \rangle.$$

Розглянемо тепер одну важливу властивість оператора еволюції і функції Гріна. Виберемо на проміжку (t_0, t) який-небудь момент часу t_1. Очевидно, що $t_0 < t_1 < t$. Позначимо через $\psi(x, t_1)$ хвильову функцію системи у цей момент і введемо два оператори еволюції: $\hat G_x(t, t_1)$ та $\hat G_x(t_1, t_0)$. На основі (1.6) можемо стверджувати, що функції $\psi(x, t_0)$, $\psi(x, t_1)$, $\psi(x, t)$ зв'язані співвідношеннями

$$\psi(x, t_1) = \hat G_x(t_1, t_0)\,\psi(x, t_0); \quad \psi(x, t) = \hat G_x(t, t_1)\,\psi(x, t_1).$$

Підставивши другу рівність у першу, отримаємо

$$\psi(x, t) = \hat G_x(t, t_1)\,\hat G_x(t_1, t_0)\,\psi(x, t_0). \tag{1.14}$$

Порівнюючи останню формулу з (1.6), бачимо, що має задовольнятися рівність

$$\hat G_x(t, t_0) = \hat G_x(t, t_1)\,\hat G_x(t_1, t_0). \tag{1.15}$$

Подібне співвідношення можна отримати і для функції Гріна. Подіємо для цього оператором (1.15) на $\delta(x-x_0)$. Взявши до уваги (1.10), запишемо

$$G(x\,t, x_0\,t_0) = \hat G_x(t, t_1)\,G(x\,t_1, x_0\,t_0).$$

Використавши очевидне співвідношення

$$G(x\,t_1, x_0\,t_0) = \int dx_1\,\delta(x-x_1)\,G(x_1\,t_1, x_0\,t_0)$$

і знову врахувавши означення (1.10), знайдемо, що

$$G(x\,t, x_0\,t_0) = \int dx_1\,G(x\,t, x_1\,t_1)\,G(x_1\,t_1, x_0\,t_0). \tag{1.16}$$

Формули (1.15), (1.16) неважко узагальнити для випадку, коли проміжок (t_0, t) поділяється на будь-яке число частин. Виберемо моменти часу t_i так, щоб виконувалась нерівність $t_0 < t_1 < t_1 < \dots < t_n = t$. Тоді справджуватимуться рівності

$$\hat G_x(t, t_0) = \hat G_x(t, t_{n-1})\,\hat G_x(t_{n-1}, t_{n-2})\dots\hat G_x(t_1, t_0); \tag{1.17}$$

$$\begin{aligned} G(x\,t, x_0\,t_0) = \int dx_1\dots dx_{n-1}\,G(x\,t, x_{n-1}\,t_{n-1})\,\times \\ \times\,G_x(x_{n-1}\,t_{n-1}, x_{n-2}\,t_{n-2})\dots G(x_1\,t_1, x_0\,t_0). \end{aligned} \tag{1.18}$$

Ці співвідношення описують так звану властивість мультиплікативності оператора еволюції і функції Гріна.

Вправа 1. *Довести рівність (1.15) (наприклад, з точністю до членів другого порядку по H_x включно) безпосереднім обчисленням на основі зображення операторів еволюції формулою (1.7).*

1.3. Рівняння для функції Гріна

Наведені вище співвідношення для функції Гріна і оператора еволюції отримані за умови, що $t > t_0$. Іноді зручно включити цю умову безпосередньо до формули, використавши розривну функцію Хевісайда (так звану Θ - функцію), яка задається рівністю

$$\Theta(t - t_0) = \begin{cases} 1, & t > t_0 \\ 0, & t < t_0 \end{cases} . \tag{1.19}$$

Розглянемо побіжно деякі властивості цієї функції. Подібно до δ - функції, Θ - функція належить до класу узагальнених функцій і має інтегральні зображення. Найпростіше з них таке:

$$\Theta(t - t_0) = \lim_{\varepsilon \to +0} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{e^{i\eta(t - t_0)}}{\eta - i\varepsilon} . \tag{1.20}$$

Щоб переконатись, що з (1.20) справді отримується співвідношення (1.19), досить обчислити інтеграл, перейшовши у комплексну η площину і використавши теорему про лишки. Продиференціювавши (1.20) за t, будемо мати

$$\frac{d\Theta(t - t_0)}{dt} = \lim_{\varepsilon \to +0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{\eta}{\eta - i\varepsilon} e^{i\eta(t - t_0)} . \tag{1.21}$$

Спрямувавши ε до нуля, бачимо, що права сторона (1.21) є інтегральним зображенням δ -функції, тобто

$$\frac{d\Theta(t - t_0)}{dt} = \delta(t - t_0) . \tag{1.22}$$

Зауважимо, що на відміну від (1.21) в (1.20) операція $\varepsilon \to +0$ має виконуватись після обчислення інтеграла, оскільки при $\varepsilon = 0$ він розбігається. Ще одне цікаве співвідношення отримується інтегруванням (1.22):

$$\Theta(t - t_0) = \int_{-\infty}^{t} dt' \, \delta(t' - t_0) . \tag{1.23}$$

Формула (1.23) дає можливість доозначити Θ - функцію при $t = t_0$, виходячи із властивостей δ - функції. Як бачимо, $\Theta(0) = 1/2$.

З означення Θ - функції зрозуміло, що врахування в (1.7), (1.10) умови $t > t_0$ еквівалентне домноженню цих формул на $\Theta(t - t_0)$. Зокрема, функція Гріна при будь-яких t матиме вигляд

$$G(x\,t, x_0\,t_0) = \Theta(t - t_0) \times$$

$$\times \left\{ 1 + \sum_{n \geq 1} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}_x(t_1) \ldots \hat{H}_x(t_n) \right\} \delta(x - x_0) . \tag{1.24}$$

Щоб отримати рівняння для функції Гріна, продиференціюємо (1.24) за t з урахуванням (1.22):

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_x(t) G + \delta(t - t_0) \left\{ 1 + \ldots \right\} \delta(x - x_0) .$$

Оскільки $\delta(t - t_0) f(t) = \delta(t - t_0) f(t_0)$, то вираз у фігурних дужках дорівнює одиниці. Таким чином, функція Гріна задовольняє рівняння

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_x(t) \right) G(x\,t, x_0\,t_0) = i\hbar\, \delta(t - t_0) \delta(x - x_0) . \tag{1.25}$$

1.4. Хронологічне впорядкування операторів (T-впорядкування)

При застосуваннях користуватись зображенням оператора еволюції у вигляді ряду (1.7) незручно. Покажемо, що цей ряд можна згорнути, тобто можна виконати підсумовування за індексом n.

Розглянемо спочатку формальний приклад ряду (1.7), в якому замість оператора $\hat{H}_x(t)$ маємо функцію часу (позначимо її $H(t)$). У цьому випадку n -кратний інтеграл в (1.7) зводиться до однократного інтеграла в n-му степені, а саме:

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \ldots H(t_n) = \frac{1}{n!} \left[\int_{t_0}^{t} dt' H(t') \right]^n . \tag{1.26}$$

Рівність доводиться безпосереднім обчисленням інтеграла в лівій частині. Змінивши позначення, перепишемо його у вигляді

$$\int_{t_0}^{t} dt_n H(t_n) \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} H(t_{n-1}) \ldots H(t_3) \int_{t_0}^{t_3} dt_2 H(t_2) \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_1) .$$

Обчислимо інтеграл за t_2. Неважко побачити, що

$$\int_{t_0}^{t_3} dt_2 H(t_2) \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_1) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_3} dt_2 \frac{d}{dt_2} \left[\int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_1) \right]^2 = \frac{1}{2} \left[\int_{t_0}^{t_3} dt_1 H(t_1) \right]^2 .$$

Далі можемо виконати інтегрування за t_3:

$$\int_{t_0}^{t_4} dt_3 H(t_3) \frac{1}{2} \left[\int_{t_0}^{t_3} dt_1 H(t_1) \right]^2 = \frac{1}{2 \cdot 3} \int_{t_0}^{t_4} dt_3 \frac{d}{dt_3} \left[\int_{t_0}^{t_3} dt_1 H(t_1) \right]^3 = \frac{1}{3!} \left[\int_{t_0}^{t_4} dt_1 H(t_1) \right]^3 .$$

Після обчислення аналогічним способом всіх інтегралів прийдемо до формули (1.26). Використавши її в (1.7), матимемо

$$1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' H(t') \right]^n = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' H(t') \right] , \tag{1.27}$$

тобто для нашої формальної моделі ряд (1.7) згортається в експоненту.

Вправа 2. *Пояснити, чому формула (1.26) не справджується для некомутуючих операторів.*

Розглянемо тепер стаціонарну систему. У цьому випадку оператор Гамільтона не залежить від часу. Тому в кожному з доданків ряду (1.7) оператори виносяться з-під символів інтегрування. Оскільки

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n = \frac{1}{n!}(t-t_0)^n ,$$

то ряд (1.7) зводиться до вигляду

$$1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!}\left[-\frac{i}{h}(t-t_0)\hat{H}_x\right]^n .$$

Використовуючи поняття функції від оператора, бачимо, що остання формула також згортається в експоненту. Таким чином, у стаціонарному випадку оператор еволюції і функція Гріна зобразяться формулами

$$\hat{G}_x(t-t_0) = \exp\left[-\frac{i}{h}(t-t_0)\hat{H}_x\right]; \tag{1.28}$$

$$G(xt, x_0 t_0) = \exp\left[-\frac{i}{h}(t-t_0)\hat{H}_x\right]\delta(x-x_0). \tag{1.29}$$

Вправа 3. *Вважаючи відомими власні функції $\Phi_\alpha(x)$ і власні значення E_α оператора $\hat{H}_x$, показати, що:*

$$G(xt, x_0 t_0) = \sum_\alpha e^{-\frac{i}{h}(t-t_0)E_\alpha}\Phi_\alpha(x)\Phi^*_\alpha(x_0).$$

Вправа 4. *Показати, що при $\hat{H}_x(t') = \varphi(t')\hat{H}_x$, де $\varphi(t')$ — функція, оператор $\hat{G}_x(t, t_0)$ також можна записати у вигляді експоненти.*

Отже, ми показали, що у двох частинних випадках ряд (1.7) збігається до експоненти. Покажемо тепер, що і в загальному випадку спостерігається подібний результат. Щоб це зробити, необхідно крім звичайного добутку операторів, залежних від часу, ввести поняття так званого хронологічного добутку. Будемо позначати його символом «T», виписуючи ліворуч від добутку операторів. Дія символа T на добуток операторів зводиться до розміщення їх у порядку спадання часового аргументу. Так, хронологічний добуток двох операторів $\hat{A}(t)$ і $\hat{B}(t')$ задається формулою

$$T(\hat{A}(t)\hat{B}(t')) = \begin{cases} \hat{A}(t)\hat{B}(t'), & t > t' \\ \hat{B}(t')\hat{A}(t), & t < t' \end{cases}. \tag{1.30}$$

Зазначимо, що параметр t не обов'язково пов'язувати з часом. У багатьох випадках це може бути довільна точка з якогось проміжку, де задаються оператори. У зв'язку з цим будемо говорити про хронологічний добуток просто як про «T-добуток».

Формулу (1.30) можна подати інакше, якщо використати Θ - функцію (1.19), а саме,

$$T(\hat{A}(t)\hat{B}(t')) = \Theta(t-t')\hat{A}(t)\hat{B}(t') + \Theta(t'-t)\hat{B}(t')\hat{A}(t). \tag{1.31}$$

Вправа 5. *Записати за допомогою Θ - функції T - добуток трьох операторів.*

Звернемо увагу на те, що операція T-впорядкування в (1.30) не визначена при аргументах, що збігаються. Покладемо, що при $t = t'$

$$T(\hat{A}(t)\hat{B}(t)) = \frac{1}{2}(\hat{A}(t)\hat{B}(t) + \hat{B}(t)\hat{A}(t)). \tag{1.32}$$

Це еквівалентно умові $\Theta(0) = 1/2$, яка найчастіше використовується для доозначення Θ - функції. Зауважимо однак, що як для T- добутку, так і для Θ - функції можливі інші доозначення (наприклад, одну з нерівностей у правій частині (1.30) можна доповнити рівністю).

Розглянемо вираз

$$T\left[\int_{t_0}^{t} dt'\hat{A}(t')\cdot\int_{t_0}^{t} dt''\hat{B}(t'')\right] = J.$$

Символ T впорядковує оператори всередині проміжку (t_0, t). Взявши до уваги лінійність операції T - впорядкування і формулу (1.31), матимемо

$$J = \int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t} dt'' T(\hat{A}(t')\hat{B}(t'')) =$$

$$= \int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt''\hat{A}(t')\hat{B}(t'') + \int_{t_0}^{t} dt'\int_{t'}^{t} dt''\hat{B}(t'')\hat{A}(t').$$

Змінимо в останньому доданку порядок інтегрування, використавши рівність:

$$\int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt'' f(t', t'') = \int_{t_0}^{t} dt''\int_{t_0}^{t''} dt' f(t', t''). \tag{1.33}$$

Якщо після цього ще перепозначити змінні інтегрування $t'' \to t'$ і $t' \to t''$, то цей доданок набере вигляду

$$\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \, \hat{B}(t')\hat{A}(t'') .$$

Таким чином, справджується рівність

$$T\left[\int_{t_0}^{t} dt'\hat{A}(t')\cdot\int_{t_0}^{t} dt''\hat{B}(t'')\right] =$$

$$= \int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt''\left[\hat{A}(t')\hat{B}(t'') + \hat{B}(t')\hat{A}(t'')\right]. \tag{1.34}$$

Нехай тепер $\hat{A}(t') = \hat{H}(t')$, $\hat{B}(t'') = \hat{H}(t'')$, тобто оператори $\hat{A}$, $\hat{B}$ відрізняються лише аргументами. Тоді з (1.34) випливає, що

$$J_2 \equiv T\left[\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}(t')\right]^2 = 2\int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt''\left[\hat{H}(t')\hat{H}(t'')\right]. \tag{1.35}$$

Розглянемо ще T-добуток трьох інтегралів від $\hat{H}(t)$:

$$J_3 \equiv T\left[\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}(t')\right]^3 = \int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t} dt''\int_{t_0}^{t} dt''' \, T\left[\hat{H}(t')\cdot\hat{H}(t'')\cdot\hat{H}(t''')\right].$$

Операція T - впорядкування має своєрідну властивість асоціативності: спочатку впорядковуються два оператори, з отриманим результатом впорядковується третій оператор і т.д. Тому в J_3 можна скористатися результатом (1.35). Тоді

$$J_3 \equiv T\left[\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}(t')\right]^3 = 2\int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt''\int_{t_0}^{t} dt''' \, T\left[\hat{H}(t')\hat{H}(t'')\hat{H}(t''')\right].$$

Тут оператори $\hat{H}(t')$ і $\hat{H}(t'')$ вже впорядковані. Тому можна застосувати формулу (1.31) і подати останній T-добуток у вигляді

$$\Theta(t''-t''')\hat{H}(t')\hat{H}(t'')\hat{H}(t''') +$$
$$\Theta(t'-t''')\,\Theta(t'''-t'')\hat{H}(t')\hat{H}(t''')\hat{H}(t'') +$$
$$\Theta(t'''-t')\hat{H}(t''')\hat{H}(t')\hat{H}(t'').$$

Тепер можемо записати

$$J_3 = 2\int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt''\int_{t_0}^{t''} dt'''\left[\hat{H}(t')\hat{H}(t'')\hat{H}(t''')\right] +$$

$$+ 2\int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt''\int_{t''}^{t'} dt'''\left[\hat{H}(t')\hat{H}(t''')\hat{H}(t'')\right] +$$

$$+ 2\int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt''\int_{t'}^{t} dt'''\left[\hat{H}(t''')\hat{H}(t')\hat{H}(t'')\right].$$

Поміняввши в другому і третьому доданках порядки інтегрування, побачимо, що вони збігаються з першим. Таким чином,

$$J_3 = 2\cdot 3\cdot\int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt''\int_{t_0}^{t''} dt'''\left[\hat{H}(t')\hat{H}(t'')\hat{H}(t''')\right]. \tag{1.36}$$

Аналогічно проводиться T - впорядкування більшого числа співмножників. У загальному випадку маємо рівність

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \, \hat{H}(t_1)\ldots\hat{H}(t_n) = \frac{1}{n!}\,T\left[\int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{H}(t')\right]^n, \tag{1.37}$$

подібну до (1.26). Використавши (1.37) в (1.7) і взявши до уваги властивість лінійності T-добутку, бачимо, що ряд згортається у своєрідну операторну експоненту. Отримуємо

$$\hat{G}_x(t, t_0) = T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{H}_x(t')\right]. \tag{1.38}$$

Аналогічно

$$G(x\,t, x_0\,t_0) = T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{H}_x(t')\right]\delta(x-x_0). \tag{1.39}$$

Останню формулу називатимемо операторним зображенням функції Гріна, а оператори вигляду (1.38) — T - експонентними операторами, або просто T - експонентами. Зауважимо, що у цих формулах $t > t_0$. Щоб розглядати довільні t, досить співвідношення (1.39) домножити на $\Theta(t-t_0)$.

2. ЕЛЕМЕНТИ ОПЕРАТОРНОГО ЧИСЛЕННЯ

2.1. Деякі властивості T-експоненти

У розд. 1 введено поняття хронологічного впорядкування операторів та T-експонентний оператор на прикладі рівняння Шредінгера. Однак ці поняття (як і складніші їх узагальнення) характерні взагалі для операторних методів квантової теорії і будуть широко використовуватись у даному курсі. Розглянемо тут докладніше властивості T-експонентних операторів досить загального вигляду

$$U(\lambda,\lambda_0) = T\exp\left(\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda'\, A(\lambda')\right), \tag{2.1}$$

де $A(\lambda')$ — оператор, а α — деякий довільний числовий параметр.

Для спрощення запису формул не будемо виписувати (там, де це не призведе до непорозуміння) змінні, на які діє оператор, а також значок « $\hat{\ }$ » над оператором. Символ T упорядковує оператори на проміжку (λ_0, λ), причому $\lambda > \lambda_0$. За означенням T-добутку праву сторону (2.1) потрібно розуміти як ряд, а саме:

$$U(\lambda,\lambda_0) = 1 + \sum_{n\geq 1} \alpha^n \int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda_1 \ldots \int_{\lambda_0}^{\lambda_{n-1}} d\lambda_n\, A(\lambda_1)\ldots A(\lambda_n). \tag{2.2}$$

Зазначимо перш за все, що у показнику експоненти в (2.1) інтегрувати не можна, оскільки, як уже було показано у розд.1, n-й степінь цього інтеграла не дорівнює n-кратному інтегралу з (2.2). Таке інтегрування можливе лише для операторів, які не залежать від λ' (див.(1.28)). До речі, завдяки цьому маємо можливість зобразити у разі потреби, наприклад, оператор $e^{\beta H}$ T-експонентою

$$e^{\beta H} = T\exp\int_0^{\beta} d\beta'\, H. \tag{2.3}$$

T-експонента має ряд властивостей звичайної експонентної функції. Так, якщо $A = A_1 + A_2$, то

$$T\exp\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda'\,(A_1(\lambda') + A_2(\lambda')) = \tag{2.4}$$

$$= T\left\{\exp\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda'\, A_1(\lambda') \cdot \exp\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda'\, A_2(\lambda')\right\}.$$

Поділимо проміжок інтегрування (λ, λ_0) на два проміжки — (λ_0, λ_1) та (λ_1, λ). Тоді

$$T\exp\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda'\left[A_1(\lambda') + A_2(\lambda')\right] =$$

$$= \left[T\exp\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda'} d\lambda'\, A_1(\lambda')\right] \cdot \left[T\exp\alpha\int_{\lambda'}^{\lambda} d\lambda'\, A_2(\lambda')\right], \tag{2.5}$$

тобто T-експонента є мультиплікативною: $U(\lambda,\lambda_0) = U(\lambda,\lambda_1)\,U(\lambda_1,\lambda_0)$. Звернемо увагу на те, що в (2.5) T-експоненти вже впорядковані між собою. Введемо тепер оператор $U^{-1}(\lambda_0,\lambda)$, який є оберненим до $U(\lambda_1,\lambda_0)$ і визначається однією з рівностей

$$U(\lambda_1,\lambda_0)\,U^{-1}(\lambda_0,\lambda_1) = U^{-1}(\lambda_0,\lambda_1)\,U(\lambda_1,\lambda_0) = 1. \tag{2.6}$$

Покладемо, що аналогічно (2.2) він зображується степеневим рядом за параметром α:

$$U^{-1}(\lambda_0,\lambda_1) = 1 + \alpha K_1 + \alpha^2 K_2 + \ldots \tag{2.7}$$

Щоб знайти $K_1, K_2, \ldots$, потрібно в (2.6) підставити формули (2.2), (2.7) і порівняти члени при однакових степенях α. Отримаємо

$$K_1 = -\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda_1\, A(\lambda_1);$$

$$K_2 = -\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda_1 \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} d\lambda_2\, A(\lambda_1)\, A(\lambda_2) - K_1\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda_1\, A(\lambda_1);$$

$$K_3 = -\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda_1 \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} d\lambda_2 \int_{\lambda_0}^{\lambda_2} d\lambda_3\, A(\lambda_1)\, A(\lambda_2)\, A(\lambda_3) -$$

$$- K_1\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda_1 \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} d\lambda_2\, A(\lambda_1)\, A(\lambda_2) - K_2\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda_1\, A(\lambda_1).$$

Перша рівність визначає оператор K_1. Підставивши його значення у другу, знайдемо K_2 та ін. Неважко переконатись, що K_n визначається за формулою

$$K_n = (-1)^n \int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda_1 \int_{\lambda_1}^{\lambda} d\lambda_2 \ldots \int_{\lambda_{n-1}}^{\lambda} d\lambda_n\, A(\lambda_1)\, A(\lambda_2)\ldots A(\lambda_n). \tag{2.8}$$

Доцільно змінити порядок інтегрування і перепозначити послідовність змінних $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ через $\lambda_n, \lambda_{n-1}, \ldots, \lambda_1$. Після цього ряд (2.7) матиме вигляд

$$U^{-1}(\lambda_0,\lambda) = 1 + \sum_{n\geq 1} (-\alpha)^n \int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda_1 \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} d\lambda_2 \ldots \int_{\lambda_n}^{\lambda_{n-1}} d\lambda_n\, A(\lambda_n)\, A(\lambda_{n-1})\ldots A(\lambda_1). \tag{2.9}$$

Порівнюючи знайдений вираз з формулою (2.2), бачимо, що в (2.9) крім зміни α на $-\alpha$ оператори $A(\lambda_i)$ розміщені в зворотному порядку, тобто в міру зростання величин λ. Ввівши для позначення такого результату впорядкування символ T^{-1}, запишемо обернений до $U(\lambda,\lambda_0)$ оператор у вигляді

$$U^{-1}(\lambda_0,\lambda)=T^{-1}\exp\left(-\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda' A(\lambda')\right). \tag{2.10}$$

Очевидно, що у випадку двох операторів зміст символу T^{-1} визначається рівністю, оберненою до (1.30), тобто

$$T^{-1}(\hat{A}(t)\hat{B}(t'))=\begin{cases}\hat{A}(t)\hat{B}(t'), & t<t'\\ \hat{B}(t')\hat{A}(t), & t>t'\end{cases}. \tag{2.11}$$

Обернене T-впорядкування з'являється також при побудові оператора $U^{+}(\lambda_0,\lambda)$, спряженого з $U(\lambda,\lambda_0)$. Справді, оскільки

$$\left[\alpha(ABC\ldots)\right]^{+}=\alpha^{*}\left(\ldots C^{+}B^{+}A^{+}\right),$$

то з (2.2) випливає, що

$$U^{+}(\lambda_0,\lambda)=$$

$$=1+\sum_{n\geq 1}(\alpha^{*})^{n}\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda_1\int_{\lambda_0}^{\lambda_1}d\lambda_2\ldots\int_{\lambda_0}^{\lambda_n}d\lambda_n A^{+}(\lambda_n)\,A^{+}(\lambda_{n-1})\ldots A^{+}(\lambda_1). \tag{2.12}$$

Тут оператори A^{+} розміщені у такому самому порядку, як і в (2.9). Тому можемо записати

$$U^{+}(\lambda_0,\lambda)=T^{-1}\exp\left(\alpha^{*}\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda' A^{+}(\lambda')\right), \tag{2.13}$$

де * означає комплексне спряження. Оператори U^{-1}, U^{+}, як і оператор U, є мультиплікативними, тобто

$$U^{-1}(\lambda_0,\lambda_1)=U^{-1}(\lambda_0,\lambda_1)U^{-1}(\lambda_1,\lambda);$$

$$U^{+}(\lambda_0,\lambda_1)=U^{+}(\lambda_0,\lambda_1)U^{+}(\lambda_1,\lambda). \tag{2.14}$$

Зауважимо, що за уявних α для самоспряжених операторів A ($A^{+}=A$), як видно з (2.10), (2.13), $U^{+}(\lambda_0,\lambda)=U^{-1}(\lambda_0,\lambda)$. Оператори $U(\lambda,\lambda_0)$, які мають таку властивість, називаються унітарними. Оскільки оператор Гамільтона самоспряжений, то зрозуміло, що оператор еволюції (1.38) є унітарним.

2.2. Диференціювання експонентних операторів

Ще одна важлива властивість T-експоненти пов'язана з її диференціюванням за параметром. А саме, під символом T-добутку диференціювання експонентного оператора проводиться за такими самими правилами, як і диференціювання функцій, тобто диференціювання за параметром і T-впорядкування є комутуючими операціями. Тому

$$\frac{\partial U(\lambda,\lambda_0)}{\partial\lambda}=T\left(\alpha A(\lambda)\exp\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda' A(\lambda')\right)=\alpha A(\lambda)U(\lambda,\lambda_0); \tag{2.15}$$

$$\frac{\partial U(\lambda,\lambda_0)}{\partial\lambda_0}=U(\lambda,\lambda_0)(-\alpha A(\lambda_0)). \tag{2.16}$$

У правильності цих формул можна переконатись диференціюванням виразу (2.2).

Обчислимо похідні від $U(\lambda,\lambda_0)$ за параметром α. Маємо

$$\frac{\partial U(\lambda,\lambda_0)}{\partial\alpha}=T\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda' A(\lambda')\;U(\lambda,\lambda_0)\right).$$

Щоб виконати операцію T-впорядкування, скористаємось мультиплікативністю оператора U, поклавши $U(\lambda,\lambda_0)=U(\lambda,\lambda')U(\lambda',\lambda_0)$. Тепер зрозуміло, що

$$\frac{\partial U(\lambda,\lambda_0)}{\partial\alpha}=\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda' U(\lambda,\lambda')A(\lambda')\;U(\lambda',\lambda_0). \tag{2.17}$$

Нехай оператор A залежить від деякого параметра γ: $A(\lambda')=A_{\gamma}(\lambda')$. Очевидно, що у цьому випадку

$$\frac{\partial U_{\gamma}(\lambda,\lambda_0)}{\partial\gamma}=\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda' U_{\gamma}(\lambda,\lambda')\frac{\partial A_{\gamma}(\lambda')}{\partial\gamma}\;U_{\gamma}(\lambda',\lambda_0). \tag{2.18}$$

Формули (2.17), (2.18) можна записати інакше, якщо скористатись у них тотожним зображенням одиниці у вигляді $1=UU^{-1}$ або $1=U^{-1}U$ і властивістю мультиплікативності. Отримаємо

$$\frac{\partial U(\lambda,\lambda_0)}{\partial\alpha}=\left[\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda' U(\lambda,\lambda')A(\lambda')\;U^{-1}(\lambda',\lambda_0)\right]U(\lambda,\lambda_0); \tag{2.17а}$$

$$\frac{\partial U(\lambda,\lambda_0)}{\partial\alpha}=U(\lambda,\lambda_0)\left[\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda' U^{-1}(\lambda_0,\lambda')A(\lambda')\;U(\lambda',\lambda_0)\right]. \tag{2.17б}$$

Іноді в літературі ці формули називають відповідно лівою і правою похідними від $U(\lambda,\lambda_0)$.

Обчислимо ще похідну від оператора $K = e^{A_\gamma}$, де A_γ — деякий оператор, залежний від параметра γ. Беручи до уваги (2.3), запишемо

$$e^{A_\gamma} = T \exp \int_0^1 d\lambda' A_\gamma \equiv K\,(1\,,0)\,.$$

Порівнюючи цей вираз з (2.1), бачимо що K(1,0) збігається з оператором U, якщо в останньому покласти $\alpha = 1$, $\lambda_0 = 0$, $\lambda = 1$ і вважати A_γ незалежним від λ'. Тоді похідну за γ можна обчислити за формулою (2.18). Знаходимо

$$\frac{\partial K(1\,,0)}{\partial\gamma} = \int_0^1 d\lambda'\, K(1\,,\lambda')\,\frac{\partial A_\gamma}{\partial\gamma}\,K(\lambda'\,,0)\,.$$

Але $K(1\,,\lambda') = \exp[\,(1-\lambda')A_\gamma\,]$, $K(\lambda'\,,0) = \exp[\,\lambda' A_\gamma\,]$. Отже,

$$\frac{\partial e^{A_\gamma}}{\partial\gamma} = \int_0^1 d\lambda' \exp[\,(1-\lambda')A_\gamma\,]\,\frac{\partial A_\gamma}{\partial\gamma}\,\exp[\,\lambda' A_\gamma\,]. \tag{2.19}$$

Якщо оператори A_γ і $\dfrac{\partial A_\gamma}{\partial\gamma}$ комутують між собою, то, як бачимо, $\dfrac{\partial e^{A_\gamma}}{\partial\gamma} = e^{A_\gamma}\dfrac{\partial A_\gamma}{\partial\gamma}$, тобто у такому випадку похідна від оператора обчислюється за такими самими правилами, як і від функції.

Формули (2.15)-(2.19) отримані виходячи з властивостей T-добутку і комутації операцій диференціювання за параметром та T-впорядкування. Останнє є хоч і майже очевидним, але допущенням. Тому для обгрунтування варто було б отримати ці формули безпосереднім диференціюванням виразу (2.3). Однак так легко одержати лише співвідношення (2.15), (2.16). Знаходження ж формул (2.17), (2.19), як і подібних до них, таким способом пов'язане з необхідністю підсумовування досить складних рядів. Далі (див. підрозд. 2.4) ці співвідношення доведено простішим способом.

Вправа 1. *Довести співвідношення (2.17) з точністю до членів третього порядку за A включно, виходячи з означення (2.2).*

Розглянемо коротко ще диференціювання операторів U^{-1} та U^{+}, яке проводиться за такими самими правилами, як і диференціювання U. Однак результат можна отримати значно простіше, якщо скористатись зв'язком цих операторів з оператором U. Так, з умови $U^{-1}U = 1$ випливає, наприклад, що

$$\frac{\partial U^{-1}}{\partial\alpha}\,U = -\,U^{-1}\frac{\partial U}{\partial\alpha}\,.$$

Звідси

$$\frac{\partial U^{-1}(\lambda_0\,,\lambda)}{\partial\alpha} = -\,U^{-1}(\lambda_0\,,\lambda)\,\frac{\partial U(\lambda\,,\lambda_0)}{\partial\alpha}\,U^{-1}(\lambda_0\,,\lambda)\,,$$

Використавши (2.17) і взявши до уваги властивість мультиплікативності, дістанемо

$$\frac{\partial U^{-1}(\lambda\,,\lambda_0)}{\partial\alpha} = -\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda'\, U^{-1}(\lambda_0\,,\lambda')\,A(\lambda')\,U^{-1}(\lambda'\,,\lambda)\,. \tag{2.20}$$

Подібним способом можна знайти й інші співвідношення. Отриманих результатів досить, щоб знайти похідні вищих порядків.

Вправа 2. *Знайти формули, аналогічні до (2.15)-(2.19), для операторів U^{-1} та U^{+}.*

Вправа 3. *Обчислити другі похідні (у тому числі й мішані) за λ, λ_0, α від оператора $U(\lambda\,,\lambda_0)$.*

2.3. Функціональне диференціювання

Розглянемо деяку функцію Ф , аргументом якої є також функція, наприклад, $\Phi = \Phi(\eta(\lambda'))$. За означенням функціональна (інакше варіаційна) похідна $\dfrac{\delta\,\Phi(\eta(\lambda'))}{\delta\eta(\lambda_1)}$ вводиться так, щоб виконувалася рівність

$$\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda'\, f(\lambda')\,\frac{\delta\,\Phi(\eta(\lambda'))}{\delta\eta(\lambda_1)} = \left[\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\,\Phi[\,\eta(\lambda_1) + \varepsilon f(\lambda_1)\,]\right]_{\varepsilon=0}. \tag{2.21}$$

Звідси видно, що

$$\frac{\delta\,\Phi(\eta(\lambda'))}{\delta\eta(\lambda_1)} = \frac{\partial\,\Phi(\eta(\lambda'))}{\partial\eta(\lambda')}\,\frac{\delta\eta(\lambda')}{\delta\eta(\lambda_1)} = \frac{\partial\,\Phi(\eta(\lambda'))}{\partial\eta(\lambda')}\,\delta(\lambda'-\lambda_1)\,, \tag{2.22}$$

де $\delta(\lambda'-\lambda_1)$ — дельта-функція Дірака.

У такий самий спосіб вводяться функціональні похідні вищих порядків. Зокрема, диференціюючи (2.22) за $\eta(\lambda_2)$, знайдемо

$$\frac{\delta^2\,\Phi(\eta(\lambda'))}{\delta\eta(\lambda_2)\,\delta\eta(\lambda_1)} = \frac{\partial^2\,\Phi(\eta(\lambda'))}{\partial[\,\eta(\lambda')\,]^2}\,\delta(\lambda'-\lambda_1)\,\delta(\lambda'-\lambda_2)\,. \tag{2.23}$$

Звернемо увагу на те, що при $\lambda' = \lambda_1$ функціональна похідна не визначена. Справді, як випливає з (2.22), при $\lambda' = \lambda_1$ дельта-функція перетворюється в $\delta(0)$, тобто

$$\frac{\delta\,\Phi(\eta(\lambda_1))}{\delta\eta(\lambda_1)} = \frac{\partial\,\Phi}{\partial\eta}\,\delta(0)\,. \tag{2.24}$$

Аналогічно при $\lambda_1 = \lambda_2$ формула (2.23) набирає вигляду

$$\frac{\delta^2\,\Phi(\eta(\lambda'))}{[\delta\eta(\lambda_1)]^2}=\frac{\partial^2\Phi}{\partial\eta^2}\,[\delta(\lambda'-\lambda_1)]^2\equiv\frac{\partial^2\Phi}{\partial\eta^2}\,\delta(\lambda'-\lambda_1)\,\delta(0). \tag{2.25}$$

Наявність у цих формулах виразів $\delta(0)$, $\delta^2(\lambda'-\lambda_1)$ відображає невизначеність відповідних похідних.

Функціональну похідну певною мірою можна розглядати як узагальнення звичайної похідної від функції багатьох змінних. Замінимо функцію $\eta(\lambda')$ на проміжку (λ_0,λ) набором чисел $\eta_1\ldots\eta_n$ $(\eta_j\equiv\eta(\lambda_j))$ (Таку заміну називають скінченнократною апроксимацією). Очевидно, що можемо записати

$$\frac{\partial\,\Phi(\eta_j)}{\partial\eta_j}=\frac{\partial}{\partial\eta_j}\sum_{i=1}^{n}\Phi(\eta_i)\equiv\frac{1}{\Delta\lambda'}\,\frac{\partial}{\partial\eta(\lambda_j)}\sum_{i=1}^{n}\Delta\lambda'\,\Phi(\eta(\lambda_i)).$$

У граничному випадку $\Delta\lambda'\to 0$, $n\to\infty$ остання сума переходить в інтеграл за λ'. Отже,

$$\frac{\partial\,\Phi(\eta(\lambda_j))}{\partial\eta(\lambda_j)}=\frac{1}{\Delta\lambda'}\,\frac{\partial}{\partial\eta(\lambda_j)}\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda'\,\Phi(\eta(\lambda')).$$

Порівнюючи це з означенням (2.21), приходимо до символічної рівності

$$\frac{\delta}{\delta\eta(\lambda_j)}=\frac{1}{\Delta\lambda'}\,\frac{\partial}{\partial\eta(\lambda_j)}. \tag{2.26}$$

Діючи цими операторами на $\Phi(\eta(\lambda_j))$ і враховуючи (2.24), знаходимо $\delta(0)=\frac{1}{\Delta\lambda'}$.

Отже, значення дельта-функції в нулі можна подати як $1/d\lambda$, тобто $\delta(0)=\frac{1}{d\lambda}$. Зауважимо, що хоч таке означення $\delta(0)$ і зустрічається в літературі, однак ніякої конструктивної інформації в ньому немає.

Розглянемо тепер функціональне диференціювання T-експонентних операторів. Нехай в (2.1) $A(\lambda')=\hat{A}(\eta(\lambda'))$. Обчислимо $\frac{\delta U(\lambda,\lambda_0)}{\delta\eta(\lambda)}$. Беручи до уваги (2.2), бачимо, що похідна від n-го доданку матиме вигляд

$$\alpha^n\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda_1\ldots\int_{\lambda_0}^{\lambda_{n-1}}d\lambda_n\left\{\frac{\partial\hat{A}(\eta(\lambda_1))}{\partial\eta(\lambda_1)}\,\delta(\lambda-\lambda_1)\,\hat{A}(\eta(\lambda_2))\ldots\hat{A}(\eta(\lambda_n))+\right.$$

$$\left.+\ldots+\hat{A}(\eta(\lambda_1))\ldots\frac{\partial\hat{A}(\eta(\lambda_n))}{\partial\eta(\lambda_n)}\,\delta(\lambda-\lambda_n)\right\}=$$

$$=\frac{1}{2}\,\alpha\,\frac{\partial\hat{A}(\eta(\lambda))}{\partial\eta(\lambda)}\,T\left\{\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda'\,\hat{A}(\eta(\lambda'))\right\}^{n-1}.$$

Таким чином,

$$\frac{\delta U(\lambda,\lambda_0)}{\delta\eta(\lambda)}=\frac{1}{2}\,\alpha\,\frac{\partial\hat{A}(\eta(\lambda))}{\partial\eta(\lambda)}\,U(\lambda,\lambda_0). \tag{2.27}$$

Аналогічно можна показати, що

$$\frac{\delta U(\lambda,\lambda_0)}{\delta\eta(\lambda_0)}=U(\lambda,\lambda_0)\cdot\frac{1}{2}\,\alpha\,\frac{\partial A(\eta(\lambda_0))}{\partial\eta(\lambda_0)}. \tag{2.28}$$

Щоб знайти функціональн похідну за $\eta(\lambda_1)$ $(\lambda_0<\lambda_1<\lambda)$, скористаємось властивістю мультиплікативності для оператора $U(\lambda,\lambda_0)$, поклавши $U(\lambda,\lambda_0)=U(\lambda,\lambda_1)\,U(\lambda_1,\lambda_0)$. Тоді

$$\frac{\delta U(\lambda,\lambda_0)}{\delta\eta(\lambda_1)}=\frac{\delta U(\lambda,\lambda_1)}{\delta\eta(\lambda_1)}\,U(\lambda_1,\lambda_0)+U(\lambda,\lambda_1)\,\frac{\delta U(\lambda_1,\lambda_0)}{\delta\eta(\lambda_1)}.$$

Використавши тут формули (2.27), (2.28), матимемо

$$\frac{\delta U(\lambda,\lambda_0)}{\delta\eta(\lambda_1)}=U(\lambda,\lambda_1)\cdot\alpha\,\frac{\partial A(\eta(\lambda_1))}{\partial\eta(\lambda_1)}\cdot U(\lambda_1,\lambda_0). \tag{2.29}$$

2.4. Рівняння Блоха

Розглянемо тепер експонентний оператор $K=e^{-\beta H}$. Оператори такого типу характерні для багатьох задач квантової теорії. Наприклад, якщо H — оператор Гамільтона, а β^{-1} — статистична температура, то K є так званим статистичним оператором — одним з фундаментальних понять рівноважної статистичної теорії. Ще одним прикладом оператора K є оператор еволюції (1.28) стаціонарної квантово-механічної системи. Зауважимо також, що саме з такими виразами маємо справу в разі зображення функцій від операторів інтегралами Фур'є чи Лапласа. Нехай оператор H складається з двох доданків $(H=H_0+V)$, які не комутують між собою. Часто виникає потреба винести з K оператор $\exp(-\beta H_0)$. Саме з такою ситуацією маємо справу в квантово-механічній або термодинамічній теорії збурень. Оскільки H_0 і V не комутують, то зрозуміло, що $K\neq\exp(-\beta H_0)\cdot\exp(-\beta V)$. Покладемо

$$K=e^{-\beta(H_0+V)}\equiv e^{-\beta H_0}\cdot S(\beta). \tag{2.30}$$

Продиференціюємо (2.30) за β:

$$-(H_0+V)\,e^{-\beta(H_0+V)}=-H_0\,e^{-\beta H_0}\cdot S(\beta)+e^{-\beta H_0}\cdot\frac{\partial S(\beta)}{\partial\beta}.$$

Ліву сторону можна переписати у вигляді $-(H_0+V)e^{-\beta H_0}\cdot S(\beta)$. Тоді доданки з H_0 скоротяться. Якщо ще домножити ліворуч обидві сторони рівності на $e^{+\beta H_0}$, дістанемо так зване рівняння Блоха

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} = -e^{\beta H_0} V e^{-\beta H_0}\cdot S(\beta), \qquad S(0)=1. \tag{2.31}$$

. Додаткова умова $S(0)=1$ є очевидною, оскільки при $\beta=0$ ліва сторона в (2.30) перетворюється на одиницю.

Операторне рівняння (2.31) дає змогу відшукати оператор $S(\beta)$. Як і при розв'язуванні рівняння Шредінгера (див.під розд. 1.1), зручно перейти до інтегральної форми цих співвідношень. Очевидно, що

$$S(\beta) = 1 - \int_0^\beta d\beta' \, V(\beta') S(\beta'); \quad V(\beta') = e^{\beta' H_0} V e^{-\beta' H_0}. \tag{2.32}$$

Розв'язуючи інтегральне рівняння методом послідовних наближень, знайдемо

$$S(\beta) = 1 + \sum_{n\ge 1} (-1)^n \int_0^\beta d\beta_1 \ldots \int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_n \, V(\beta_1)\ldots V(\beta_n). \tag{2.33}$$

Ряд (2.33) згортається в T-експонентний оператор. Підставивши результат в (2.30), дістанемо рівність

$$e^{-\beta(H_0+V)} = e^{-\beta H_0}\, T\exp\Big(-\int_0^\beta d\beta' \, V(\beta')\Big), \tag{2.34}$$

де оператор $V(\beta')$ визначається другою з формул (2.32).

Іноді замість (2.30) зручно вимагати, щоб

$$e^{-\beta(H_0+V)} = \overline{S}(\beta)\, e^{-\beta H_0}. \tag{2.35}$$

Оператор $\overline{S}(\beta)$ визначається таким самим методом, як і $S(\beta)$. Однак результат можна отримати простіше. Справді, порівнюючи (2.35) з (2.30), бачимо, що

$$\overline{S}(\beta) = e^{-\beta H_0} S(\beta) e^{\beta H_0}$$

Підставляючи сюди замість $\overline{S}(\beta)$ формулу (2.33) і використовуючи тотожне зображення одиниці у вигляді $e^{\beta H_0} e^{-\beta H_0}$, знаходимо:

$$\overline{S}(\beta) = 1 + \sum_{n\ge 1} (-1)^n \int_0^\beta d\beta_1 \ldots \int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_n \, \overline{V}(\beta_1)\ldots \overline{V}(\beta_n), \tag{2.36}$$

де

$$\overline{V}(\beta_i) = e^{-\beta H_0} V(\beta_i) e^{\beta H_0} = e^{-(\beta-\beta_i)H_0} V e^{(\beta_i-\beta)H_0}. \tag{2.37}$$

Таким чином,

$$e^{-\beta(H_0+V)} = T\exp\left[-\int_0^\beta d\beta' \, \overline{V}(\beta')\right] e^{-\beta H_0} \tag{2.38}$$

Вправа 4. *Одержати формули (2.36)–(2.38) на основі рівняння Блоха для оператора* $\overline{S}(\beta)$.

Співвідношення, аналогічні до (2.34) або (2.38), справджуються також для T-експонентних операторів. Розглянемо оператор

$$\widetilde{U}(\lambda,\lambda_0) = T\exp\left[\alpha \int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda' \, \big(A(\lambda') + B(\lambda')\big)\right]. \tag{2.39}$$

Покладемо, що

$$\widetilde{U}(\lambda,\lambda_0) = U(\lambda,\lambda_0)\cdot S(\lambda,\lambda_0), \tag{2.40}$$

де $U(\lambda,\lambda_0)$ визначається за формулою (2.1).

Рівняння для $S(\lambda,\lambda_0)$ одержується диференціюванням цих співвідношень за параметром λ згідно з формулою (2.15). Неважко переконатись, що воно матиме вигляд, подібний до (2.31):

$$\frac{\partial S(\lambda,\lambda_0)}{\partial \lambda} = \alpha U^{-1}(\lambda_0,\lambda) B(\lambda) U(\lambda,\lambda_0)\, S(\lambda,\lambda_0).$$

Причому, як це видно з (2.39), (2.40), $S(\lambda_0,\lambda_0)=1$. Повторивши тут дії, які привели до формули (2.34), знайдемо

$$S(\lambda,\lambda_0) = T\exp\left[\alpha \int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda' \, U^{-1}(\lambda_0,\lambda') B(\lambda') U(\lambda',\lambda_0)\right]. \tag{2.41}$$

2.5. Фейнманівське «розплутування» операторів

Результати підрозд. 2.4 можна отримати іншим способом, так званим фейнманівським «розплутуванням» операторів з-під T-добутку. Проілюструємо метод на прикладі оператора (2.39), переписавши його у тотожному вигляді:

$$\widetilde{U}(\lambda,\lambda_0) = T\left\{T_A \exp\left[\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda' \, A(\lambda')\right]\cdot T_B \exp\left[\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda' \, B(\lambda')\right]\right\}. \tag{2.42}$$

Тут символ T_A впорядковує лише оператори $A(\lambda')$, а T_B— відповідно $B(\lambda')$; зовнішній символ T впорядковує експоненти між собою. Ідея методу полягає у частковому впорядкуванні операторів. Зокрема, позначимо першу T-експоненту згідно з (2.1) $U(\lambda,\lambda_0)$ і впорядкуємо її з операторами $B(\lambda')$. Таку операцію називають «розплутуванням» в (2.39) оператора $U(\lambda,\lambda_0)$ з-під знака T-добутку. Для цього спочатку впорядкуємо між собою оператори $B(\lambda')$. За означенням (див. (2.1), (2.2)) маємо

$$\tilde{U}(\lambda,\lambda_0)=U(\lambda,\lambda_0)+\sum_{n\geq 1}T\left\{U(\lambda,\lambda_0)\alpha^n\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda_1\ldots\int_{\lambda_0}^{\lambda_{n-1}}d\lambda_n B(\lambda_1)\ldots B(\lambda_n)\right\}. \quad (2.43)$$

Ми вже тут врахували, що $TU(\lambda,\lambda_0)=U(\lambda,\lambda_0)$. Тепер впорядкуємо $U(\lambda,\lambda_0)$ з B, використовуючи властивість мультиплікативності оператора $U(\lambda,\lambda_0)$:

$$U(\lambda,\lambda_0)=U(\lambda,\lambda_1)U(\lambda_1,\lambda_2)\ldots U(\lambda_{n-1},\lambda_n)U(\lambda_n,\lambda_0);$$

$$(\lambda>\lambda_1>\lambda_2>\ldots>\lambda_n>\lambda_0).$$

Очевидно, що

$$T\left\{U(\lambda,\lambda_0)B(\lambda_1)\ldots B(\lambda_n)\right\}= \quad (2.44)$$

$$=U(\lambda,\lambda_1)B(\lambda_1)U(\lambda_1,\lambda_2)B(\lambda_2)\ldots U(\lambda_{n-1},\lambda_n)B(\lambda_n)U(\lambda_n,\lambda_0).$$

Для того щоб після підстановки (2.44) в (2.43) ряд можна було згорнути, вставимо між операторами $B(\lambda_i)$ та $U(\lambda_i,\lambda_{i+1})$ одиницю, записавши її як $U^{-1}(\lambda_i,\lambda)U(\lambda,\lambda_i)$. Тоді $B(\lambda_i)U(\lambda_i,\lambda_{i+1})=B(\lambda_i)U^{-1}(\lambda_i,\lambda)U(\lambda,\lambda_{i+1})$. Після цього формула (2.44) перепишеться у вигляді

$$T\left\{U(\lambda,\lambda_0)B(\lambda_1)\ldots B(\lambda_n)\right\}=\left[U(\lambda,\lambda_1)B(\lambda_1)U^{-1}(\lambda_1,\lambda)\right]\times$$
$$\times\left[U(\lambda,\lambda_2)B(\lambda_2)U^{-1}(\lambda_2,\lambda)\right]\ldots\left[U(\lambda,\lambda_n)B(\lambda_n)U^{-1}(\lambda_n,\lambda)\right]\cdot U(\lambda,\lambda_0).$$

Підставляючи цей результат в (2.43), бачимо, що з кожного з доданків виноситься у праву сторону оператор $U(\lambda,\lambda_0)$, після чого ряд згортається в T-експоненту. Отримаємо

$$\tilde{U}(\lambda,\lambda_0)=T\exp\left[\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda'\,U(\lambda,\lambda')B(\lambda')U^{-1}(\lambda',\lambda)\right]\cdot U(\lambda,\lambda_0). \quad (2.45)$$

Вправа 5. *Показати, що* $\tilde{U}(\lambda,\lambda_0)$ *можна записати у вигляді*

$$\tilde{U}(\lambda,\lambda_0)=U(\lambda,\lambda_0)T\exp\left[\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda'\,U^{-1}(\lambda_0,\lambda')B(\lambda')U(\lambda',\lambda_0)\right]. \quad (2.46)$$

Формули (2.45), (2.46) (як і формули підрозд. 2.4) дають змогу обґрунтувати правила диференціювання експонентних операторів, а також інших функцій від операторів. Доведемо лише співвідношення (2.18) як найбільш загальне з підрозд. 2.2. За означенням похідної

$$\frac{\partial U_\gamma(\lambda,\lambda_0)}{\partial\gamma}=\lim_{\delta\gamma\to 0}\frac{1}{\delta\gamma}\left[U_{\gamma+\delta\gamma}(\lambda,\lambda_0)-U_\gamma(\lambda,\lambda_0)\right]. \quad (2.47)$$

Оскільки, обчислюючи різницю в квадратних дужках, досить обмежитись урахуванням лише членів порядку $\delta\gamma$, то

$$U_{\gamma+\delta\gamma}(\lambda,\lambda_0)\approx T\exp\left\{\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda'\left[A_\gamma(\lambda')+\frac{\partial A_\gamma(\lambda')}{\partial\gamma}\delta\gamma\right]\right\}.$$

Застосовуючи формулу (2.45) (при $B(\lambda')=\delta\gamma\dfrac{\partial A_\gamma(\lambda')}{\partial\gamma}$) і відкидаючи члени порядку $(\delta\gamma)^n$ $(n\geq 2)$, знаходимо

$$U_{\gamma+\delta\gamma}(\lambda,\lambda_0)\approx\left\{1+\alpha\delta\gamma\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda'\,U(\lambda,\lambda')\frac{\partial A_\gamma(\lambda')}{\partial\gamma}\delta\gamma\,U^{-1}(\lambda',\lambda)\right\}U(\lambda,\lambda_0).$$

Підставивши цей результат у (2.47), дістанемо

$$\frac{\partial U_\gamma(\lambda,\lambda_0)}{\partial\gamma}=\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda'\,U(\lambda,\lambda')\frac{\partial A_\gamma(\lambda')}{\partial\gamma}U^{-1}(\lambda',\lambda)\cdot U(\lambda,\lambda_0), \quad (2.48)$$

що, як легко переконатись, збігається з (2.18).

2.6. Приклади експонентних операторів

Застосовуючи методи, які обговорюються в нашому курсі, можна часто зустріти операторні конструкції вигляду

$$U(\lambda,\lambda_0)F(B)U^{-1}(\lambda_0,\lambda) \quad \text{або} \quad e^{\alpha A}F(B)e^{-\alpha A}, \quad (2.49)$$

де $F(B)$ — деяка функція від оператора B.

Приступаючи до розрахунку таких виразів, зауважимо перш за все, що завжди справджуються такі операторні рівності:

$$e^{\alpha A}F(B)e^{-\alpha A}=F(B_\alpha);\qquad B_\alpha=e^{\alpha A}Be^{-\alpha A};$$

$$U(\lambda,\lambda_0)F(B)U^{-1}(\lambda_0,\lambda)=F(\tilde{B});$$

$$\tilde{B}=U(\lambda,\lambda_0)BU^{-1}(\lambda_0,\lambda). \quad (2.50)$$

Справді, розвинемо $F(B)$ у ряд Тейлора за степенями оператора B. Тоді

7 – IIIО

$$e^{\alpha A}F(B)e^{-\alpha A}=e^{\alpha A}\left\{F(0)+\frac{1}{1!}F'(0)B+\frac{1}{2!}F''(0)BB+\dots\right\}e^{-\alpha A},$$

де штрихом позначено похідну від функції F за аргументом.

Якщо тепер між двома сусідніми операторами B вставити одиницю у вигляді $e^{-\alpha A}e^{\alpha A}$, то права сторона останньої формули набере вигляду

$$F(0)+\frac{1}{1!}F'(0)B_\alpha+\frac{1}{2!}F''(0)B_\alpha B_\alpha+\dots\ ,$$

що збігається з розвиненням Тейлора для функції $F(B_\alpha)$.

Аналогічно доводиться і друга група формул (2.50). Зазначимо окремо, що рівності (2.50) виконуються навіть тоді, коли $F(B)$ не може бути розвиненою в ряд в околі нуля (наприклад, $F(B)=B^{-1}$). У такому випадку вираз $F(B)$ потрібно замінити на $F(B+\delta)$ і скористатись розвиненням Тейлора в околі точки δ. Повторивши попередні викладки і поклавши після цього $\delta=0$, знову отримаємо співвідношення (2.50).

Отже, ми показали, що розкриття змісту конструкцій (2.49) зводиться до розрахунку простіших операторних виразів B_α та $\tilde{B}$. Розглянемо їх. Очевидно, що

$$e^{\alpha A}Be^{-\alpha A}=\left\{1+\alpha A+\frac{\alpha^2}{2!}A^2+\frac{\alpha^3}{3!}A^3+\dots\right\}\times$$
$$\times B\left\{1-\alpha A+\frac{\alpha^2}{2!}A^2-\frac{\alpha^3}{3!}A^3+\dots\right\}.$$

Перемноживши ці ряди, знайдемо

$$B_\alpha=B+\alpha(AB-BA)+\alpha^2\left(\frac{1}{2!}A^2B+\frac{1}{2!}BA^2-ABA\right)+\dots .$$

Коефіцієнт біля α є комутатором двох операторів: $AB-BA=[A,B]$. Неважко переконатися, що наступний доданок дорівнює $(1/2!)\cdot[A[A,B]]$. У загальному випадку коефіцієнт біля α^n можна подати у вигляді комутатора n-го порядку: $\frac{1}{n!}[A\,[A\dots[A,B]\dots]]^{(n)}$. Верхній індекс (n) вказує, що вираз містить n операторів A. Таким чином,

$$e^{\alpha A}Be^{-\alpha A}=B+\sum_{n\ge 1}\frac{\alpha^n}{n!}[A\,[A\dots[A,B]\dots]]^{(n)}. \qquad (2.51)$$

Подібну формулу можна отримати і для оператора $\tilde{B}$. Підставимо для цього в $\tilde{B}$ замість U і U^{-1} їх значення з (2.2), (2.9) і перемножимо ряди. Лінійний за α доданок має вигляд

$$\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda_1\left\{A(\lambda_1)B-BA(\lambda_1)\right\}=\alpha\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda_1\,[A(\lambda_1),B].$$

Члени другого порядку задаються інтегралами

$$\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda_1\int_{\lambda_0}^{\lambda_1}d\lambda_2\left\{A(\lambda_1)A(\lambda_2)B+BA(\lambda_2)A(\lambda_1)\right\}-$$
$$-\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda'\,A(\lambda')B\cdot\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda''\,A(\lambda''). \qquad (2.52)$$

Для того щоб добуток двох інтегралів звести до кратного інтеграла, перепишемо його у вигляді

$$\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda'\int_{\lambda_0}^{\lambda'}d\lambda''\,A(\lambda')BA(\lambda'')+\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda'\int_{\lambda'}^{\lambda}d\lambda''\,A(\lambda')BA(\lambda'')$$

і змінимо порядок інтегрування в другому доданку. Перепозначивши змінні інтегрування, бачимо, що вираз (2.52) зводиться до такого:

$$\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda_1\int_{\lambda_0}^{\lambda_1}d\lambda_2\left\{A(\lambda_1)A(\lambda_2)B+BA(\lambda_2)A(\lambda_1)-A(\lambda_1)BA(\lambda_2)-A(\lambda_2)BA(\lambda_1)\right\}=$$
$$=\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda_1\int_{\lambda_0}^{\lambda_1}d\lambda_2\,[A(\lambda_1)[A(\lambda_2),B]].$$

Аналогічно перетворюються доданки вищих порядків. У результаті матимемо

$$U(\lambda,\lambda_0)BU^{-1}(\lambda_0,\lambda)=B+\sum_{n\ge 1}\alpha^n\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda_1\dots\int_{\lambda_0}^{\lambda_{n-1}}d\lambda_n\times$$
$$\times[A(\lambda_1)[A(\lambda_2)\dots[A(\lambda_n),B]\dots]]^{(n)}. \qquad (2.53)$$

Вправа 6. *Показати, що*

$$U^{-1}(\lambda_0,\lambda)BU(\lambda,\lambda_0)=B+\sum_{n\ge 1}(-\alpha)^n\int_{\lambda_0}^{\lambda}d\lambda_1\dots\int_{\lambda_0}^{\lambda_{n-1}}d\lambda_n\times$$
$$\times[A(\lambda_n)[A(\lambda_{n-1})\dots[A(\lambda_1),B]\dots]]^{(n)}. \qquad (2.54)$$

Зауважимо, що в (2.54) оператори $A(\lambda_i)$ розміщені у зворотному по відношенню до (2.53) порядку.

Розглянемо тепер декілька конкретних прикладів застосування формул (2.50), (2.51), (2.53).

1. Нехай $\hat{A} = \frac{d}{dx}$, $\hat{B} = x$. Оскільки $[A, B] = \frac{d}{dx}x - x\frac{d}{dx} = 1$, то $[A[A, B]] = 0$. Отже, дорівнюють нулю і всі комутатори вищих порядків, тобто у ряді (2.51) відмінними від нуля є лише два перші доданки : $x + \alpha$. Використавши це в (2.50), знайдемо

$$e^{\alpha\frac{d}{dx}} F(x) e^{-\alpha\frac{d}{dx}} = F(x+\alpha). \tag{2.55}$$

Формулу можна записати також у вигляді:

$$e^{\alpha\frac{d}{dx}} F(x) = F(x+\alpha) e^{\alpha\frac{d}{dx}}. \tag{2.56}$$

Таким чином, результат дії оператора $e^{\alpha\frac{d}{dx}}$ на функцію $F(x)$ полягає у зміщенні аргументу x на величину α. Тому $e^{\alpha\frac{d}{dx}}$ називають оператором трансляції (або зсуву). Зауважимо, що коли оператор трансляції діє лише на $F(x)$, то (2.55) можемо записати, як

$$e^{\alpha\frac{d}{dx}} F(x) = F(x+\alpha). \tag{2.57}$$

Співвідношення (2.57) є очевидним, оскільки після розвинення експоненти в ряд ліва сторона формули набирає вигляду ряду Тейлора за степенями α для функції $F(x+\alpha)$.

2. Нехай $\hat{A} = x\frac{d}{dx}$, $\hat{B} = x$. Тоді $[A, B] = [x\frac{d}{dx}, x] = x$. Використавши цей результат при обчисленні комутатора другого порядку, отримаємо $[A[A, B]] = [x\frac{d}{dx}, x] = x$. Зрозуміло, що комутатор n-го порядку також дорівнює x. Формула (2.51) набирає вигляду

$$e^{\alpha x\frac{d}{dx}} x e^{-\alpha x\frac{d}{dx}} = x\left(1 + \sum_{n\geq 1}\frac{\alpha^n}{n!}\right) = x e^{\alpha}.$$

Таким чином,

$$e^{\alpha x\frac{d}{dx}} F(x) e^{-\alpha x\frac{d}{dx}} = F(x e^{\alpha}). \tag{2.58}$$

Оператор $e^{\alpha x\frac{d}{dx}}$ називають оператором масштабного перетворення. Цікаво, що при $\alpha = i\pi$ оператор $e^{-i\pi x\frac{d}{dx}}$ має зміст оператора інверсії $\left(x e^{i\pi} = -x\right)$.

3. Ситуація, коли ряд (2.51) згортається в експоненту, не вичерпується щойно розглянутим прикладом. Справді, нехай оператори A, B є такими, що $AB - BA = a B$, де a — деякий числовий параметр. Очевидно, що комутатор n-го порядку дорівнює $a^n B$. Тоді

$$e^{\alpha A} B e^{-\alpha A} = B\left(1 + \sum_{n\geq 1}\frac{(\alpha a)^n}{n!}\right) = B e^{\alpha a} \equiv B_{\alpha}. \tag{2.59}$$

Вправа 7. *У квантовій теорії багатьох тіл при застосуванні формалізму вторинного квантування оператори фізичних величин виражаються через так звані оператори породження і знищення (a_n, a_n^+). Для останніх справедливі такі умови комутації:*

$$a_n a_l^+ + \eta a_l^+ a_n = \delta_{ln};$$

$$a_n a_l + \eta a_l a_n = 0, \quad a_n^+ a_l^+ + \eta a_l^+ a_n^+ = 0,$$

де δ_{ln} — символ Кронекера; $\eta = \pm 1$. Використовуючи ці співвідношення і формулу (2.51), обчислити вираз $e^{\alpha A} B e^{-\alpha A}$ при $A = \sum_j \varepsilon_j a_j^+ a_j$, $B = a_n^+$ та $B = a_n$ (ε_j — деякі числа).

Вправа 8. *Нехай $[A, B] = a C$ і $[A, C] = aB$. Показати, що*

$$e^{\alpha A} B e^{-\alpha A} = B\,ch(\alpha a) + C\,sh(\alpha a). \tag{2.60}$$

Формула (2.51), як і її частинні випадки (2.59), (2.60), справджується не тільки для операторів, а й для квадратних матриць.

Вправа 9. *Обчислити вираз $e^{\alpha\sigma_z}\sigma_{\pm} e^{-\alpha\sigma_z}$, де*

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Використовуючи отриманий результат, знайти

$$e^{\alpha\sigma_z}\begin{pmatrix} 0 & b \\ c & 0 \end{pmatrix} e^{-\alpha\sigma_z}.$$

4. Складнішим порівняно з масштабним перетворенням (2.58) є приклад з операторами $\hat{A} = \varphi(x)\frac{d}{dx}$, $\hat{B} = x$, де $\varphi(x)$ — деяка функція. Застосування формули (2.51) у такому випадку неефективне, оскільки комутатори вищих порядків будуть занадто складними для встановлення якогось алгоритму, що дозволив би згорнути ряд. Однак результат можна отримати простішим шляхом. Перейдемо від x до нової змінної y, покладаючи $x = \gamma(y)$. Якщо функцію $\gamma(y)$ вибрати так, щоб оператор $\varphi(x)\frac{d}{dx}$ перетворився в $\frac{d}{dy}$ (очевидно, що для цього $\gamma(y)$ має бути розв'язком диференціального

8 - ІІІО

рівняння $\frac{d\gamma(y)}{dy}=\varphi(\gamma(y))$, то $\exp(\alpha\varphi(x)\frac{d}{dx})$ перетвориться на оператор трансляції $\exp(\alpha\frac{d}{dy})$. Тоді

$$e^{\alpha\varphi(x)\frac{d}{dx}}F(x)e^{-\alpha\varphi(x)\frac{d}{dx}}=$$
$$=e^{\alpha\frac{d}{dy}}F(\gamma(y))e^{-\alpha\frac{d}{dy}}=F(\gamma(y+\alpha)). \tag{2.61}$$

Після цього потрібно повернутись до старої змінної x. Наприклад, при $\varphi(x)=x$ потрібну заміну змінної можна подати у вигляді $x=e^y$ $(y=\ln x)$ і в (2.61) $F(\gamma(y+\alpha))=F(e^{y+\alpha})=F(xe^{\alpha})$, що збігається з (2.58).

Розглянемо ще випадок $\varphi(x)=x^2$. Заміна змінних задається формулою $x=-\frac{1}{y}$. Тоді

$$F(\gamma(y+\alpha))=F(-\frac{1}{y+\alpha})=F(\frac{x}{1-\alpha x}).$$

Отже,

$$e^{\alpha x^2\frac{d}{dx}}F(x)e^{-\alpha x^2\frac{d}{dx}}=F(\frac{x}{1-\alpha x}). \tag{2.62}$$

5.Щойно розглянутий метод має деякі недоліки. Зокрема, ним важко скористатись у випадку багатьох змінних. Покажемо, що існує більш загальний спосіб розрахунку виразів типу (2.61). Розглянемо спочатку випадок однієї змінної. Нехай

$$\overline{U}(\lambda,\lambda')F(x)\overline{U}^{-1}(\lambda',\lambda)=\widetilde{F}(x);$$
$$\overline{U}(\lambda,\lambda')=T\exp\left(\int_{\lambda'}^{\lambda}d\lambda''\varphi(x,\lambda'')\frac{d}{dx}\right), \tag{2.63}$$

де $\varphi(x,\lambda'')$ — деяка функція, залежна від координати x і параметра λ''. Очевидно, що приклади з попереднього пункту є частинним випадком (2.63) (якщо φ незалежна від λ'' і $\lambda-\lambda'=\alpha$). Згідно з (2.50)

$$\widetilde{F}(x)=\widetilde{F}(x(\lambda')), \tag{2.64}$$

де

$$x(\lambda')=\overline{U}(\lambda,\lambda')x\overline{U}^{-1}(\lambda',\lambda). \tag{2.65}$$

Знайдемо $x(\lambda')$. Для цього продиференціюємо (2.65) за λ' (!). Зважаючи на (2.16) і подібну формулу для оберненого оператора, отримаємо

$$\frac{dx(\lambda')}{d\lambda'}=\overline{U}(\lambda,\lambda')\left\{-\varphi(x,\lambda')\frac{d}{dx}\cdot x+x\,\varphi(x,\lambda')\frac{d}{dx}\right\}\overline{U}^{-1}(\lambda',\lambda)=$$

$$=-\overline{U}(\lambda,\lambda')\varphi(x,\lambda')\overline{U}^{-1}(\lambda',\lambda).$$

Якщо тепер знову врахувати формули (2.50), визначення $x(\lambda')$ (2.65) і те, що при $\lambda'=\lambda$ $\overline{U}(\lambda,\lambda')=1$, $\overline{U}^{-1}(\lambda',\lambda)=1$, можна записати

$$\frac{dx(\lambda')}{d\lambda'}=-\varphi(x(\lambda'),\lambda'),\quad x(\lambda')\big|_{\lambda'=\lambda}=x, \tag{2.66}$$

тобто величина $x(\lambda')$ визначається з диференціального рівняння першого порядку. Таким чином, дія оператора $\overline{U}(\lambda,\lambda')$ на функцію $F(x)$ зводиться до заміни в ній аргументу x розв'язком рівняння (2.66).

Зауважимо, що коли φ не містить явної залежності від λ', це рівняння просто інтегрується. Тоді отримуються співвідношення з попереднього пункту.

Вправа 10. *Використовуючи (2.64)-(2.66), отримати формули (2.62), (2.58).*

Узагальнення отриманих результатів на випадок багатьох змінних очевидне. Нехай $\widetilde{F}=\widetilde{F}(x_1,\dots,x_n)$,

$$\overline{U}^{(n)}(\lambda\lambda')=T\exp\int_{\lambda'}^{\lambda}d\lambda''\sum_{i=1}^{n}\varphi_i(x_1,\dots,x_n,\lambda'')\frac{\partial}{\partial x_i}; \tag{2.67}$$

Тоді $\widetilde{F}=\widetilde{F}(x_1(\lambda'),\dots,x_n(\lambda'))$, де величини $x_j(\lambda')$ визначаються системою рівнянь

$$\frac{dx_j(\lambda')}{d\lambda'}=-\varphi_j(x_1(\lambda'),\dots,x_n(\lambda'),\lambda'),\quad x_j(\lambda)=x_j. \tag{2.68}$$

Застосуємо тепер наш метод для розкриття дії T-експонентних операторів у виразі

$$\widetilde{F}\left(\frac{d}{dx}\right)=\overline{U}(\lambda,\lambda')F\left(\frac{d}{dx}\right)\overline{U}^{-1}(\lambda,\lambda')=F\left(\hat{\pi}(\lambda')\right), \tag{2.69}$$

де $F\left(\frac{d}{dx}\right)$ є функцією від оператора $\frac{d}{dx}$.

Очевидно, що

$$\hat{\pi}(\lambda')=\overline{U}(\lambda,\lambda')\frac{d}{dx}\overline{U}^{-1}(\lambda,\lambda'),\quad \hat{\pi}(\lambda')\big|_{\lambda'=\lambda}=\frac{d}{dx}. \tag{2.70}$$

Як і у попередньому прикладі, продиференціюємо (2.70) за λ', після чого отримаємо диференціальне рівняння для визначення оператора $\hat{\pi}(\lambda')$:

$$\frac{d\hat{\pi}(\lambda')}{d\lambda'}=\varphi'\left(x(\lambda'),\lambda'\right)\hat{\pi}(\lambda'), \tag{2.71}$$

де $x(\lambda')$ задається формулою (2.65) і знаходиться шляхом розв'язування рівняння (2.66), а $\varphi' \equiv \frac{d\varphi}{dx}$.

Зручно перейти до інтегральної форми цього рівняння. Враховуючи початкову умову з (2.70), матимемо

$$\hat{\pi}(\lambda') = \frac{d}{dx} - \int_{\lambda'}^{\lambda} d\lambda'' \varphi'\left(x(\lambda''), \lambda''\right) \hat{\pi}(\lambda'').$$

Рівняння розв'язується методом ітерацій. Отримаємо

$$\hat{\pi}(\lambda') = \left\{ 1 + \sum_{n \geq 1} \int_{\lambda'}^{\lambda} d\lambda_1 \ldots \int_{\lambda_{n-1}}^{\lambda} d\lambda_n \varphi'\left(x(\lambda_1), \lambda_1\right) \ldots \varphi'\left(x(\lambda_n), \lambda_n\right) \right\} \frac{d}{dx}.$$

Ряд згортається в експоненту. Таким чином оператор $\hat{\pi}(\lambda')$ зводиться до наступного:

$$\hat{\pi}(\lambda') = \exp\left[-\int_{\lambda'}^{\lambda} d\lambda'' \varphi'\left(x(\lambda''), \lambda''\right) \right] \frac{d}{dx}. \tag{2.72}$$

Остання формула спрощується у випадку, коли функція φ не містить явної залежності від параметра λ''. Дійсно, беручи до уваги (2.66), бачимо, що $\varphi'(x(\lambda'')) \equiv \varphi\varphi'/\varphi = -\frac{dx(\lambda'')}{d\lambda''} \frac{\varphi'}{\varphi} = -\frac{d}{d\lambda''} \ln \varphi(x(\lambda''))$, тобто в (2.72) можна легко виконати інтегрування. В результаті знайдемо

$$\hat{\pi}(\lambda') = \frac{\varphi(x)}{\varphi(x(\lambda'))} \cdot \frac{d}{dx}. \tag{2.73}$$

6. Розглянемо ще приклад з експонентним оператором дещо складнішого вигляду, а саме, обчислимо вираз

$$F = e^{[a\frac{d}{dx} + f(x)]} F(x). \tag{2.74}$$

Очевидно, що його можна переписати у тотожному вигляді як

$$F = T \exp\left\{ \int_0^1 d\lambda \left[a\frac{d}{dx} + f(x) \right] \right\} F(x).$$

Використовуючи фейнманівське «виплутування» операторів, винесемо праворуч з-під знака T-добутку оператор диференціювання (див. (2.39), (2.45)). Тоді

$$F = T \exp\left\{ \int_0^1 d\lambda\, e^{(1-\lambda)a\frac{d}{dx}} f(x) e^{-(1-\lambda)a\frac{d}{dx}} \right\} e^{a\frac{d}{dx}} F(x) =$$

$$= \left[T \exp\left\{ \int_0^1 d\lambda\, f\left(x + (1-\lambda)a\right) \right\} \right] F(x+a).$$

Тут використано співвідношення (2.55). Оскільки в правій частині отриманої формули фігурують лише функції, то знак T-добутку можна опустити. Неважко побачити, що після заміни змінних вираз набере вигляду

$$F = \exp\left\{ \frac{1}{a} \int_x^{x+a} dx' f(x') \right\} F(x+a). \tag{2.75}$$

Вправа 11. *Показати, що*

$$T \exp\left\{ \int_0^{\lambda} d\lambda' \left[a(\lambda')\frac{d}{dx} + f(x) \right] \right\} =$$

$$= \exp\left\{ \int_0^{\lambda} d\lambda' f\left(x + \int_{\lambda'}^{\lambda} d\lambda'' a(\lambda'')\right) \right\} \cdot F\left(x + \int_0^{\lambda} d\lambda' a(\lambda')\right). \tag{2.76}$$

7. Ми розглянули ряд прикладів експонентних операторів з похідними першого порядку. У випадку старших похідних доводиться, як правило, користуватись безпосередньо формулами (2.51) чи (2.53). Конструкції (2.49) у разі наявності старших похідних уже не зводяться до функцій, а залишаються операторами. Наприклад, застосовуючи (2.50), (2.51), неважко показати, що

$$\exp\left(\alpha\frac{d^n}{dx^n}\right) F(x) \exp\left(-\alpha\frac{d^n}{dx^n}\right) = F\left(x + n\alpha\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}\right). \tag{2.77}$$

Однак, часто становить інтерес результат дії експонентного оператора лише на задану функцію (тобто необхідно обчислити вираз $\exp(\hat{A}) \cdot F(x)$). У такому випадку можна скористатись деякими способами, що дозволяють виразити ці оператори через експонентні оператори з першими похідними, техніку роботи з якими ми вивчили. Проілюструємо це на двох прикладах.

а) Нехай нам потрібно обчислити вираз

$$\exp\left(\frac{\alpha}{2}\frac{d^2}{dx^2}\right) \Phi(x) \equiv \Phi_{\alpha}(x). \tag{2.78}$$

Розглянемо спочатку допоміжну рівність

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(-\frac{1}{2}\eta^2 \pm \eta a\right) = \sqrt{2\pi}\, e^{\frac{1}{2}a^2}, \tag{2.79}$$

яка є очевидною, оскільки після перетворення змінної інтегрування $\eta \to \eta \pm a$ інтеграл зводиться до пуассонівського. Тут a може бути довільним (у тому числі й комплексним) числом. Вважатимемо, що формулу (2.79) можна записати також і для оператора, тобто покладемо

$$e^{\frac{\alpha}{2}\hat{A}^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(-\frac{1}{2}\eta^2 \pm \eta\sqrt{\alpha}\,\hat{A}\right). \tag{2.80}$$

Щоб переконатися у правильності цієї рівності, досить розвинути в ряди обидві операторні експоненти і порівняти вирази з однаковими степенями α. Очевидно, що в разі застосування (2.80) до нашого прикладу (2.78) потрібно покласти $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ і скористатись властивістю оператора трансляції. Тоді

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(-\frac{1}{2}\eta^2\right) \Phi(x \pm \eta\sqrt{\alpha}). \tag{2.81}$$

б) Ще один спосіб переходу до експонентних операторів з першими похідними грунтується на використанні операторної рівності

$$\Gamma(\hat{A}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, \Gamma(\xi)\,\delta(\xi - \hat{A}), \tag{2.82}$$

де $\delta(\xi - \hat{A})$ — δ-функція від оператора. Використавши для неї інтегральне зображення, запишемо

$$\Gamma(\hat{A}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \Gamma(\xi)\, e^{i\xi p} e^{-ip\hat{A}}.$$

Звідси бачимо, що

$$\Gamma\left(\frac{d}{dx}\right)\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi\, dp}{2\pi}\, \Gamma(\xi)\, e^{i\xi p}\, \Psi(x - ip). \tag{2.83}$$

На закінчення звернемо увагу на те, що формули (2.81), (2.83) не є універсальними. Зокрема, функції Ψ, Φ, Γ мають бути такими, щоб існували відповідні інтеграли.

2.7. Формула Фейнмана для оберненого оператора

Важливим прикладом операторної експоненти є фейнманівська формула для визначення оберненого оператора. Розглянемо дві рівності:

$$\int_0^{\infty} d\xi\, e^{-\xi\alpha} = \frac{1}{\alpha}, \quad \frac{1}{\beta} = \pm\frac{1}{i}\int_0^{\infty} ds\, e^{-\varepsilon s} e^{\pm is\beta}, \tag{2.84}$$

де α, β — комплексні числа.

Зрозуміло, що для існування першого з інтегралів має бути $\operatorname{Re}\alpha > 0$. Другий інтеграл існує для будь-яких дійсних β. Якщо β комплексне, то його уявна частина має забезпечувати збіжність інтеграла. Фейнманівське зображення оберненого оператора грунтується на твердженні, що формули (2.84) справджується тоді, коли α і β є операторами, тобто якщо $\hat{A}$, $\hat{B}$ - оператори, то обернені до них оператори визначаються рівностями

$$\hat{A}^{-1} = \int_0^{\infty} d\xi\, e^{-\xi\hat{A}}; \tag{2.85}$$

$$\hat{B}^{-1} = \pm\frac{1}{i}\int_0^{\infty} ds\, e^{-\varepsilon s} e^{\pm is\hat{B}}. \tag{2.86}$$

Очевидно, що у першому випадку власні значення оператора $\hat{A}$ (вони визначаються з рівняння $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$) мають бути додатними ($a_n > 0$). Для існування інтеграла (2.86) досить, щоб оператор $\hat{B}$ був ермітовим (тоді його власні значення будуть дійсними).

Зауважимо, що подібним способом можна подати і степені обернених операторів. Наприклад,

$$\left(\hat{A}^{-1}\right)^n = \frac{1}{(n-1)!}\int_0^{\infty} d\xi\, \xi^{n-1} e^{-\xi\hat{A}}. \tag{2.87}$$

2.8. Три модельні приклади функцій Гріна

Використаємо тепер розвинуту вище техніку операторного числення для знаходження функцій Гріна деяких модельних систем.

1. Вільна частинка в одновимірному просторі. Згідно з (1.39) функція Гріна задається формулою

$$G(xt, x_0t_0) = \exp\left(\frac{i}{h}(t - t_0)\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\delta(x - x_0). \tag{2.88}$$

Як бачимо, вона збігається з виразом (2.78) при $\alpha = \frac{ih(t - t_0)}{m}$, $\Phi(x) = \delta(x - x_0)$. Тоді згідно з (2.81) можемо записати

$$G(xt, x_0t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left[-\frac{1}{2}\eta^2\right]\delta(x - x_0 + \eta\sqrt{\alpha}) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}}\exp\left[-\frac{1}{2\alpha}(x - x_0)^2\right].$$

Підставивши в цю формулу значення параметра α, знайдемо

$$G(xt, x_0t_0) = \left(\frac{m}{2\pi i h(t - t_0)}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{i}{h}\frac{m(x - x_0)^2}{2(t - t_0)}\right\}. \tag{2.89}$$

Звернемо увагу на те, що величина $\frac{m(x - x_0)^2}{2(t - t_0)}$ у показнику експоненти є класичною дією для вільної частинки.

Вправа 12. *Отримати формулу (2.89), використавши в (2.88) інтегральне зображення δ-функції.*

2. Частинка під дією нестаціонарної зовнішньої сили $F(t)$. Функція Гріна задається формулою (1.39) при $\hat{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - F(t)\,x$. Використовуючи рівняння Блоха (див. (2.30) - (2.34)), винесемо з T-експоненти функцію $F(t')\,x$. Тоді

$$G(xt, x_0 t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}xf(t,t_0)}\,T\exp\left[\frac{i\hbar}{2m}\int_{t_0}^{t}dt'\left(\frac{d^2}{dx^2}\right)_{t'}\right]\delta(x-x_0);$$

де

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}\right)_{t'} = e^{-\frac{i}{\hbar}xf(t',t_0)}\frac{d^2}{dx^2}\,e^{\frac{i}{\hbar}xf(t',t_0)};$$

$$f(t', t_0) = \int_{t_0}^{t'}dt''\,F(t'').$$

Розкривши зміст оператора $\left(\frac{d^2}{dx^2}\right)_{t'}$, згідно з (2.51) знайдемо

$$G = e^{\frac{i}{\hbar}xf(t,t_0)}\,T\exp\left[\frac{i\hbar}{2m}\int_{t_0}^{t}dt'\left(\frac{d^2}{dx^2} + 2\frac{i}{\hbar}f(t',t_0)\frac{d}{dx} + \left[\frac{i}{\hbar}f(t',t_0)\right]^2\right)\right]\delta(x-x_0). \tag{2.90}$$

Оператори в показнику експоненти комутують між собою. Тому в (2.90) можемо покласти $T = 1$, виконати інтегрування за t' і записати експоненту від суми операторів у вигляді добутку експонент. Співмножник з першою похідною є оператором трансляції, а дія другого визначається, наприклад, формулами (2.78), (2.81). Отримаємо

$$G = \exp\frac{i}{\hbar}\left[xf(t,t_0) - \frac{1}{2m}\int_{t_0}^{t}dt'\,f^2(t',t_0)\right]\times$$

$$\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}d\eta\,e^{-\frac{1}{2}\eta^2}\,\delta\left(x - x_0 - \frac{1}{m}\int_{t_0}^{t}dt'\,f(t',t_0) - \eta\left[\frac{i\hbar(t-t_0)}{m}\right]^{1/2}\right).$$

Після обчислення інтеграла за η знайдемо

$$G(xt, x_0 t_0) = \cancel{\exp\frac{i}{\hbar}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right)^{\frac{1}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}S(x,x_0)}, \tag{2.91}$$

де

$$S(x, x_0) = \frac{m(x-x_0)^2}{2(t-t_0)} + \left\{xf(t,t_0) - \frac{(x-x_0)}{(t-t_0)}\int_{t_0}^{t}dt'\,f(t',t_0)\right\} +$$

$$+\frac{1}{2m}\left\{\frac{1}{t-t_0}\left[\int_{t_0}^{t}dt'\,f(t',t_0)\right]^2 - \int_{t_0}^{t}dt'\,f^2(t',t_0)\right\}.$$

Остання формула дещо спрощується, якщо замість функції $f(t', t_0)$ підставити її значення і виконати можливі інтегрування. У результаті матимемо

$t - t'$

$$S(x, x_0) = \frac{m(x-x_0)^2}{2(t-t_0)} + \frac{1}{t-t_0}\left[x\int_{t_0}^{t}dt'\,(t'-t_0)F(t') + x_0\int_{t_0}^{t}dt'\,(t'-t_0)F(t') - \frac{1}{m}\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\,(t'-t_0)(t''-t_0)F(t')F(t'')\right]. \tag{2.92}$$

Як і в попередньому прикладі, функція $S(x, x_0)$ збігається з класичною дією системи, яка описується (в даному випадку) гамільтоніаном $H = \frac{p^2}{2m} - xF(t)$. Нагадаємо, що обидва результати є частинними випадками більш загального положення. А саме, якщо гамільтоніан системи є квадратичною функцією імпульсів і координат, то $G \propto \exp\frac{i}{\hbar}S$, де S — класична дія. Остання знаходиться розв'язуванням класичних рівнянь руху в формі Гамільтона - Якобі. Можна використати й інші форми рівнянь руху класичної механіки, наприклад, рівняння Лагранжа - Ейлера. У такому випадку для визначення S розв'язки цих рівнянь потрібно підставити у функцію Лагранжа і проінтегрувати отриманий вираз за часом на проміжку (t_0, t). Звернемо увагу, що додаткові умови (незалежно від форми механіки) задаються у вигляді $x(t) = x$, $x(t_0) = x_0$. Таким чином, для систем з квадратичним гамільтоніаном розв'язок квантового рівняння Шредінгера завжди виражається через розв'язки рівнянь руху класичної механіки.

Вправа 13. *Переконатися безпосереднім обчисленням, що (2.92) є розв'язком рівняння Гамільтона - Якобі*

$$\frac{\partial S(x,x_0)}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left[\frac{\partial S(x,x_0)}{\partial x}\right]^2 - xF(t) = 0.$$

3. Наведемо ще один важливий приклад, коли функція Гріна для рівняння Шредінгера виражається через класичну дію. Розглянемо частинку в нестаціонарному зовнішньому полі. В одновимірному випадку оператор Гамільтона має вигляд

$\hat H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x,t)$. Функція Гріна визначається формулою (1.39), яку зручно записати у вигляді

$$G(x_j t_j, x_{j-1} t_{j-1}) = \hat G(t_j, t_{j-1})\,\delta(x_j - x_{j-1}) =$$

$$= T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_{j-1}}^{t_j} dt' \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_j^2} + V(x_j,t')\right)\right]\delta(x_j - x_{j-1}). \qquad (2.93)$$

Виразити тут результат дії операторів у формі квадратур у загальному випадку, очевидно, неможливо. Водночас за умови, коли моменти часу t_j та t_{j-1} безмежно мало відрізнятьюся між собою, це можна зробити для довільних функцій $V(x,t)$. Покладемо $t_{j-1} = t_j - \varepsilon$, де $\varepsilon \to 0$. Зміщенням аргументу інтегрування оператор еволюції в (2.93) зводиться до вигляду

$$G_{x_j}(t_j, t_j - \varepsilon) = T_\varepsilon \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^\varepsilon d\tau\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_j^2} + V(x_j, t_j - \tau)\right)\right]. \qquad (2.94)$$

При $\varepsilon \to 0$ цей оператор можна замінити простішим

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V(x_j,t_j)\right]\cdot\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_j^2}\right)\right] = \hat G_{x_j}(\varepsilon). \qquad (2.95)$$

Справді, відмінність між цими формулами виявляється лише у членах другого (і вищих) порядку за ε. Це добре видно в стаціонарному випадку, коли в (2.94) T-добуток не відіграє ніякої ролі. Тоді

$$\hat G_{x_j}(t_j, t_j - \varepsilon) - \hat G(\varepsilon) = \left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\right)^2 \frac{1}{2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{d^2}{dx_j^2}V(x_j) + V(x_j)\frac{d^2}{dx_j^2}\right) -$$

$$-\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\right)^2 V(x_j)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_j^2}\right) = \frac{\varepsilon^2}{4m}\left(\frac{d^2V(x_j)}{dx_j^2} + 2\frac{dV(x_j)}{dx_j}\frac{d}{dx_j}\right).$$

Таким чином, з точністю до членів першого порядку за ε включно оператор еволюції (2.94) можемо замінити на оператор (2.95). Використавши останній в (2.93), будемо мати

$$G(x_j t_j, x_{j-1} t_j - \varepsilon) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V(x_j,t_j)}\cdot\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_j^2}\right)\right]\delta(x_j - x_{j-1}).$$

Вираз у квадратних дужках є функцією Гріна вільної частинки і, як було показано вище, визначається формулою (2.89). Враховуючи це, знаходимо

$$G(x_j t_j, x_{j-1} t_j - \varepsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}S_\varepsilon(x_j, x_{j-1})}\ ;$$

$$S_\varepsilon(x_j, x_{j-1}) = \frac{m}{2\varepsilon}(x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x_j, t_j). \qquad (2.96)$$

Формулу (2.96) можна переписати у вигляді

$$S_\varepsilon(x_j, x_{j-1}) = \varepsilon\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon}\right)^2 - V(x_j, t_j)\right\} = \varepsilon\bar L. \qquad (2.97)$$

Тут $\bar L$ має зміст функції Лагранжа. Справді, функція Лагранжа для частинки в зовнішньому полі задається співвідношенням $L = \frac{m}{2}\left(\frac{dx(t')}{dt'}\right)^2 - V\left(x(t'), t'\right)$. Функція дії отримується інтегруванням L за часом. У нашому випадку

$$S_\varepsilon = \int_{t_j-\varepsilon}^{t_j} dt'\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{dx(t')}{dt'}\right)^2 - V\left(x(t'), t'\right)\right\}$$

Очевидно, що при $\varepsilon \to 0$, $S_\varepsilon = \varepsilon\tilde L$, де $\tilde L$ є середнім значенням підінтегральної функції. Позначивши координати частинки у момент часу t_j, $t_j - \varepsilon$ як x_j, x_{j-1} і врахувавши, що похідна на проміжку $(t_j - \varepsilon, t_j)$ може бути замінена на різницю $(x_j - x_{j-1})/\varepsilon$, бачимо, що $\tilde L$ збігається з $\bar L$ з (2.97). Таким чином, функція $S_\varepsilon(x_j, x_{j-1})$ в (2.96) справді має зміст класичної дії. Підкреслимо, що формули (2.96) правильні лише за умови, що $\varepsilon \to 0$.

3. МЕТОД ЗМІЩЕНЬ

3.1. Зображення зміщень

Повернемось до аналізу операторних експонент K вигляду (2.30). У разі застосування їх до реальних фізичних задач дуже часто оператором є лише один із доданків в $H_0 + V$. Наприклад, у випадку частинки в зовнішньому полі доданок H_0 є диференціальним оператором кінетичної енергії, тоді як оператор потенціальної енергії V є оператором множення, тобто функцією. Мається на увазі, що використовується координатна форма квантової теорії. Оскільки власні функції і власні значення оператора H_0, як правило, відомі, то зображення оператора K у вигляді (2.34) або (2.38) еквівалентне звичайній теорії збурень за степенями взаємодії.

Добре відомо, що такий метод збурень у квантовій теорії є ефективним лише тоді, коли середня потенціальна енергія значно менша від середньої кінетичної. Про таку ситуацію прийнято говорити як про слабкий зв'язок. Якщо ж обидві енергії однакового порядку або середня потенціальна значно більша від середньої кінетичної (сильний зв'язок), застосування теорії збурень за степенями V може бути успішним лише за умови, що яким-небудь способом вдасться знайти суму цілого нескінченного ряду, або принаймні суму його домінуючих членів. Інший підхід полягає в тому, щоб будувати теорію збурень не за степенями V. Однією з можливих реалізацій такого підходу є метод зміщень, запропонований у квантовій механіці ще в 30-ті роки Вігнером. У 60-ті роки І.Юхновський поєднав метод зміщень з методом колективних змінних, що дало змогу ефективно розв'язати цілий ряд задач квантової статистичної фізики. Пояснимо тут основи методу на прикладі однієї частинки масою m у неоднорідному зовнішньому полі. Покладемо

$$\hat{K} = e^{-\beta(\hat{H}_0 + V)}\,, \quad \hat{H}_0 = -\frac{h^2}{2m}\Delta\,, \quad V = V(\vec{r})\,, \tag{3.1}$$

де Δ — оператор Лапласа; $\vec{r}$ — координата частинки.

Розвиваючи експоненту в ряд, маємо доданки трьох типів: лише оператори $(H_0)^n$, добутки функцій на оператори і лише функції. Останні з'являються як від степенів V, так і в результаті дії операторів H_0 на V. Ідея методу полягає в тому, щоб з K виділити всі ці функції у вигляді деякого множника. Наприклад, винесемо ліворуч з K множник $e^{-\beta V}$. Для цього досить скористатися формулами (2.30) - (2.34), помінявши в них H_0 і V місцями. Оскільки

$$e^{\beta' V}\Delta e^{-\beta' V} = \left(e^{\beta' V}\nabla e^{-\beta' V}\right)^2 = \left(\nabla - grad(\beta' V)\right)^2,$$

то отримаємо

$$e^{-\beta(\hat{H}_0 + V)} = e^{-\beta V}\,\hat{\sigma}_1\,;$$

$$\hat{\sigma}_1 = T\exp\int_0^\beta d\beta'\left\{\frac{h^2}{2m}\left[\nabla^2 - 2\beta'(grad V\,\nabla)\right] + V_1(\beta')\right\}; \tag{3.2}$$

$$V_1(\beta', r) = \frac{h^2}{2m}\left[-\beta'\Delta V + (\beta'\, grad V)^2\right].$$

Як бачимо, у показнику T - експоненти з'явилась нова функція V_1, яку також можна винести. Матимемо

$$e^{-\beta(\hat{H}_0 + V)} = \exp\left[-\beta V + \int_0^\beta d\beta'\, V_1(\beta')\right]\hat{\sigma}_2\,. \tag{3.3}$$

Очевидно, що в $\hat{\sigma}_2$ знову з'явиться деяка функція, оскільки при винесенні V_1 оператор ∇ переходить у $\nabla - grad(\int_0^\beta d\beta'\, V_1)$, тобто оператор «зміщується» на градієнт деякої функції. (Саме цим і пояснюється назва методу). Зрозуміло, що цей процес можна продовжити. Наслідком таких перетворень буде рівність

$$e^{-\beta(\hat{H}_0 + V)} = e^{U}\,\hat{\sigma}\,, \tag{3.4}$$

де U — функція, а $\hat{\sigma}$ — оператор.

Запропонований спосіб поділу оператора $\hat{K}$ на два співмножники видається дещо складним. Справді, функція U задається у вигляді ряду, через що постає питання про знаходження його суми. Однак існує значно простіший метод визначення U та $\hat{\sigma}$. Продиференціюємо (3.4) за β. Очевидно, що

$$-(\hat{H}_0 + V)\,e^{U}\hat{\sigma} = \frac{\partial U}{\partial\beta}e^{U}\hat{\sigma} + e^{U}\hat{\sigma}\,.$$

Звідси

$$\left\{\frac{h^2}{2m}\left[\Delta + 2(gradU\cdot\nabla) + (\Delta U) + (gradU)^2\right] - V\right\}\hat{\sigma} = \frac{\partial U}{\partial\beta}\hat{\sigma} + \frac{\partial\hat{\sigma}}{\partial\beta}\,. \tag{3.5}$$

(Позначення (ΔU) показує, що оператор діє лише на U). Ми отримали рівняння для визначення U та $\hat{\sigma}$. Оскільки невідомих величин дві, а рівняння одне, його можна поділити на два рівняння. Пам'ятаючи, що U має бути функцією, а $\hat{\sigma}$ — оператором, покладемо

$$\frac{\partial U}{\partial\beta} = \frac{h^2}{2m}\left[(\Delta U) + (gradU)^2\right] - V\,; \tag{3.6}$$

$$\frac{\partial\hat{\sigma}}{\partial\beta} = \frac{h^2}{2m}\left[(\Delta) + 2(gradU\cdot\nabla)^2\right]\hat{\sigma}\,. \tag{3.7}$$

Ці рівняння потрібно доповнити початковими умовами $U_{\beta=0}=0$, $\hat{\sigma}_{\beta=0}=1$, які є очевидним наслідком рівності (3.2). Друге з рівнянь аналогічне (2.32). Тому його розв'язок записується подібно до (2.34) у вигляді T-експоненти. Враховуючи це, бачимо, що виконується рівність

$$\hat{K} \equiv \exp\left[-\beta\left(-\frac{h^2}{2m}\Delta + V\right)\right] =$$

$$= e^{U(\beta)} \cdot T\exp\int_0^\beta d\beta' \frac{h^2}{2m}\left[\Delta\ 2\left(gradU(\beta')\cdot\nabla\right)\right], \tag{3.8}$$

де $U(\beta)$ є розв'язком рівняння (3.6). Записана формула і визначає зміст зображення зміщень для оператора $\hat{K}$.

Вправа 14. *Показати, що після заміни $\beta = \frac{i}{h}t$, $U = \frac{h}{i}\ln\Psi$ рівняння (3.6) перетворюється в рівняння Шредінгера.*

Розглянемо окремо зображення зміщень для матричного елемента оператора (3.1), тобто для

$$< r_0 \mid \hat{K} \mid r > = e^{-\beta(\hat{H}_0+V)}\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = K(r, r_0;\beta). \tag{3.9}$$

Виразимо тут δ-функцію інтегралом

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = \frac{1}{(2\pi h)^3}\int dp^3\, e^{\frac{i}{h}\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}_0)}$$

і прокомутуємо $e^{\frac{i}{h}\vec{p}\vec{r}}$ з оператором $\hat{K}$. Оскільки $\nabla e^{\frac{i}{h}\vec{p}\vec{r}} = e^{\frac{i}{h}\vec{p}\vec{r}}\left(\nabla + \frac{i}{h}\vec{p}\right)$, то формула (3.9) набирає вигляду

$$K(r, r_0;\beta) = \int\frac{d^3p}{(2\pi h)^3}\, e^{\frac{i}{h}\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}_0)}\, e^{-\beta\varepsilon_p}\,\hat{Q}(r, p, \beta); \tag{3.10}$$

$$\hat{Q}(r, p, \beta) = \exp\left\{-\beta\left(-\frac{h^2}{2m}\Delta - \frac{ih}{m}(\vec{p},\nabla) + V(r)\right)\right\}. \tag{3.11}$$

Оператор $\hat{Q}$ в (3.10) діє на одиницю, в результаті чого отримується лише деяка функція. Тому тут немає потреби зводити $\hat{Q}$ до форми (3.2), а досить вимагати, щоб

$$\hat{Q}(r, p, \beta)\cdot 1 = e^{\overline{U}}\ ;\ \overline{U} = \overline{U}(r, p, \beta). \tag{3.12}$$

Диференціюючи (3.12) за β, знаходимо рівняння для визначення функції $\overline{U}$:

$$\frac{\partial\overline{U}}{\partial\beta} = \frac{h^2}{2m}\left[(\Delta\overline{U}) + (\nabla\overline{U})^2\right] + \frac{ih}{m}(\vec{p}\cdot\nabla\overline{U}) - V,$$

$$\overline{U}(r, p, 0) = 0. \tag{3.13}$$

Таким чином, стосовно матричного елемента оператора $\hat{K}$ метод зміщень приводить до співвідношення

$$K(r, r_0;\beta) = e^{-\beta(\hat{H}_0+V)}\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) =$$

$$= \int\frac{d^3p}{(2\pi h)^3}\, e^{\frac{i}{h}\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}_0)}\, e^{-\beta\varepsilon_p + \overline{U}(r,p,\beta)}, \tag{3.14}$$

у якому $\overline{U}(r, p, \beta)$ є розв'язком рівняння (3.13).

Ми розглянули дві можливі реалізації методу зміщень на прикладі однієї частинки в зовнішньому полі. Формули (3.8), (3.14) неважко узагальнити на випадок багатьох тіл. Тоді під $\hat{H}_0 + V$ потрібно розуміти оператор Гамільтона системи взаємодіючих частинок, а δ-функцію замінити відповідним добутком δ-функцій. Як бачимо, формула (3.14) простіша за (3.8). Однак область її застосування вужча. Пояснюється це тим, що у випадку системи тотожних частинок у матричному елементі вигляду (3.9) добуток δ-функцій потрібно замінити залежно від типу статистики їх симетричною або антисиметричною комбінацією, тобто замість (3.9) матриця $K(r, r_0;\beta)$ задається формулою

$$K = e^{-\beta(\hat{H}_0+V)}\frac{1}{N!}\det\begin{bmatrix}\delta(r_1-r'_1), & \delta(r_1-r'_2), & \ldots, & \delta(r_1-r'_N)\\ \delta(r_2-r'_1), & \delta(r_2-r'_2), & \ldots, & \delta(r_2-r'_N)\\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots\\ \delta(r_N-r'_1), & \delta(r_N-r'_2), & \ldots, & \delta(r_N-r'_N)\end{bmatrix}_{\pm}. \tag{3.15}$$

Тут N — число частинок, індекси $\pm$ відповідно вказують, що у випадку фермієвської статистики маємо справу з визначником, а у випадку бозівської — із симетричним добутком. Останній отримується, якщо після розкриття визначника всі знаки «-» замінити на «+». Зрозуміло, що подати (3.15) у вигляді (3.14) не можна. У цьому випадку для знаходження $K(r, r';\beta)$ оператор $e^{-\beta(\hat{H}_0+V)}$ в (3.15) потрібно виразити формулою (3.4).

Вправа 15. *Записати рівняння (3.6), (3.8), (3.13) для системи багатьох частинок.*

3.2. Гармонічні осцилятори

Проілюструємо тут ефективність методу зміщень на двох прикладах. Розглянемо спочатку одновимірний осцилятор, для якого $\hat{H}_0 + V = -\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$. Формули (3.14), (3.13) тепер матимуть вигляд

$$K(r, r_0;\beta) = \int\frac{dp}{2\pi h}\, e^{\frac{i}{h}p(x-x_0)}\exp\left[-\beta\frac{p^2}{2m} + \overline{U}(x, p, \beta)\right];$$

$$\frac{\partial\overline{U}}{\partial\beta} = \frac{h^2}{2m}\left[\frac{d^2\overline{U}}{dx^2} + \left(\frac{d\overline{U}}{dx}\right)^2 + 2i\frac{p}{h}\frac{d\overline{U}}{dx}\right] - \frac{m\omega^2}{2}x^2, \tag{3.16}$$

$$\overline{U}(x, p, 0) = 0 .$$

У цьому випадку неважко знайти точний розв'язок рівняння для $\overline{U}$. Справді, повертаючись до формул (3.1)-(3.3), бачимо, що в процесі зміщень кожен раз виноситься з $\hat{K}$ функція, яка є пропорційною лише x^2. Тому розв'язок рівняння для $\overline{U}$ будемо шукати у вигляді

$$\overline{U}(x, p, \beta) = a_0 + a_1 x + \frac{1}{2} a_2 x^2 . \tag{3.17}$$

Тут величини a_0, a_1, a_2 є функціями від β і p. Підставляючи (3.17) в (3.16) і порівнюючи доданки з однаковими степенями x, отримуємо систему звичайних диференціальних рівнянь для коефіцієнтів a_i, а саме

$$\frac{\partial a_2}{\partial \beta} = \frac{h^2}{m} a_2^2 - m\omega^2 , \quad \frac{\partial a_1}{\partial \beta} = \frac{h^2}{m} a_2 \left(a_1 + i \frac{p_x}{h} \right) ;$$

$$\frac{\partial a_0}{\partial \beta} = \frac{h^2}{2m} \left\{ a_2 + \left(a_1 + i \frac{p_x}{h} \right)^2 \right\} + \frac{p^2}{2m} , \quad a_i{}_{\beta = 0} = 0 . \tag{3.18}$$

Рівняння легко інтегруються. Знаходимо

$$a_2 = - \frac{m\omega^2}{h} th(\beta h \omega) , \quad a_1 = i \frac{p}{h} \left(\frac{1}{ch(\beta h \omega)} - 1 \right) ;$$

$$a_0 = - \frac{1}{2} \ln ch(\beta h \omega) + \beta \frac{p^2}{2m} \left(1 - \frac{th(\beta h \omega)}{\beta h \omega} \right) . \tag{3.19}$$

Використавши ці результати в (3.16), матимемо

$$K(x, x_0, \beta) = \left[ch(\beta h \omega) \right]^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{1}{2} a_2 x^2 \right) \times$$

$$\times \int \frac{dp}{2\pi h} \exp\left[- \frac{p^2}{2m h \omega} th(\beta h \omega) + i \frac{p}{h} \left(\frac{x}{ch(\beta h \omega)} - x_0 \right) \right].$$

Інтеграл за p легко зводиться до пуассонівського. Після його обчислення і деяких спрощень можна показати, що матричний елемент оператора $\hat{K}$ виражається формулами

$$K(x, x_0, \beta) = \left[\frac{m\omega}{2\pi h \, sh(\beta h \omega)} \right]^{\frac{1}{2}} e^{W(x, x_0)} ;$$

$$W = - \frac{m\omega}{2h} \left\{ (x - x_0)^2 cth(\beta h \omega) + 2 x x_0 th\left(\frac{1}{2} \beta h \omega \right) \right\} . \tag{3.20}$$

Якщо зробити заміну $\beta = \frac{i}{h} t$, то $K(x, x_0; \frac{i}{h} t)$ буде функцією Гріна для рівняння Шредінгера. При цьому матимемо $W = \frac{i}{h} S$, де S буде розв'язком рівняння Гамільтона - Якобі. Зауважимо також, що при $\beta = \frac{i}{h}(t - t_0)$, $\omega = 0$ (3.20) збігається з (2.89).

Знайдемо ще суму діагональних елементів матриці $K(x, x_0, \beta)$, тобто $Sp\,\hat{K}$. Така величина називається інтегралом стану або статистичною сумою і задається формулами

$$Z = Sp\,\hat{K} = \int_V dx\, K(x, x_0, \beta) . \tag{3.21}$$

Величина $K(x, x_0, \beta)/Z$ має зміст густини ймовірності перебування системи в околі точки з координатою x, а V визначає область, в якій перебуває система. В нашому випадку область V збігається з усією числовою віссю. Беручи до уваги (3.20), запишемо

$$Z = \left[\frac{m\omega}{2\pi h \, sh(\beta h \omega)} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[- x^2 \frac{m\omega}{h} th\left(\frac{1}{2} \beta h \omega \right) \right] . \tag{3.22}$$

Після обчислення інтеграла матимемо

$$Z = \frac{1}{2} sh\left(\frac{1}{2} \beta h \omega \right) . \tag{3.23}$$

Результат (3.23) можна отримати і простішим способом. Власні значення оператора Гамільтона для гармонічного осцилятора є не виродженими і задаються формулою $E_n = h\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$, $n = 0, 1, 2 \ldots$. Тоді

$$Z = Sp\, e^{-\beta \hat{H}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta h \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} = \frac{e^{-\frac{1}{2} \beta h \omega}}{1 - e^{-\beta h \omega}} ,$$

що збігається з (3.23).

Звернемо увагу на граничний перехід $\omega \to 0$, коли осцилятор перетворюється у вільну частинку. Інтеграл (3.22) розбігається. В такому випадку потрібно проміжок інтегрування $(-\infty, +\infty)$ замінити на $(-L/2, +L/2)$. Отже,

$$Z_0 = \left(\frac{m}{2\pi h^2 \beta} \right)^{\frac{1}{2}} L . \tag{3.24}$$

Щоб отримати єдину формулу, з якої випливали б (3.23) і (3.24), потрібно в (3.22) інтегрувати відразу в межах $(-L/2, +L/2)$. Тоді знайдемо

$$Z' = \frac{1}{2\, sh\left(\frac{1}{2} \beta h \omega \right)} \Phi \left(\frac{L}{2} \left[\frac{m\omega}{h} th\left(\frac{1}{2} \beta h \omega \right) \right] \right), \tag{3.25}$$

де Φ — інтеграл імовірності:

$$\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z d\xi\, e^{-\xi^2} .$$

Взявши до уваги, що $\Phi(z) \underset{z \to 0}{\to} \frac{2}{\sqrt{\pi}} z$, і $\Phi(z) \underset{z \to \infty}{\to} 1$, з (3.25), при $L \to \infty$ отримаємо (3.23), а при $\omega \to 0$ — (3.24).

Розглянемо тепер заряджену частинку в постійному магнітному полі з напруженістю H . Виберемо векторний потенціал так, щоб $A_x = A_y = 0$, $A_z = Hx$. Тоді оператор Гамільтона матиме вигляд

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) =$$

$$= -\frac{h^2}{2m}\Delta + i h \omega x \frac{\partial}{\partial y} + \frac{m\omega^2}{2}x^2, \quad \omega = \frac{eH}{mc}. \tag{3.26}$$

Будемо обчислювати інтеграл стану. Згідно з (3.21), (3.10)

$$Z = \int \frac{d^3r\, d^3p}{(2\pi h)^3} e^{\frac{-\beta p^2}{2m}} \hat{Q},$$

де

$$\hat{Q} = \exp\left\{-\beta\left[-\frac{h^2}{2m}\left(\Delta + 2\frac{i}{h}(\vec{p}\,\nabla)\right) + i h\omega x\left(\frac{\partial}{\partial y} + \frac{i}{h}p_y\right) + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right]\right\}. \tag{3.27}$$

Оскільки Q діє на одиницю і в показнику експоненти немає функцій, залежних від y і x , то доданки з $\frac{\partial}{\partial y}$ і $\frac{\partial}{\partial z}$ потрібно опустити. Отже, можемо записати

$$\hat{Q}\cdot 1 = \exp\left\{-\beta\left[-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{h}{m}p_x\frac{d}{dx} - \omega x p_y + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right]\right\} = e^{\overline{U}}.$$

Як бачимо, знову маємо справу з осцилятором. Тому функцію $\overline{U}$ потрібно шукати у вигляді (3.17). Однак рівняння для коефіцієнта a_1 буде дещо іншими порівняно з (3.18), а саме

$$\frac{\partial a_1}{\partial \beta} = \frac{h^2}{m} a_2\left(a_1 + i\frac{p_x}{h}\right) + \Omega\, p_y.$$

Після інтегрування рівнянь знайдемо

$$a_2 = -\frac{m\omega}{h} th\,\delta, \quad a_1 = \frac{p_y}{h} th\,\delta - i\frac{p_x}{h}\left(1 - \frac{1}{ch\,\delta}\right);$$

$$a_0 = -\frac{1}{2}\ln ch\,\delta + \beta\left[\frac{p_x^2 + p_y^2}{2m}\left(1 - \frac{th\,\delta}{\delta}\right) + i\frac{p_x p_y}{m\delta}\left(1 - \frac{1}{ch\,\delta}\right)\right]. \tag{3.28}$$

Використавши ці результати в (3.27), матимемо

$$Z = \frac{1}{\sqrt{ch\,\delta}}\int \frac{d^3r\, d^3p}{(2\pi h)^3} e^{-x^2\frac{m\omega}{2h}th\,\delta} e^{\frac{-\beta p_z^2}{2m}} \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{\beta}{2m\delta}\left[(p_x^2 + p_y^2)\, th\,\delta + 2 i p_x p_y\left(1 - \frac{1}{ch\,\delta}\right)\right] + \right. \tag{3.29}$$

$$\left. + \frac{x}{h}\left\{p_y\, th\,\delta - i p_x\left(1 - \frac{1}{ch\,\delta}\right)\right\}\right].$$

Тут усі інтеграли за $\vec{p}$ є пуассонівськими. Можна показати, що після їх обчислення в (3.29) зникне залежність підінтегрального виразу від координати x. Тому тривимірний інтеграл за координатами потрібно прирівняти до об'єму системи V. Після цього формула для Z набере вигляду

$$Z = V\left(\frac{m}{2\pi h^2\beta}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\beta h\omega}{2\, sh\left(\frac{1}{2}\beta h\omega\right)}. \tag{3.30}$$

За відсутності магнітного поля $\omega = 0$ і з (3.30) отримуємо статистичну суму вільної частинки.

Зауваження. В (3.29) можна було б спочатку обчислити інтеграл (у нескінченних межах) за x . Після цього в підінтегральній функції зникне залежність від p_y . У такому випадку потрібно врахувати, що p_y не може перевищувати деякого максимального значення p^{max} . Останнє знаходиться з умови $p^{max} = m\, v^{max} = m\frac{2\pi L}{T} = m L\omega = L\left(\frac{eH}{c}\right)$. З урахуванням цього знову отримаємо (3.30).

3.3. Осцилятор x^4

Розглянемо ще один цікавий приклад, який і досі досліджується в науковій літературі, а саме, одновимірну частинку з гамільтоніаном

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + g x^4. \tag{3.31}$$

Будемо обчислювати інтеграл стану. Для цього зручно скористатись зображенням зміщень не для матричного елемента, а для оператора exp ($-\beta \hat{H}$) . Згідно з (3.4)-(3.8) запишемо

$$e^{-\beta\hat{H}} = e^{U}\hat{\sigma};$$

$$\hat{\sigma} = T\exp\int_0^\beta d\tau \frac{h^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + 2\frac{dU}{dx}\cdot\frac{d}{dx}\right), \tag{3.32}$$

де U задовольняє рівняння

$$\frac{dU}{d\beta} = \frac{h^2}{2m}\left\{\frac{d^2U}{dx^2} + \left(\frac{dU}{dx}\right)^2\right\} - g x^4, \quad U_{\beta=0} = 0, \tag{3.33}$$

яке точно не розв'язується. Будемо шукати його розв'язки у вигляді ряду

$$U = a_0 + \frac{1}{2!}a_2 x^2 + \frac{1}{4!}a_4 x^4 + \ldots \tag{3.34}$$

Справді, як видно з (3.2), (3.3) уже після першого зміщення (винесення $g x^4$) у показнику T-експоненти з'явиться доданок, пропорційний x^6 . Непарні степені x в (3.34) відсутні, оскільки рівняння є інваріантним відносно перетворення $x \to -x$. Підставляючи (3.34) в (3.33), отримаємо систему рівнянь для коефіцієнтів a_i:

$$\frac{da_0}{d\beta} = \frac{h^2}{2m} a_2 \, , \quad \frac{1}{2!}\frac{da_2}{d\beta} = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{a_4}{2!} + a_2\right) ;$$

$$\frac{1}{4!}\frac{da_4}{d\beta} = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{a_6}{4!} + \frac{2}{3!} a_2 a_4\right) - g \, ; \qquad (3.35)$$

$$\frac{1}{6!}\frac{da_6}{d\beta} = \frac{h^2}{2m}\left[\frac{1}{6!} a_8 + \frac{2}{5!} a_2 a_6 + \left(\frac{1}{3!} a_4\right)^2\right] ;$$

. . . .

Рівняння занадто складні, щоб їх можна було розв'язати в загальному вигляді. Обмежимось випадком, коли $\beta \to \infty$. Тоді можна вважати, що біля кожного з $\frac{da_{2l}}{d\beta}$ є малий параметр $\left(\frac{1}{\beta}\right)$. Щоб знайти нетривіальні розв'язки, всі $\frac{da_{2l}}{d\beta}$ (за винятком $\frac{da_0}{d\beta}$) потрібно покласти такими, що дорівнюють нулю. Тоді замість (3.35) матимемо

$$\frac{da_0}{d\beta} = \frac{h^2}{2m} a_2 \, , \quad \frac{1}{2!} a_4 + a_2^2 = 0 \, ;$$

$$\frac{h^2}{2m}\left(\frac{a_6}{4!} + \frac{1}{3} a_2 a_4\right) - g = 0 \, ; \qquad (3.36)$$

$$\frac{h^2}{2m}\left[\frac{1}{6!} a_8 + \frac{2}{5!} a_2 a_6 + \left(\frac{1}{3!} a_4\right)^2\right] = 0 \, ;$$

. . . .

Для розв'язування цієї системи вважатимимо, що $a_6 = a_8 = \ldots = 0$. Після цього з другого рівняння знайдемо, що $a_4 = -2a_2^2$; a_2 визначається з третього рівняння: $a_2 = -\left(\frac{3mg}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}}$. Підставивши цей результат у перше рівняння і врахувавши, що $a_0(\beta=0) = 0$, отримаємо $a_0(\beta) = -\beta\frac{h^2}{2m}\left(\frac{3mg}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}}$. Таким чином, у нульовому наближенні можемо записати

$$U^{(0)} \approx -\beta\frac{h^2}{2m}\alpha - \frac{1}{2}\alpha x^2 - \frac{1}{12}\alpha^2 x^4 \, , \quad \alpha = \left(\frac{3mg}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}}. \qquad (3.37)$$

Щоб знайти U у першому наближенні, потрібно врахувати a_6. З четвертого рівняння бачимо, що $a_6 = -\frac{3a_4^2}{5a_2}$. Використавши це значення в трьох перших рівняннях, будемо

мати

$$U^{(1)} \approx -\beta\frac{h^2}{2m}\bar{\alpha} - \frac{1}{2}\bar{\alpha}x^2 - \frac{1}{12}\bar{\alpha}^2 x^4 - \frac{1}{60}\bar{\alpha}^3 x^6 \, , \quad \bar{\alpha} = \left(\frac{60mg}{23h^2}\right)^{\frac{1}{3}}. \qquad (3.38)$$

Аналогічно можна знайти U у вищих наближеннях.

Розглянемо тепер оператор $\hat{\sigma}$. У виразі для матричного елемента він діє на δ-функцію. Отже, потрібно обчислити вираз

$$\langle x | \hat{\sigma} | x_0 \rangle = T \exp\left[\int_0^\beta d\beta' \frac{h^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + 2\frac{dU}{dx}\cdot\frac{d}{dx}\right)\right]\delta(x - x_0). \qquad (3.39)$$

Покладемо $\beta' = \beta\tau$ і перепишемо його у вигляді

$$\langle x | \hat{\sigma} | x_0 \rangle = T_\tau \exp\left[\gamma\int_0^1 d\tau \frac{h^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} - \Phi(x)\frac{d}{dx}\right)\right]\delta(x - x_0),$$

$$\Phi(x) = 2\alpha x\left(1 + \frac{\alpha}{3}x^2 + \ldots\right) , \quad \gamma = \frac{h^2\beta}{2m}. \qquad (3.40)$$

Винесемо з показника експоненти доданок з першою похідною. Тоді

$$\langle x | \hat{\sigma} | x_0 \rangle = T \exp\left(\gamma\int_0^1 d\tau \left[\left(\frac{d}{dx}\right)_\tau\right]^2\right)\delta(x(0) - x_0),$$

Тут

$$\left\{x(\tau); \left(\frac{d}{dx}\right)_\tau\right\} = e^{-\gamma(1-\tau)\Phi\frac{d}{dx}}\left\{x; \frac{d}{dx}\right\}e^{\gamma(1-\tau)\Phi\frac{d}{dx}} . \qquad (3.41)$$

Щоб знайти $x(\tau)$, $\left(\frac{d}{dx}\right)_\tau$, потрібно скористатись формулами (2.65)-(2.73). Виконавши обчислення, знайдемо

$$x(\tau) = \frac{x e^{-\delta(1-\tau)}}{\left(1 + \frac{\alpha}{3}x^2\left[1 - e^{-2g(1-\tau)}\right]\right)^{\frac{1}{2}}} \, , \quad \delta = 2\gamma\alpha = \beta\frac{h^2}{m}\alpha ;$$

$$\left(\frac{d}{dx}\right)_\tau = \left(1 + \frac{\alpha}{3}x^2\left[1 - e^{-2\delta(1-\tau)}\right]\right)^{\frac{3}{2}} e^{\delta(1-\tau)}\frac{d}{dx}.$$

Оскільки нас цікавить лише випадок $\beta \to \infty$ $(\delta \to \infty)$, то δ-функція з (3.41) набере вигляду

$$\delta\left(\frac{x e^{-\delta}}{\left[1 + \frac{\alpha}{3}x^2\right]^{\frac{1}{2}}} - x_0\right) \underset{\delta\to\infty}{\to} \delta(x_0).$$

Не зупиняючись на точніших дослідженнях, вкажемо, що такий самий результат матимемо і для матричного елемента (3.4).

Підсумовуючи знайдені результати, запишемо

$$e^{-\beta H}\delta(x-x_0)\to e^{U(x)}\delta(x_0)\,. \tag{3.42}$$

Інтеграл стану буде визначатись за формулою

$$Z=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,e^{U(x)}\delta(x)=e^{a_0}\,.$$

Враховуючи значення a_0, отримаємо

$$Z=\exp\left\{-\beta\frac{h^2}{2m}\alpha\right\}. \tag{3.43}$$

Формула (3.43) дає можливість знайти енергію основного стану. Справді, якщо відомі власні значення оператора H, то інтеграл стану Z подається у вигляді формули

$$Z=\sum_n e^{-\beta E_n}, \tag{3.44}$$

яку можна переписати таким чином:

$$Z=e^{-\beta E_0}\left(1+e^{-\beta(E_1-E_0)}+\ldots\right).$$

Оскільки всі $E_n>0$ (для від'ємних E_n нескінченний ряд (3.44) не має змісту), то зрозуміло, що при $\beta\to 0$ можемо покласти $Z\approx\exp(-\beta E_0)$, де E_0 — найменше власне значення енергії. Повертаючись до (3.43), (3.37), бачимо, що енергія основного стану осцилятора x^4

$$E_0=\frac{1}{2}3^{\frac{1}{3}}\left(g\frac{h^4}{m^2}\right)^{\frac{1}{3}}, \tag{3.45}$$

або, якщо замість (3.37) використати (3.38),

$$E_0=\frac{1}{2}\left(\frac{60}{23}\right)^{\frac{1}{3}}\left(g\frac{h^4}{m^2}\right)^{\frac{1}{3}}. \tag{3.46}$$

Енергія основного стану осцилятора x^4 обчислювалась різноманітними способами. За точну формулу вважають результат

$$E_0^{\text{точн}}=0.668\left(g\frac{h^4}{m^2}\right)^{\frac{1}{3}}, \tag{3.47}$$

який отримується при розв'язуванні рівняння Шредінгера числовими методами. Числові коефіцієнти в формулах (3.45), (3.46) дорівнюють відповідно 0.721, 0.688 . Як видно, результати методу зміщень добре узгоджуються з точним виразом.

4. ФУНКЦІЇ ГРІНА ДЛЯ ДЕЯКИХ РІВНЯНЬ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ

4.1. Рівняння Ліувілля

Це рівняння є одним з фундаментальних співвідношень статистичної фізики. Воно описує еволюцію в часі функції статистичного розподілу F, яка описує стан статистичної системи. Конкретний вигляд рівняння залежить від вибору змінних, які характеризують частинки системи. Так, при використанні канонічних змінних рівняння Ліувілля матиме вигляд

$$\frac{\partial F}{\partial t}+\left(\frac{\partial H}{\partial\vec{\pi}}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{q}}\right)F-\left(\frac{\partial H}{\partial\vec{q}}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{\pi}}\right)F=0,\quad F\equiv F(\vec{\pi},\vec{q},t), \tag{4.1}$$

де $H\equiv H(\vec{\pi},\vec{q},t)$ — функція Гамільтона, $\vec{q}$, $\vec{\pi}$ — $3N$-вимірні (N — число частинок системи) вектори координат та імпульсів .

Умова нормування і середні значення фізичних величин задаються формулами

$$\int d\vec{\pi}\,d\vec{q}\,F=1\,,\quad \langle A(\vec{\pi},\vec{q})\rangle=\int d\vec{\pi}\,d\vec{q}\,A(\vec{\pi},\vec{q})\,F\,. \tag{4.2}$$

Замість сукупності $(\vec{\pi},\vec{q})$ зручніше користуватись змінними Лагранжа $\vec{q}$, $\vec{u}$, які мають зміст координат і швидкостей частинок. Основні співвідношення теорії отримуються з (4.1), (4.2) заміною змінних $\vec{\pi}=\partial L/\partial\vec{q}$, де $L=L(\vec{q},\vec{u},t)$ — функція Лагранжа. Оскільки елемент об'єму фазового простору $d\vec{\pi}\,d\vec{q}$ при такій заміні змінних перетворюється в $d\vec{u}\,d\vec{q}\,\det\left|\partial^2L/\partial\vec{u}\,\partial\vec{u}\right|$, то у формулах (4.2) цей визначник можна повністю або частково об'єднати з функцією розподілу. Залежно від цього матимемо ту чи іншу форму рівняння Ліувілля. Зокрема, якщо визначник віднести до функції F, поклавши

$$\det\left|\frac{\partial^2L}{\partial\vec{u}\,\partial\vec{u}}\right|\cdot F\left(\frac{\partial L}{\partial\vec{u}},\vec{q},t\right)=f(\vec{q},\vec{u},t), \tag{4.3}$$

то умова нормування і середні значення задаватимуться формулами

$$\int d\vec{u}\,d\vec{q}\,f(\vec{q},\vec{u},t)=1\,,\quad \langle B(\vec{u},\vec{q})\rangle=\int d\vec{\pi}\,d\vec{q}\,B(\vec{u},\vec{q})f(\vec{q},\vec{u},t),$$

а еволюція функції статистичного розподілу буде описуватись рівнянням

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\left(\vec{u}\,\frac{\partial}{\partial\vec{q}}\right)f+\left(\frac{\partial}{\partial\vec{q}}\,\dot{\vec{u}}\right)f=0, \tag{4.4}$$

де $\dot{\vec{u}}=\dfrac{d\vec{u}}{dt}$ визначається з класичних рівнянь руху

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\vec{u}}-\frac{\partial L}{\partial\vec{q}}=0\,. \tag{4.5}$$

Для багатьох систем класичної статфізики рівняння руху (4.5) є такими, що $\dfrac{d\dot{\vec{u}}}{d\vec{u}}\equiv div_u\,\dot{\vec{u}}=0$. Тоді останній доданок в (4.4) перетворюється в $\dot{\vec{u}}\dfrac{\partial f}{\partial\vec{u}}$. Наприклад, нерелятивістська система взаємодіючих частинок у зовнішньому полі описується функцією Лагранжа

$$L = \sum_l \frac{m_l v_l^2}{2} - \sum_l \Phi(r_l) - \sum_{l \neq l} V(\,|\vec{r}_l - \vec{r}_l\,|\,). \tag{4.6}$$

Рівняння руху матимуть вигляд

$$m_l \dot{\vec{v}}_l = -\nabla_l \Phi(r_l) - \nabla_l \sum_{\substack{l \\ (l \neq j)}} V(\,|\vec{r}_j - \vec{r}_l\,|\,) \equiv \vec{F}_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N);$$

$$\vec{v}_l = \frac{d\vec{r}_l}{dt}. \tag{4.7}$$

Тоді рівняння Ліувілля для функції $f = f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N;\ \vec{v}_1, \vec{v}_2, \ldots, \vec{v}_N, t)$ задається формулою

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_l \left(\vec{v}_l \frac{\partial f}{\partial \vec{r}_l}\right) + \sum_l \left(\dot{\vec{v}}_l \frac{\partial f}{\partial \vec{v}_l}\right) = 0. \tag{4.8}$$

Вправа 1. *Записати рівняння Ліувілля для системи невзаємодіючих зарядів у зовнішньому електромагнітному полі з напруженістю* $\vec{E}$, $\vec{H}$.

Побудуємо тепер функцію Гріна для рівняння Ліувілля. Щоб спростити запис формул, розглянемо одновимірну систему з лагранжіаном $L = \frac{v^2}{2} - \Phi(x, t)$, де v — швидкість, а x — координата. Рівняння Ліувілля (4.4) можна записати у вигляді

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \hat{L}_{xv}(t)\right) f(x, v, t) = 0;$$

$$\hat{L}_{xv}(t) \equiv v\frac{\partial}{\partial x} + F(x, t)\frac{\partial}{\partial v}. \tag{4.9}$$

Тут $F(x, t) = -\frac{\partial \Phi(x, t)}{\partial x}$ має зміст сили, яка діє на частинку, а оператор $\hat{L}_{xv}(t)$ називається оператором Ліувілля. Рівняння (4.9) потрібно доповнити початковою умовою

$$f(x, v, t)\,|_{t = t_0} = f_0(x, v, t_0). \tag{4.10}$$

Оскільки рівняння Ліувілля є лінійним диференціальним рівнянням першого порядку, то його розв'язок звичайним способом виражається через функцію Гріна G, а саме :

$$f(x, v, t) = \int d x_0\, d v_0\ G(x, v, t; x_0, v_0, t_0) f_0(x_0, v_0, t_0). \tag{4.11}$$

Неважко встановити явний вигляд функції Гріна G. Справді, співвідношення (4.9), (4.10) мають такий самий вигляд, як і рівняння Шредінгера (1.1) з початковою умовою (1.2). Це добре видно, якщо (1.1) переписати так :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\hat{H}_x(t)\right)\Psi(x, t) = 0.$$

Функція Гріна для останнього рівняння подається формулою (1.39). Оскільки роль оператора $\frac{i}{\hbar}\hat{H}_x(t)$ у нашому випадку відіграє оператор Ліувілля $\hat{L}_{xv}(t)$, то аналогічно (1.39) можемо записати

$$G(x, v, t; x_0, v_0, t_0) = T\exp\left(-\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{L}_{xv}(t')\right)\delta(x - x_0)\delta(v - v_0) \equiv$$

$$\equiv \hat{S}_{xv}(t, t_0)\delta(x - x_0)\delta(v - v_0) \tag{4.12}$$

при $t > t_0$. Якщо $t < t_0$, то $G = 0$ (як і (1.39)). Підставивши (4.12) в (4.11), будемо мати

$$f(x, v, t) = \hat{S}_{xv}(t, t_0) f_0(x_0, v_0, t_0), \tag{4.13}$$

тобто оператор $\hat{S}_{xv}(t, t_0)$ має зміст оператора еволюції. Диференціюючи (4.12) за часом, неважко знайти рівняння для функції Гріна. Подібно до (1.25) воно матиме вигляд

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \hat{L}_{xv}(t)\right) G(x, v, t; x_0, v_0, t_0) =$$

$$= \delta(x - x_0)\delta(v - v_0)\delta(t - t_0). \tag{4.14}$$

Як бачимо, функції Гріна і оператори еволюції як рівняння Шредінгера, так і рівняння Ліувілля подаються формально однаковими виразами. Зрозуміло, що ці величини мають ряд однакових властивостей. Поряд з цим рівняння Ліувілля істотно відрізняється від рівняння Шредінгера у тому відношенні, що воно є диференціальним рівнянням першого порядку не лише за часом, а й за координатами x, v. Саме це дає можливість розкрити в (4.12) дію оператора $\hat{S}$ на δ - функції в загальному вигляді. Справді, оскільки оператор Ліувілля містить лише доданки з похідними, то

$$\hat{S}_{xv}(t, t_0)\cdot 1 = 1.$$

Тому формула (4.12) зводиться до вигляду

$$G(x, v, t; x_0, v_0, t_0) = \delta(x(t_0) - x_0)\delta(v(t_0) - v_0), \tag{4.15}$$

де

$$x(t_0) = \hat{S}_{xv}(t, t_0)\, x\, \hat{S}_{xv}^{-1}(t, t_0);$$

$$v(t_0) = \hat{S}_{xv}(t, t_0)\, v\, \hat{S}_{xv}^{-1}(t, t_0). \tag{4.16}$$

Подібні вирази ми вже розраховували (див.(2.65)-(2.68)). Замінимо в (4.16) t_0 на τ і продиференціюємо обидві формули за τ. Оскільки

$$\frac{\partial \hat{S}(t, \tau)}{\partial \tau} = \hat{S}(t, \tau)\hat{L}(\tau), \quad \frac{\partial \hat{S}^{-1}(t, \tau)}{\partial \tau} = -\hat{L}(\tau)\,\hat{S}^{-1}(t, \tau),$$

то

$$\frac{\partial x(\tau)}{\partial \tau} = \hat{S}(t,\tau)\left\{\hat{L}(t)x - x\hat{L}(\tau)\right\}\hat{S}^{-1}(t,\tau),$$

$$\frac{\partial v(\tau)}{\partial \tau} = \hat{S}(t,\tau)\left\{\hat{L}(t)v - v\hat{L}(\tau)\right\}\hat{S}^{-1}(t,\tau). \tag{4.17}$$

Беручи до уваги (4.9), бачимо, що комутатори в (4.17) дорівнюють відповідно v та $F(x,\tau)$. Після цього неважко побачити, що співвідношення (4.17) наберуть вигляду

$$\frac{\partial x(\tau)}{\partial \tau} = v(\tau), \quad \frac{\partial v(\tau)}{\partial \tau} = F(x(\tau),\tau). \tag{4.18}$$

Отримані вирази, як легко переконатись, збігаються з класичними рівняннями руху (4.5) для нашої моделі. Початкові умови є очевидними: оскільки при аргументах, що збігаються, оператори $\hat{S}$ і $\hat{S}^{-1}$ дорівнюють одиниці, то з (4.16) випливає, що

$$x(\tau)\,|_{\tau=t} = x, \quad v(\tau)\,|_{\tau=t} = v. \tag{4.19}$$

Таким чином, величини , через які виражається функція Гріна (4.15), є розв'язками класичних рівнянь руху (4.18), (4.19). З викладеного зрозуміло також, що цей результат не пов'язаний з конкретною моделлю, а є загальним. Аналогічно формула (4.13) зводиться до вигляду

$$f(x,v,t) = f_0(x(t_0), v(t_0), t_0). \tag{4.20}$$

Таким чином, еволюція початкового розподілу f_0 визначається лише динамікою частинок.

Вправа 2. *Показати, що у випадку постійної сили*

$$G = \delta\left(\left[x - v(t-t_0) + \frac{F}{2}(t-t_o)^2\right] - x_0\right)\delta\left(v - F(t-t_0) - v_0\right).$$

Наші висновки про характер функції Гріна отримані у припущенні, що оператор Ліувілля містить лише доданки з похідними. У більш загальному випадку (4.4) цей оператор має вигляд

$$\hat{L} = u\frac{\partial}{\partial q} + \dot{u}\frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial \dot{u}}{\partial u} \equiv \hat{L}_0 + \varphi(u,q).$$

У такому разі оператор еволюції $\hat{S}$ можна звести до вигляду

$$\hat{S}(t,t_0) = \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\, \hat{S}_0(t,\tau)\varphi(q,u,\tau)\hat{S}_0^{-1}(t,\tau)\right\}\cdot\hat{S}_0(t,t_0),$$

$$\hat{S}_0(t,t_0) = T\exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\,\hat{L}_0\right\}.$$

Враховуючи попередні результати, бачимо, що тепер функція Гріна буде задаватись формулою

$$G = \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\,\varphi(q(\tau),u(\tau),\tau)\right\}\delta(u(t_0)-u_0)\,\delta(q(t_0)-q_0), \tag{4.21}$$

де $u(\tau)$, $q(\tau)$ як і раніше, є розв'язками класичних рівнянь руху.

Розглянемо ще на основі рівняння Ліувілля еволюцію рівноважного розподілу. Нехай у момент часу t система перебуває в стані статистичної рівноваги, який описується гіббсівською функцією

$$F_0(\pi,q) = const\,\exp\left\{-\beta H(\pi,q)\right\}. \tag{4.22}$$

(Зручно використати канонічні змінні). Згідно з (4.1) і означенням оператора еволюції розподіл у момент часу t задається формулами

$$F(\pi,q,t) = e^{-(t-t_0)L}\,F_0(\pi,q),$$

$$\hat{L} = \frac{\partial H}{\partial \pi}\frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial}{\partial \pi}. \tag{4.23}$$

Оскільки оператор $\hat{L}$, як неважко переконатись, комутує з функцією Гамільтона H, то знаходимо, що $F(\pi,q,t) = F_0(\pi,q)$, тобто система залишається в стані статистичної рівноваги. Зрозуміло, що такий самий висновок справджується і у разі використання лагранжевих змінних.

На закінчення звернемо увагу на одну цікаву обставину. Як видно з викладеного , оператор $\hat{S}$, діючи на x та v, генерує класичні рівняння руху. Таким чином, якщо відомий оператор Ліувілля $\hat{L}$, то можна встановити вигляд рівнянь руху кожної з частинок. Це не дивно, оскільки рівняння характеристик для рівняння Ліувілля збігаються з рівняннями руху. Цікаво, що такий метод знаходження рівнянь руху можна застосувати у випадку дисипативних систем, коли варіаційний спосіб їх отримання незастосовний, оскільки для дисипативних систем не існує у звичайному розумінні функції Лагранжа чи Гамільтона. Справді, нехай у системі крім звичайних сил $F(x,t)$ діє сила тертя $-j(x)v$. Оператор Ліувілля матиме вигляд

$$\hat{L}_{xv}(t) = v\frac{\partial}{\partial x} + \left[F(x,t) - vj(x)\right]\frac{\partial}{\partial v}.$$

Тоді

$$x(\tau) = \hat{S}(t,\tau)\,x\,\hat{S}^{-1}(t,\tau), \quad v(\tau) = \hat{S}(t,\tau)\,v\,\hat{S}^{-1}(t,\tau).$$

Диференціюючи останні формули за τ, знайдемо

$$\frac{dx(\tau)}{d\tau} = v(\tau), \quad \frac{dv(\tau)}{d\tau} = F(x(\tau),\tau) - j(x(\tau))v(\tau).$$

Звідси

$$\frac{d^2 x(\tau)}{d\tau} + v(\tau) j(x(\tau)) = F(x(\tau), \tau), \tag{4.24}$$

тобто ми отримали рівняння руху для частинки за наявності сил тертя.

4.2. Функція Гріна і неоднорідне рівняння

Функцію Гріна можна застосувати для знаходження розв'язку неоднорідного рівняння. Розглянемо таку задачу: знайти розв'язок рівняння

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \hat{L}_q(t)\right) f(q, t) = \varphi(q, t) \tag{4.25}$$

для $t \geq t_0$, який при $t = t_0$ збігається з функцією $f_0(q, t_0)$. Якщо $q = \{x, v\}$, а $\hat{L}_q$ — оператор Ліувілля, то (4.25) є неоднорідним рівнянням Ліувілля, яке широко застосовується в теорії необоротних процесів.

Як відомо, розв'язок рівняння (4.25) можна записати у вигляді суми

$$f(q, t) = f^{(1)}(q, t) + f^{(2)}(q, t), \tag{4.26}$$

де $f^{(1)}(q, t)$ є загальним розв'язком однорідного рівняння, а $f^{(2)}(q, t)$ — частинним розв'язком неоднорідного рівняння. Перший з них визначається через функцію Гріна формулою типу (4.11). Другий, як це видно з (4.25), можна подати у вигляді

$$f^{(2)}(q, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \hat{L}_q(t)\right)^{-1} \varphi(q, t). \tag{4.27}$$

Наведену формулу зручно записати інакше, а саме:

$$f^{(2)}(q, t) = \int dq' \int_{t_0}^{\infty} dt' \, \tilde{G}(qt, q't') \varphi(q', t'), \tag{4.28}$$

де

$$\tilde{G}(qt, q't') = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \hat{L}_q(t)\right)^{-1} \delta(t - t') \delta(q - q'). \tag{4.29}$$

Справді, підставивши (4.29) в (4.28) і обчисливши інтеграли, отримаємо (4.27).

Обчислимо тепер $\tilde{G}$. Зручно скористатись фейнманівським зображенням оберненого оператора (наприклад, (2.85)). Тоді

$$\tilde{G}(qt, q't') = \int_0^{\infty} d\lambda \, \exp\left\{-\lambda\left(\frac{\partial}{\partial t} + \hat{L}_q(t)\right)\right\} \delta(t - t') \delta(q - q'). \tag{4.30}$$

Винесемо тепер з експоненти у праву сторону оператор $\exp\left\{-\lambda \frac{\partial}{\partial t}\right\}$. Використовуючи «правила розплутування» (див. підрозд. 2.4) і властивість оператора трансляцій, знайдемо

$$\tilde{G}(qt, q't') = \int_0^{\infty} d\lambda \, T_{\lambda'} \exp\left\{-\int_0^{\lambda} d\lambda' \, \hat{L}_q(t - \lambda + \lambda')\right\} \delta(t - \lambda - t_0) \delta(q - q_0).$$

Наявність δ-функції в підінтегральному виразі дає змогу обчислити інтеграл. Якщо після цього у T-експоненті зробити заміну змінної інтегрування $\lambda' = \tau - t_0$, то будемо мати

$$\tilde{G}(qt, q't') = \Theta(t - t_0) T \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \, \hat{L}_q(\tau)\right\} \delta(q - q_0), \tag{4.31}$$

тобто введена згідно з (4.29) величина $\tilde{G}$ збігається з функцією Гріна рівняння (4.25) при $\varphi(q, t) = 0$. Підставивши (4.31) в (4.28), знайдемо $f^{(2)}(q, t)$. Якщо врахувати, що $f^{(1)}(q, t)$ також виражається через функцію Гріна, то бачимо, що розв'язок рівняння (4.25) подається формулою

$$\begin{aligned} f(q, t) = {} & \int dq_0 \, \tilde{G}(qt, q_0 t_0) f_0(q_0, t_0) + \\ & + \int_{t_0}^{t} dt' \int dq' \, \tilde{G}(qt, q't') \varphi_0(q', t'). \end{aligned} \tag{4.32}$$

У загальному випадку величина $\varphi(q, t)$ в (4.25) має зміст джерела деякого процесу, що характеризується функцією $f(q, t)$. Тоді другий доданок в (4.32) відображає принцип причинності, згідно з яким характер процесу f у момент часу t залежить від інтенсивності джерела φ в усі попередні моменти $t' \leq t$.

Формула (4.32) є досить загальною, оскільки вигляд оператора $\hat{L}_q(t)$ в процесі її отримання не конкретизувався. Під $\hat{L}_q(t)$ можемо розуміти будь-який лінійний диференціальний оператор. Якщо $\hat{L}_q(t)$ є оператором Ліувілля, то функція $\tilde{G}$, як було показано у підрозд. 4.1, виражається через δ - функцію, і формула (4.32) спрощується, а саме:

$$f(q, t) = f_0(q_0(t_0), t_0) + \int_{t_0}^{t} dt' \, \varphi(q(t'), t'), \tag{4.33}$$

де $q(t')$ є розв'язками відповідних класичних рівнянь руху з початковою умовою $q(t')|_{t'=t} = q$.

4.3. Рівняння Клейна - Гордона - Фока

Це рівняння є релятивістським узагальненням квантово-механічного рівняння Шредінгера для безспінової частинки в зовнішньому полі. Зокрема, у випадку зарядженої безспінової частинки в електромагнітному полі з потенціалами $\vec{A}(\vec{r}, t)$, $\varphi(\vec{r}, t)$ воно має вигляд

$$\hat{K}_r(t) \, \Psi(\vec{r}, t) = 0,$$

$$\hat K_r(t) = \left(i h\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi(\vec r, t)\right)^2 - c^2\left(i h\nabla - \frac{e}{c}\vec A(\vec r, t)\right)^2 - m^2 c^4 . \tag{4.34}$$

Вільна ($\vec A(\vec r, t) = 0, \varphi(\vec r, t) = 0$) частинка описується рівнянням

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial^2 t}\right)\Psi(\vec r, t) - \frac{m^2c^2}{h^2}\Psi(\vec r, t) = 0 . \tag{4.35}$$

Записані рівняння є рівняннями другого порядку за часом. Тому, щоб отримати однозначний розв'язок, необхідно задати дві початкові умови. Виберемо їх у вигляді

$$\Psi(\vec r, t)\,|_{t=t_0} = \Psi_0(\vec r, t_0), \quad \frac{\partial\Psi(\vec r, t)}{\partial t}\,|_{t=t_0} = X_0(\vec r, t_0) . \tag{4.36}$$

Введемо також функцію Гріна $D(rt, r_0 t_0)$ згідно з рівнянням

$$\hat K_r(t) D(rt, r_0 t_0) = i h\delta(r - r_0)\delta(t - t_0) . \tag{4.37}$$

Причому, на відміну від попередніх прикладів, функція $D(rt, r_0 t_0)$ відмінна від нуля при будь-якому співвідношенні між t і t_0.

Покажемо перш за все, що функцію $D(rt, r_0 t_0)$ можна пов'язати з функцією Гріна деякого рівняння шредінгерівського типу. Перейдемо для цього до чотиривимірного простору з координатами x_μ ($\mu = 1, 2, 3, 4$; $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$, $x_4 = ict$) і введемо 4-потенціали A_μ ($\vec A$, $A_4 = i\varphi$) та оператори 4-імпульсу $\hat P_\mu = -i h\frac{\partial}{\partial x_\mu}$. Неважко побачити, що рівняння (4.37) набере вигляду

$$\left[\sum_{\mu=1}^{4} c^2\cdot\left(\hat P_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)^2 + m^2c^4\right] D(rt, r_0 t_0) = hc\,\delta^{(4)}(x - x_0),$$

де $\delta^{(4)}(x - x_0)$ є дельта-функцією у чотиривимірному просторі:

$$\delta^{(4)}(x - x_0) \equiv \delta(\vec r - \vec r_0)\,\delta(x_4 - x_4^0) = \frac{1}{ic}\,\delta(\vec r - \vec r_0)\,\delta(t - t_0),$$

або

$$\left(\hat H_x + \frac{mc^2}{2}\right) D(x, x_0^0) = \frac{h}{2mc}\,\delta^{(4)}(x - x_0), \tag{4.38}$$

$$\hat H_x = \frac{1}{2m}\sum_{\mu=1}^{4}\left(\hat P_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)^2 . \tag{4.39}$$

Звідси

$$D(x, x_0) = \frac{h}{2mc}\left(\hat H_x + \frac{mc^2}{2}\right)^{-1}\delta^{(4)}(x - x_0) .$$

Зручно скористатись фейнманівським зображенням оберненого оператора у вигляді (2.86). Тоді

$$D(x, x_0) = \frac{i}{2mc}\int_0^\infty ds\,\exp\left\{-\varepsilon s - i s\frac{mc^2}{2h}\right\} Q(x, s; x_0, 0) . \tag{4.40}$$

Тут

$$Q(x, s; x_0, 0) = e^{-\frac{i}{h}s\hat H_x}\,\delta(x - x_0) \tag{4.41}$$

є функцією Гріна для стаціонарного рівняння Шредінгера у чотиривимірному просторі Мінковського. Роль параметра еволюції в (4.41) відіграє змінна s. Диференціюючи (4.41) за s і враховуючи умову $s > 0$ (це видно з (4.40)), будемо мати

$$\left(i h\frac{\partial}{\partial t} - \hat H_x\right) Q(x, s; x_0, 0) = i h\,\delta^{(4)}(x - x_0)\,\delta(s), \tag{4.42}$$

$\hat H_x$ визначається формулою (4.39). Таким чином, Q є функцією Гріна для рівняння Шредінгера

$$i h\frac{\partial\Phi(x, s)}{\partial s} = \hat H_x\Phi(x, s), \tag{4.43}$$

яке описує «чотиривимірну частинку у зовнішньому магнітному полі з потенціалом A_μ». Можна показати, що s має зміст власного часу.

Встановимо тепер зв'язок функції D з розв'язком рівняння (4.34) та початковими умовами (4.36). Зручно перейти від рівняння другого порядку за часом до рівняння першого порядку. Позначивши

$$\Psi = \Psi_1, \quad i h\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \Psi_2, \tag{4.44}$$

бачимо, що рівняння (4.34) еквівалентне системі двох рівнянь:

$$\begin{aligned} i h\frac{\partial\Psi_1}{\partial t} &= \Psi_2, \\ i h\frac{\partial\Psi_2}{\partial t} &= 2e\varphi\Psi_2 + \left(i h e\frac{\partial\varphi}{\partial t} - e^2\varphi^2\right)\Psi_1 + \\ &+ \left[c^2\left(-i h\nabla - \frac{e}{c}\vec A\right)^2 + m^2c^4\right]\Psi_1 . \end{aligned} \tag{4.45}$$

Введемо двокомпонентну хвильову функцію

$$[\Psi] = \begin{pmatrix}\Psi_1 \\ \Psi_2\end{pmatrix} \tag{4.46}$$

і матричний оператор

$$\left[\hat{L}_r(t)\right] = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix}, \tag{4.47}$$

де

$$L_{11} = 0, \; L_{12} = 1,$$

$$L_{21} = c^2\left(-ih\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + m^2c^4 + ihe\frac{\partial\varphi}{\partial t} - e^2\varphi^2, \quad L_{22} = 2e\varphi.$$

Тоді (4.45) можемо записати у вигляді матричного рівняння

$$ih\frac{\partial[\Psi]}{\partial t} = \left[\hat{L}_r(t)\right]\left[\Psi\right] \tag{4.48}$$

з (як це видно з (4.36), (4.44), (4.46)) початковою умовою:

$$\left[\Psi\right]\Big|_{t=0} = \begin{pmatrix} \Psi_0(r,t) \\ ihX_0(r,t) \end{pmatrix} \equiv \left[\Psi(r_0,t_0)\right]_0 . \tag{4.49}$$

Співвідношення (4.48), (4.49) за зовнішнім виглядом такі самі, як і нерелятивістське рівняння Шредінгера (1.1) з початковою умовою (1.2). Тому, щоб знайти розв'язок, достатньо повторити деякі викладки з розд.1, врахувавши, що тепер маємо справу з матричними величинами. Отримаємо

$$\left[\Psi(r,t)\right] = \int d^3r_0 \left[G(rt; r_0t_0)\right]\left[\Psi(r_0,t_0)\right]_0, \tag{4.50}$$

де матрична функція Гріна $\left[G\right]$ подається формулою

$$\left[G(rt,r_0t_0)\right] = \Theta(t-t_0)\,T\exp\left\{-\frac{i}{h}\int_{t_0}^{t} dt' \left[\hat{L}_r(t')\right]\right\}\delta(r-r_0). \tag{4.51}$$

Ми виписали тут Θ - функцію, підкреслюючи, що формула (4.51) отримується у припущенні $t > t_0$. Покладемо

$$\left[G\right] = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}. \tag{4.52}$$

З (4.46), (4.49), (4.52) бачимо, що

$$\Psi(r,t) = \int d^3r_0 \left[G_{11}(rt,r_0t_0)\,\Psi_0(r_0,t_0) + G_{12}(rt,r_0t_0)\,ihX_0(r_0,t_0)\right], \tag{4.53}$$

$$ih\frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t} = \int d^3r_0 \left[G_{21}(rt,r_0t_0)\,\Psi_0(r_0,t_0) + G_{22}(rt,r_0t_0)\,ihX_0(r_0,t_0)\right].$$

Таким чином, щоб знайти $\Psi(r,t)$, достатньо відшукати тільки G_{11} та G_{12}. Неважко знайти рівняння для цих величин. Справді, диференціюючи (4.52) за t і враховуючи умову $t > t_0$, отримаємо

$$ih\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{21} & G_{22} \\ L_{21}G_{21} + L_{22}G_{22} & L_{21}G_{12} + L_{22}G_{22} \end{pmatrix} +$$
$$+ ih\delta(t-t_0)\delta(r-r_0)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Це матричне рівняння еквівалентне системі чотирьох рівнянь:

$$\begin{aligned} ih\frac{\partial G_{11}}{\partial t} &= G_{21} + ih\delta(t-t_0)\delta(r-r_0), \\ ih\frac{\partial G_{21}}{\partial t} &= \hat{L}G_{12} + 2e\varphi G_{22} + ih\delta(t-t_0)\delta(r-r_0), \\ ih\frac{\partial G_{12}}{\partial t} &= G_{22}; \\ ih\frac{\partial G_{22}}{\partial t} &= \hat{L}G_{11} + 2e\varphi G_{21}. \end{aligned} \tag{4.54}$$

Нас цікавлять лише величини G_{11} та G_{12}. З 2-го і 3-го рівнянь знаходимо, що

$$\hat{K}_r(t)\,G_{12}(\vec{r}t,\vec{r}_0t_0) = ih\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\delta(t-t_0), \tag{4.55}$$

тобто, рівняння для G_{11} таке саме, як і (4.37) для функції D. Рівняння для функції G_{12} дещо складніше. Комбінуючи в (4.54) 1-ше рівняння з 4-м, будемо мати

$$\hat{K}_r(t)\,G_{11}(\vec{r}t,\vec{r}_0t_0) = -(ih)^2\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\frac{d}{dt}\delta(t-t_0) -$$
$$- ih2e\varphi(r,t)\,\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\,\delta(t-t_0). \tag{4.55}$$

Беручи до уваги властивості δ - функції, перепишемо формулу (4.55) у вигляді

$$\hat{K}_r(t)\,G_{11}(\vec{r}t,\vec{r}_0t_0) = -(ih)^2\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\frac{d}{dt_0}\delta(t-t_0) -$$
$$- ih2e\varphi(r_0,t_0)\,\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\,\delta(t-t_0). \tag{4.56}$$

Рівняння (4.55), (4.56) дають можливість визначити функції G_{11} та G_{12}. Початкові умови випливають з (4.53) і задаються формулами

$$G_{11}(\vec{r}t_0,\vec{r}_0t_0) = \delta(\vec{r}-\vec{r}_0), \quad G_{12}(\vec{r}t_0,\vec{r}_0t_0) = 0. \tag{4.57}$$

Функції G_{11} та G_{12} не є незалежними. Порівнюючи (4.56) з (4.55), бачимо, що має виконуватись рівність

$$G_{11}(\vec{r}t, \vec{r}_0 t_0) = \left[-i h \frac{\partial}{\partial t_0} - 2 e \Phi(r_0, t_0) \right] G_{12}(\vec{r}t, \vec{r}_0 t_0). \qquad (4.58)$$

Справді, оператор $\hat{K}_r(t)$ комутує з оператором $-i h \frac{\partial}{\partial t_0} - 2 e \varphi(r_0, t_0)$, оскільки вони залежать від різних змінних. Застосовуючи останній оператор до рівності (4.55) і беручи до уваги (4.58), бачимо, що отримуване рівняння буде таким самим, як і (4.51), тобто, G_{11} і G_{12} справді зв'язані співвідношенням (4.58). Крім цього, рівняння для G_{12} збігається з рівнянням для D. Якщо ще ввести запізнюючу функцію Гріна

$$D_r(\vec{r}t, \vec{r}_0 t_0) = \begin{cases} D(\vec{r}t, \vec{r}_0 t_0), & t > t_0 \\ 0, & t \le t_0, \end{cases} \qquad (4.59)$$

то $G_{12} = D_r$. Враховуючи це і формули (4.54), (4.58), бачимо, що розв'язок рівняння (4.34) з початковими умовами (4.36) при $t > t_0$ задається співвідношенням

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int d^3 r_0 \left(-i h \frac{\partial}{\partial t_0} - 2 e \varphi(r_0, t_0) \right) D_r(\vec{r}t, \vec{r}_0 t_0) \Psi_0(r_0, t_0) +$$

$$+ i h \int d^3 r_0 D_r(\vec{r}t, \vec{r}_0 t_0) X_0(r_0, t_0), \qquad (4.60)$$

де D_r визначається згідно з (4.59), (4.37).

Зауважимо на закінчення, що отриманих співвідношень достатньо також для побудови розв'язку неоднорідного рівняння

$$\hat{K}_r(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}, t). \qquad (4.61)$$

4.4. Вільна релятивістська частинка

Розглянемо окремо випадок вільної частинки. Оскільки у разі відсутності поля $\vec{A} = \varphi = 0$, то співвідношення з підрозд.4.3 значно спрощуються. Зокрема, формула (4.41) набере вигляду

$$Q^0(x, s; x_0, 0) = \exp\left\{ -\frac{i}{h} s \sum_{\mu=1}^{4} \frac{\hat{P}_\mu}{2m} \right\} \delta^{(4)}(x - x_0),$$

характерного для функції Гріна рівняння Шредінгера. Взявши до уваги (2.89), бачимо, що

$$Q^0(x, s; x_0, 0) = \left[\frac{m}{2\pi i h s} \right]^2 \exp\left\{ \frac{i}{h} \sum_{\mu=1}^{4} \frac{m (x_\mu - x_\mu^0)^2}{2s} \right\}. \qquad (4.62)$$

Щоб знайти функцію D, підставимо цей результат у (4.40) і перейдемо до нової змінної інтегрування $\xi = \frac{m}{h s}$. Матимемо

$$D(x, x_0) = -\frac{i}{8\pi^2 h c} \int_0^\infty d\xi \exp\left\{ -\frac{i}{2} \left[\frac{1}{\xi} \left(\frac{mc}{h} \right)^2 + \xi (c^2 \Delta t^2 - \Delta \vec{r}^{\,2}) \right] \right\};$$

$$\Delta t = (t - t_0), \quad \Delta \vec{r} = (\vec{r} - \vec{r}_0). \qquad (4.63)$$

Обчислення інтегралу дещо складніше. Можна показати, що після інтегрування для D матимемо формулу

$$D(\vec{r}t, \vec{r}_0 t_0) = \frac{i}{2\pi h c} \left[-\delta(\gamma^2) + \frac{mc}{2h\gamma} H_1^{(2)}\left(\gamma \frac{mc}{h}\right) \right];$$

$$\gamma = \begin{cases} \left\{ c^2 \Delta t^2 - \Delta r^2 \right\}^{1/2}, & c^2 \Delta t^2 > \Delta r^2, \\ -i \left\{ \Delta r^2 - c^2 \Delta t^2 \right\}^{1/2}, & c^2 \Delta t^2 < \Delta r^2. \end{cases} \qquad (4.64)$$

де $\delta(\gamma^2)$ — дельта-функція; $H_1^{(2)}(\zeta)$ — функція Ханкеля.

Розглянемо ще матричну функцію (4.51). Для вільної частинки вона задається формулами

$$\left[G^0 \right] = \exp\left\{ \frac{i}{h} (t - t_0) \left[\hat{L}^0 \right] \right\} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0);$$

$$\left[\hat{L}^0 \right] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \hat{\varepsilon}^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\varepsilon}^2 = m^2 c^4 - c^2 h^2 \Delta. \qquad (4.65)$$

Безпосереднім обчисленням можна переконатись, що

$$\left[\hat{L}^0 \right]^{2n} = \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}^{2n} & 0 \\ 0 & \hat{\varepsilon}^{2n} \end{pmatrix}, \quad \left[\hat{L}^0 \right]^{2n+1} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\varepsilon}^{2n} \\ \hat{\varepsilon}^{2n+2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Тому

$$\left[G^0 \right] = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{t - t_0}{h} \hat{\varepsilon} \right), & -i \hat{\varepsilon}^{-1} \sin\left(\frac{t - t_0}{h} \hat{\varepsilon} \right) \\ -i \hat{\varepsilon} \sin\left(\frac{t - t_0}{h} \hat{\varepsilon} \right), & \cos\left(\frac{t - t_0}{h} \hat{\varepsilon} \right) \end{pmatrix} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0). \qquad (4.66)$$

Таким чином, у випадку вільної частинки

$$G_{11} = \cos\left(\frac{t - t_0}{h} \hat{\varepsilon} \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0);$$

$$G_{12} = -i \hat{\varepsilon}^{-1} \sin\left(\frac{t - t_0}{h} \hat{\varepsilon} \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0). \qquad (4.67)$$

Як бачимо, $G_{11} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t_0} G_{12}$ (що узгоджується з (4.58)) і задовольняються співвідношення (4.57).

Обчислимо G_{12}. Скориставшись інтегральним зображенням δ - функції, матимемо:

$$G_{12} = -\frac{i}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty d^3 p \frac{1}{\varepsilon(p)} \sin\left[\frac{t-t_0}{\hbar}\varepsilon(p)\right] e^{\frac{i}{\hbar}p(r-r_0)},$$

$$\varepsilon^2(p) = m^2 c^4 + c^2 p^2. \tag{4.68}$$

Зручно перейти до сферичних координат. Тоді після інтегрування за кутовими змінними формула (4.68) набере вигляду

$$G_{12} = -\frac{i}{2\pi^2\hbar^2} \frac{1}{|\Delta r|} \int_0^\infty dp \frac{p}{\varepsilon(p)} \sin\left[\frac{\Delta t}{\hbar}\varepsilon(p)\right] \sin\left[\frac{p}{\hbar}|\Delta r|\right]. \tag{4.69}$$

Якщо $\Delta t > 0$, обчислення інтеграла приводить до результату (4.64).

На закінчення зауважимо, що формули істотно спрощуються у випадку безмасової частинки. Справді, при $m = 0$ з (4.64) знаходимо

$$D^0(\vec{r}t, \vec{r}_0 t_0) = \frac{i}{2\pi\hbar c} \delta(c^2\Delta t^2 - \Delta r^2)$$

або

$$D^0(\vec{r}t, \vec{r}_0 t_0) = \frac{i}{4\pi\hbar c} \frac{1}{|\Delta r|} \begin{cases} \delta(|\Delta r| - c\Delta t), \Delta t > 0, \\ \delta(|\Delta r| + c\Delta t), \Delta t < 0. \end{cases} \tag{4.70}$$

Остання формула (з точністю до числового множника) є функцією Гріна для звичайного класичного хвильового рівняння.

1 крб.

З. 1110.