

Vybrané partie z teorie kvantovaných polí

(neúplný) text přednášky F744 pro 4. - 5. ročník oboru TF, 1999/2000

verze 2.4, 19. 11. 1999

J. Novotný, NC MFF UK
V Holešovičkách 2, 180 00 Praha 8

Obsah

1	Dráhový integrál v kvantové mechanice	2
1.1	Definice dráhového integrálu	2
1.2	Diskrétní aproximace a operátorové uspořádání	5
1.3	Wienerova míra	9
1.4	Částice v časově závislém homogenním vnějším poli	16
1.5	Lineární harmonický oscilátor	18
1.6	Gaussovské dráhové integrály	21
1.7	Lineární harmonický oscilátor v poli homogenní časově závislé vnější síly	26
1.8	Vytvořující funkcionály	30
1.9	Vytvořující funkcionál souvislých Greenových funkcí a efektivní akce	36
1.10	Fyzikální význam efektivní akce, adiabatická aproximace	45
1.11	Wickova rotace a kvantová teorie při konečné teplotě	51
1.12	Fermionové stupně volnosti a Berezinův integrál	58
1.13	Gaussovské integrály přes antikomutující proměnné	67
1.14	Cvičení	72
2	Funkcionální integrál v kvantové teorii pole	75
2.1	Teorie pole ve Schrödingerově reprezentaci	75
2.2	Vlastnosti gaussovských funkcionálních měr	83
2.3	Funkcionální integrál jako dráhový integrál na prostoru polních konfigurací	94
2.4	Vytvořující funkcionál Greenových funkcí volného skalárního pole a gaussovská funkcionální míra	100
2.5	Kvantová teorie pole na mříži	106
2.6	Schrödingerova reprezentace pro fermiony a fermionový funkcionální integrál	110
2.7	Vytvořující funkcionál Greenových funkcí pro fermiony a fermionový dráhový integrál	122
2.8	Funkcionální integrál v poruchové kvantové teorii pole	128
2.9	Cvičení	132
3	Wardovy identity a anomálie	134
3.1	Dysonovy - Schwingerovy rovnice	134
3.2	Wardovy identity	137

1 Dráhový integrál v kvantové mechanice

1.1 Definice dráhového integrálu

Zavedení formalismu dráhového integrálu v kvantové teorii se datuje do roku 1948, kdy byl publikován fundamentální Feynmanův článek nazvaný “Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics” [1]. Hlavní ideou bylo reprezentovat kvantověmechanickou amplitudu pravděpodobnosti přechodu systému mezi dvěma klasickými konfiguracemi \mathbf{x}' a \mathbf{x}'' za čas T jako sumu amplitud pravděpodobností od jednotlivých klasických trajektorií se zafixovaným počátečním a koncovým bodem ve tvaru

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \sum_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}', \mathbf{x}(T)=\mathbf{x}''} \exp \frac{i}{\hbar} S[\mathbf{x}(t)], \quad (1)$$

kde $S[\mathbf{x}(t)]$ je klasická akce jako funkcionál klasické trajektorie $\mathbf{x}(t)$, a sumu na pravé straně tohoto výrazu interpretovat jako integrál na prostoru klasických trajektorií v konfiguračním prostoru s nějakou mírou $\mathcal{D}\mathbf{x}(t)$. Sám Feynman brzy našel uplatnění této idey v rozličných dalších odvětvích kvantové fyziky: v kvantové elektrodynamice (zde byla důležitým prostředkem pro odvození relativisticky kovariantních Feynmanových pravidel) v teorii supratekutosti, v pevných látkách [2, 3]. Do širšího povědomí pronikl dráhový integrál po knižním publikování Hibbových zápisků Feynmanových přednášek [4] o alternativní konstrukci kvantové mechaniky vystavěné primárně na dráhovém integrálu, bez použití operátorového formalismu jako východiska. Postupně se stal mocným nástrojem pro analýzu mnohých fyzikálních systémů, výhodným pro získání globálních neporuchových vlastností, kvaziklasického přiblížení i přímočarého generování poruchových rozvoji. Zatímco v kvantové teorii pole je dráhový integrál (v této souvislosti standardně nazývaný jako funkcionální případně kontinuální integrál) definován spíše operacionalisticky a intuitivně (sadou pravidel jak s ním zacházet), v kvantové mechanice ho lze rigorózně definovat a zejména v posledních deseti letech byla spočtena řada netriviálních dráhových integrálů [5], což umožnilo sestavit tabulku “elementárních” dráhových integrálů a vypracována řada transformačních pravidel, v některých případech dovolující převést daný integrál na “tabulkový”.

Začneme s definicí dráhového integrálu v kvantové mechanice. Uvažujme pro jednoduchost jednočásticový systém v d -dimenzionálním prostoru s hamiltoniánem

$$H = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}). \quad (2)$$

Evoluční operátor pro tento systém je

$$U(T) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} HT\right). \quad (3)$$

Jádro tohoto operátoru má význam amplitudy pravděpodobnosti přechodu systému ze stavu s ostrou hodnotou souřadnice $|\mathbf{x}'\rangle$ do stavu $|\mathbf{x}''\rangle$ za čas T . V dalším se pokusíme reprezentovat toto jádro sumou příspěvků klasických trajektorií (1), tj. Feynmanovým dráhovým integrálem. Pišme formuli (3) ve tvaru¹

¹Poznamenejme, že pro omezené operátory na Hilbertově prostoru platí tzv. Lieova formule $\exp(A+B) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\exp\left(\frac{A}{n}\right) \exp\left(\frac{B}{n}\right)\right)^n$ ve smyslu konvergence v normě. Podobná formule platí i pro neomezené operátory. Lze např. dokázat, že pro v podstatě samosdružené zdola omezené operátory H_0 a V pro něž je operátor $H = H_0 + V$ v podstatě samosdružený platí ve smyslu silné operátorové limity $\exp(-H) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\exp(-H_0/n) \exp(-V/n)\right)^n$, [6].

$$U(T) = \left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \frac{T}{n}\right) \right)^n = \left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \frac{T}{n}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(\hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n}\right) \right)^n + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right). \quad (4)$$

Pro jádro evolučního operátoru $K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \langle \mathbf{x}'' | U(T) | \mathbf{x}' \rangle$ v x -reprezentaci tedy máme

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) &= \langle \mathbf{x}'' | \left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \frac{T}{n}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(\hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n}\right) \right)^n | \mathbf{x}' \rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right) \\ &= \int d^d \mathbf{x}_1 \dots d^d \mathbf{x}_{n-1} \langle \mathbf{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \frac{T}{n}} e^{-\frac{i}{\hbar} V(\hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n}} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle \dots \langle \mathbf{x}_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \frac{T}{n}} e^{-\frac{i}{\hbar} V(\hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n}} | \mathbf{x}' \rangle \\ &\quad + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right), \end{aligned} \quad (5)$$

kde jsme $(n-1)$ -krát vložili úplný systém vlastních stavů operátoru souřadnice

$$\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle, \quad \int d^d \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = 1, \quad \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle = \delta^{(d)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (6)$$

Vložení úplného systému vlastních stavů operátoru impulsu

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle, \quad \int d^d \mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = 1, \quad \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right) \quad (7)$$

dostáváme

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_j | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \frac{T}{n}} e^{-\frac{i}{\hbar} V(\hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n}} | \mathbf{x}_{j-1} \rangle &= \int d^d \mathbf{p}_j \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{j-1})\right) \frac{T}{n}\right) \langle \mathbf{x}_j | \mathbf{p}_j \rangle \langle \mathbf{p}_j | \mathbf{x}_{j-1} \rangle \\ &= \int \frac{d^d \mathbf{p}_j}{(2\pi\hbar)^d} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_j \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{j-1})\right) \frac{T}{n}\right). \end{aligned} \quad (8)$$

Celkem tedy máme pro jádro evolučního operátoru, provedeme-li limitu při $n \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) &= \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \int \frac{d^d \mathbf{p}_n}{(2\pi\hbar)^d} &\left(\prod_{j=1}^{n-1} \frac{d^d \mathbf{p}_j d^d \mathbf{x}_j}{(2\pi\hbar)^d} \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n (\mathbf{p}_j \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - \left(\frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{j-1})\right) \frac{T}{n})\right), \end{aligned} \quad (9)$$

kde jsme označili $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}'$ a $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}''$. Tato formule je jednou z forem hledané reprezentace dráhovým integrálem. Na pravou stranu této formule lze nahlížet jako na *definici* tohoto integrálu na prostoru trajektorií ve fázovém prostoru, pro který se vžilo standardní značení

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(T)=\mathbf{x}''} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \mathcal{D}\mathbf{p}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt (\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - H)\right). \quad (10)$$

Tento výraz připouští názornou fyzikální interpretaci². V rámci klasické mechaniky je stav systému popsán bodem ve fázovém prostoru s kanonickými souřadnicemi (\mathbf{x}, \mathbf{p}) . Dynamika je pak odvozena z principu nejmenší akce

²Následující řádky neobsahují rigorózní tvrzení, spíše jen intuitivní pohled na formuli(9).

$$\delta S(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \delta \int_0^T dt (\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - H) = 0, \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}', \quad \mathbf{x}(T) = \mathbf{x}''. \quad (11)$$

Pro po částech konstantní testovací trajektorii v \mathbf{p}

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}_j \quad \text{pro} \quad \frac{j-1}{n}T < t < \frac{j}{n}T \quad (12)$$

a po částech lineární testovací trajektorii v \mathbf{x}

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_{j-1} + \frac{n}{T}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})(t - \frac{j-1}{n}T) \quad \text{pro} \quad \frac{j-1}{n}T < t < \frac{j}{n}T, \quad (13)$$

kde opět $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}'$ a $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}''$, je funkcional akce

$$S(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \sum_{j=1}^n (\mathbf{p}_j \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - (\frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{j-1}))\frac{T}{n} + \mathcal{O}((\frac{T}{n})^2)). \quad (14)$$

Poslední výraz je s přesností $\mathcal{O}((\frac{T}{n}))$ (a až na koeficient $\frac{1}{\hbar}$) totožný s výrazem stojícím v exponenciále integrandu (9). Libovolnou spojitou trajektorii ve fázovém prostoru lze aproximovat trajektorií (12,13), výraz (14) lze pak chápat jako Riemannovu integrální sumu aproximující funkcional akce figurující v dynamickém principu nejmenší akce (11). Integraci v aproximativním výrazu pro jádro evolučního operátoru

$$K_n(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \int \frac{d^d \mathbf{p}_n}{(2\pi\hbar)^d} \left(\prod_{j=1}^{n-1} \frac{d^d \mathbf{p}_j d^d \mathbf{x}_j}{(2\pi\hbar)^d} \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n (\mathbf{p}_j \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - (\frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{j-1}))\frac{T}{n})\right), \quad (15)$$

lze tedy chápat jako sumu příspěvků klasických trajektorií typu (12,13), které začínají v $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}'$ a končí v $\mathbf{x}(T) = \mathbf{x}''$, do kvantověmechanické amplitudy pravděpodobnosti (9) přechodu ze stavu $|\mathbf{x}'\rangle$ do stavu $|\mathbf{x}''\rangle$ za čas T . Přitom příspěvek každé takové trajektorie je v absolutní hodnotě stejný (to Feynman nazývá principem ekvivalence trajektorií), liší se jen fází, která je dána klasickou akcí v jednotkách \hbar . V limitě $n \rightarrow \infty$ jsou pak započteny příspěvky všech trajektorií, aproximovatelných trajektoriemi (12,13). Výraz (15) pak připomíná Riemannovu integrální sumu pro integrál na prostoru fázových trajektorií. To je motivací pro označení ³

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(T)=\mathbf{x}''} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \mathcal{D}\mathbf{p}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt (\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - H)\right). \quad (16)$$

Výraz (9) lze ještě upravit na tvar bližší původní Feynmanově formuli (1). S využitím vztahu pro gaussovskou integraci

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}ax^2 + bx\right) = \left(\frac{1}{2\pi a}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{b^2}{2a}\right) \quad (17)$$

³Znovu poznamenejme, že dráhový integrál, vystupující na pravé straně výrazu (16) je definován limitou Riemannových sum (15).

dostaneme

$$\int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^d} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\mathbf{p}^2 T}{2m} + \mathbf{p} \cdot \Delta \mathbf{x}\right)\right) = \left(\frac{nm}{2\pi i \hbar T}\right)^{d/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} m \Delta \mathbf{x}^2 \frac{n}{2T}\right). \quad (18)$$

Odtud dostáváme vyjádření jádra evolučního operátoru pomocí dráhového integrálu na prostoru trajektorií v konfiguračním prostoru

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{nm}{2\pi i \hbar T}\right)^{nd/2} \int \prod_{j=1}^{n-1} d^d \mathbf{x}_j \exp \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \left(m(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2 \frac{n}{2T} - V(\mathbf{x}_{j-1}) \frac{T}{n}\right), \quad (19)$$

ve vžitém standardním značení s (neexistující) funkcionální mírou $\mathcal{D}\mathbf{x}(t)$

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(T)=\mathbf{x}''} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left(m \frac{\dot{\mathbf{x}}(t)^2}{2} - V(\mathbf{x}(t))\right)\right). \quad (20)$$

Toto je původní Feynmanova formule odpovídající reprezentaci (1).

V kvantové mechanice je tedy dráhový integrál *definován* jako limita konečnoměrných integrálů z výrazů, které formálně představují “diskrétní aproximace” integrandu (16) resp. (20). Tyto diskrétní aproximace se obdrží nahrazením (jednorozměrného) časového kontinua $(0, T)$ sadou “mřížových bodů” $\{0, T/n, \dots, j(T/n), \dots, n(T/n)\}$ a nahrazením (spojitě) nekonečného počtu integračních proměnných $\mathbf{x}(t)$ konečně mnoha proměnnými - hodnotami $\mathbf{x}(j(T/n))$ v mřížových bodech. Tato formální konstrukce se přenáší i do kvantové teorie pole, kde slouží k formulaci teorie na prostoročasové mříži.

1.2 Diskrétní aproximace a operátorové uspořádání

Diskrétní aproximace (15, 19) dráhového integrálu byly odvozeny za předpokladu, že hamiltonián (2) systému měl tvar

$$H = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}), \quad (21)$$

ve kterém byla separována závislost na operátorech impulsu a souřadnice. Užitím formule (8) jsme pak obdrželi přibližný propagátor pro infinitesimální časy

$$K(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_{j-1}; \frac{T}{n}) \approx \int \frac{d^d \mathbf{p}_j}{(2\pi\hbar)^d} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_j \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{j-1})\right) \frac{T}{n}\right). \quad (22)$$

V případě obecnějšího hamiltoniánu $H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})$, pro který tato separace není možná, je třeba být obezřetnější. Předpokládejme například, že hamiltonián upravíme užitím kanonických komutačních relací na tvar, v němž všechny operátory $\hat{\mathbf{p}}$ stojí nalevo od operátorů $\hat{\mathbf{x}}$ (tzv. *px*-uspořádání) a označme takto upravený hamiltonián $H_{px}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})$. Potom obdržíme následující analog formule (22)

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_{j-1}; \frac{T}{n}) &= \langle \mathbf{x}_j | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n}\right) | \mathbf{x}_{j-1} \rangle \\ &= \langle \mathbf{x}_j | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_{px}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n}\right) | \mathbf{x}_{j-1} \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\approx \langle \mathbf{x}_j | (1 - \frac{i}{\hbar} H_{px}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n}) | \mathbf{x}_{j-1} \rangle \\
&= \int d^d \mathbf{p}_j \langle \mathbf{x}_j | \mathbf{p}_j \rangle \langle \mathbf{p}_j | (1 - \frac{i}{\hbar} H_{px}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n}) | \mathbf{x}_{j-1} \rangle \\
&= \int d^d \mathbf{p}_j (1 - \frac{i}{\hbar} H_{px}(\mathbf{p}_j, \mathbf{x}_{j-1}) \frac{T}{n}) \langle \mathbf{x}_j | \mathbf{p}_j \rangle \langle \mathbf{p}_j | \mathbf{x}_{j-1} \rangle \\
&\approx \int \frac{d^d \mathbf{p}_j}{(2\pi\hbar)^d} \exp(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_j \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - \frac{i}{\hbar} H_{px}(\mathbf{p}_j, \mathbf{x}_{j-1}) \frac{T}{n}),
\end{aligned} \tag{23}$$

který pak lze použít ke konstrukci dráhového integrálu⁴ stejným postupem jako v předchozí podkapitole⁵

$$\begin{aligned}
&K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \\
&\lim_{n \rightarrow \infty} \int \frac{d^d \mathbf{p}_n}{(2\pi\hbar)^d} \left(\prod_{j=1}^{n-1} \frac{d^d \mathbf{p}_j d^d \mathbf{x}_j}{(2\pi\hbar)^d} \right) \exp(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n (\mathbf{p}_j \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - H_{px}(\mathbf{p}_j, \mathbf{x}_{j-1}) \frac{T}{n})).
\end{aligned} \tag{24}$$

Je-li však závislost na impulsech jiná než kvadratická, nelze obecně vyintegrováním přejít k dráhovému integrálu na prostoru trajektorií v konfiguračním prostoru ve tvaru analogickém (19).

Všimněme si, že v exponentu výrazu (24) stojí nikoliv *klasický* hamiltonián $H(\mathbf{p}, \mathbf{x})$, ale tzv. px -symbol operátoru $H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})$, tj. funkce $H_{px}(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ který může obsahovat “kvantové korekce” úměrné pozitivním mocninám \hbar .

Podobně, úpravou hamiltoniánu do tzv. xp -formy, kde všechny operátory $\hat{\mathbf{p}}$ stojí napravo od operátorů $\hat{\mathbf{x}}$, obdržíme

$$\begin{aligned}
K(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_{j-1}; \frac{T}{n}) &= \langle \mathbf{x}_j | \exp(-\frac{i}{\hbar} H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n}) | \mathbf{x}_{j-1} \rangle \\
&= \langle \mathbf{x}_j | \exp(-\frac{i}{\hbar} H_{xp}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n}) | \mathbf{x}_{j-1} \rangle \\
&\approx \langle \mathbf{x}_j | 1 - \frac{i}{\hbar} H_{xp}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n} | \mathbf{x}_{j-1} \rangle \\
&= \int d^d \mathbf{p}_j \langle \mathbf{x}_j | 1 - \frac{i}{\hbar} H_{xp}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) \frac{T}{n} | \mathbf{p}_j \rangle \langle \mathbf{p}_j | \mathbf{x}_{j-1} \rangle \\
&= \int d^d \mathbf{p}_j (1 - \frac{i}{\hbar} H_{xp}(\mathbf{p}_j, \mathbf{x}_j) \frac{T}{n}) \langle \mathbf{x}_j | \mathbf{p}_j \rangle \langle \mathbf{p}_j | \mathbf{x}_{j-1} \rangle \\
&\approx \int \frac{d^d \mathbf{p}_j}{(2\pi\hbar)^d} \exp(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_j \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - \frac{i}{\hbar} H_{xp}(\mathbf{p}_j, \mathbf{x}_j) \frac{T}{n}),
\end{aligned} \tag{25}$$

odkud

$$\begin{aligned}
&K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \\
&\lim_{n \rightarrow \infty} \int \frac{d^d \mathbf{p}_n}{(2\pi\hbar)^d} \left(\prod_{j=1}^{n-1} \frac{d^d \mathbf{p}_j d^d \mathbf{x}_j}{(2\pi\hbar)^d} \right) \exp(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n (\mathbf{p}_j \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - H_{xp}(\mathbf{p}_j, \mathbf{x}_j) \frac{T}{n})).
\end{aligned} \tag{26}$$

⁴Poznamenejme, že v tomto případě nemáme k dispozici rigorózní tvrzení typu Lieovy formule, proto není apriori zřejmé, zda členy řádu $\mathcal{O}(\frac{1}{n^2})$ lze beztestně zanedbat.

⁵Ve speciálním případě hamiltoniánu (21) dostaneme opět formuli (15).

Na rozdíl od předchozího nyní stojí v exponentu místo klasického hamiltoniánu tzv. xp -symbol operátoru $H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})$.

Všimněme si také, že v případě px -uspořádání se liší “časové” indexy trajektorií $\mathbf{p}(t)$ a $\mathbf{x}(t)$, které se dosazují do px -symbolu v dráhovém integrálu, zatímco v případě xp -uspořádání nikoliv. Chápeme-li \mathbf{p}_j jako hodnotu trajektorie $\mathbf{p}(t)$ v čase $t_j = (j - 1/2)T/n$ a \mathbf{x}_j jako hodnotu trajektorie $\mathbf{x}(t)$ v čase $t = jT/n$, potom v px -symbolu časový argument $\mathbf{x}(t)$ předchází a v xp -symbolu následuje časový argument trajektorie $\mathbf{p}(t)$. Proto se někdy formální spojitá limita diskrétního výrazu (24) píše ve tvaru⁶

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(T)=\mathbf{x}''} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \mathcal{D}\mathbf{p}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt (\mathbf{p}(t) \cdot \dot{\mathbf{x}}(t) - H_{px}(\mathbf{p}(t), \mathbf{x}(t)))\right) \quad (27)$$

a podobně pro spojitou limitu (26)

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(T)=\mathbf{x}''} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \mathcal{D}\mathbf{p}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt (\mathbf{p}(t) \cdot \dot{\mathbf{x}}(t) - H_{xp}(\mathbf{p}(t), \mathbf{x}(t)))\right), \quad (28)$$

kde jsme zavedli označení $f_{\pm}(t) = f(t \pm 0)$.

Než postoupíme dále, uveďme jednoduchý příklad - interakci nabitě bezspinové částice s vnějším elektromagnetickým polem, popsáným vektorovým potenciálem⁷ $A^\mu(\mathbf{x}) = (\phi(\mathbf{x}), \mathbf{A}(\mathbf{x}))$. Příslušný hamiltonián má tvar

$$\begin{aligned} H &= \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}))^2}{2m} + e\phi(\hat{\mathbf{x}}) \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e}{2m}(\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}) + \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}) \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2(\hat{\mathbf{x}}) + e\phi(\hat{\mathbf{x}}). \end{aligned} \quad (29)$$

Odtud pomocí vztahu

$$[\hat{p}_j, A_k(\hat{\mathbf{x}})] = -i\hbar \nabla_j \cdot \mathbf{A}_k(\hat{\mathbf{x}})$$

snadno odvodíme px - a xp -symbody:

$$H_{px}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{m}\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2(\mathbf{x}) + e\phi(\mathbf{x}) - \frac{i\hbar}{2m}(\nabla \cdot \mathbf{A})(\mathbf{x}), \quad (30)$$

$$H_{xp}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{m}\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2(\mathbf{x}) + e\phi(\mathbf{x}) + \frac{i\hbar}{2m}(\nabla \cdot \mathbf{A})(\mathbf{x}). \quad (31)$$

Dosazením do vztahů (24, 26) a vyintegrováním přes zobecněné impulsy⁸ dostaneme pro jádro evolučního operátoru dvě ekvivalentní reprezentace dráhovým integrálem na prostoru

⁶Úvahu lze také obrátit: pokud uijeme pro jádro evolučního operátoru reprezentaci (24) s *klasickým* hamiltoniánem $H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \sum_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_m} h_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_m} p_{i_1} \dots p_{i_n} x_{j_1} \dots x_{j_m}$, znamená to, že jsme použili kvantovací předpis, kdy tomuto hamiltoniánu je přiřazen operátor $H_{px}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) = \sum_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_m} h_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_m} \hat{p}_{i_1} \dots \hat{p}_{i_n} \hat{x}_{j_1} \dots \hat{x}_{j_m}$, zatímco použijeme-li s tímž klasickým hamiltoniánem reprezentaci (26), kvantujeme pomocí předpisu $H_{xp}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) = \sum_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_m} h_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_m} \hat{x}_{j_1} \dots \hat{x}_{j_m} \hat{p}_{i_1} \dots \hat{p}_{i_n}$.

⁷Pro jednoduchost předpokládáme, že vnější pole nezávisí na čase.

⁸Integrace je opět gaussovská.

trajektorií v konfiguračním prostoru

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{nm}{2\pi i \hbar T} \right)^{nd/2} \int \prod_{j=1}^{n-1} d^d \mathbf{x}_j \exp \frac{i}{\hbar} S_{\mp}^n,$$

kde

$$S_{-}^n = \sum_{j=1}^n \left(\frac{m(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2}{2T/n} + e\mathbf{A}(\mathbf{x}_{j-1}) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - (e\phi(\mathbf{x}_{j-1}) - \frac{ie\hbar}{2m}(\nabla \cdot \mathbf{A})(\mathbf{x}_{j-1})) \frac{T}{n} \right), \quad (32)$$

a podobně

$$S_{+}^n = \sum_{j=1}^n \left(\frac{m(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2}{2T/n} + e\mathbf{A}(\mathbf{x}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - (e\phi(\mathbf{x}_j) + \frac{ie\hbar}{2m}(\nabla \cdot \mathbf{A})(\mathbf{x}_j)) \frac{T}{n} \right). \quad (33)$$

Zde S_{\mp}^n je diskrétní aproximace akce na fázovém prostoru, odpovídající px a xp uspořádání.

Přicházíme zde ke zdánlivému paradoxu. Provedeme-li totiž formální limitu $n \rightarrow \infty$ a budeme-li chtít zapsat dráhový integrál “spojitě” v analogii s (20) obdržíme

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(T)=\mathbf{x}''} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt (m \frac{\dot{\mathbf{x}}(t)^2}{2} + e\mathbf{A}(\mathbf{x}(t)) \cdot \dot{\mathbf{x}}(t) - e\phi(\mathbf{x}(t)) \pm \frac{ie\hbar}{2m}(\nabla \cdot \mathbf{A})(\mathbf{x}(t)))}, \quad (34)$$

tedy nejednoznačný výsledek! To je ilustrace faktu, že “spojitý” výraz typu (20) nemá sám o sobě dobrý smysl a je ho třeba brát vždy jen jako symbolický zápis pro formule typu (32, 33). Pokud tedy chceme s takovými symbolickými formulami pracovat, je třeba podobně jako v případě integrálu na prostoru fázových trajektorií vyznačit pořadí časových argumentů funkcí $\mathbf{x}(t)$ a $\dot{\mathbf{x}}(t)$ a psát

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(T)=\mathbf{x}''} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt (m \frac{\dot{\mathbf{x}}(t)^2}{2} + e\mathbf{A}(\mathbf{x}(t)) \cdot \dot{\mathbf{x}}_{\mp}(t) - e\phi(\mathbf{x}(t)) \pm \frac{ie\hbar}{2m}(\nabla \cdot \mathbf{A})(\mathbf{x}(t)))}. \quad (35)$$

V další podkapitole uvidíme, jak lze pochopit kompatibilitu obou těchto reprezentací jako vlastnost trajektorií na nichž je soustředěna “míra” odpovídající dráhovému integrálu.

Formule (35) má nevýhodu v tom, že už na “klasické” úrovni obsahuje “kvantovou korekci”, k jejímuž odvození je třeba znát kvantový hamiltonián. Lze si klást otázku, zda neexistuje jiné vhodné uspořádání “časových” indexů v diskrétní aproximaci klasické akce, které by se bez kvantových korekcí obešlo. Řešením pro náš příklad je tzv. *mid-point prescription*, spojené s tzv. Weylovým uspořádáním nekomutujících operátorů

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \frac{d^d \mathbf{p}_n}{(2\pi \hbar)^d} \left(\prod_{j=1}^{n-1} \frac{d^d \mathbf{p}_j d^d \mathbf{x}_j}{(2\pi \hbar)^d} \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n (\mathbf{p}_j \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - H_W(\mathbf{p}_j, \bar{\mathbf{x}}_j) \frac{T}{n} \right), \quad (36)$$

kde $\bar{\mathbf{x}}_j = (\mathbf{x}_j + \mathbf{x}_{j-1})/2$ a $H_W(\mathbf{p}, \bar{\mathbf{x}})$ je tzv. Weylův symbol kvantového hamiltoniánu. Ten odpovídá symetrickému uspořádání nekomutujících operátorů $\hat{\mathbf{p}}$ a $\hat{\mathbf{x}}$. V našem příkladu je

$$H_W(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2(\mathbf{x}) + e\phi(\mathbf{x}), \quad (37)$$

tedy Weylův symbol je totožný s klasickým hamiltoniánem. Konfigurační dráhový integrál je pak

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{nm}{2\pi i \hbar T} \right)^{nd/2} \int \prod_{j=1}^{n-1} d^d \mathbf{x}_j \exp \frac{i}{\hbar} S_W^n,$$

kde diskrétní aproximace akce odpovídající Weylovu uspořádání je

$$S_W^n = \sum_{j=1}^n \left(\frac{m(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2}{2T/n} + e\mathbf{A}(\bar{\mathbf{x}}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}) - e\phi(\bar{\mathbf{x}}_j) \frac{T}{n} \right). \quad (38)$$

Ve spojitě formě

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(T)=\mathbf{x}''} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt (m \frac{\dot{\mathbf{x}}(t)^2}{2} + e\mathbf{A}(\bar{\mathbf{x}}(t)) \cdot \dot{\mathbf{x}}(t) - e\phi(\bar{\mathbf{x}}(t)))}. \quad (39)$$

Kompatibilitu s předchozími formami budeme ilustrovat v následující podkapitole.

1.3 Wienerova míra

Jak již bylo řečeno, formální míra $\mathcal{D}\mathbf{x}(t)$ neexistuje v matematicky rigorózním smyslu. Přesto lze celý formalismus přeformulovat tak, že dráhový integrál je integrálem s dobře definovanou mírou na prostoru spojitých funkcí. Prvním krokem je tzv. Wickova rotace, tj. analytické prodloužení jádra evolučního operátoru do imaginárního času, $T \rightarrow -i\hbar\tau$. Fyzikálně to odpovídá přechodu k matici hustoty kanonického Gibbsova souboru $\rho(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \beta)$ s inverzní teplotou $\beta = \tau = 1/kT$, kde nyní T je absolutní teplota a k je Boltzmanova konstanta. Zopakováním předchozího postupu dospějeme k následující reprezentaci

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; -i\hbar\tau) = \rho(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau) = \langle \mathbf{x}'' | \exp(-H\tau) | \mathbf{x}' \rangle = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(\tau)=\mathbf{x}''} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp \left(- \int_0^\tau dt \left(m \frac{\dot{\mathbf{x}}(t)^2}{2\hbar^2} + V(\mathbf{x}(t)) \right) \right). \quad (40)$$

Všimněme si, že poslední výraz se liší od (20) náhradou oscilující exponenciály exponenciálou klesající (pro potenciál $V(\mathbf{x})$ zdola ohraničený), což zlepšuje vlastnosti konvergence dráhového integrálu. Tento postup se přenáší i do teorie pole, odpovídá přechodu z Minkowského prostoročasu do Euklidova prostoru. Míra $\mathcal{D}\mathbf{x}(t)$ sice opět neexistuje, existuje však míra⁹ formálně definovaná formulí¹⁰ (Pro zjednodušení zápisu od této chvíle až do konce podkapitoly

⁹Jakožto míra na prostoru spojitých funkcí na intervalu $(0, \tau)$ splňujících podmínky $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}'$, $\mathbf{x}(\tau) = \mathbf{x}''$, spočetně aditivní na σ -algebře borelovských podmnožin.

¹⁰Zcela analogicky lze zavést Wienerovu míru na trajektoriích spojitých na intervalu (t', t'') splňujících podmínky $\mathbf{x}(t') = \mathbf{x}'$, $\mathbf{x}(t'') = \mathbf{x}''$, formulí

$$dW(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; t'', t') = \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp \left(- \int_{t'}^{t''} dt \frac{M\dot{\mathbf{x}}(t)^2}{2} \right);$$

jediná změna v následujících definicích spočívá v položení $t_0 = t'$ a $t_n = t''$. V některých výpočtech budeme z důvodů symetrie výsledných výrazů používat tuto "časově posunutou" míru.

klademe $m/\hbar^2 = M$.)

$$dW(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau) = \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp\left(-\int_0^\tau dt \frac{M\dot{\mathbf{x}}(t)^2}{2}\right), \quad (41)$$

na prostoru funkcí \mathcal{W} spojitých na $(0, \tau)$, spojujících body \mathbf{x}' a \mathbf{x}'' . Tato tzv. Wienerova míra byla známá přibližně dvacet let před Feynmanovou prací [1] a používaná v teorii difuzních procesů¹¹.

Naznačme, jak lze tuto míru rigorózně definovat. Základními množinami, jejichž míra je definována, jsou tzv. cylindrické množiny, určené sadou bodů $t_0 = 0 < t_1 < \dots < t_j < \dots < t_n = \tau$, $j = 1, \dots, n-1$ a intervalů I_j . Příslušná cylindrická množina je pak určena podmínkou

$$M(\{t_j\}, \{I_j\}) = \{\mathbf{x}(t) | \mathbf{x}(t_j) \in I_j, j = 1, \dots, n-1\} \quad (42)$$

Míra takovéto množiny je pak podle definice

$$\begin{aligned} W(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau)(M(\{t_j\}, \{I_j\})) &= \int_{M(\{t_j\}, \{I_j\})} dW(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau) \\ &= \left(\prod_{i=1}^{n-1} \int_{I_i} d^d \mathbf{x}_i\right) \prod_{j=1}^n \left(\frac{M}{2\pi(t_j - t_{j-1})}\right)^{d/2} \exp\left(-\frac{M(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2}{2(t_j - t_{j-1})}\right), \end{aligned} \quad (43)$$

kde $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}'$ a $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}''$. Definujeme-li

$$W(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau)(\mathcal{W}) = \left(\frac{M}{2\pi\tau}\right)^{d/2} \exp\left(-\frac{M(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')^2}{2\tau}\right), \quad (44)$$

jsou tyto definice konsistentní díky semigrupové podmínce platné pro jádro matice hustoty

$$\langle \mathbf{x}'' | \exp\left(-(\tau - \sigma)\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\hbar^2 M}\right) | \mathbf{x}' \rangle = \left(\frac{M}{2\pi(\tau - \sigma)}\right)^{d/2} \exp\left(-\frac{M(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')^2}{2(\tau - \sigma)}\right).$$

Roli jednoduchých funkcí, jejichž integrál lze spočítat, hrají konečné lineární kombinace charakteristických funkcí cylindrických množin a jejich limity, tzv. cylindrické funkce. To jsou fakticky funkce pouze konečně mnoha funkčních hodnot funkce $\mathbf{x}(t)$:

$$F[\mathbf{x}(t)] = f(\mathbf{x}(t_1), \mathbf{x}(t_2), \dots, \mathbf{x}(t_{n-1})). \quad (45)$$

Integrál takové funkce je pak

$$\begin{aligned} &\int dW(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau) F[\mathbf{x}(t)] = \\ &\left(\int \prod_{i=1}^{n-1} d^d \mathbf{x}_i\right) \prod_{j=1}^n \left(\frac{M}{2\pi(t_j - t_{j-1})}\right)^{d/2} \exp\left(-\frac{M(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2}{2(t_j - t_{j-1})}\right) f(\mathbf{x}(t_1), \dots, \mathbf{x}(t_{n-1})) \end{aligned} \quad (46)$$

Diskrétní aproximace dráhového integrálu (40) pak odpovídá aproximaci integrovatelné funkce

$$F[\mathbf{x}(t)] = \exp\left(-\int_0^\tau dt V(\mathbf{x}(t))\right)$$

¹¹Poznamenejme, že analogická míra $\mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \frac{m\dot{\mathbf{x}}(t)^2}{2}\right)$ neexistuje. Důvodem je právě oscilující komplexní exponenciála.

cylindrickou funkcí

$$F_n[\mathbf{x}(t)] = \exp\left(-\sum_{j=1}^{n-1} V(\mathbf{x}(j(\tau/n)))(\tau/n)\right).$$

Pro spojitě funkce $V(\mathbf{x})$ a $\mathbf{x}(t)$ konvergují tyto cylindrické funkce k integrandu $F[\mathbf{x}(t)]$, takže ve smyslu integrálu s Wienerovou mírou máme

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; -i\hbar\tau) = \int dW(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau) \exp\left(-\int_0^\tau dt V(\mathbf{x}(t))\right). \quad (47)$$

Tato formule se v této souvislosti nazývá Feynmanovou-Kacovou formulí. Fakt, že tento integrál existuje¹² ve smyslu teorie míry umožňuje zacházet s ním podle pravidel platných pro obyčejné integrály¹³.

Uveďme několik poznámek k vlastnostem Wienerovy míry. Pravá strana “definice” (41) vznikla formálním limitním přechodem

$$\lim_{n \rightarrow \infty, t_j - t_{j-1} = \tau/n} \left(\prod_{j=1}^{n-1} d^d \mathbf{x}_j \left(\frac{M}{2\pi(t_j - t_{j-1})} \right)^{d/2} \right) e^{-\sum_{j=1}^n \frac{M(\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1}))^2}{2(t_j - t_{j-1})}}, \quad (48)$$

avšak ani jeden z faktorů nemá dobře definovanou limitu pro $n \rightarrow \infty$, $t_j - t_{j-1} = \tau/n$ pro obecnou spojitou funkci $\mathbf{x}(t)$. Proto nelze spoléhat na intuici a odvozovat vlastnosti Wienerovy míry z této symbolické formule.

Ukažme dva příklady, kdy dochází k rozporům mezi intuitivním chápáním Wienerova integrálu a jeho rigorózními vlastnostmi ve smyslu teorie míry. Příklady jsou instruktivní i z toho důvodu, že ilustrují postupy používané pro integraci jednoduchých cylindrických funkcí a umožňují získat “kvantově mechanickou” intuici pro dráhové integrování.

Formule (41) zdánlivě implikuje, že rozhodující typ trajektorií, které přispívají do Wienerova integrálu, jsou ty trajektorie, pro něž je (volná) akce $S[\mathbf{x}(t)] = \int_0^\tau dt \frac{M\dot{\mathbf{x}}(t)^2}{2}$ konečná, neboť v opačném případě je příspěvek potlačen exponenciálním faktorem $\exp(-S[\mathbf{x}(t)])$. Poznamenejme, že akce je definovaná pouze pro diferencovatelné trajektorie, zatímco Wienerova míra je mírou na prostoru všech spojitých trajektorií, proto definujme pro obecnou spojitou trajektorii, inspirování formální limitou¹⁴ (48),

$$\begin{aligned} S[\mathbf{x}(t)] &= \limsup_{n \rightarrow \infty, t_j - t_{j-1} = \tau/n} S_n[\mathbf{x}(t)] \\ &= \limsup_{n \rightarrow \infty, t_j - t_{j-1} = \tau/n} \sum_{j=1}^n \frac{M(\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1}))^2}{2(t_j - t_{j-1})}. \end{aligned} \quad (49)$$

Uvažujme pozitivní funkcionály¹⁵

$$G_n[\mathbf{x}(t)] = \exp(-\varepsilon S_n[\mathbf{x}(t)]), \quad (50)$$

¹²Existence je zaručena např. pro spojitý a zdola omezený potenciál $V(\mathbf{x})$, takový, že operátor $\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$ je v podstatě samosdružený.

¹³Pro Feynmanův dráhový integrál naproti tomu nejsou tato pravidla apriori zaručena.

¹⁴Abychom zajistili existenci pro každou uvažovanou trajektorii, definujme akci jako limitu superior. Takto definovaná akce je pak buď konečná, nebo rovna $+\infty$, přičemž pro spojitě diferencovatelné trajektorie tato definice souhlasí s formulí $S[\mathbf{x}(t)] = \int_0^\tau dt \frac{M\dot{\mathbf{x}}(t)^2}{2}$.

¹⁵V dalším budeme často funkce na prostoru trajektorií \mathcal{W} nazývat funkcionály, abychom je odlišili od funkcí $\mathbf{x}(t)$, které jsou prvky \mathcal{W} .

kde $\varepsilon > 0$, a spočtěme jejich integrál vzhledem k Wienerově míře. Jedná se o cylindrické funkcionály, je tedy podle definice (46)

$$\begin{aligned}
& \int dW(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau) G_n[\mathbf{x}(t)] = \\
& \int \prod_{i=1}^{n-1} d^d \mathbf{x}_i \prod_{j=1}^n \left(\frac{M}{2\pi(t_j - t_{j-1})} \right)^{d/2} \exp \left(-\frac{M(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2}{2(t_j - t_{j-1})} \right) \\
& \quad \times \exp \left(-\varepsilon \sum_{j=1}^n \frac{M(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2}{2(t_j - t_{j-1})} \right) = \\
& \int \prod_{i=1}^{n-1} d^d \mathbf{x}_i \prod_{j=1}^n \left(\frac{M}{2\pi(t_j - t_{j-1})} \right)^{d/2} \exp \left(-\frac{M(1+\varepsilon)(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2}{2(t_j - t_{j-1})} \right) \quad (51)
\end{aligned}$$

Integrand se liší od analogického integrandu na pravé straně (43) přeškálováním hmoty M v exponentu faktorem $(1+\varepsilon)$, pokud bychom přeškálovali M také v předexponenciálním faktoru, dostali bychom výraz pro Wienerovu míru cylindrické množiny určené posloupností časů t_j a intervalů $I_j = \mathbf{R}$ (tedy celé množiny spojitých funkcí \mathcal{W}) s parametrem $M \rightarrow M(1+\varepsilon)$. Je tedy

$$\begin{aligned}
& \int dW(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau) G_n[\mathbf{x}(t)] = (1+\varepsilon)^{-nd/2} W(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau)(\mathcal{W}) \\
& = (1+\varepsilon)^{-nd/2} \left(\frac{M(1+\varepsilon)}{2\pi\tau} \right)^{d/2} \exp \left(-\frac{M(1+\varepsilon)(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')^2}{2\tau} \right). \quad (52)
\end{aligned}$$

Všimněme si dále limitního funkcionálu

$$G_\infty[\mathbf{x}(t)] = \exp(-\varepsilon S[\mathbf{x}(t)]) = \liminf_{n \rightarrow \infty} G_n[\mathbf{x}(t)].$$

Zřejmě se anuluje pro ty trajektorie, které mají nekonečnou akci (49). Pro trajektorie s konečnou akcí (označme množinu takových trajektorií symbolem \mathcal{W}_{finite}) je nenulový a pozitivní. Přitom pro integrál tohoto funkcionálu platí¹⁶

$$\begin{aligned}
0 & \leq \int_{\mathcal{W}_{finite}} dW(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau) G_\infty[\mathbf{x}(t)] = \int dW(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau) G_\infty[\mathbf{x}(t)] \\
& = \int dW(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau) \liminf_{n \rightarrow \infty} G_n[\mathbf{x}(t)] \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \int dW(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; \tau) G_n[\mathbf{x}(t)] = 0. \quad (53)
\end{aligned}$$

To je možné jen tehdy, má-li množina \mathcal{W}_{finite} Wienerovu míru rovnou nule. Tedy do Wienerova dráhového integrálu trajektorie s konečnou akcí vůbec nepřispívají!

Další chybný intuitivní závěr, který sugeruje “spojitá” formule (41), je, že do dráhového integrálu by měly přispívat ty trajektorie, pro které má pravá strana této formule smysl, t.j.

¹⁶Zde užíváme Fatouova lemmatu známého z teorie integrálu, které pro posloupnost pozitivních měřitelných funkcí f_n na prostoru X s mírou $d\mu$ dává odhad

$$\int_X d\mu \liminf_{n \rightarrow \infty} f_n \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \int_X d\mu f_n.$$

diferencovatelné trajektorie. Pro takové trajektorie platí $|\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(t)| \approx \textit{konst.}|s - t|$ pro $s \rightarrow t$. Ukažme nyní, že chování trajektorií, které jsou podstatně pro Wienerův integrál, je pro $s \rightarrow t$ odlišné, totiž¹⁷ $|\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(t)| \approx \textit{konst.}|s - t|^\alpha$, kde $\alpha \leq 1/2$.

Budeme postupovat podobně jako v předcházejícím případě; zvolíme vhodný funkcionál, který se anuluje pro trajektorie s výše uvedenou vlastností a pro ostatní trajektorie je pozitivní, a ukážeme, že jeho integrál je roven nule.

Uvažujme funkcionály

$$H_{s,t}[\mathbf{x}(\cdot)] = \exp\left(-\frac{M(\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(t))^2}{2(s-t)^{2\alpha}}\right)$$

a spočítáme jejich integrál. Jedná se opět o cylindrickou funkci, závisící na hodnotách trajektorie $\mathbf{x}(t)$ ve dvou bodech. Místo abychom počítali přímo integrál $\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') H_{s,t}[\mathbf{x}(\cdot)]$, spočítáme pomocný integrál

$$\begin{aligned} I(\beta) &= \int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') \exp\left(-\frac{M}{2}\beta(\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(t))^2 + \frac{M}{2}\frac{(\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(t))^2}{(s-t)}\right) \\ &= \left(\frac{M}{2\pi(t''-s)}\right)^{d/2} \left(\frac{M}{2\pi(s-t)}\right)^{d/2} \left(\frac{M}{2\pi(t-t')}\right)^{d/2} \int d^d\mathbf{x}_s d^d\mathbf{x}_t \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{M}{2}\beta(\mathbf{x}_s - \mathbf{x}_t)^2 - \frac{M}{2}\frac{(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}_s)^2}{(t''-s)} - \frac{M}{2}\frac{(\mathbf{x}_t - \mathbf{x}')^2}{(t-t')}\right), \end{aligned} \quad (54)$$

který využijeme v dalším. Zřejmě platí

$$\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') H_{s,t}[\mathbf{x}(\cdot)] = I\left(\frac{1}{s-t} + \frac{1}{(s-t)^{2\alpha}}\right). \quad (55)$$

Integrace v (54) vede na výpočet $2d$ -dimenzionálního gaussovského integrálu, připomeňme obecnou formuli pro integrál tohoto typu:

$$\int d^d\mathbf{x} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{x}\right) = \det\left(\frac{2\pi}{\mathbf{A}}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{1}{2}\mathbf{b}^T \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b}\right). \quad (56)$$

V našem případě má $2d \times 2d$ matice kvadratické formy tvar

$$\mathbf{A} = M \begin{pmatrix} \frac{1}{t''-s} + \beta & -\beta \\ -\beta & \frac{1}{t-t'} + \beta \end{pmatrix} \quad (57)$$

a $2d$ -dimenzionální vektor \mathbf{b} je

$$\mathbf{b} = M \begin{pmatrix} \frac{1}{(t''-s)}\mathbf{x}'' \\ \frac{1}{(t-t')}\mathbf{x}' \end{pmatrix}. \quad (58)$$

Pro determinant matice \mathbf{A} máme

$$\det \mathbf{A} = M^{2d} \left(\frac{1 + \beta(t'' - t' - (s - t))}{(t'' - s)(t - t')}\right)^d \quad (59)$$

¹⁷Takové funkce se nazývají α -Hölderovské s $\alpha \leq 1/2$.

a inverzní matice je

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{M} \frac{(t'' - s)(t - t')}{1 + \beta(t'' - t' - (s - t))} \begin{pmatrix} \frac{1}{t-t'} + \beta & \beta \\ \beta & \frac{1}{t''-s} + \beta \end{pmatrix}. \quad (60)$$

Po dosazení do formule (56) obdržíme¹⁸

$$I(\beta) = \left(\frac{M}{2\pi(s-t)} \right)^{d/2} \left(\frac{1}{1 + \beta(t'' - t' - (s - t))} \right)^{d/2} \\ \times \exp \left(-\frac{M}{2} (\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')^2 \frac{\beta}{1 + \beta(t'' - t' - (s - t))} \right). \quad (61)$$

Tedy

$$\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') H_{s,t}[\mathbf{x}(\cdot)] = \left(\frac{M}{2\pi} \frac{(s-t)^{2\alpha-1}}{(t'' - t')(1 + (s-t)^{2\alpha-1}) - (s-t)} \right)^{d/2} \\ \times \exp \left(-\frac{M}{2} (\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')^2 \frac{1 + (s-t)^{2\alpha-1}}{(t'' - t')(1 + (s-t)^{2\alpha-1}) - (s-t)} \right).$$

Uvažujme nyní, zcela v analogii s předchozím případem, limitní funkcionál

$$H_t[\mathbf{x}(\cdot)] = \liminf_{s \rightarrow t^+} H_{s,t}[\mathbf{x}(\cdot)] \geq 0, \quad (62)$$

který se zřejmě anuluje pro ty trajektorie, pro něž $\limsup_{s \rightarrow t^+} |\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(t)|/|s-t|^\alpha = \infty$, tedy nosič $H_t[\mathbf{x}(\cdot)]$ (označme ho \mathcal{W}_α) obsahuje speciálně všechny funkce, pro něž $|\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(t)| \approx \text{konst.} |s-t|^\beta$ pro $s \rightarrow t$ a $\beta \geq \alpha$. Je-li nyní $\alpha > 1/2$, máme podobně jako v předchozím případě

$$0 \leq \int_{\mathcal{W}_\alpha} dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') H_t[\mathbf{x}(\cdot)] = \int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') H_t[\mathbf{x}(\cdot)] \\ = \int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') \liminf_{s \rightarrow t^+} H_{s,t}[\mathbf{x}(\cdot)] \leq \liminf_{s \rightarrow t^+} \int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') H_{s,t}[\mathbf{x}(\cdot)] = 0. \quad (63)$$

Tedy Wienerova míra množiny \mathcal{W}_α je rovna nule a speciálně diferencovatelné trajektorie, pro něž je $\beta = 1$, do Wienerova integrálu nepřispívají!

Jak jsme předeslali v předchozí podkapitole, je to právě tato vlastnost, která zodpovídá za nekomutativitu operátorů fyzikálních pozorovatelných v kvantové mechanice.

Spočteme ještě jednu charakteristiku Wienerovy míry - "střední hodnotu" kvadrátu vzdálenosti¹⁹ $(\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(t))^2$. Pomocí předchozího výsledku máme

$$\langle (\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(t))^2 \rangle = \frac{\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') (\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(t))^2}{\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t')} \\ = \frac{-\frac{2}{M} \frac{\partial}{\partial \beta} I(\beta)}{\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') \Big|_{\beta = \frac{1}{s-t}}} \\ = \frac{d}{M} \frac{(s-t)(t'' - t' - (s-t))}{(t'' - t')^2} + \frac{(s-t)^2 (\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')^2}{(t'' - t')^2},$$

¹⁸Všimněme si, že pro $\beta = 1/(s-t)$ zreprodukuje formulí (44) pro Wienerovu míru prostoru trajektorií \mathcal{W} .

¹⁹T.j. interpretujeme-li Wienerovu míru jako (nenormovanou) pravděpodobnostní míru; normalizace ve vztahu (64) je určena z podmínky jednotkové míry množiny \mathcal{W} . Takto chápaná Wienerova míra je svázána se stochastickým Wienerovým procesem, který je spojitou limitou náhodné procházky (Brownova pohybu) po d -dimenzionální mříži, podrobnosti viz [9].

(64)

tedy pro $s - t \rightarrow 0$ je $\langle (\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(t))^2 \rangle \approx (d/M)(s - t)$, což opět odráží nediferencovatelnost typických trajektorií²⁰.

Na závěr ukažme, jak nediferencovatelnost trajektorií vysvětluje kompatibilitu px - a xp -reprezentace v příkladu bezspinové částice ve vnějším (statickém) elektromagnetickém poli²¹ s hamiltoniánem (29). Po analytickém prodloužení $t \rightarrow -i\hbar\tau$ dostaneme pro matici hustoty px -reprezentaci

$$\langle \mathbf{x}'' | e^{-\tau H} | \mathbf{x}' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', \tau, 0) e^{-S_{E-}^n},$$

kde

$$-S_{E-}^n = \sum_{j=1}^n \left(\frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{x}(t_{j-1})) \cdot (\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1})) - e \frac{\tau}{n} (\phi(\mathbf{x}(t_{j-1})) - \frac{i\hbar}{2m} (\nabla \cdot \mathbf{A})(\mathbf{x}(t_{j-1}))) \right). \quad (65)$$

Pořadí limity a integrálu nelze zaměnit, neboť limita integrandu neexistuje pro skoro všechny trajektorie. Jak se však lze přesvědčit²², pro velká n charakteristické trajektorie, přispívající do Wienerova integrálu, splňují (srov. (64))

$$\frac{\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', \tau, 0) (x_r(t_j) - x_r(t_{j-1}))(x_s(t_j) - x_s(t_{j-1}))}{\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', \tau, 0)} \approx \delta_{rs} \frac{\tau \hbar^2}{n m}.$$

Proto lze psát pod integrálem

$$\begin{aligned} \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{x}(t_{j-1})) \cdot (\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1})) &= \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{x}(t_j)) \cdot (\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1})) \\ &- \frac{ie}{\hbar} (\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1})) \cdot \nabla \mathbf{A}(\mathbf{x}(t_j)) \cdot (\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1})) \\ &\approx + \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{x}(t_j)) \cdot (\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1})) - \frac{ie\hbar}{m} \frac{\tau}{n} (\nabla \cdot \mathbf{A})(\mathbf{x}(t_j)). \end{aligned}$$

V ostatních členech lze zaměnit časový argument t_{j-1} za t_j beze změny hodnoty integrálu, neboť trajektorie jsou spojitě. Tedy reprezentace (65) je ekvivalentní reprezentaci užívající xp -uspořádání

$$\langle \mathbf{x}'' | e^{-\tau H} | \mathbf{x}' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', \tau, 0) e^{-S_{E+}^n},$$

kde

$$-S_{E+}^n = \sum_{j=1}^n \left(\frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{x}(t_j)) \cdot (\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1})) - e \frac{\tau}{n} (\phi(\mathbf{x}(t_j)) + \frac{i\hbar}{2m} (\nabla \cdot \mathbf{A})(\mathbf{x}(t_j))) \right). \quad (66)$$

Zcela analogicky lze ukázat kompatibilitu s Weylovskou formou, v tomto případě je opět změna $\mathbf{x}_j \rightarrow \bar{\mathbf{x}}_j$ podstatná jen ve “členu s derivací”

$$\frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{x}(t_{j-1})) \cdot (\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1})) = \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\bar{\mathbf{x}}(t_j)) \cdot (\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1}))$$

²⁰Interpretováno v termínech příslušného stochastického procesu, částice urazí střední vzdálenost úměrnou druhé odmocnině času. To je typickou vlastností Brownova pohybu.

²¹Budeme předpokládat hladkost vektorového potenciálu A^μ .

²²V následujících podkapitolách vyvineme pohodlné procedury pro důkaz podobných tvrzení.

$$\begin{aligned}
& -\frac{ie}{2\hbar}(\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1})) \cdot \nabla \mathbf{A}(\bar{\mathbf{x}}(t_j)) \cdot (\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1})) \\
& \approx +\frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\bar{\mathbf{x}}(t_j)) \cdot (\mathbf{x}(t_j) - \mathbf{x}(t_{j-1})) - \frac{ie\hbar}{2m} \frac{\tau}{n} (\nabla \cdot \mathbf{A})(\mathbf{x}(t_j)),
\end{aligned}$$

a kvantová korekce je tedy efektivně eliminována.

Znovu připomeňme, že formulovat Feynmanův dráhový integrál v termínech (komplexní) míry na prostoru \mathcal{W} nelze, i když způsob výpočtu jeho diskretních aproximací se po formální stránce neliší od výpočtů Wienerových integrálů cylindrických funkcí a některé kvalitativní rysy (jako je charakterizace trajektorií relevantních pro dráhový integrál) lze s jistou licencí použít i zde.

V dalším opustíme Wienerův integrál a spočteme některé elementární Feynmanovy dráhové integrály.

1.4 Částice v časově závislém homogenním vnějším poli

Uvažujme systém s časově závislým hamiltoniánem

$$H(t) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mathbf{F}(t) \cdot \hat{\mathbf{x}}, \quad (67)$$

kde $\mathbf{F}(t)$ je c-číselná funkce. $\mathbf{F}(t)$ představuje časově závislou vnější sílu působící na částici s hmotou m . Jádro evolučního operátoru je dáno dráhovým integrálem²³

$$K[\mathbf{F}(t)](\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \int_{\mathbf{x}(t')=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(t'')=\mathbf{x}''} \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \left(m \frac{\dot{\mathbf{x}}(t)^2}{2} + \mathbf{F}(t) \cdot \mathbf{x}(t)\right)\right), \quad (68)$$

kde $T = t'' - t'$. Diskretní aproximace je

$$\begin{aligned}
& K[\mathbf{F}(t)](\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \\
& \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{nm}{2\pi i \hbar T}\right)^{nd/2} \int \prod_{j=1}^{n-1} d^d \mathbf{x}_j \exp \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \left(m(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2 \frac{n}{2T} + \mathbf{F}_{j-1} \cdot \mathbf{x}_{j-1} \frac{T}{n}\right), \quad (69)
\end{aligned}$$

kde $\mathbf{F}_j = \mathbf{F}(t' + j(T/n))$. Integrace přes \mathbf{x}_j je gaussovská (srov. (17,18)). Kvadratickou formu v exponenciále

$$\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \left(m(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2 \frac{n}{2T} + \mathbf{F}_{j-1} \cdot \mathbf{x}_{j-1} \frac{T}{n}\right), \quad (70)$$

která je nedigonální (a tedy nelze bezprostředně použít formule (17)), přepíšme na výhodnější tvar

$$i \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{2\varepsilon} \mathbf{z}_j^2 + \sum_{j=1}^{n-1} \mathbf{z}_j \cdot \sum_{k=j}^{n-1} \mathbf{f}_k \varepsilon + \mathbf{y}_0 \cdot \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{f}_j \varepsilon \right), \quad (71)$$

²³Všimněme si, že v tomto případě evoluční operátor *není* dán formulí $U(T) = \exp(-\frac{i}{\hbar}HT)$, ale formulí $U(T) = T \exp(-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt H(t))$, kde T značí časové uspořádání. Reprezentaci (68) pak dostaneme pomocí následujícího vztahu pro T -exponenciálu

$$T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt H(t)\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon H(t_{n-1})\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon H(t_{n-2})\right) \dots \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon H(t_0)\right),$$

kde $t_j = (t' + j\varepsilon)$ a $\varepsilon = (t'' - t')/n$, a užitím Lieovy formule.

kde jsme definovali $\varepsilon = (T/n)$, $\mathbf{y}_j = (m/\hbar)^{1/2} \mathbf{x}_j$, $\mathbf{f}_j = \mathbf{F}(t' + j(T/n))/(m\hbar)^{1/2}$ a $\mathbf{z}_j = \mathbf{y}_j - \mathbf{y}_{j-1}$. Přitom lze uměle rozšířit integraci i na proměnou \mathbf{z}_n dodáním δ -funkce, vyjadřující vazbu $\sum_{j=1}^n \mathbf{z}_j = (\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_0)$:

$$\prod_{j=1}^{n-1} d^d \mathbf{x}_j = \left(\frac{\hbar}{m}\right)^{(n-1)d/2} \prod_{j=1}^n d^d \mathbf{z}_j \delta^{(d)}\left(\sum_{j=1}^n \mathbf{z}_j - (\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_0)\right), \quad (72)$$

kde $\mathbf{y}_0 = (m/\hbar)^{1/2} \mathbf{x}'$ a $\mathbf{y}_n = (m/\hbar)^{1/2} \mathbf{x}''$. S použitím integrální reprezentace

$$\delta^{(d)}\left(\sum_{j=1}^n \mathbf{z}_j - (\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_0)\right) = \int \frac{d^d \mathbf{a}}{(2\pi)^d} \exp\left(\mathbf{i} \mathbf{a} \cdot \left(\sum_{j=1}^n \mathbf{z}_j - (\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_0)\right)\right) \quad (73)$$

obdržíme následující snadno spočitatelný gaussovský integrál s diagonální kvadratickou formou v proměnných \mathbf{z}_j , $j = 1, \dots, n$:

$$K_n[\mathbf{F}(t)](\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \left(\frac{nm}{2\pi i \hbar T}\right)^{nd/2} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^{(n-1)d/2} \int \prod_{j=1}^n d^d \mathbf{z}_j \frac{d^d \mathbf{a}}{(2\pi)^d} \exp\left(\mathbf{i} \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{2\varepsilon} \mathbf{z}_j^2 + \sum_{j=1}^{n-1} \mathbf{z}_j \cdot \left(\sum_{k=j}^{n-1} \mathbf{f}_k \varepsilon + \mathbf{a}\right) + \mathbf{z}_n \cdot \mathbf{a} + \mathbf{y}_0 \cdot \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{f}_j \varepsilon - \mathbf{a} \cdot (\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_0)\right)\right). \quad (74)$$

Po integraci přes \mathbf{z}_j máme

$$K_n[\mathbf{F}(t)](\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \left(\frac{nm}{2\pi i \hbar T}\right)^{nd/2} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^{(n-1)d/2} (2\pi i \varepsilon)^{nd/2} \exp\left(\mathbf{i} \mathbf{y}_0 \cdot \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{f}_j \varepsilon\right) \int \frac{d^d \mathbf{a}}{(2\pi)^d} \exp\left(-\frac{\mathbf{i}\varepsilon}{2} (n\mathbf{a}^2 + \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=j}^{n-1} \mathbf{f}_k \varepsilon)^2 + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \mathbf{a} \cdot \sum_{k=j}^{n-1} \mathbf{f}_k \varepsilon - \mathbf{i} \mathbf{a} \cdot (\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_0)\right). \quad (75)$$

Zbývající gaussovská integrace je opět snadná, jako výsledek obdržíme

$$K_n[\mathbf{F}(t)](\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{d/2} \exp\left(\frac{\mathbf{i}(\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_0)^2}{2T}\right) \times \exp\left(\frac{\mathbf{i}}{2T} (2(\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_0) \cdot \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=j}^{n-1} \mathbf{f}_k \varepsilon^2 + 2T \mathbf{y}_0 \cdot \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{f}_j \varepsilon + (\sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=j}^{n-1} \mathbf{f}_k)^2 \varepsilon^4 - \sum_{j=1}^{n-1} (\sum_{k=j}^{n-1} \mathbf{f}_k)^2 n \varepsilon^4)\right). \quad (76)$$

Zbývá provést limitu pro $n \rightarrow \infty$, $\varepsilon \rightarrow 0$, $n\varepsilon = T = (t'' - t')$. Pro spojitou funkci $\mathbf{f}(t)$ máme pro $n \rightarrow \infty$:

$$2T \mathbf{y}_0 \cdot \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{f}_j \varepsilon \rightarrow 2\mathbf{y}_0 \cdot \int_{t'}^{t''} dt (t'' - t') \mathbf{f}(t), \quad (77)$$

$$2(\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_0) \cdot \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=j}^{n-1} \mathbf{f}_k \varepsilon^2 = 2(\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_0) \cdot \sum_{j=1}^{n-1} j \mathbf{f}_j \varepsilon^2 \rightarrow 2(\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_0) \cdot \int_{t'}^{t''} dt (t - t') \mathbf{f}(t), \quad (78)$$

neboť $j\varepsilon = (t_j - t')$,

$$\left(\sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=j}^{n-1} \mathbf{f}_k\right)^2 \varepsilon^4 \rightarrow \int_{t'}^{t''} dt ds (t-t')(s-t') \mathbf{f}(t) \mathbf{f}(s), \quad (79)$$

a konečně

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{n-1} \left(\sum_{k=j}^{n-1} \mathbf{f}_k\right)^2 n \varepsilon^4 &\rightarrow T \int_{t'}^{t''} d\tau \int_{t'}^{t''} dt ds \theta(t-\tau) \theta(s-\tau) \mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{f}(s) = \\ &T \int_{t'}^{t''} dt ds \mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{f}(s) (\theta(t-s)(s-t') + \theta(s-t)(t-t')). \end{aligned} \quad (80)$$

Pro jádro evolučního operátoru tedy obdržíme konečný výsledek ve tvaru

$$\begin{aligned} K[\mathbf{F}(t)](\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{d/2} \exp\left(\frac{im(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')^2}{2\hbar T}\right) \\ &\times \exp\left(\frac{i}{2T\hbar} (2\mathbf{x}'' \cdot \int_{t'}^{t''} dt \mathbf{F}(t)(t-t') + 2\mathbf{x}' \cdot \int_{t'}^{t''} dt \mathbf{F}(t)(t''-t) + \right. \\ &\left. \frac{1}{m} \int_{t'}^{t''} dt ds \mathbf{F}(t) \cdot \mathbf{F}(s) ((t-t')(s-t') - \theta(t-s)(s-t')T - \theta(s-t)(t-t')T))\right) \end{aligned} \quad (81)$$

Jako speciální případy dostaneme odtud jednak dobře známý propagátor volné částice

$$K_0(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{d/2} \exp\left(\frac{im(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')^2}{2\hbar T}\right), \quad (82)$$

jednak propagátor částice v lineárním potenciálu

$$\begin{aligned} K[\mathbf{F}](\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{d/2} \exp\left(\frac{im(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')^2}{2\hbar T}\right) \\ &\times \exp\left(\frac{i}{2\hbar} (T\mathbf{x}'' \cdot \mathbf{F} + T\mathbf{x}' \cdot \mathbf{F} - \frac{T^3}{12m} \mathbf{F}^2)\right). \end{aligned} \quad (83)$$

1.5 Lineární harmonický oscilátor

Dalším elementárním dráhovým integrálem je dráhový integrál pro lineární harmonický oscilátor s hamiltoniánem

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (84)$$

Diskrétní aproximace pro dráhový integrál

$$K(x'', x'; T) = \int_{x(0)=x'}^{x(T)=x''} \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left(m \frac{\dot{x}(t)^2}{2} - \frac{m\omega^2 x(t)^2}{2}\right)\right) \quad (85)$$

je

$$K_n(x'', x'; T) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{n/2} \int \prod_{j=1}^{n-1} dx_j \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \left(\frac{m(x_j - x_{j-1})^2}{2\varepsilon} - \frac{m\omega^2 x_{j-1}^2 \varepsilon}{2} \right) \right), \quad (86)$$

kde $\varepsilon = (t'' - t')/n$. Přejdem k proměnným $y_j = (m/\hbar\varepsilon)^{1/2} x_j$ máme

$$K_n(x'', x'; T) = \left(\frac{m}{\hbar\varepsilon} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^{n/2} \int \prod_{j=1}^{n-1} dy_j \exp \left(i \sum_{j=1}^n \left(\frac{(y_j - y_{j-1})^2}{2} - \frac{\omega^2 y_{j-1}^2 \varepsilon^2}{2} \right) \right). \quad (87)$$

Integrál na pravé straně předchozí formule je opět gaussovský s nediagonální kvadratickou formou v exponenciále. Připomeňme obecnou formuli pro takový integrál:

$$\int d^d \mathbf{x} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{x} \right) = \det \left(\frac{2\pi}{\mathbf{A}} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b} \right). \quad (88)$$

V našem případě je $n - 1$ rozměrná matice \mathbf{A} rovna

$$\mathbf{A}_{n-1} = -2ai \begin{pmatrix} 1, -\frac{1}{2a}, 0, \dots, 0 \\ -\frac{1}{2a}, 1, -\frac{1}{2a}, 0, \dots, 0 \\ 0, -\frac{1}{2a}, 1, -\frac{1}{2a}, 0, \dots, 0 \\ \dots, \dots, \dots, \dots, \dots, \dots \\ 0, \dots, -\frac{1}{2a}, 1, -\frac{1}{2a} \\ 0, \dots, \dots, -\frac{1}{2a}, 1 \end{pmatrix}, \quad (89)$$

kde $a = 1 - (1/2)\omega^2 \varepsilon^2$, a $n - 1$ rozměrný vektor \mathbf{b} je roven

$$\mathbf{b} = -i \left(\frac{m}{\hbar\varepsilon} \right)^{1/2} \begin{pmatrix} x' \\ 0 \\ \vdots \\ x'' \end{pmatrix}. \quad (90)$$

V tomto označení můžeme přepsat výraz na pravé straně (87) na tvar

$$\left(\frac{m}{\hbar\varepsilon} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^{n/2} \int d^{n-1} \mathbf{y} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{y}^T \cdot \mathbf{A}_{n-1} \cdot \mathbf{y} + \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{y} + \frac{im}{2\varepsilon\hbar} (x'^2 + x''^2 - \omega^2 \varepsilon^2 x'^2) \right) \quad (91)$$

Pro determinant matice \mathbf{A}_{n-1} píšme

$$\begin{aligned} \det \mathbf{A}_{n-1} &= (-2ai)^{n-1} \det \begin{pmatrix} 1, -\frac{1}{2a}, 0, \dots, 0 \\ -\frac{1}{2a}, 1, -\frac{1}{2a}, 0, \dots, 0 \\ 0, -\frac{1}{2a}, 1, -\frac{1}{2a}, 0, \dots, 0 \\ \dots, \dots, \dots, \dots, \dots, \dots \\ 0, \dots, -\frac{1}{2a}, 1, -\frac{1}{2a} \\ 0, \dots, \dots, -\frac{1}{2a}, 1 \end{pmatrix} \\ &= (-2ai)^{n-1} \det \mathbf{B}_{n-1} = (-2ai)^{n-1} B_{n-1}. \end{aligned} \quad (92)$$

Díky tvaru matice \mathbf{A}_{n-1} máme $A_{n-1,n-1}^{-1} = A_{1,1}^{-1}$. Přitom

$$A_{1,1}^{-1} = \frac{\det \mathbf{A}_{n-2}}{\det \mathbf{A}_{n-1}} = i \frac{\sin(n-1)\beta}{\sin n\beta}; \quad (102)$$

podobně

$$A_{1,n-1}^{-1} = (-1)^n (\det \mathbf{A}_{n-1})^{-1} (-2ia)^{n-2} \left(-\frac{1}{2a}\right)^{n-2} = i \frac{\sin \beta}{\sin n\beta}. \quad (103)$$

Kvadratická forma (101) v exponenciále je tedy

$$\begin{aligned} & \frac{im}{2\varepsilon\hbar} \left((x'^2 + x''^2) \frac{\sin \beta \cos n\beta + \sin n\beta(1 - \cos \beta)}{\sin n\beta} - 2x'x'' \frac{\sin \beta}{\sin n\beta} \right) \\ & \rightarrow \frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} \left(\cos \omega T (x'^2 + x''^2) - 2x'x'' \right). \end{aligned} \quad (104)$$

Celkem tedy máme pro propagátor harmonického oscilátoru následující formuli

$$\begin{aligned} K(x'', x'; T) &= \int_{x(0)=x'}^{x(T)=x''} \mathcal{D}x(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left(\frac{m\dot{x}(t)^2}{2} - \frac{m\omega^2 x(t)^2}{2} \right) \right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} \left(\cos \omega T (x'^2 + x''^2) - 2x'x'' \right) \right). \end{aligned} \quad (105)$$

1.6 Gaussovské dráhové integrály

Elementární dráhové integrály, které jsme spočítali v předchozích podkapitolách vedly na mnohadimenzionální gaussovské (přesněji fresnelovské) integrály typu

$$\int d^d \mathbf{x} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{x} \right) = \det \left(\frac{2\pi}{\mathbf{A}} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b} \right), \quad (106)$$

kde \mathbf{A} je regulární symetrická matice. Všimněme si, že kvadratická forma v exponenciále na pravé straně tohoto výrazu je rovna

$$\frac{1}{2} \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b} = -\frac{1}{2} \mathbf{x}_*^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_* + \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{x}_*, \quad (107)$$

kde \mathbf{x}_* je stacionární bod kvadratické formy v exponenciále integrandu, tedy takové \mathbf{x} , pro něž platí

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{x} \right) = 0. \quad (108)$$

Např. pro harmonický oscilátor měla tato podmínka tvar

$$\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{(x_{j+1} - x_j)}{\varepsilon} - \frac{(x_j - x_{j-1})}{\varepsilon} \right) + \omega^2 x_j = 0, \quad x_0 = x', \quad x_n = x'', \quad (109)$$

což není nic jiného, než diskretizovaná varianta klasické pohybové rovnice s okrajovými podmínkami

$$\frac{d^2}{dt^2} x(t) + \omega^2 x(t) = 0, \quad x(0) = x', \quad x(T) = x''. \quad (110)$$

Řešení²⁶ této rekurentní rovnice (109)

$$x_j = \frac{x'' - x' e^{-i\beta n}}{2i \sin n\beta} e^{i\beta j} - \frac{x'' - x' e^{i\beta n}}{2i \sin n\beta} e^{-i\beta j}, \quad (111)$$

v limitě $n \rightarrow \infty$ přechází v řešení diferenciální rovnice (110)

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{x'' - x' e^{-i\omega T}}{2i \sin \omega T} e^{i\omega t} - \frac{x'' - x' e^{i\omega T}}{2i \sin \omega T} e^{-i\omega t} \\ &= x'' \frac{\sin \omega t}{\sin \omega T} + x' \frac{\sin \omega(T-t)}{\sin \omega T} \end{aligned} \quad (112)$$

Není obtížné se přesvědčit, že kvadratická forma v exponenciále propagátoru (105) je právě klasická akce spočtená pro trajektorii (112). Tedy místo počítání s diskrétním přiblížením (což, jak jsme viděli v předchozím, vede na dosti nepřehledné gaussovské integrování) jsme mohli přímo vyjít z podmínky pro stacionaritu akce, řešit klasickou pohybovou rovnici a výsledek pak dosadit do formule pro klasickou akci.

Totéž zůstává v platnosti i pro obecnou kvadratickou akci v exponenciále integrandu dráhového integrálu, tedy např. i pro částici v časově závislém homogenním vnějším poli. Je-li tedy klasická akce kvadratická, nemusíme provádět pracnou mnohodomenzionální integraci a výraz v exponenciále obdržíme “klasickými” metodami.

Ukažme ještě, jak lze obdobně získat i předexponenciální faktor²⁷. Pišme propagátor ve tvaru

$$K(x'', x'; T) = F(x'', x'; T) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{klas}(x'', x'; T)\right). \quad (113)$$

Z podmínky unitarity pro propagátor máme

$$\begin{aligned} \int dx K(x'', x; T) K(x', x; T)^* &= \delta(x'' - x') \\ &= \int dx F(x'', x; T) F(x', x; T)^* \exp\left(\frac{i}{\hbar} (S_{klas}(x'', x; T) - S_{klas}(x', x; T))\right). \end{aligned} \quad (114)$$

Pro $x'' - x' \rightarrow 0$ lze psát

$$S_{klas}(x'', x; T) - S_{klas}(x', x; T) = (x'' - x') \frac{\partial S_{klas}(x', x; T)}{\partial x'}.$$

Provedme nyní v integrálu (114) substituci

$$x \rightarrow y = \frac{\partial S_{klas}(x', x; T)}{\partial x'}.$$

Podržíme-li pouze členy nejnižšího řádu v $(x'' - x')$, dostaneme

$$\delta(x'' - x') = \int dy \left(\frac{\partial^2 S_{klas}(x', x; T)}{\partial x' \partial x} \right)^{-1} |F(x', x; T)|^2 \exp\left(\frac{i}{\hbar} y(x'' - x')\right). \quad (115)$$

²⁶Metoda řešení je stejná, jako v případě rekurentní rovnice pro determinant B_{n-1} .

²⁷Následující argumentace není příliš rigorózní, slouží spíše jako motivace, výsledek je nicméně správný.

Až na fázi musí tedy být

$$F(x'', x'; T) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S_{klas}(x'', x'; T)}{\partial x'' \partial x'} \right)^{1/2}. \quad (116)$$

Porovnáním s gaussovskými integrály spočtenými v předchozích podkapitolách máme konečně

$$K(x'', x'; T) = \left(-\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 S_{klas}(x'', x'; T)}{\partial x'' \partial x'} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{klas}(x'', x'; T)\right). \quad (117)$$

Zobecnění pro gaussovský dráhový integrál v d -dimenzionálním případě je přímočaré, příslušná formule zní

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) = \det\left(-\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 S_{klas}(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T)}{\partial x_i'' \partial x_j'}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{klas}(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T)\right). \quad (118)$$

Faktor před exponenciálou je tzv. van Vleckův determinant.

Van Vleckův determinant lze dále interpretovat způsobem, který je “spojitým” zobecněním formule (106). Píšeme-li diskrétní aproximaci kvadratické akce ve tvaru

$$S_n(\mathbf{x}_{n-1}) = -\frac{1}{2} \mathbf{x}_{n-1}^T \cdot \mathbf{A}_{n-1} \cdot \mathbf{x}_{n-1} + \mathbf{b}_{n-1}^T \cdot \mathbf{x}_{n-1}, \quad (119)$$

kde $\mathbf{x}_{n-1}^T = (x_1, x_2, \dots, x_{n-1})$, máme pro něj²⁸ následující vyjádření:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \left(-\frac{m}{\varepsilon} \right)^{(n-1)/2} \det^{-1/2} \mathbf{A}_{n-1}. \quad (120)$$

Např. pro harmonický oscilátor máme

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{A}_{n-1} \cdot \mathbf{x}_{n-1})_j = \\ & m \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{(x_{j+1} - x_j)}{\varepsilon} - \frac{(x_j - x_{j-1})}{\varepsilon} \right) + m\omega^2 x_j = 0, \quad x_0 = 0, \quad x_n = 0. \end{aligned} \quad (121)$$

Ve spojitě limitě přechází matice $\frac{1}{\varepsilon} \mathbf{A}_{n-1}$ v diferenciální operátor \mathbf{A} , v případě harmonického oscilátoru je tento operátor $\mathbf{A} = m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right)$. Předexponenciální faktor tedy bude v limitě $n \rightarrow \infty$ “úměrný” determinantu (t.j. součinu vlastních hodnot) operátoru \mathbf{A} .

Zde je třeba učinit dvě poznámky. Abychom spočetli příslušné vlastní hodnoty a mohli vyčíslit determinant, je nutné vymezit vektorový prostor, na kterém je operátor \mathbf{A} definován, t.j. definovat okrajové podmínky pro funkce $x(t)$. Okrajové podmínky $x(0) = x'$, $x(T) = x''$ použít nelze, neboť nedefinují vektorový prostor. Okrajové podmínky, odpovídající diskrétní aproximaci, jsou (srov. (121)) $x(0) = x(T) = 0$. Intuitivně lze tento fakt vysvětlit následovně. Píšme

$$x(t) = x_{klas}(t) + x_{kvant}(t), \quad (122)$$

kde $x_{klas}(t)$ je řešení klasické pohybové rovnice s okrajovými podmínkami²⁹ $x_{klas}(0) = x'$, $x_{klas}(T) = x''$ a $x_{kvant}(t)$ představuje kvantové fluktuace kolem klasické trajektorie. Zřejmé

²⁸Pro jednoduchost uvažujeme jednorozměrný případ.

²⁹Tedy to řešení, které dosazujeme do klasické akce $S_{klas}(x'', x'; T)$.

platí $x_{kvant}(0) = x_{kvant}(T) = 0$, tato podmínka již vektorový prostor definuje a určuje jednoznačně vlastní hodnoty operátoru \mathbf{A} . Akci lze pak zapsat ve tvaru (zde využíváme toho, že $x_{klas}(t)$ je řešení klasické pohybové rovnice, proto “smíšené” členy v akci vypadnou)

$$S[x(t)] = S_{klas}(x'', x'; T) - \frac{1}{2} \int_0^T dt x_{kvant}(t) \mathbf{A} x_{kvant}(t).$$

Předpokládáme-li dále translační invarianci “míry” $\mathcal{D}x(t)$, t.j.

$$\mathcal{D}x(t) = \mathcal{D}x_{kvant}(t), \quad (123)$$

můžeme formálně psát

$$\int_{x(0)=x'}^{x(T)=x''} \mathcal{D}x(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = e^{\frac{i}{\hbar} S_{klas}(x'', x'; T)} \int_{x_{kvant}(0)=0}^{x_{kvant}(T)=0} \mathcal{D}x_{kvant}(t) e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_0^T dt x_{kvant}(t) \mathbf{A} x_{kvant}(t)}. \quad (124)$$

Tedy v gaussovském dráhovém integrálu je předexponenciální faktor určen integrálem přes kvantové fluktuační $x_{kvant}(t)$.

Druhá poznámka se týká existence determinantu operátoru \mathbf{A} . Např pro harmonický oscilátor máme pro vlastní hodnoty operátoru $m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right)$ formuli $\lambda_k = -m \left(\left(\frac{\pi k}{T} \right)^2 - \omega^2 \right)$, $k = 1, 2, \dots$, součin vlastních hodnot tedy diverguje. Normalizujeme-li však vlastní hodnoty na vlastní hodnoty operátoru $m \frac{d^2}{dt^2}$, (tedy normujeme-li předexponenciální faktor na předexponenciální faktor volné částice), dostaneme regularizovaný determinant

$$\begin{aligned} \text{Det}_R \left(m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) \right) &= \text{Det} \left(m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) / \left(m \frac{d^2}{dt^2} \right) \right) \\ &= \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 - \left(\frac{\omega T}{\pi k} \right)^2 \right) = \frac{\sin \omega T}{\omega T}. \end{aligned} \quad (125)$$

Předexponenciální faktor (120) lze tedy pro harmonický oscilátor psát ve tvaru

$$F(x'', x'; T) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2} \text{Det}_R^{-1/2} \left(m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) \right), \quad (126)$$

kde jsme využili znalost předexponenciálního faktoru pro volnou částici. V obecném případě pak

$$F(x'', x'; T) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2} \text{Det}_R^{-1/2} \mathbf{A}, \quad (127)$$

kde regularizovaný determinant je opět normovaný na determinant operátoru $m d^2/dt^2$.

Tento výsledek lze chápat také jako vztah mezi dvěma vyjádřeními funkcionální míry gaussovského integrálu. Rozvineme-li trajektorii $x_{kvant}(t)$ do vlastních funkcí (módů) $f_n(t)$ operátoru \mathbf{A} , t.j. píšeme-li

$$x(t) = x_{klas}(t) + \sum_{n=0}^{\infty} x_n f_n(t), \quad (128)$$

faktorizuje se integrand v termínech proměnných x_n na součin jednodimenzionálních gaussovských integrálů a lze symbolicky psát

$$\mathcal{D}x(t) = \mathcal{D}x_{kvant}(t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{1/2} \mathcal{D}et^{1/2} \left(\frac{i}{2\pi \hbar} m \frac{d^2}{dt^2}\right) \prod_{n=0}^{\infty} dx_n. \quad (129)$$

Poznamenejme, že formule (117), (118) lze použít tehdy, existuje-li pro dané $T = t_f - t_i$, x' a x'' právě jedna klasická trajektorie splňující okrajové podmínky³⁰ $x(t_i) = x'$, $x(t_f) = x''$. Zatímco existenci a jednoznačnost máme obvykle zaručenu pro počáteční podmínky $x(t_i) = x'$, $\dot{x}(t_i) = v'$ (označme takové řešení $x(t; t_i, x', v')$), v případě výše uvedených okrajových podmínek tomu tak není. Rovnice

$$x(t_f; t_i, x', v') = x'' \quad (130)$$

totiž nemusí mít jednoznačné řešení vzhledem k v' , nebo nemusí mít řešení pro *libovolné* x'' , ale jen pro speciální hodnoty x'' . To může nastat tehdy, je-li

$$\frac{\partial x(t_f; t_i, x', v')}{\partial v'} = 0. \quad (131)$$

(Pokud platí poslední rovnost pro všechna v' (t.j. podmínka (130) nezávisí na v'), dostáváme vazbu pro možné koncové hodnoty³¹ $x'' = x''(t_i, t_f, x')$ jako funkci počátečních hodnot x' , t_i a konečného času t_f .)

Dalším důsledkem patologické situace (131) je, že van Vleckův determinant není dobře definovaný. S využitím vztahu

$$\frac{\partial S_{klas}(x'', x'; T)}{\partial x'} = -p' = -mv' \quad (132)$$

máme pro $\partial x(t_f; t_i, x', v')/\partial v' \neq 0$ následující vztah

$$\begin{aligned} \left(-\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 S_{klas}(x'', x'; T)}{\partial x'' \partial x'}\right)^{1/2} &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \frac{\partial v'}{\partial x''}\right)^{1/2} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{1/2} \left(\frac{T}{\partial x(t_f; t_i, x', v')/\partial v'}\right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (133)$$

který má singularitu pro $\partial x(t_f; t_i, x', v')/\partial v' \rightarrow 0$.

Porovnání formule (127) a formule (133) dává ještě jedno užitečné vyjádření (regularizovaného) determinantu. Máme totiž

$$\mathcal{D}et_R \mathbf{A} = \frac{1}{T} \frac{\partial x(t_f; t_i, x', v')}{\partial v'}. \quad (134)$$

Všimněme si, že funkce $\psi(t) = \partial x(t; t_i, x', v')/\partial v'$ je řešením následující rovnice s počátečními podmínkami

$$\mathbf{A}\psi(t) = 0, \quad \psi(t_i) = 0, \quad \dot{\psi}(t_i) = 1. \quad (135)$$

³⁰Pro jednoduchost uvažujme jednodimenzionální případ, přechod k obecnému d je přímočarý.

³¹Bod (t_f, x'') se pak nazývá ohniskovým bodem - ať totiž "vystřelíme" z bodu x' pod jakoukoliv rychlostí v' , v čase t_f vždy skončíme v bodě $x'' = x''(t_i, t_f, x')$.

Poslední tvrzení plyne zderivováním vztahů definujících $x(t; t_i, x', v')$

$$\mathbf{A}x(t; t_i, x', v') = 0, \quad x(t_i; t_i, x', v') = x', \quad \dot{x}(t_i; t_i, x', v') = v' \quad (136)$$

podle v' . Máme tedy následující formuli pro regularizovaný determinant

$$\mathcal{D}et_R \mathbf{A} = \frac{\psi(t_f)}{T}. \quad (137)$$

Platí-li (131), je $\psi(t_f) = 0$ a tedy determinant je roven nule - díky (135) je totiž v tomto případě $\psi(t)$ vlastní funkcí operátoru \mathbf{A} s nulovou vlastní hodnotou (nulový mód) a regularizovaný determinant operátoru \mathbf{A} je úměrný součinu všech vlastních hodnot.

1.7 Lineární harmonický oscilátor v poli homogenní časově závislé vnější síly

Jako aplikaci formule (117) spočítejme důležitý speciální případ - harmonický oscilátor ve vnějším homogenním časově závislém poli s hamiltoniánem

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} - F(t)x, \quad (138)$$

kde opět $F(t)$ je c-číselná funkce. Tento příklad je prototypem pro analogické výpočty v kvantové teorii pole, v tomto kontextu se c-číselná funkce $F(t)$ nazývá klasický zdroj. Dráhový integrál je pak funkcionálem klasického zdroje, který má význam amplitudy přechodu z počátečního do koncového stavu pod vlivem vnějšího zdroje $F(t)$.

Akce je v tomto případě opět kvadratická

$$S[x(t)] = \int_0^T dt \left(\frac{m\dot{x}(t)^2}{2} - \frac{m\omega^2 x(t)^2}{2} + F(t)x(t) \right), \quad (139)$$

abychom mohli použít formuli (117), musíme spočítat akci podél klasické trajektorie, minimalizující $S[x(t)]$, jako funkci x'' , x' a T . K tomu je třeba řešit klasickou pohybovou rovnici, která zní

$$\frac{d^2}{dt^2}x(t) + \omega^2 x(t) = \frac{F(t)}{m}, \quad x(0) = x', \quad x(T) = x'' \quad (140)$$

Její řešení hledejme ve tvaru $x(t) = x_0(t) + x_F(t)$, kde $x_0(t)$ je řešení (112) homogenní rovnice příslušející (110),

$$x_0(t) = x'' \frac{\sin \omega t}{\sin \omega T} + x' \frac{\sin \omega(T-t)}{\sin \omega T}, \quad (141)$$

a $x_F(t)$ je partikulární řešení rovnice s pravou stranou, s okrajovými podmínkami $x_F(0) = x_F(T) = 0$. Standardní metodou pro získání takového partikulárního řešení je metoda Greenovy funkce. Najdeme-li nejprve řešení rovnice

$$\frac{d^2}{dt^2}G_0(t, s) + \omega^2 G_0(t, s) = \delta(t-s), \quad G_0(0, s) = 0, \quad G_0(T, s) = 0, \quad (142)$$

máme díky linearitě pro řešení rovnice s pravou stranou $x_F(t)$

$$x_F(t) = \frac{1}{m} \int_0^T ds G_0(t, s) F(s). \quad (143)$$

Standardní výraz pro Greenovu funkci lineárního diferenciálního operátoru druhého řádu je

$$G_0(t, s) = W^{-1} (\theta(s-t)\psi_0(t)\psi_T(s) + \theta(t-s)\psi_0(s)\psi_T(t)), \quad (144)$$

kde $\psi_0(t)$ a $\psi_T(t)$ jsou lineárně nezávislá řešení splňující počáteční podmínky $\psi_0(0) = 0$, $\dot{\psi}_0(0) = 1$ resp. $\psi_T(T) = 0$, $\dot{\psi}_T(T) = 1$ a W je jejich wronskián,

$$W = \det \begin{pmatrix} \psi_0(t) & \psi_T(t) \\ \dot{\psi}_0(t) & \dot{\psi}_T(t) \end{pmatrix}. \quad (145)$$

V našem případě $\psi_0(t) = (1/\omega)\sin\omega t$, $\psi_T(t) = (1/\omega)\sin\omega(t-T)$ a $W = (1/\omega)\sin\omega T$. Všimněme si, že pro $T = \pi n/\omega$ je $W = 0$, obě řešení jsou lineárně závislá a formulí (144) nelze použít. Jak uvidíme později, Greenova funkce v tomto případě neexistuje, proto budeme v dalším předpokládat $T \neq \pi n/\omega$. Potom je

$$G_0(t, s) = \frac{1}{\omega \sin \omega T} (\theta(s-t) \sin \omega t \sin \omega(s-T) + \theta(t-s) \sin \omega s \sin \omega(t-T)). \quad (146)$$

Při výpočtu klasické akce podél trajektorie $x(t) = x_0(t) + x_F(t)$ lze s výhodou použít pohybových rovnic

$$\begin{aligned} S_{klas}[x(t)] &= \int_0^T dt \left(\frac{m\dot{x}(t)^2}{2} - \frac{m\omega^2 x(t)^2}{2} + F(t)x(t) \right) = \\ &= \frac{1}{2} m x(t)\dot{x}(t) \Big|_0^T - \frac{1}{2} \int_0^T dt \left(x(t) \left(m \frac{d^2}{dt^2} x(t) + m\omega^2 x(t) - 2F(t) \right) \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left(m x(t)\dot{x}(t) \Big|_0^T + \int_0^T dt F(t)x(t) \right). \end{aligned} \quad (147)$$

Upravme ještě

$$\int_0^T dt F(t)x_0(t) = m \int_0^T dt x_0(t) \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) x_F(t).$$

Pužijeme-li dvakrát integrace per partes a uvědomíme-li si, že $x_F(0) = x_F(T) = 0$ a $(d^2/dt^2 + \omega^2)x_0(t) = 0$, dostaneme

$$\int_0^T dt F(t)x_0(t) = m x_0(t)\dot{x}_F(t) \Big|_0^T.$$

Celkem tedy, s uvážením vztahu (143)

$$S_{klas}[x(t)] = \frac{1}{2} \left(m x_0(t)\dot{x}_0(t) \Big|_0^T + 2 \int_0^T dt F(t)x_0(t) + \frac{1}{m} \int_0^T dt ds F(t)G_0(t, s)F(s) \right). \quad (148)$$

Po dosazení do poslední formule za derivaci

$$\dot{x}_0(t) = \frac{\omega}{\sin \omega T} (x'' \cos \omega t - x' \cos \omega(T-t)) \quad (149)$$

a přímočarých úpravách dostaneme

$$S_{klas}(x'', x'; T) = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} (\cos \omega T (x''^2 + x'^2) - 2 x' x'')$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2x'}{m\omega} \int_0^T dt F(t) \sin \omega(T-t) + \frac{2x''}{m\omega} \int_0^T dt F(t) \sin \omega t + \\
& \int_0^T dt ds F(t) F(s) \frac{\theta(t-s) \sin \omega s \sin \omega(t-T) + \theta(s-t) \sin \omega t \sin \omega(s-T)}{(m\omega)^2}. \quad (150)
\end{aligned}$$

Tím jsme spočetli všechny ingredience potřebné pro použití formule (117), zbytek je přímočaré dosazení (poznamenejme, že van Vleckův determinant je stejný, jako u volného lineárního harmonického oscilátoru, neboť odpovídá kvadratické části akce a tedy nezávisí funkcionálně na $F(t)$). Máme tedy

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; T) &= \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega T} (\cos \omega T (x'^2 + x''^2) - 2 x' x'') \right) \\
&\times \exp \left(\frac{i}{\hbar} \left(\int_0^T dt F(t) x_0(t) + \frac{1}{2m} \int_0^T dt ds F(t) G_0(t, s) F(s) \right) \right). \quad (151)
\end{aligned}$$

Není obtížné se přesvědčit, že v limitě $\omega \rightarrow 0$ se reprodukuje propagátor (1-dimenzionální) částice v poli vnější síly.

Uveďme ještě jednu reprezentaci Greenovy funkce $G_0(t, s)$, která má analogii v teorii pole. $G_0(t, s)$ je maticovým elementem inverze operátoru $d^2/dt^2 + \omega^2$ na prostoru funkcí na intervalu $(0, T)$ splňujících nulové okrajové podmínky pro $t = 0, T$.

$$G_0(t, s) = \langle t | (d^2/dt^2 + \omega^2)^{-1} | s \rangle = \sum_k \frac{f_k(t) f_k^*(s)}{\omega^2 + \lambda_k}, \quad (152)$$

kde $f_k(t)$ jsou normalizované vlastní funkce operátoru d^2/dt^2 a λ_k jsou příslušné vlastní hodnoty. Není obtížné se přesvědčit, že $f_k(t) = (2/T)^{1/2} \sin(\pi k t/T)$ a $\lambda_k = -(\pi k/T)^2$, takže pro $G_0(t, s)$ máme následující reprezentaci

$$G_0(t, s) = \frac{2}{T} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin(\pi k t/T) \sin(\pi k s/T)}{\omega^2 - (\pi k/T)^2}. \quad (153)$$

Všimněme si, že pro $T \rightarrow \pi n/\omega$ je n -tý člen sumy na pravé straně (153) singulární, operátor $d^2/dt^2 + \omega^2$ má nulový mód a Greenova funkce tedy neexistuje.

Limita propagátoru (151) pro $T \rightarrow \pi n/\omega$ však existuje. Pišme $T = \pi n/\omega + \tau$, potom $\sin \omega T = e^{i\pi n} \sin \omega \tau$, $\cos \omega T = e^{i\pi n} \cos \omega \tau$. V limitě $\tau \rightarrow 0$ máme, položíme-li $\alpha^2 = 2i\hbar \sin \omega \tau / m\omega$,

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; \pi n/\omega + \tau) &= \frac{1}{\sqrt{\pi \alpha}} \exp \left(-\frac{i\pi n}{2} - \frac{i}{\hbar} x' \int_0^{\pi n/\omega} dt F(t) \cos \omega t \right) \\
&\times \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m\omega} \int_0^{\pi n/\omega} dt ds F(t) F(s) (\theta(s-t) \sin \omega t \cos \omega s + \theta(t-s) \sin \omega s \cos \omega t) \right) \\
&\times \exp \left(-\frac{1}{\alpha^2} \left(x'' - (-1)^n x' + \frac{(-1)^n}{m\omega} \int_0^{\pi n/\omega} dt F(t) \sin \omega t \right)^2 \right) \\
\rightarrow &\delta \left(x'' - (-1)^n x' + \frac{(-1)^n}{m\omega} \int_0^{\pi n/\omega} dt F(t) \sin \omega t \right) \exp \left(-\frac{i\pi n}{2} - \frac{i}{\hbar} x' \int_0^{\pi n/\omega} dt F(t) \cos \omega t \right) \\
&\times \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m\omega} \int_0^{\pi n/\omega} dt ds F(t) F(s) (\theta(s-t) \sin \omega t \cos \omega s + \theta(t-s) \sin \omega s \cos \omega t) \right).
\end{aligned}$$

(154)

Tento výsledek lze pochopit na klasické úrovni, vzpomeneme-li si na diskusi použitelnosti formule pro gaussovské integrování v předchozí podkapitole. Pro $T = \pi n/\omega$ nastává totiž situace, kdy řešení klasické pohybové rovnice s okrajovými podmínkami $x(0) = x'$, $x(T) = x''$ existuje jen pro x' , x'' splňující podmínku

$$x'' - (-1)^n x' + \frac{(-1)^n}{m\omega} \int_0^{\pi n/\omega} dt F(t) \sin \omega t = 0. \quad (155)$$

Řešení $x(t; 0, x', v')$ má totiž v tomto případě tvar

$$x(t; 0, x', v') = x' \cos \omega t + \frac{v'}{\omega} \sin \omega t + \frac{1}{m\omega} \int_0^{\pi n/\omega} ds \theta(t-s) \sin \omega(t-s) F(s) \quad (156)$$

a platí (131) pro každé v' se všemi důsledky popsány v předchozí podkapitole.

Jak jsme již uvedli výše, van Vleckův determinant je stejný, jako u volného lineárního harmonického oscilátoru. Přepišme ho ještě do modifikované podoby, která je běžná v kvantové teorii pole (srov. předchozí podkapitolu):

$$\left(-\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 S_{klas}(x'', x'; T)}{\partial x'' \partial x'} \right)^{1/2} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2} \left[\text{Det} \left(\frac{-m(d^2/dt^2 + \omega^2)/2\pi}{-m d^2/dt^2 / 2\pi} \right) \right]^{-1/2}. \quad (157)$$

Pro harmonický oscilátor můžeme tedy psát rovnost³²

$$\int_{x(0)=0}^{x(T)=0} \mathcal{D}x(t) \exp \left(\frac{-im}{2\hbar} \int_0^T dt x(t) \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) x(t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^T dt F(t) x(t) \right) = N(T) \text{Det}_R^{-1/2} \left(-m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) / 2\pi \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \int_0^T dt ds F(t) \langle t | \frac{1}{(d^2/dt^2) + \omega^2} | s \rangle F(s) \right), \quad (159)$$

kde normalizační faktor je

$$N(T) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2}.$$

Tato formule představuje předpis pro gaussovské integrování na (nekonečnědimenzionálním) vektorovém prostoru funkcí s okrajovými podmínkami $x(0) = 0$, $x(T) = 0$. Všimněte si formální podobnosti s formulí pro konečnoměrné gaussovské integrování (88). Tato podobnost bude dovedena ještě dále v následující podkapitole.

Poznamenejme, že výsledky této podkapitoly lze snadno zobecnit na případ libovolného počátečního a koncového času t_i, t_f , kde $T = t_f - t_i$ (za přítomnosti časově závislého vnějšího zdroje není systém translačně invariantní v časové proměnné). Pro potřeby dalších odvolávek uveďme výslednou formuli:

$$\int_{x(t_i)=x'}^{x(t_f)=x''} \mathcal{D}x(t) \exp \left(\frac{im}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\left(\frac{d}{dt} x(t) \right)^2 - \omega^2 x(t)^2 \right) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt F(t) x(t) \right) =$$

³²Zde Det_R znamená regularizovaný determinant zavedený v předchozí podkapitole,

$$\text{Det}_R \left(\frac{\mathbf{A}}{2\pi} \right) := \text{Det} \left(\frac{\mathbf{A}/2\pi}{-m d^2/dt^2 / 2\pi} \right). \quad (158)$$

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} \left(\cos \omega T (x'^2 + x''^2) - 2x'x'' \right) \right) \\
& \times \exp \left(\frac{i}{\hbar \sin \omega T} \left(x' \int_{t_i}^{t_f} dt F(t) \sin \omega(t_f - t) + x'' \int_{t_i}^{t_f} dt F(t) \sin \omega(t - t_i) \right) \right) \\
& \times \exp \frac{i}{2\hbar m\omega \sin \omega T} \int_{t_i}^{t_f} dt ds F(t)F(s) (\theta(t-s) \sin \omega(s-t_i) \sin \omega(t-t_f) \\
& \quad + \theta(s-t) \sin \omega(t-t_i) \sin \omega(s-t_f)). \tag{160}
\end{aligned}$$

1.8 Vytvořující funkcionály

Veličinou, kterou jsme se zabývali v předchozích podkapitolách, byl evoluční operátor $U[F(t)](t_f, t_i)$ (ve Schrödingerově obrazu) pro systém s hamiltoniánem obecného tvaru

$$H(t) = H_0 - F(t)\hat{x}, \tag{161}$$

kde hamiltonián H_0 nezávisel explicitě na čase a $F(t)$ byl vnější zdroj.

Jádro takového evolučního operátoru je pak funkcionálem vnějšího zdroje, který v sobě nese řadu informací o vlastnostech systému s hamiltoniánem H_0 . Metodám jak tyto informace získat je věnována tato podkapitola.

Začneme s připomenutím pojmu funkcionální derivace, který je zobecněním operace derivace ve směru pro funkce konečně mnoha (reálných) proměnných. Pro funkci $F(\mathbf{x})$ se definuje derivace ve směru ν pomocí formule

$$\nu \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} F(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n \nu_j \frac{\partial}{\partial x_j} F(\mathbf{x}) = \frac{d}{dt} F(\mathbf{x} + t\nu)|_{t=0}. \tag{162}$$

Parciální derivaci podle proměnné x_i lze pak chápat jako derivaci ve speciálním směru, totiž pro $\nu = \mathbf{e}^i$, kde \mathbf{e}^i je jednotkový vektor ve směru i -té souřadnicové osy, t.j. $e_j^i = \delta_j^i$. Je-li $\mathcal{F}[x(t)]$ funkcionál, definovaný na vhodném prostoru (reálných) funkcí, definuje se derivace ve směru $n(t)$ zcela analogicky:

$$\langle n, \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x} \rangle = \int dt' n(t') \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x(t')} = \frac{d}{ds} \mathcal{F}[x(t) + sn(t)]|_{s=0} \tag{163}$$

a funkcionální derivace je pak definována jako derivace ve speciálním směru, kdy $n(t) = \delta(t-t')$, t.j.

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x(t')} = \frac{d}{ds} \mathcal{F}[x(t) + s\delta(t-t')]|_{s=0}. \tag{164}$$

Uveďme několik příkladů:

$$\begin{aligned}
\frac{\delta x(t)}{\delta x(t')} &= \frac{d}{ds} (x(t) + s\delta(t-t'))|_{s=0} = \delta(t-t') \\
\frac{\delta dx(t)/dt}{\delta x(t')} &= \frac{d}{ds} (\dot{x}(t) + s\delta'(t-t'))|_{s=0} = \delta'(t-t') \\
\frac{\delta}{\delta x(t')} \int dt F(t)x(t) &= F(t') \\
\frac{\delta x(t)^n}{\delta x(t')} &= nx(t)^{n-1} \delta(t-t') \\
\frac{\delta}{\delta x(t')} \int dt L(x(t), x'(t)) &= \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}. \tag{165}
\end{aligned}$$

V dalším budeme často používat formuli

$$\frac{\delta}{\delta F(t')} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dt F(t)x(t)\right) = \frac{i}{\hbar} x(t') \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dt F(t)x(t)\right) \quad (166)$$

Vraťme se nyní k systému, popsanému hamiltoniánem (161). Považujeme-li H_0 za neporušený hamiltonián a člen $F(t)\hat{x}$ za poruchu, lze psát pro evoluční operátor v Diracově obrazu příslušném tomuto rozkladu vztah

$$\begin{aligned} S[F(t)](t_f, t_i) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t_f\right) U[F(t)](t_f, t_i) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t_i\right) \\ &= \text{T exp}\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt F(t)\hat{x}(t)\right). \end{aligned} \quad (167)$$

Zde $\hat{x}(t)$ je Diracův obraz operátoru souřadnice, tedy Heisenbergův obraz operátoru \hat{x} vzhledem k neporušenému hamiltoniánu H_0 :

$$\hat{x}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) \hat{x} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right), \quad (168)$$

T značí časové uspořádání. Jak plyne z výrazu (167), maticové elementy operátoru $S[F(t)](t_f, t_i)$ mezi stacionárními stavy hamiltoniánu H_0 se liší od maticových elementů evolučního operátoru $U[F(t)](t_f, t_i)$ ve Schrödingerově obrazu až na fázový faktor $\exp i(E_f t_f - E_i t_i)/\hbar$.

Spočtěme následující funkcionální derivaci operátoru $S[F(t)](t_f, t_i)$ ³³

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\hbar}{i}\right)^n \frac{\delta^n}{\delta F(t_1) \dots \delta F(t_n)} S[F(t)](t_f, t_i)|_{F(t)=0} \\ &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n \frac{\delta^n}{\delta F(t_1) \dots \delta F(t_n)} \text{T exp}\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt F(t)\hat{x}(t)\right)|_{F(t)=0} \\ &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^{n-1} \frac{\delta^{n-1}}{\delta F(t_2) \dots \delta F(t_n)} \text{T}\left(\hat{x}(t_1) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt' F(t')\hat{x}(t')\right)\right)|_{F(t)=0} \\ &= \dots = \text{T}\left(\hat{x}(t_1) \dots \hat{x}(t_n) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt' F(t')\hat{x}(t')\right)\right)|_{F(t)=0} \\ &= \text{T}(\hat{x}(t_1) \dots \hat{x}(t_n)). \end{aligned} \quad (169)$$

Tedy operátor $S[F(t)](t_f, t_i)$ je operátorovým vytvořujícím funkcionálem³⁴ T-součinů heisenbergovských operátorů $\hat{x}(t)$ v teorii s hamiltoniánem H_0 . Podobně maticové elementy tohoto operátoru mezi vlastními stavy operátoru H_0 jsou c-číselné vytvořující funkcionály, generující maticové elementy příslušných T-součinů. Výsadní postavení mezi těmito vytvořujícími funkcionály má generátor vakuových středních hodnot

$$Z[F(t)](t_f, t_i) = \langle 0 | \text{T exp}\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt F(t)\hat{x}(t)\right) | 0 \rangle, \quad (170)$$

kde $|0\rangle$ je základní stav hamiltoniánu H_0 . Podívejme se nyní, jak lze pro tyto veličiny získat reprezentaci dráhovým integrálem.

³³Za znakem T-součinu operátory $\hat{x}(t)$ komutují, takže lze s nimi manipulovat jako s c-čísly.

³⁴T.j. rozvoj $S[F(t)](t_f, t_i)$ do řady v $F(t)$ má koeficienty až na faktor rovné těmto T-součinům.

Známe-li jádro evolučního operátoru, lze snadno spočítat pravděpodobost přechodu z libovolného počátečního stavu $|\psi_i\rangle$ v čase t_i do libovolného koncového stavu $|\psi_f\rangle$ v čase t_f pomocí formule

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | U[F(t)](t_f, t_i) | \psi_i \rangle &= \int dx' dx'' \psi_f(x'')^* \psi_i(x') K(x'', x'; t_f, t_i) \\ &= \int dx' dx'' \psi_f(x'')^* \psi_i(x') \int_{x(t_i)=x'}^{x(t_f)=x''} \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t), F(t)]\right), \end{aligned} \quad (171)$$

kde $S[x(t), F(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt (L(x(t), \dot{x}(t)) + F(t)x(t))$. Díky formuli (167) máme tedy

$$\begin{aligned} Z[F(t)](t_f, t_i) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_0(t_f - t_i)\right) \\ &\times \int dx' dx'' \Omega(x'')^* \Omega(x') \int_{x(t_i)=x'}^{x(t_f)=x''} \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t), F(t)]\right), \end{aligned} \quad (172)$$

kde $\Omega(x) = \langle x|0\rangle$ je vlnová funkce základního stavu. Tato reprezentace funkcionálu $Z[F(t)](t_f, t_i)$ je vhodná tehdy, známe-li explicitě tvar funkce $\Omega(x)$ (a jsme-li schopni spočítat příslušné integrály). Často je proto výhodnější následující procedura³⁵. Pro jednoduchost předpokládejme, že hamiltonián H_0 má čistě bodové spektrum³⁶ s vlastními hodnotami E_n a vlastními funkcemi $\Omega_n(x)$. Potom můžeme psát spektrální rozklad implikující následující asymptotiku při analytickém prodloužení do imaginárního času:

$$\begin{aligned} \langle x'' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) | x' \rangle &= \sum_n \Omega_n(x'') \Omega_n^*(x') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \\ &\rightarrow \Omega(x'') \Omega^*(x') \exp\left(-\frac{1}{\hbar} E_0 \tau\right) \quad \text{pro } t = -i\tau \rightarrow -i\infty. \end{aligned} \quad (173)$$

Máme tedy s užitím rovností (172,167,173):

$$\begin{aligned} &\lim_{T_f, i \rightarrow \mp i\infty} e^{\frac{i}{\hbar} E_0(T_f - T_i)} \langle x_f | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0(T_f - t_f)\right) U[F(t)](t_f, t_i) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0(t_i - T_i)\right) | x_i \rangle \\ &= \lim_{T_f, i \rightarrow \mp i\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_0(T_f - T_i)\right) \int dx' dx'' \langle x_f | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0(T_f - t_f)\right) | x'' \rangle \\ &\quad \times \langle x'' | U[F(t)](t_f, t_i) | x' \rangle \langle x' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0(t_i - T_i)\right) | x_i \rangle \\ &= \Omega(x_f) \Omega^*(x_i) \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_0(t_f - t_i)\right) \int dx' dx'' \Omega(x'')^* \Omega(x') \langle x'' | U[F(t)](t_f, t_i) | x' \rangle \\ &= Z[F(t)](t_f, t_i) \Omega(x_f) \Omega^*(x_i). \end{aligned} \quad (174)$$

Na druhé straně výraz pod limitou na levé straně (174) lze vyjádřit dráhovým integrálem

$$\begin{aligned} &e^{\frac{i}{\hbar} E_0(T_f - T_i)} \langle x_f | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0(T_f - t_f)\right) U[F(t)](t_f, t_i) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0(t_i - T_i)\right) | x_i \rangle \\ &= \int_{x(T_i)=x_i}^{x(T_f)=x_f} \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\int_{T_i}^{T_f} dt (L(x(t), \dot{x}(t)) + E_0) + \int_{t_i}^{t_f} dt x(t) F(t)\right)\right). \end{aligned} \quad (175)$$

³⁵V kvantové teorii pole neexistuje jiná možnost.

³⁶Jako příklad může sloužit harmonický oscilátor. Pro platnost následujících úvah stačí, aby základní stav odpovídal diskrétnímu bodu spektra hamiltoniánu H_0 .

Všimněte si, že v exponenciále stojí “renormalizovaný” lagrangián, příslušný hamiltoniánu $H_0 - E_0$ (s nulovou energií základního stavu), a že působení vnějšího zdroje je omezeno na časový interval (t_i, t_f) , který je částí intervalu (T_i, T_f) . Výsledná reprezentace dráhovým integrálem tudíž je

$$Z[F(t)](t_f, t_i)\Omega(x_f)\Omega^*(x_i) = \lim_{T_{f,i} \rightarrow \mp i\infty} \int_{x(T_i)=x_i}^{x(T_f)=x_f} \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(\int_{T_i}^{T_f} dt(L(x(t), \dot{x}(t)) + E_0) + \int_{t_i}^{t_f} dt x(t)F(t)\right)\right) \quad (176)$$

Tedy k výpočtu funkcionálu $Z[F(t)](t_f, t_i)$ stačí spočítat dráhový integrál (175), díky normalizaci $Z[0](t_f, t_i) = 1$ současně obdržíme vlnovou funkci základního stavu $\Omega(x)$.

Dříve, než se budeme blíže zabývat reprezentací (176), ilustrujme popsanou proceduru na příkladu harmonického oscilátoru.

Integrál (175) získáme z formule (160) záměnou $T \rightarrow (T_f - T_i)$, $t_{i,f} \rightarrow T_{i,f}$, $F(t) \rightarrow \chi_{(t_i, t_f)}(t)F(t)$, kde $\chi_{(t_i, t_f)}(t)$ je charakteristická funkce intervalu (t_i, t_f) . Uvážíme-li, že energie základního stavu $E_0 = \hbar\omega/2$, dostaneme po analytickém prodloužení ve smyslu formule (174)

$$\begin{aligned} Z[F(t)](t_f, t_i)\Omega(x_f)\Omega^*(x_i) &= \lim_{T_{f,i} \rightarrow \pm\infty} e^{\frac{\omega}{2}(T_f - T_i)} \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh \omega(T_f - T_i)}\right)^{1/2} \\ &\times \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar \sinh \omega(T_f - T_i)} \left(\cosh \omega(T_f - T_i)(x_i^2 + x_f^2) - 2x_i x_f\right)\right) \\ &\times \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar \sinh \omega(T_f - T_i)} \left(\frac{2x_i}{m\omega} \int_{t_i}^{t_f} dt F(t) \sin \omega(-iT_f - t) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{2x_f}{m\omega} \int_{t_i}^{t_f} dt F(t) \sin \omega(t + iT_i)\right)\right) \\ &\times \exp\left(-\frac{1}{2\hbar m\omega \sinh \omega(T_f - T_i)} \int_{t_i}^{t_f} dt ds F(t)F(s) (\theta(s - t) \sin \omega(t + iT_i) \sin \omega(s + iT_f) \right. \\ &\quad \left. + \theta(t - s) \sin \omega(s + iT_i) \sin \omega(t + iT_f))\right). \end{aligned} \quad (177)$$

Výpočet limity je přímočarý, jako výsledek obdržíme

$$Z[F(t)](t_f, t_i)\Omega(x_f)\Omega^*(x_i) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_i^2 + x_f^2)\right) \exp\left(\frac{i}{2m\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt ds F(t)F(s) \frac{i}{2\omega} e^{-i\omega|t-s|}\right), \quad (178)$$

jako vedlejší produkt jsme zreprodukovali známý tvar vlnové funkce základního stavu harmonického oscilátoru

$$\Omega(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right).$$

Tedy pro vytvářející funkcionál $Z[F(t)](t_f, t_i)$ máme výslednou formuli

$$Z[F(t)](t_f, t_i) = \exp\left(\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt ds F(t)F(s) G_F(t, s)\right), \quad (179)$$

kde $G_F(t, s)$ je kauzální (Feynmanova) Greenova funkce lineárního operátoru $m (d^2/dt^2 + \omega^2)$ na intervalu $(-\infty, \infty)$:

$$\begin{aligned} G_F(t, s) &= \langle t | \left(m \left(d^2/dt^2 + \omega^2 - i\varepsilon \right) \right)^{-1} | s \rangle \\ &= -\frac{1}{m} \int \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-iE(t-s)}}{E^2 - \omega^2 + i\varepsilon} = \frac{i}{2m\omega} e^{-i\omega|t-s|}. \end{aligned} \quad (180)$$

Z formule (179) plyne

$$\langle 0 | T \hat{x}(t) \hat{x}(t') | 0 \rangle = \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{\delta^2}{\delta F(t) \delta F(t')} Z[F(t)](t_f, t_i) |_{F(t)=0} = \frac{\hbar}{i} G_F(t, t'), \quad (181)$$

což dává fyzikální interpretaci G_F v termínech vakuové střední hodnoty T -součinu dvou heisenbergovských operátorů souřadnice. Funkcionálním derivováním formule (179) dostaneme dále

$$\begin{aligned} \langle 0 | T (\hat{x}(t_1) \hat{x}(t_2) \dots \hat{x}(t_{2k+1})) | 0 \rangle &= 0 \\ \langle 0 | T (\hat{x}(t_1) \hat{x}(t_2) \dots \hat{x}(t_{2k})) | 0 \rangle &= \sum_{\langle i_l, j_l \rangle} (-i\hbar)^k \prod_{l=1}^k G_F(t_{i_l}, t_{j_l}), \end{aligned} \quad (182)$$

kde se v poslední formuli sčítá přes všechna možná spárování indexů $i_l, j_l = 1, 2, \dots, 2k$.

Ukažme ještě na tomto příkladu, jak lze pomocí vytvářejícího funkcionálu získat kompletní informaci o fyzikálním systému, tj. jak počítat maticové elementy operátorů mezi stacionárními stavy. Fyzikálním pozorovatelným odpovídají heisenbergovské operátory, které jsou funkcemi operátorů $\hat{x}(t)$ a $\hat{p}(t) = m\dot{\hat{x}}(t)$. Pro n -tý stacionární stav harmonického oscilátoru máme

$$|n\rangle = \frac{a^+(t)^n}{(n!)^{1/2}} |0\rangle |_{t=0}, \quad (183)$$

kde pro kreační operátor máme vztah

$$a^+(t) = \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \left(\hat{x}(t) - \frac{i}{m\omega} \hat{p}(t) \right) = \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \left(\hat{x}(t) - \frac{i}{\omega} \dot{\hat{x}}(t) \right). \quad (184)$$

Podobně pro anihilační operátor máme

$$a(t) = \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \left(\hat{x}(t) + \frac{i}{\omega} \dot{\hat{x}}(t) \right). \quad (185)$$

Střední hodnoty T -součinů těchto operátorů v základním stavu dostaneme z vytvořujícího funkcionálu aplikováním funkcionálních derivací a derivováním podle časových argumentů. Uspořádáme-li jednotlivé časové argumenty v T -součinu vhodným způsobem tak, aby kreační operátory působily napravo a anihilační operátory nalevo od operátoru $\mathcal{O}(\hat{x}, \hat{p})$, můžeme pro jeho maticový element psát

$$\begin{aligned} \langle n | \mathcal{O}(\hat{x}, \hat{p}) | m \rangle &= \frac{1}{(n!m!)^{1/2}} \langle 0 | a(0)^n \mathcal{O}(\hat{x}(0), \hat{p}(0)) a^+(0)^m | 0 \rangle = \\ &= \lim_{\substack{t_{-m} \rightarrow 0^-, t_n \rightarrow 0^+ \\ t_{-m} < \dots < t_0 < \dots < t_n}} \frac{1}{(n!m!)^{1/2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{(n+m)/2} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^{n+m} \end{aligned}$$

$$\prod_{k=1}^m \left(\left(1 - \frac{i}{\omega} \frac{\partial}{\partial t_{-k}} \right) \frac{\delta}{\delta F(t_{-k})} \right) \prod_{l=1}^n \left(\left(1 + \frac{i}{\omega} \frac{\partial}{\partial t_l} \right) \frac{\delta}{\delta F(t_l)} \right) \\ \mathcal{O} \left(\left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\delta}{\delta F(t_0)}, m \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial}{\partial t_0} \frac{\delta}{\delta F(t_0)} \right) Z[F](t_f, t_i)|_{F(t)=0}. \quad (186)$$

Tj. např.

$$\langle 0|\hat{x}|1\rangle = \lim_{t \rightarrow 0^-} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{\delta}{\delta F(0)} \left(\left(1 - \frac{i}{\omega} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\delta}{\delta F(t)} \right) Z[F](t_f, t_i)|_{F(t)=0} \\ = \lim_{t \rightarrow 0^-} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{i}{\omega} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\hbar}{i} G_F(t, 0) = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2}, \quad (187)$$

což je výsledek shodný s výsledkem přímého výpočtu. Jak uvidíme v dalším, podobný postup pro získání maticových elementů operátorů mezi stacionárními stavy a elementů S-matice se užívá v kvantové teorii pole (tzv. LSZ formule).

Zmiňme se ještě o jedné metodě vydělení příspěvku základního stavu, který nevyžaduje přechod ke komplexním časům. Přidáme-li totiž k hamiltoniánu infinitezimální antihermitovský dodatek, dodáme vlastním hodnotám infinitezimální zápornou imaginární část, která opět potlačí příspěvky vyšších excitovaných stavů. Tato metoda vede také ke správnému pravidlu na obchod pólů ve Fourierově transformaci dvoubodové Greenovy funkce.

Ilustrujme původ a výsledný efekt dodatečných “ $i\varepsilon$ ” členů na příkladu harmonického oscilátoru. Vyjděme z formule (172). Exponenciální faktor pocházející z vlnových funkcí základního stavu lze zapsat ve tvaru

$$\exp \left(- \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right) (x''^2 + x'^2) \right) = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} i\varepsilon m\omega \lim_{t_{f,i} \rightarrow \pm\infty} \int_{t_i}^{t_f} dt x(t)^2 e^{-\varepsilon|t|} \right), \quad (188)$$

kde ε je kladné infinitesimální (t.j. ve výsledku se předpokládá limita $\varepsilon \rightarrow 0^+$). Platí totiž

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) e^{-\varepsilon|t|} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t/\varepsilon) e^{-|t|} \\ = \int_{-\infty}^{\infty} dt f(\text{sign}(t)\infty) e^{-|t|} = f(\infty) + f(-\infty) \quad (189)$$

Zahrneme-li tedy člen $\frac{1}{2}i\varepsilon m\omega \int_{t_i}^{t_f} dt x(t)^2 e^{-\varepsilon|t|}$ do akce dráhového integrálu, (ve kterém pak integrujeme přes všechny trajektorie bez omezení na hodnoty $x(t_i)$, $x(t_f)$), vhodně celý výraz normalizujeme tak, aby $Z[0] = 1$ a vezmeme limitu $t_{f,i} \rightarrow \pm\infty$, dostáváme

$$Z[F(t)] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\int \mathcal{D}x(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt (L(x(t), \dot{x}(t)) + \frac{1}{2}i\varepsilon m\omega x(t)^2 e^{-\varepsilon|t|} + F(t)x(t)) \right)}{\int \mathcal{D}x(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt (L(x(t), \dot{x}(t)) + \frac{1}{2}i\varepsilon m\omega x(t)^2 e^{-\varepsilon|t|}) \right)}. \quad (190)$$

Počítáme-li výsledný gaussovský integrál, lze v rovnici pro klasickou trajektorii³⁷ nahradit faktor $e^{-\varepsilon|t|}$ jedničkou, neboť rozdíl generuje členy vyššího řádu v ε . Efektivně to znamená záměnu $\omega^2 \rightarrow \omega^2 - i\varepsilon\omega$ ve výrazu pro akci. Při výpočtu dráhového integrálu(190) lze tedy

³⁷Okrajové podmínky pro Greenovu funkci je třeba volit $x(\pm\infty) = 0$, což opět odpovídá kvantovým fluktuacím kolem klasické trajektorie s $F(t) = 0$. Příspěvky všech klasických trajektorií s $F(t) = 0$ se zruší normalizačním faktorem (jmenovatelem výrazu (190)).

vyjít z formule (160), v níž provedeme záměnu $\omega \rightarrow \omega - i\delta$, $\delta \rightarrow 0$, přeintegrujeme přes x' , x'' a provedeme limitu³⁸ $t_{f,i} \rightarrow \pm\infty$; tento postup reprodukuje výsledek (179).

Všimněme si, že výsledek (179) lze získat formálně přímo pomocí (190), aniž bychom vycházeli z formule (160). Specifikujeme-li prostor trajektorií, přes které se provádí gaussovská integrace v (190), pomocí okrajových podmínek³⁹ $x(t) \rightarrow 0$ pro $t \rightarrow \pm\infty$ (to je postup typický pro kvantovou teorii pole), je operátor $m(d^2/dt^2 + \omega^2 - i\varepsilon\omega)$ invertibilní a klasická trajektorie má tvar

$$x(t) = \left(m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 - i\varepsilon\omega \right) \right)^{-1} F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} ds G_F(t, s) F(s). \quad (191)$$

Dodatečný $i\varepsilon$ -člen ve Fourierově obrazu jádra $G_F(t, s)$ je tentýž jako v rovnici (180). Dosazením této klasické trajektorie do akce znovu zreprodukuje výsledek (179).

1.9 Vytvořující funkcionál souvislých Greenových funkcí a efektivní akce

V této podkapitole zavedeme další dva funkcionály odvozené od vytvořujícího funkcionálu $Z[F]$ vakuových středních hodnot T-uspořádaných součinů heisenbergovských operátorů $\hat{x}(t)$,

$$Z[F] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \int dt_1 \dots dt_n F(t_1) \dots F(t_n) \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)\dots\hat{x}(t_n)|0\rangle, \quad (192)$$

který jsme definovali v předchozí podkapitole. Tyto nové funkcionály budou podobně jako $Z[F]$ generovat Greenovy funkce, které budou co do struktury “elementárnější” než původní vakuové střední hodnoty - budou v jistém smyslu jejich “stavebními bloky”.

Prvním z těchto dvou funkcionálů je generující funkcionál tzv. souvislých⁴⁰ Greenových funkcí, pro něž se užívá značení $\langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)\dots\hat{x}(t_n)|0\rangle_c$. Ty jsou definovány rekurentně. Jednobodová souvislá Greenova funkce je definitoricky rovna vakuové střední hodnotě⁴¹ operátoru $\hat{x}(t)$

$$\langle 0|T\hat{x}(t)|0\rangle = \langle 0|T\hat{x}(t)|0\rangle_c = \langle 0|\hat{x}(t)|0\rangle = \langle 0|\hat{x}(0)|0\rangle. \quad (193)$$

Rekurentní relace pro n -bodovou funkci pak zní⁴²

$$\begin{aligned} & \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)\dots\hat{x}(t_n)|0\rangle \\ &= \sum_{\text{rozklad}} \langle 0|T\hat{x}(t_{i_1^1})\hat{x}(t_{i_1^2})\dots\hat{x}(t_{i_1^{n_1}})|0\rangle_c \dots \langle 0|T\hat{x}(t_{i_s^1})\hat{x}(t_{i_s^2})\dots\hat{x}(t_{i_s^{n_s}})|0\rangle_c. \end{aligned} \quad (194)$$

Zde jsme zavedli symbolickou sumu

$$\sum_{\text{rozklad}} \equiv \sum_{s=1}^n \sum_{\substack{\cup_{k=1}^s \{i_k^j\}_{j=1}^{n_k} = \{1, 2, \dots, n\} \\ \sum_k n_k = n, \{i_k^j\}_{j=1}^{n_k} \cap \{i_l^j\}_{j=1}^{n_l} = \emptyset}} , \quad (195)$$

³⁸Na pořadí posledních dvou operací efektivně nezáleží.

³⁹Tedy trajektorie vycházejí v $t = -\infty$ z “klasického vakua” $x = 0$ a končí v čase $t = \infty$ opět v klasickém základním stavu $x = 0$.

⁴⁰Jak uvidíme v dalším, souvislé Greenovy funkce budou dány v rámci poruchové teorie sumou příspěvků souvislých Feynmanových grafů.

⁴¹Zde využíváme definici heisenbergovského operátoru $\hat{x}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}Ht\right)\hat{x}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)$ a stacionarit u základního stavu, t.j. vztah $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)|0\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_0t\right)|0\rangle$ kde E_0 je energie základního stavu.

⁴²Tato definice je analogická klastrovému rozkladu známému z klasické statistické mechaniky.

odpovídající součtu přes všechny možné rozklady množiny indexů $\{1, 2, \dots, n\}$ na vzájemně disjunktí podmnožiny (klastry). Souvislá n -bodová Greenova funkce tedy vznikne z původní vakuové střední hodnoty odečtením všech nesouvislých příspěvků (t.j. příspěvků faktorizujících se na součin souvislých $n_k < n$ -bodových Greenových funkcí, kde $\sum_k n_k = n$). Například pro dvoubodovou funkci dostaneme z předchozích relací

$$\langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)|0\rangle = \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)|0\rangle_c + \langle 0|\hat{x}(t_1)|0\rangle_c \langle 0|\hat{x}(t_2)|0\rangle_c, \quad (196)$$

a tedy s využitím relace (193)

$$\langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)|0\rangle_c = \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)|0\rangle - \langle 0|\hat{x}(t_1)|0\rangle \langle 0|\hat{x}(t_2)|0\rangle. \quad (197)$$

Analogicky, pro třibodovou funkci plyne z (194)

$$\begin{aligned} \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)\hat{x}(t_3)|0\rangle &= \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)\hat{x}(t_3)|0\rangle_c \\ &+ \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)|0\rangle_c \langle 0|\hat{x}(t_3)|0\rangle_c \\ &+ \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_3)|0\rangle_c \langle 0|\hat{x}(t_2)|0\rangle_c \\ &+ \langle 0|T\hat{x}(t_2)\hat{x}(t_3)|0\rangle_c \langle 0|\hat{x}(t_1)|0\rangle_c \\ &+ \langle 0|\hat{x}(t_1)|0\rangle_c \langle 0|\hat{x}(t_2)|0\rangle_c \langle 0|\hat{x}(t_3)|0\rangle_c \end{aligned} \quad (198)$$

a dosazením za jednobodovou a dvoubodovou souvislou funkci z (193) a (197) dostaneme

$$\begin{aligned} \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)\hat{x}(t_3)|0\rangle_c &= \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)\hat{x}(t_3)|0\rangle \\ &- \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)|0\rangle \langle 0|\hat{x}(t_3)|0\rangle \\ &- \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_3)|0\rangle \langle 0|\hat{x}(t_2)|0\rangle \\ &- \langle 0|T\hat{x}(t_2)\hat{x}(t_3)|0\rangle \langle 0|\hat{x}(t_1)|0\rangle \\ &+ 2\langle 0|\hat{x}(t_1)|0\rangle \langle 0|\hat{x}(t_2)|0\rangle \langle 0|\hat{x}(t_3)|0\rangle. \end{aligned} \quad (199)$$

Najděme nyní explicitní řešení rekurentních relací (194) v obecném případě. K tomu využijeme vztahu souvislých Greenových funkcí a vytvářejícího funkcionálu $Z[F]$. Pomocí definice (194) pro něj postupně dostáváme (srov. (192))

$$\begin{aligned} Z[F] &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \int dt_1 \dots dt_n F(t_1) \dots F(t_n) \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2) \dots \hat{x}(t_n)|0\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \int dt_1 \dots dt_n F(t_1) \dots F(t_n) \\ &\quad \times \sum_{\text{rozklad}} \langle 0|T\hat{x}(t_{i_1}^{n_1}) \dots \hat{x}(t_{i_{n_1}}^{n_1})|0\rangle_c \dots \langle 0|T\hat{x}(t_{i_s}^{n_s}) \dots \hat{x}(t_{i_s}^{n_s})|0\rangle_c \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \sum_{\text{rozklad}} \int dt_{i_1}^{n_1} \dots dt_{i_{n_1}}^{n_1} F(t_{i_1}^{n_1}) \dots F(t_{i_{n_1}}^{n_1}) \langle 0|T\hat{x}(t_{i_1}^{n_1}) \dots \hat{x}(t_{i_{n_1}}^{n_1})|0\rangle_c \\ &\quad \times \dots \int dt_{i_1}^{n_1} \dots dt_{i_{n_1}}^{n_1} F(t_{i_1}^{n_1}) \dots F(t_{i_{n_1}}^{n_1}) \langle 0|T\hat{x}(t_{i_1}^{n_1}) \dots \hat{x}(t_{i_{n_1}}^{n_1})|0\rangle_c. \end{aligned} \quad (200)$$

Protože se přes časové argumenty integruje, dávají jednotlivé členy sumy přes rozklady, lišící se pouze permutací indexů, stejný příspěvek. Například tři členy ve druhém až čtvrtém řádku rozkladu (198) přispívají stejně, odpovídající vklad jednoho členu činí

$$\int dt_1 dt_2 dt_3 F(t_1) F(t_2) F(t_3) \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)|0\rangle_c \langle 0|T\hat{x}(t_3)|0\rangle_c.$$

V obecném případě tento příspěvek závisí na posloupnosti nezáporných celých čísel $\{n_j\}$, která udávají počet klastrů sestávajících z j prvků (v předchozím příkladu je $n_1 = n_2 = 1$ a $n_j = 0$ pro $j > 2$) a je roven

$$Z[F]_{\{n_j\}} = \prod_{j=1}^n \left(\frac{i}{\hbar} W_j[F] j! \right)^{n_j}, \quad (201)$$

kde jsme označili

$$W_j[F] = -i\hbar \frac{1}{j!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^j \int dt_1 \dots dt_j F(t_1) \dots F(t_j) \langle 0 | T \hat{x}(t_1) \dots \hat{x}(t_j) | 0 \rangle_c \quad (202)$$

Takových příspěvků je

$$C_{\{n_j\}} = \frac{(\sum_j j n_j)!}{\prod_{j=1}^n (j!)^{n_j} n_j!}.$$

Tento faktor odpovídá počtu způsobů, jak rozmístit $n = \sum_{j=1}^n j n_j$ časových argumentů do $N = \sum_{j=1}^{\infty} n_j$ klastrů, přičemž klastry stejné délky jsou nerozlišitelné. Lze tedy psát

$$\begin{aligned} Z[F] &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\{n_j\}, \sum_j j n_j = n} C_{\{n_j\}} Z[F]_{\{n_j\}} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\{n_j\}, \sum_j j n_j = n} C_{\{n_j\}} \prod_{j=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} W_j[F] j! \right)^{n_j} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\{n_j\}, \sum_j j n_j = n} (\sum_j j n_j)! \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{n_j!} \left(\frac{i}{\hbar} W_j[F] \right)^{n_j} \\ &= \sum_{\{n_j\}} \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{n_j!} \left(\frac{i}{\hbar} W_j[F] \right)^{n_j}, \end{aligned} \quad (203)$$

kde $\sum_{\{n_j\}}$ představuje sumu přes všechny posloupnosti nezáporných celých čísel bez omezení na $\sum_j j n_j$. Proto lze v posledním výrazu zaměnit pořadí součinu a sumy, a tedy

$$\begin{aligned} Z[F] &= \prod_{j=1}^{\infty} \sum_{n_j=0}^{\infty} \frac{1}{n_j!} \left(\frac{i}{\hbar} W_j[F] \right)^{n_j} \\ &= \prod_{j=1}^{\infty} \exp \left(\frac{i}{\hbar} W_j[F] \right). \end{aligned} \quad (204)$$

Definujeme-li tedy vytvořující funkcionál souvislých Greenových funkcí vztahem

$$\begin{aligned} W[F] &= \sum_{n=1}^{\infty} W_n[F] \\ &= -i\hbar \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \int dt_1 \dots dt_n F(t_1) \dots F(t_n) \langle 0 | T \hat{x}(t_1) \hat{x}(t_2) \dots \hat{x}(t_n) | 0 \rangle_c, \end{aligned} \quad (205)$$

lze pravou stranu formule (204) přepsat na kompaktní tvar⁴³

$$Z[F] = \exp \frac{i}{\hbar} W[F]. \quad (206)$$

Hledané obecné řešení rekurentních relací (194) lze tedy psát ve tvaru

$$\begin{aligned} \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)\dots\hat{x}(t_n)|0\rangle_c &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^{n-1} \frac{\delta^n}{\delta F(t_1)\delta F(t_2)\dots\delta F(t_n)} W[F]|_{F=0} \\ &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n \frac{\delta^n}{\delta F(t_1)\delta F(t_2)\dots\delta F(t_n)} \ln Z[F]|_{F=0}. \end{aligned} \quad (207)$$

Uveďme explicitní příklad této obecné konstrukce. Pro lineární harmonický oscilátor máme z formule (179)

$$W[F] = \frac{1}{2} \int dt ds F(t) F(s) G_F(t, s) \quad (208)$$

tedy jediná netriviální souvislá Greenova funkce je dvoubodová funkce

$$\langle 0|T\hat{x}(t)\hat{x}(s)|0\rangle_c = \langle 0|T\hat{x}(t)\hat{x}(s)|0\rangle = \frac{\hbar}{i} G_F(t, s)$$

a všechny vícebodové funkce jsou nesouvislé (srov (182)).

Druhým funkcionálem, který zavedeme v této podkapitole, je tzv. efektivní akce. Nejprve definujeme

$$x_{\text{cl}}(t) = \frac{\delta W[F]}{\delta F(t)} = -i\hbar \frac{1}{Z[F]} \frac{\delta Z[F]}{\delta F(t)} = \frac{\langle 0|T\hat{x}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int d\tau F(\tau)\hat{x}(\tau)\right) |0\rangle}{\langle 0|T \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int d\tau F(\tau)\hat{x}(\tau)\right) |0\rangle} \quad (209)$$

a pomocí této veličiny, která je pro $F = 0$ identická s vakuovou střední hodnotou operátoru $\hat{x}(t)$, definujeme efektivní akci jako funkcionální analogii Legendrově transformace funkcionálu $W[F]$

$$\Gamma[x_{\text{cl}}] = W[F] - \int dt F(t) x_{\text{cl}}(t). \quad (210)$$

Důsledkem formulí (209) a (210) je platnost “kvantové pohybové rovnice” ve tvaru

$$\frac{\delta \Gamma[x_{\text{cl}}]}{\delta x_{\text{cl}}(t)} = -F(t). \quad (211)$$

Skutečně, máme postupně

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Gamma[x_{\text{cl}}]}{\delta x_{\text{cl}}(t)} &= \int d\tau \frac{\delta W[F]}{\delta F(\tau)} \frac{\delta F(\tau)}{\delta x_{\text{cl}}(t)} - \int d\tau \frac{\delta F(\tau)}{\delta x_{\text{cl}}(t)} x_{\text{cl}}(\tau) - F(t) \\ &= -F(t). \end{aligned} \quad (212)$$

Koeficientní funkce $\Gamma^{(n)}(t_1, t_2, \dots, t_n)$ rozvoje efektivní akce

$$\Gamma[x_{\text{cl}}] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dt_1 \dots dt_n \Gamma^{(n)}(t_1, t_2, \dots, t_n) x_{\text{cl}}(t_1) x_{\text{cl}}(t_2) \dots x_{\text{cl}}(t_n) \quad (213)$$

⁴³Tato formule není ničím jiným než kombinatorickým Mayerovým teorémem, známým m.j. z klasické statistické mechaniky.

se nazývají vlastní vrcholy nebo (z důvodů, které budou jasné později) jednočásticově ireducibilní (useknuté) Greenovy funkce (1PI Greenovy funkce).

Pro ilustraci spočítejme efektivní akci pro lineární harmonický oscilátor. Máme s užitím (208)

$$x_{\text{cl}}(t) = \int ds G_F(t, s) F(s), \quad (214)$$

tedy, protože $G_F(s, t) = \langle s | (m (d^2/dt^2 + \omega^2 - i\varepsilon))^{-1} | t \rangle$,

$$F(t) = m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) x_{\text{cl}}(t), \quad (215)$$

a tedy

$$\begin{aligned} \Gamma[x_{\text{cl}}] &= -\frac{1}{2} \int dt ds F(t) G_F(t, s) F(s) \\ &= -\frac{1}{2} m \int dt x_{\text{cl}}(t) \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) x_{\text{cl}}(t) \\ &= \int dt \left(m \frac{\dot{x}_{\text{cl}}^2(t)}{2} - \frac{m\omega^2 x_{\text{cl}}(t)}{2} \right), \end{aligned} \quad (216)$$

kde jsme při poslední úpravě použili integraci per partes⁴⁴. Tedy efektivní akce Γ je tomto případě rovna klasické akci. Jak uvidíme v dalším, pro systém s obecnou klasickou akcí $S[x(t)]$ platí

$$\Gamma[x_{\text{cl}}(t)] = S[x_{\text{cl}}(t)] + \mathcal{O}(\hbar), \quad (217)$$

kde druhý člen představuje kvantové korekce. V tomto smyslu lze formuli (211) chápat jako kvantový analog pohybové rovnice

$$\frac{\delta S}{\delta x(t)} = -F(t) \quad (218)$$

pro klasický systém s akcí $S_F[x(t)]$ s vnějším zdrojem $F(t)$, $S_F[x(t)] = S[x(t)] + \int dt F(t)x(t)$. Řešením této kvantové pohybové rovnice dostaneme vakuovou střední hodnotu $x_{\text{cl}}(t)|_{F=0} = \langle 0 | \hat{x}(t) | 0 \rangle$.

Vraťme se k interpretaci 1PI Greenových funkcí. Pro jednoduchost budeme předpokládat⁴⁵ $\langle 0 | \hat{x}(t) | 0 \rangle = 0$. Funkcionálním zderivováním rovnice (211) podle $F(s)$ dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 \Gamma[x_{\text{cl}}]}{\delta x_{\text{cl}}(t) \delta F(s)} &= \int d\tau \frac{\delta^2 \Gamma[x_{\text{cl}}]}{\delta x_{\text{cl}}(t) \delta x_{\text{cl}}(\tau)} \frac{\delta x_{\text{cl}}(\tau)}{\delta F(s)} \\ &= \int d\tau \frac{\delta^2 \Gamma[x_{\text{cl}}]}{\delta x_{\text{cl}}(t) \delta x_{\text{cl}}(\tau)} \frac{\delta^2 W[F]}{\delta F(\tau) \delta F(s)} = -\delta(t-s). \end{aligned} \quad (219)$$

⁴⁴Povrchové členy nepřispívají, předpokládáme-li dostatečně rychlé ubývání $F(t)$ pro $t \rightarrow \pm\infty$.

⁴⁵V případě, že $\langle 0 | \hat{x}(t) | 0 \rangle \neq 0$, zůstávají následující úvahy v platnosti, definujeme-li veličinu $\tilde{x}_{\text{cl}}(t)$, do jejíž mocnin rozvíjíme $\Gamma[x_{\text{cl}}]$, pomocí vztahu

$$\frac{\delta W[F]}{\delta F(t)} = \tilde{x}_{\text{cl}}(t) + \langle 0 | \hat{x}(t) | 0 \rangle,$$

t.j. definujeme-li 1PI Greenovy funkce jako

$$\Gamma^{(n)}(t_1, \dots, t_n) = \frac{\delta^n \Gamma[x_{\text{cl}}]}{\delta x_{\text{cl}}(t_1) \dots \delta x_{\text{cl}}(t_n)} \Big|_{x_{\text{cl}} = \langle 0 | \hat{x}(t) | 0 \rangle}.$$

Tedy jádra $\delta^2\Gamma[x_{\text{cl}}]/(\delta x_{\text{cl}}(t)\delta x_{\text{cl}}(\tau))$ a $\delta^2W[F]/(\delta F(\tau)\delta F(s))$ jsou navzájem inverzní; položíme-li speciálně v (219) $F = 0$, (a tedy také $x_{\text{cl}} = 0$), dostaneme

$$\int d\tau \Gamma^{(2)}(t, \tau) W^{(2)}(\tau, s) = -\delta(t - s), \quad (220)$$

kde jsme označili

$$W^{(2)}(\tau, s) = \frac{\delta^2 W[F]}{\delta F(\tau)\delta F(s)} \Big|_{F=0} = \frac{i}{\hbar} \langle 0 | T \hat{x}(\tau) \hat{x}(s) | 0 \rangle_c. \quad (221)$$

Tzn. $\Gamma^{(2)}(t, \tau)$ je až na faktor inverzní jádro dvoubodové (souvislé) Greenovy funkce.

Odvoďme nyní relace, vyjadřující vztah mezi souvislými a 1PI Greenovými funkcemi v obecném případě. Z definice $\Gamma[x_{\text{cl}}]$ plyne

$$\begin{aligned} W[F] &= \int dt F(t) x_{\text{cl}}(t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dt_1 \dots dt_n \Gamma^{(n)}(t_1, t_2, \dots, t_n) x_{\text{cl}}(t_1) x_{\text{cl}}(t_2) \dots x_{\text{cl}}(t_n) \\ &= \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1-n}{n!} \int dt_1 \dots dt_n \Gamma^{(n)}(t_1, t_2, \dots, t_n) x_{\text{cl}}(t_1) x_{\text{cl}}(t_2) \dots x_{\text{cl}}(t_n) \end{aligned} \quad (222)$$

kde za $x_{\text{cl}}(t)$ je třeba dosadit řešení kvantové pohybové rovnice (211). Rovnice (211) má tvar

$$\begin{aligned} F(t) &= - \int ds \Gamma^{(2)}(t, s) x_{\text{cl}}(s) \\ &\quad - \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \int dt_2 \dots dt_n \Gamma^{(n)}(t_1, t_2, \dots, t_n) x_{\text{cl}}(t_2) \dots x_{\text{cl}}(t_n) \end{aligned} \quad (223)$$

a s použitím (220) ji přepíšeme do formy

$$\begin{aligned} x_{\text{cl}}(t) &= \int ds W^{(2)}(t, s) F(s) \\ &\quad + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \int dt_1 \dots dt_n W^{(2)}(t, t_1) \Gamma^{(n)}(t_1, t_2, \dots, t_n) x_{\text{cl}}(t_2) \dots x_{\text{cl}}(t_n). \end{aligned} \quad (224)$$

Tento vztah lze chápat jako iterativní formuli pro rozvoj funkcionálu $x_{\text{cl}}[F](t)$ do mocnin F . Nultá iterace je

$$x_{\text{cl}}^{(0)}(t) = \int ds W^{(2)}(t, s) F(s). \quad (225)$$

Dosazením $x_{\text{cl}}^{(0)}(t)$ za $x_{\text{cl}}(t)$ do (224) dostaneme první iteraci

$$\begin{aligned} x_{\text{cl}}^{(1)}(t) &= \int ds W^{(2)}(t, s) F(s) \\ &\quad + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \int dt_1 \dots dt_n W^{(2)}(t, t_1) \Gamma^{(n)}(t_1, t_2, \dots, t_n) x_{\text{cl}}^{(0)}(t_2) \dots x_{\text{cl}}^{(0)}(t_n) \\ &= \int ds W^{(2)}(t, s) F(s) \\ &\quad + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \int dt_1 \dots dt_n W^{(2)}(t, t_1) \Gamma^{(n)}(t_1, t_2, \dots, t_n) \\ &\quad \times \int ds_2 W^{(2)}(t_2, s_2) F(s_2) \dots \int ds_n W^{(2)}(t_n, s_n) F(s_n), \end{aligned} \quad (226)$$

atd. Obecně

$$x_{\text{cl}}^{(n)}(t) = \int ds W^{(2)}(t, s) F(s) + \sum_{m=3}^{\infty} \frac{1}{(m-1)!} \int dt_1 \dots dt_m W^{(2)}(t, t_1) \Gamma^{(m)}(t_1, t_2, \dots, t_m) x_{\text{cl}}^{(n-1)}(t_2) \dots x_{\text{cl}}^{(n-1)}(t_m). \quad (227)$$

Tato iterační procedura generuje postupně členy, které mají názornou grafickou interpretaci - lze je totiž zobrazit jako souvislé grafy, složené z vrcholů (těm odpovídají 1PI Greenovy funkce) a vnějších a vnitřních linií (těm odpovídá dvoubodová souvislá Greenova funkce). Popišme tuto korespondenci podrobněji. Typický člen generovaný iterační procedurou má tvar

$$\int \prod_{j=1}^V \prod_{k=1}^{n_j} ds_k^{(j)} W^{(2)}(t, s_1^{(1)}) \prod_{j=1}^V \Gamma^{(n_j)}(s_1^{(j)}, \dots, s_{n_j}^{(j)}) \times \prod_{k=1}^E \int d\sigma_l W^{(2)}(\tau_l, \sigma_l) F(\sigma_k) \prod_{m=1}^I W^{(2)}(s_m, t_m). \quad (228)$$

Integrand obsahuje součin “kmene” grafu $W^{(2)}(t, s_1^{(1)})$, napojeného ve “spojovacím bodě” $s_1^{(1)}$ na jeden z celkového počtu V vrcholů (1PI Greenových funkcí) $\Gamma^{(n_j)}$ se spojovacími body $\{s_k^{(j)}\}_{k=1}^{n_j}$, přes které se integruje, dále E vnějších linií $\int d\sigma_l W^{(2)}(\tau_l, \sigma_l) F(\sigma_k)$ napojených na vlastní vrcholy (tím se míní, že $\tau_l \in \cup_{j=1}^n \{s_1^{(j)}, \dots, s_{n_j}^{(j)}\}$) a konečně I vnitřních linií $W^{(2)}(s_m, t_m)$ spojujících různé vlastní vrcholy, (tj. $s_m \in \{s_1^{(j)}, \dots, s_{n_j}^{(j)}\}$ a $t_m \in \{s_1^{(k)}, \dots, s_{n_k}^{(k)}\}$ kde $j \neq k$). Přitom všechna τ_l , s_m a t_m jsou navzájem různá. Takovéto příspěvky se sčítají přes všechna možná “propojení” a všechna možná E , I , $\{n_j\}_{j=1}^V$, pro něž jsou splněny relace

$$(E+1) + 2I = \sum_{j=1}^V n_j, \quad (229)$$

$$I - V + 1 = 0. \quad (230)$$

Zobrazíme-li každý takovýto příspěvek jako graf, sestrojený z výše popsaných vrcholů, vnitřních a vnějších linií, představuje relace (229) tvrzení, že z vrcholu odpovídajícímu n_j -bodové 1PI Greenově funkci vychází právě n_j linií (po jedné z každého “spojovacího bodu” $s_k^{(j)}$), zatímco relace (230) znamená, že takto sestrojený graf nemá žádnou smyčku - jedná se tedy o tzv. stromový graf. Do n -té iterace pak přispívají takové “stromy”, jejichž maximální “výška” (tj. maximální počet vrcholů, které lze projít při cestě od “kmene stromu” po vnitřních liniích dokud se nenarazí na vnější linii, přičemž každá vnitřní linie se projde nanejvýš jednou) je menší nebo rovna n .

Tyto iterace generují spolu se vztahem (222) hledané formule, vyjadřující souvislé Greenovy funkce pomocí 1PI funkcí. Ukažme na příkladu tříbodové a čtyřbodové souvislé Greenovy funkce, jak tyto formule pracují. Abychom tyto funkce získali, stačí najít řešení (224) do řádu⁴⁶ $\mathcal{O}(F^3)$. To snadno obdržíme z první a druhé⁴⁷ iterace. První iterace dává (viz (226))

$$x_{\text{cl}}^{(1)}(t) = \int ds W^{(2)}(t, s) F(s)$$

⁴⁶Připomeňme, že $x_{\text{cl}}(t) = \delta W[F]/\delta F(t)$.

⁴⁷Každá další iterace produkuje korekce, které jsou řádu $\mathcal{O}(F^4)$.

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \int dt_1 dt_2 dt_3 ds_2 ds_3 W^{(2)}(t, t_1) \Gamma^{(3)}(t_1, t_2, t_3) \\
& \quad \times W^{(2)}(t_2, s_2) F(s_2) W^{(2)}(t_3, s_3) F(s_3) \\
& + \frac{1}{3!} \int dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 ds_2 ds_3 ds_4 W^{(2)}(t, t_1) \Gamma^{(4)}(t_1, t_2, t_3, t_4) \\
& \quad \times W^{(2)}(t_2, s_2) F(s_2) W^{(2)}(t_3, s_3) F(s_3) W^{(2)}(t_4, s_4) F(s_4) \\
& + \mathcal{O}(F^4). \tag{231}
\end{aligned}$$

Dosadíme-li $x_{\text{cl}}^{(1)}$ do vztahu (227) a podržíme-li pouze členy do řádu $\mathcal{O}(F^3)$, dostaneme

$$\begin{aligned}
x_{\text{cl}}^{(2)}(t) = x_{\text{cl}}^{(1)}(t) & + 2 \frac{1}{2} \int dt_1 dt_2 dt_3 ds_2 W^{(2)}(t, t_1) \Gamma^{(3)}(t_1, t_2, t_3) W^{(2)}(t_2, s_2) F(s_2) \\
& \quad \times \frac{1}{2} \int d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 d\sigma_2 d\sigma_3 W^{(2)}(t_3, \tau_1) \Gamma^{(3)}(\tau_1, \tau_2, \tau_3) \\
& \quad \times W^{(2)}(\tau_2, \sigma_2) F(\sigma_2) W^{(2)}(\tau_3, \sigma_3) F(\sigma_3) \\
& + \mathcal{O}(F^4). \tag{232}
\end{aligned}$$

Odtud máme pro tříbodovou funkci

$$\begin{aligned}
\langle 0 | T \hat{x}(t_1) \hat{x}(t_2) \hat{x}(t_3) | 0 \rangle_c & = \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{\delta^3 W[F]}{\delta F(t_1) \delta F(t_2) \delta F(t_3)} \Big|_{F=0} = \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{\delta^2 x_{\text{cl}}(t_1)}{\delta F(t_2) \delta F(t_3)} \Big|_{F=0} \\
& = \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \int ds_1 ds_2 ds_3 \Gamma^{(3)}(s_1, s_2, s_3) W^{(2)}(t_1, s_1) W^{(2)}(t_2, s_2) W^{(2)}(t_3, s_3) \\
& = \frac{i}{\hbar} \int ds_1 ds_2 ds_3 \Gamma^{(3)}(s_1, s_2, s_3) \\
& \quad \times \langle 0 | T \hat{x}(t_1) \hat{x}(s_1) | 0 \rangle_c \langle 0 | T \hat{x}(t_2) \hat{x}(s_2) | 0 \rangle_c \langle 0 | T \hat{x}(t_3) \hat{x}(s_3) | 0 \rangle_c. \tag{233}
\end{aligned}$$

Podobně pro čtyřbodovou funkci

$$\begin{aligned}
\langle 0 | T \hat{x}(t_1) \hat{x}(t_2) \hat{x}(t_3) \hat{x}(t_4) | 0 \rangle_c & = \left(\frac{\hbar}{i} \right)^3 \frac{\delta^4 W[F]}{\delta F(t_1) \delta F(t_2) \delta F(t_3) \delta F(t_4)} \Big|_{F=0} \\
& = \left(\frac{\hbar}{i} \right)^3 \frac{\delta^3 x_{\text{cl}}(t_1)}{\delta F(t_2) \delta F(t_3)} \Big|_{F=0} \\
& = \int ds_1 ds_2 ds_3 ds_4 \Gamma^{(4)}(s_1, s_2, s_3, s_4) W^{(2)}(t_1, s_1) W^{(2)}(t_2, s_2) W^{(2)}(t_3, s_3) W^{(2)}(t_4, s_4) \\
& + \int ds_1 ds_2 ds_3 ds_4 d\tau d\sigma \Gamma^{(3)}(s_1, s_2, \tau) W^{(2)}(\tau, \sigma) \Gamma^{(3)}(\sigma, s_3, s_4) \\
& \times \left(W^{(2)}(t_1, s_1) W^{(2)}(t_2, s_2) W^{(2)}(t_3, s_3) W^{(2)}(t_4, s_4) \right. \\
& \quad + W^{(2)}(t_1, s_1) W^{(2)}(t_3, s_2) W^{(2)}(t_2, s_3) W^{(2)}(t_4, s_4) \\
& \quad \left. + W^{(2)}(t_1, s_1) W^{(2)}(t_4, s_2) W^{(2)}(t_3, s_3) W^{(2)}(t_2, s_4) \right) \\
& = \frac{i}{\hbar} \int ds_1 ds_2 ds_3 ds_4 \Gamma^{(4)}(s_1, s_2, s_3, s_4) \\
& \quad \times \langle 0 | T \hat{x}(t_1) \hat{x}(s_1) | 0 \rangle_c \langle 0 | T \hat{x}(t_2) \hat{x}(s_2) | 0 \rangle_c \langle 0 | T \hat{x}(t_3) \hat{x}(s_3) | 0 \rangle_c \langle 0 | T \hat{x}(t_4) \hat{x}(s_4) | 0 \rangle_c \\
& + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int ds_1 ds_2 ds_3 ds_4 d\tau d\sigma \Gamma^{(3)}(s_1, s_2, \tau) \langle 0 | T \hat{x}(\tau) \hat{x}(\sigma) | 0 \rangle_c \Gamma^{(3)}(\sigma, s_3, s_4)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times (\langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(s_1)|0\rangle_c \langle 0|T\hat{x}(t_2)\hat{x}(s_2)|0\rangle_c \langle 0|T\hat{x}(t_3)\hat{x}(s_3)|0\rangle_c \langle 0|T\hat{x}(t_4)\hat{x}(s_4)|0\rangle_c \\
& + \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(s_1)|0\rangle_c \langle 0|T\hat{x}(t_3)\hat{x}(s_2)|0\rangle_c \langle 0|T\hat{x}(t_2)\hat{x}(s_3)|0\rangle_c \langle 0|T\hat{x}(t_4)\hat{x}(s_4)|0\rangle_c \\
& + \langle 0|T\hat{x}(t_1)\hat{x}(s_1)|0\rangle_c \langle 0|T\hat{x}(t_4)\hat{x}(s_2)|0\rangle_c \langle 0|T\hat{x}(t_3)\hat{x}(s_3)|0\rangle_c \langle 0|T\hat{x}(t_2)\hat{x}(s_4)|0\rangle_c).
\end{aligned} \tag{234}$$

Jak je vidět v těchto speciálních případech, souvislé Greenovy funkce se konstruují z 1PI funkcí tak, že se započítají příspěvky všech možných stromových grafů, sestavených z vrcholů odpovídajících $\Gamma^{(n)}$ a linií $W^{(2)}$ (resp. z vrcholů $(i/\hbar)\Gamma^{(n)}$ a linií $\langle 0|T\hat{x}(t)\hat{x}(s)|0\rangle_c$) takových, že vnějším liniím jsou všemi možnými (topologicky neekvivalentními) způsoby připsány časové argumenty konstruované souvislé Greenovy funkce.

Pomocí předchozích výrazů pro Greenovy funkce lze získat vytvářející funkcionál $W[F]$ do čtvrtého řádu v F . Ukažme ještě jednu možnost, jak lze tento vytvářející funkcionál zrekonstruovat přímo pomocí x_{cl} , aniž bychom museli počítat funkcionální derivace. Lze postupovat dvěma způsoby. Jednak lze přímočaře dosadit (232) do (222), to však nepředstavuje nikterak výrazné ušetření práce. Druhá elegantnější možnost je integrovat s danou přesností funkcionální diferenciální rovnici⁴⁸

$$\frac{\delta W[F]}{\delta F(t)} = x_{\text{cl}}[F](t). \tag{235}$$

Ta je funkcionální analogií parciální diferenciální rovnice

$$\nabla_{\mathbf{f}} w(\mathbf{f}) = \mathbf{X}(\mathbf{f}), \tag{236}$$

která má řešení tehdy, jsou-li splněny podmínky integrability

$$\frac{\partial X^i}{\partial f^j} = \frac{\partial X^j}{\partial f^i}, \tag{237}$$

vyjadřující komutativitu parciálních derivací. Řešení rovnice (236) lze pak vyjádřit ve tvaru

$$w(\mathbf{f}) = w(\mathbf{f}_0) + \int_{C(\mathbf{f}, \mathbf{f}_0)} d\mathbf{f} \cdot \mathbf{X}(\mathbf{f}) = w(\mathbf{f}_0) + \int_0^1 dt \frac{d\mathbf{f}(t)}{dt} \cdot \mathbf{X}(\mathbf{f}(t)) \tag{238}$$

kde $C(\mathbf{f}, \mathbf{f}_0)$ je libovolná křivka s parametrizací $\mathbf{f}(t)$, pro niž $\mathbf{f}(0) = \mathbf{f}_0$ a $\mathbf{f}(1) = \mathbf{f}$.

Není obtížné se přesvědčit, že aproximace (232) pravé strany rovnice (235) splňuje (v důsledku symetrie 1PI Greenových funkcí vzhledem k záměně libovolných dvou časových argumentů) následující analog podmínky integrability (237)

$$\frac{\delta x_{\text{cl}}^{(2)}[F](t)}{\delta F(s)} = \frac{\delta x_{\text{cl}}^{(2)}[F](s)}{\delta F(t)}. \tag{239}$$

V analogii s (238) lze pak psát

$$W[F] = \int_0^1 d\tau \int dt \frac{dF_\tau(t)}{d\tau} x_{\text{cl}}^{(2)}[F_\tau](t) + \mathcal{O}(F^5), \tag{240}$$

⁴⁸Zde jsme explicitě vyznačili funkcionální závislost $x_{\text{cl}}(t)$ na F .

kde $F_\tau(t)$ je libovolná (hladká jako funkce τ) jednoparametrická množina (křivka v prostoru vnějších zdrojů F), taková, že $F_0 = 0$ a $F_1 = F$. Vhodnou volbou je např. $F_\tau(t) = \tau F(t)$, máme tak

$$W[F] = \int_0^1 d\tau \int dt F(t) x_{\text{cl}}^{(2)}[\tau F](t) + \mathcal{O}(F^5). \quad (241)$$

Po dosazení za $x_{\text{cl}}^{(2)}[\tau F](t)$ z (232) dostaneme konečně

$$\begin{aligned} W[F] &= \frac{1}{2} \int dt_1 dt_2 F(t_1) W^{(2)}(t_1, t_2) F(t_2) \\ &+ \frac{1}{3!} \int dt_1 dt_2 dt_3 ds_1 ds_2 ds_3 \\ &\quad \times \Gamma^{(3)}(t_1, t_2, t_3) W^{(2)}(t_1, s_1) W^{(2)}(t_2, s_2) W^{(2)}(t_3, s_3) F(s_1) F(s_2) F(s_3) \\ &+ \frac{1}{4!} \int dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 ds_1 ds_2 ds_3 ds_4 \Gamma^{(4)}(t_1, t_2, t_3, t_4) \\ &\quad \times W^{(2)}(t_1, s_1) W^{(2)}(t_2, s_2) W^{(2)}(t_3, s_3) W^{(2)}(t_4, s_4) F(s_1) F(s_2) F(s_3) F(s_4) \\ &+ \frac{1}{8} \int dt_1 dt_2 dt_3 ds_1 ds_2 d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 d\sigma_2 d\sigma_3 \\ &\quad \times W^{(2)}(t_1, s_1) F(s_1) W^{(2)}(t_2, s_2) F(s_2) \\ &\quad \times \Gamma^{(3)}(t_1, t_2, t_3) W^{(2)}(t_3, \tau_1) \Gamma^{(3)}(\tau_1, \tau_2, \tau_3) \\ &\quad \times W^{(2)}(\tau_2, \sigma_2) F(\sigma_2) W^{(2)}(\tau_3, \sigma_3) F(\sigma_3) \\ &+ \mathcal{O}(F^5). \end{aligned} \quad (242)$$

1.10 Fyzikální význam efektivní akce, adiabatická aproximace

V této podkapitole ukážeme, jak lze fyzikálně interpretovat vytvářející funkcionály, zavedené v předchozí podkapitole, za předpokladu, že vnější zdroj je pomalu se měnící funkcí času⁴⁹. Začneme jednoduchým příkladem, který se ukáže být užitečným v dalším. Jak známo, energii E_0 základního stavu $|0\rangle$ (dále budeme předpokládat, že základní stav je nedegenerovaným diskretním bodem spektra hamiltoniánu H) lze získat Ritzovou variační metodou - tj. minimalizací funkcionálu $\langle \phi | H | \phi \rangle$ na množině normovaných stavů $\langle \phi | \phi \rangle = 1$,

$$E_0 = \inf_{\langle \phi | \phi \rangle = 1} \langle \phi | H | \phi \rangle. \quad (243)$$

Minimalizační proceduru lze provádět ve dvou krocích. Nejprve minimalizujeme na množině normovaných stavů, splňujících dodatečnou podmínku

$$\langle \phi | \hat{\mathbf{x}} | \phi \rangle = \bar{\mathbf{x}}. \quad (244)$$

Tím dostaneme funkci $\mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}})$

$$\mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}}) = \inf_{\langle \phi | \phi \rangle = 1, \langle \phi | \hat{\mathbf{x}} | \phi \rangle = \bar{\mathbf{x}}} \langle \phi | H | \phi \rangle = \langle \phi(\bar{\mathbf{x}}) | H | \phi(\bar{\mathbf{x}}) \rangle \quad (245)$$

přičemž předpokládejme, že infimum se nabývá ve stavu $|\phi(\bar{\mathbf{x}})\rangle$. Ve druhém kroku potom minimalizujeme vzhledem k $\bar{\mathbf{x}}$,

$$E_0 = \inf_{\bar{\mathbf{x}}} \mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}}). \quad (246)$$

⁴⁹Míra "pomalé změny" vnějšího zdroje bude specifikována později.

Formálně nutnou podmínkou pro minimum funkce $\mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}})$ je anulování prvních parciálních derivací

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}}) = 0. \quad (247)$$

Bod $\bar{\mathbf{x}}_{\min}$, ve kterém nabývá funkce $\mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}})$ svého minima, je identický s vakuovou střední hodnotou operátoru $\hat{\mathbf{x}}$:

$$\bar{\mathbf{x}}_{\min} = \langle 0 | \hat{\mathbf{x}} | 0 \rangle, \quad (248)$$

kde $|0\rangle$ je základní stav hamiltoniánu H . V tomto smyslu lze funkci $\mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}})$ chápat jako kvantové zobecnění klasického potenciálu $V(\mathbf{x})$, jehož minima určují klasické statické konfigurace systému.

Minimalizaci s vedlejší podmínkou (244) lze provést metodou Lagrangeových multiplikátorů. Místo funkcionálu $\langle \phi | H | \phi \rangle$ s podmínkou (244) se minimalizuje funkcionál

$$E_0(\bar{\mathbf{x}}, \mathbf{F}) = \langle \phi | (H - \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}}) | \phi \rangle + \mathbf{F} \cdot \bar{\mathbf{x}} \quad (249)$$

bez vazby (244), který je však parametricky závislý na multiplikátoru \mathbf{F} a střední hodnotě $\bar{\mathbf{x}}$. Protože poslední člen na pravé straně (249) nezávisí na $|\phi\rangle$, stačí uvažovat na $\bar{\mathbf{x}}$ nezávislý funkcionál $\langle \phi | (H - \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}}) | \phi \rangle$. Označme

$$E_0(\mathbf{F}) = \inf_{\langle \phi | \phi \rangle = 1} \langle \phi | (H - \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}}) | \phi \rangle = \langle E_0(\mathbf{F}) | (H - \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}}) | E_0(\mathbf{F}) \rangle. \quad (250)$$

Tedy $E_0(\mathbf{F})$ je energie základního stavu $|E_0(\mathbf{F})\rangle$ systému s hamiltoniánem $H - \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}}$. Přitom stav $|E_0(\mathbf{F})\rangle$ realizující minimum funkcionálu s vedlejší podmínkou je určen hodnotou Lagrangeova multiplikátoru, který splňuje vztah

$$\bar{x}^i = \langle E_0(\mathbf{F}) | \hat{x}^i | E_0(\mathbf{F}) \rangle = \langle E_0(\mathbf{F}) | \left(-\frac{\partial}{\partial F^i} (H - \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \right) | E_0(\mathbf{F}) \rangle = -\frac{\partial}{\partial F^i} E_0(\mathbf{F}). \quad (251)$$

Funkce $\mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}})$ je tedy Legendreovou transformací funkce $E_0(\mathbf{F})$

$$\mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}}) = E_0(\mathbf{F}) + \mathbf{F} \cdot \bar{\mathbf{x}}. \quad (252)$$

Platí tudíž také

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}}) = F^i. \quad (253)$$

Ukažme nyní, jak funkce $E_0(\mathbf{F})$ a $\mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}})$ souvisí s vytvořujícím funkcionálem $W[\mathbf{F}]$ a efektivní akcí $\Gamma[\mathbf{x}_{cl}]$. Uvažujme pomalu se měnící vnější zdroj $\mathbf{F}(t)$, splňující

$$\text{supp} \mathbf{F}(t) \subset (t_i, t_f), \quad (254)$$

t.j. $\mathbf{F}(t_i) = \mathbf{F}(t_f) = 0$. Pro vytvořující funkcionál Greenových funkcí máme

$$\begin{aligned} Z[\mathbf{F}] &= \exp \left(\frac{i}{\hbar} W[\mathbf{F}] \right) = \langle 0 | T \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \mathbf{F}(t) \cdot \hat{\mathbf{x}}(t) \right) | 0 \rangle \\ &= \exp \left(\frac{i}{\hbar} E_0(t_f - t_i) \right) \langle 0 | U[\mathbf{F}](t_f, t_i) | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (255)$$

Stavový vektor $U[\mathbf{F}](t, t_i) | 0 \rangle$ je řešením Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} U[\mathbf{F}](t, t_i) | 0 \rangle = (H - \mathbf{F}(t) \cdot \hat{\mathbf{x}}) U[\mathbf{F}](t, t_i) | 0 \rangle. \quad (256)$$

Hledejme její řešení ve tvaru

$$U[\mathbf{F}](t, t_i)|0\rangle = \sum_n a_n(t)|E_n(\mathbf{F}(t))\rangle, \quad a_n(t_i) = \delta_{n0}, \quad (257)$$

kde stavy $|E_n(\mathbf{F})\rangle$ jsou normovanými⁵⁰ vlastními stavy hamiltoniánu $H - \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}}$

$$(H - \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}})|E_n(\mathbf{F})\rangle = E_n(\mathbf{F})|E_n(\mathbf{F})\rangle, \quad \langle E_n(\mathbf{F})|E_m(\mathbf{F})\rangle = \delta_{nm}. \quad (258)$$

Protože $\mathbf{F}(t_i) = \mathbf{F}(t_f) = 0$, je $|0\rangle = |E_n(\mathbf{0})\rangle$ a platí tedy

$$Z[\mathbf{F}] = \exp\left(\frac{i}{\hbar}E_0(t_f - t_i)\right) a_0(t_f) \quad (259)$$

Pro koeficienty $a_n(t)$ dostaneme nekonečnou soustavu obyčejných lineárních diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt}a_n(t) &= E_n(\mathbf{F}(t))a_n(t) - \sum_m a_m(t)\langle E_n(\mathbf{F}(t))|i\hbar \frac{d}{dt}|E_m(\mathbf{F}(t))\rangle \\ &= a_n(t)(E_n(\mathbf{F}(t)) - \langle E_n(\mathbf{F}(t))|i\hbar \frac{d}{dt}|E_n(\mathbf{F}(t))\rangle) \\ &\quad - \sum_{m \neq n} a_m(t)\langle E_n(\mathbf{F}(t))|i\hbar \frac{d}{dt}|E_m(\mathbf{F}(t))\rangle, \end{aligned} \quad (260)$$

kde jsme explicitě vydělili diagonální část matice $\langle E_n(\mathbf{F}(t))|i\hbar \frac{d}{dt}|E_m(\mathbf{F}(t))\rangle$. Řešení (260) lze zapsat ve tvaru

$$a_n(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t d\tau (E_n(\mathbf{F}(\tau)) - \langle E_n(\mathbf{F}(\tau))|i\hbar \frac{d}{d\tau}|E_n(\mathbf{F}(\tau))\rangle)\right) A_n(t), \quad (261)$$

kde $A_n(t)$ řeší rovnici

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt}A_n(t) &= - \sum_{m \neq n} \langle E_n(\mathbf{F}(t))|i\hbar \frac{d}{dt}|E_m(\mathbf{F}(t))\rangle A_m(t) \\ &= - \sum_{m \neq n} \left(\frac{d}{dt}\mathbf{F}(t)\right) \cdot \langle E_n(\mathbf{F}(t))|i\hbar \nabla_{\mathbf{F}}|E_m(\mathbf{F}(t))\rangle A_m(t) \end{aligned} \quad (262)$$

s počáteční podmínkou

$$A_n(t_i) = \delta_{0n}. \quad (263)$$

Formální řešení poslední rovnice lze zapsat ve tvaru časově, resp. dráhově uspořádané exponenciály (trajektorie $\mathbf{F}(t)$ v prostoru oboru hodnot vnějšího zdroje je uzavřená, neboť $\mathbf{F}(t_i) = \mathbf{F}(t_f) = 0$)

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(t_f) &= T \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} d\tau \mathbf{M}(\mathbf{F}(\tau)) \cdot \frac{d}{d\tau}\mathbf{F}(\tau)\right) \mathbf{A}(t_i) \\ &= P \exp\left(\frac{i}{\hbar} \oint_{\mathbf{F}(\tau)} d\mathbf{F} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{F})\right) \mathbf{A}(t_i), \end{aligned} \quad (264)$$

⁵⁰Pro jednoduchost předpokládáme spektrum hamiltoniánu $H - \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}}$ diskrétní. Následující úvahy však zůstávají v platnosti i pro případ spojitého spektra, pokud základní stav je nedegenerovaným diskrétním bodem spektra, oddělený energetickou mezerou od excitovaných stavů.

kde nekonečná matice $\mathbf{M}(\mathbf{F})$ má maticové elementy

$$\mathbf{M}_{nm}(\mathbf{F}) = i\hbar \langle E_n(\mathbf{F}) | \nabla_{\mathbf{F}} | E_m(\mathbf{F}) \rangle - i\hbar \delta_{mn} \langle E_n(\mathbf{F}) | \nabla_{\mathbf{F}} | E_n(\mathbf{F}) \rangle \quad (265)$$

$$= i\hbar \frac{\langle E_n(\mathbf{F}) | \hat{\mathbf{x}} | E_m(\mathbf{F}) \rangle - \delta_{mn} \langle E_n(\mathbf{F}) | \hat{\mathbf{x}} | E_n(\mathbf{F}) \rangle}{E_n(\mathbf{F}) - E_m(\mathbf{F})}. \quad (266)$$

Poslední rovnost je důsledkem relací (258). Pro koeficient $A_0(t)$ tak dostáváme jako důsledek počáteční podmínky (263)

$$\begin{aligned} A_0(t_f) &= T \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} d\tau \mathbf{M}(\mathbf{F}(\tau)) \cdot \frac{d}{d\tau} \mathbf{F}(\tau) \right)_{00} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_i}^{t_f} dt_1 \dots dt_n T(M^{i_1}(t_1) \dots M^{i_n}(t_n))_{00} \frac{dF^{i_1}(t_1)}{dt_1} \dots \frac{dF^{i_n}(t_n)}{dt_n}. \end{aligned} \quad (267)$$

Je tedy $A_0(t_f) = 1 + \mathcal{O}((d\mathbf{F}/dt)^2)$ neboť $\mathbf{M}_{00} = 0$. Pro vytvořující funkcionál $Z[\mathbf{F}]$ Greenových funkcí tak máme

$$Z[\mathbf{F}] = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} d\tau (E_0(\mathbf{F}(\tau)) - E_0) - \int_{t_i}^{t_f} d\tau \frac{d\mathbf{F}(\tau)}{d\tau} \cdot \langle E_0(\mathbf{F}(\tau)) | \nabla_{\mathbf{F}} | E_0(\mathbf{F}(\tau)) \rangle \right) A_0(t_f) \quad (268)$$

a vytvořující funkcionál $W[\mathbf{F}]$ souvislých Greenových funkcí je tedy díky (267) dán ve tvaru řady v mocninách časové derivace vnějšího zdroje $d\mathbf{F}(t)/dt$

$$W[\mathbf{F}] = - \int_{t_i}^{t_f} d\tau (E_0(\mathbf{F}(\tau)) - E_0) + i\hbar \int_{t_i}^{t_f} d\tau \frac{d\mathbf{F}(\tau)}{d\tau} \cdot \langle E_0(\mathbf{F}(\tau)) | \nabla_{\mathbf{F}} | E_0(\mathbf{F}(\tau)) \rangle - i\hbar \ln A_0(t_f) \quad (269)$$

Pokud se vnější zdroj pomalu mění s časem (t.j. jsou-li jeho časové derivace malé), je přirozené podržet pouze konečný počet členů tohoto rozvoje. Ponecháme-li pouze první dva členy (tj. položíme-li $A_0(t_f) = 1$), jedná se o tzv. adiabatickou aproximaci. Ta je dobrou aproximací tehdy, lze-li v rovnici (260) pro $n = 0$ zanedbat příspěvek nediagonálních členů, tedy platí-li

$$\left| \frac{\mathbf{M}_{0m}(\mathbf{F}) \cdot \dot{\mathbf{F}}(t)}{E_0(\mathbf{F})} \right| < 1. \quad (270)$$

Odhadneme-li $|\dot{\mathbf{F}}(t)| \approx |\bar{\omega} \mathbf{F}(t)|$, kde $\bar{\omega}$ je charakteristická frekvence Fourierova spektra vnějšího zdroje $\mathbf{F}(t)$ a použijeme-li (266), lze tuto podmínku přepsat do tvaru

$$\left| \frac{\hbar \bar{\omega}}{E_m(\mathbf{F}) - E_0(\mathbf{F})} \frac{\langle E_m(\mathbf{F}) | \hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F} | E_0(\mathbf{F}) \rangle}{E_0(\mathbf{F})} \right| < \left| \frac{\hbar \bar{\omega}}{\Delta E(\mathbf{F})} \frac{\langle E_m(\mathbf{F}) | \hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F} | E_0(\mathbf{F}) \rangle}{E_0(\mathbf{F})} \right| < 1, \quad (271)$$

kde $\Delta E(\mathbf{F})$ je energetická mezera mezi základním a prvním excitovaným stavem. Tedy adiabatická aproximace je přípustná, je-li charakteristická frekvence $\bar{\omega}$ malá ve srovnání s frekvencí odpovídající energetické mezeře a nejsou-li velké maticové elementy “poruchy” $\mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}}$ ve srovnání s energií základního stavu (nebo je-li malá amplituda pravděpodobnosti přechodu ze základního stavu do vyšších excitovaných stavů pod vlivem vnějšího zdroje).

Časový vývoj základního stavu $|0\rangle$ v adiabatické aproximaci je pak dán až na fázi

$$e^{i\hat{\mathbf{k}}\phi(t)} = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \left(\int_{t_i}^t d\tau E_0(\mathbf{F}(\tau)) - \int_{t_i}^t d\tau \mathcal{A}_0(\mathbf{F}(\tau)) \cdot \dot{\mathbf{F}}(\tau) \right) \right)$$

(zde jsme označili $\mathcal{A}_0(\mathbf{F}) = i\hbar\langle E_0(\mathbf{F})|\nabla_{\mathbf{F}}|E_0(\mathbf{F})\rangle$) základními stavy $|E_0(\mathbf{F}(t))\rangle$ časově závislého hamiltoniánu $H - \mathbf{F}(t) \cdot \hat{\mathbf{x}}$; t.j.

$$U[\mathbf{F}](t, t_i)|0\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\phi(t)}|E_0(\mathbf{F}(t))\rangle \quad (272)$$

Fáze $\phi(t)$ se skládá ze dvou členů. První z nich,

$$\phi_D(t) = - \int_{t_i}^t d\tau E_0(\mathbf{F}(\tau)) \quad (273)$$

je tzv. dynamická fáze. Druhý člen

$$\phi_B(t) = \int_{t_i}^t d\tau \mathcal{A}_0(\mathbf{F}(\tau)) \cdot \dot{\mathbf{F}}(\tau) \quad (274)$$

se nazývá adiabatická (Berryho) fáze. V adiabatické aproximaci tedy máme

$$W[\mathbf{F}] = E_0(t_f - t_i) + \phi_D(t_f) + \phi_B(t_f). \quad (275)$$

Všimněme si nejprve vlastností příspěvku Berryho fáze. Ten lze zapsat ve tvaru křivkového integrálu po uzavřené⁵¹ křivce $\mathbf{F}(\tau)$

$$\phi_B(t_f) = \oint_{\mathbf{F}(\tau)} d\mathbf{F} \cdot \mathcal{A}_0(\mathbf{F}), \quad (276)$$

a tedy vymizí v jednodimenzionálním případě a obecně tehdy, platí-li

$$\mathcal{A}_0(\mathbf{F}) = \nabla_{\mathbf{F}}\Lambda(\mathbf{F}), \quad (277)$$

kde $\Lambda(\mathbf{F})$ je vhodná funkce⁵², resp. jsou-li splněny podmínky integrability

$$\mathcal{F}_{ij}(\mathbf{F}) := \frac{\partial}{\partial F^i(t)} \mathcal{A}_0^j(\mathbf{F}) - \frac{\partial}{\partial F^j(t)} \mathcal{A}_0^i(\mathbf{F}) = 0. \quad (278)$$

Všimněme si, že tato podmínka je totožná s podmínkou anulování “tenzoru napětí” $\mathcal{F}_{ij}(\mathbf{F})$ sestrojeného pomocí “vektorového potenciálu” $\mathcal{A}_0^i(\mathbf{F})$. Tato analogie vede ještě dále. Předpokládejme, že jsme místo základních stavů $|E_0(\mathbf{F})\rangle$, které jsou určeny jednoznačně až na fázi, zvolili jiné základní stavy, dané formulí

$$|E_0(\mathbf{F})\rangle^{(\lambda)} = e^{i\lambda(\mathbf{F})}|E_0(\mathbf{F})\rangle, \quad (279)$$

kde $\lambda(\mathbf{F})$ je hladká funkce. Přitom dostaneme

$$\mathcal{A}_0(\mathbf{F})^{(\lambda)} = i\hbar^{(\lambda)}\langle E_0(\mathbf{F})|\nabla_{\mathbf{F}}|E_0(\mathbf{F})\rangle^{(\lambda)} = \mathcal{A}_0(\mathbf{F}) - \hbar\nabla_{\mathbf{F}}\lambda(\mathbf{F}), \quad (280)$$

tedy “vektorový potenciál” se transformuje pomocí kalibrační transformace. Berryho fáze je tedy nazávislá na výběru základních stavů $|E_0(\mathbf{F})\rangle$. Všimněme si také, že se nemění “tenzor napětí”, který je kalibračním invariantem, odtud opět plyne, že transformací typu (279) nelze odstranit Berryho fázi (t.j. splnit podmínku integrability (278), pokud byla její pravá strana nenulová při původním výběru základních stavů). Stejně tak i fyzikální veličiny, odvozené

⁵¹Připomeňme, že $\mathbf{F}(t_i) = \mathbf{F}(t_f) = 0$.

⁵²Tedy je-li diferenciální forma $d\mathbf{F} \cdot \mathcal{A}_0(\mathbf{F})$ exaktní.

od vytvářejícího funkcionálu v adiabatické aproximaci, závisí pouze na kalibračně invariantní kombinaci $\mathcal{F}_{ij}(\mathbf{F})$. Příkladem takové veličiny je $\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)$:

$$\begin{aligned} x_{\text{cl}}^i(t) &= \frac{\delta W[\mathbf{F}]}{\delta F^i(t)} \\ &= -\frac{\partial}{\partial F^i(t)} E_0(\mathbf{F}(t)) + \dot{F}^j(t) \frac{\partial}{\partial F^i(t)} \mathcal{A}_0^j(\mathbf{F}(t)) - \frac{d}{dt} \mathcal{A}_0^i(\mathbf{F}(t)) \\ &= -\frac{\partial}{\partial F^i(t)} E_0(\mathbf{F}(t)) + \mathcal{F}_{ij}(\mathbf{F}(t)) \dot{F}^j(t). \end{aligned} \quad (281)$$

Soustředíme se nyní na příspěvek zbývajících členů na první straně rovnosti (275). Je-li Berryho fáze rovná nule (t.j. je-li $\mathcal{F}_{ij}(\mathbf{F}) = 0$) nebo lze-li ji zanedbat (např. je-li $\mathbf{F}(t)$ “skoro konstanta”)⁵³ máme pro veličinu $\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)$ (srov. (251))

$$x_{\text{cl}}^i(t) = -\frac{\partial}{\partial F^i(t)} E_0(\mathbf{F}(t)) = \langle E_0(\mathbf{F}(t)) | \hat{x}_i | E_0(\mathbf{F}(t)) \rangle, \quad (282)$$

$\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)$ je tedy v této aproximaci rovna střední hodnotě operátoru souřadnice v základním stavu hamiltoniánu $H - \mathbf{F}(t) \cdot \hat{\mathbf{x}}$ a efektivní akce je (srov. (252))

$$\begin{aligned} \Gamma[\mathbf{x}_{\text{cl}}] &= E_0(t_f - t_i) - \int_{t_i}^{t_f} d\tau \left(E_0(\mathbf{F}(\tau)) - F^i(\tau) \frac{\partial}{\partial F^i(t)} E_0(\mathbf{F}(t)) \right) \\ &= E_0(t_f - t_i) - \int_{t_i}^{t_f} d\tau \mathcal{E}_0(\mathbf{x}_{\text{cl}}(\tau)), \end{aligned} \quad (283)$$

kde $\mathcal{E}_0(\mathbf{x}_{\text{cl}})$ je Legendrova transformace funkce $E_0(\mathbf{F})$. Speciálně je-li $\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}$ konstantní, je i $\mathbf{x}_{\text{cl}}(t) = \mathbf{x}_{\text{cl}}$ konstantní a efektivní akce je

$$\Gamma[\mathbf{x}_{\text{cl}}] = -(t_f - t_i) \mathcal{V}(\mathbf{x}_{\text{cl}}), \quad (284)$$

⁵³Je-li Berryho fáze nenulová, máme

$$-\frac{\partial}{\partial F^i(t)} E_0(\mathbf{F}(t)) = x_{\text{cl}}^i(t) + \mathcal{F}_{ij}(\mathbf{F}(t)) \dot{F}^j(t) := \bar{x}^i(t)$$

a pro Legendrovu transformaci $\mathcal{E}_0(\mathbf{x}) = E_0(\mathbf{F}) + \mathbf{x} \cdot \mathbf{F}$ platí

$$\frac{\partial}{\partial x^i(t)} \mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}}) = \frac{\partial}{\partial x^i(t)} \mathcal{E}_0(x_{\text{cl}}^i(t) + \mathcal{F}_{ij}(\mathbf{F}(t)) \dot{F}^j(t)) = F^i(t).$$

Máme tedy

$$\frac{\partial}{\partial x^i(t)} \mathcal{E}_0(x_{\text{cl}}^i(t)) = F^i(t) + \mathcal{O}(\dot{\mathbf{F}})$$

a v důsledku toho, s přesností $\mathcal{O}(\dot{\mathbf{F}})$,

$$\begin{aligned} \Gamma[\mathbf{x}_{\text{cl}}] &= E_0(t_f - t_i) - \int_{t_i}^{t_f} d\tau \left(E_0(\mathbf{F}(\tau)) - F^i(\tau) \frac{\partial}{\partial F^i(t)} E_0(\mathbf{F}(t)) - F^i \mathcal{F}_{ij} \dot{F}^j - \mathcal{A}_0 \cdot \dot{\mathbf{F}} \right) \\ &= E_0(t_f - t_i) - \int_{t_i}^{t_f} d\tau (\mathcal{E}_0(\bar{\mathbf{x}}) - F^i \mathcal{F}_{ij} \dot{F}^j - \mathcal{A}_0 \cdot \dot{\mathbf{F}}) \\ &= E_0(t_f - t_i) - \int_{t_i}^{t_f} d\tau (\mathcal{E}_0(\mathbf{x}_{\text{cl}}) - \mathcal{A}_0 \cdot \dot{\mathbf{F}}). \end{aligned}$$

V posledním členu lze dosadit $F^i(t) = \partial \mathcal{E}_0(\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)) / \partial x_{\text{cl}}^i(t)$, dopustíme se tak chyby řádu $\mathcal{O}(\dot{\mathbf{F}}^2)$.

kde funkce $\mathcal{V}(\mathbf{x}_{cl})$ se nazývá efektivní potenciál. Z předchozí formule je tedy zřejmé, že efektivní potenciál je až na aditivní konstantu identický s funkcí $\mathcal{E}_0(\mathbf{x}_{cl})$, zavedenou na počátku této podkapitoly, t.j. představuje energii “testovacích základních stavů” $|\phi(\mathbf{x}_{cl})\rangle$ s fixovanou střední hodnotou $\mathbf{x}_{cl} = \langle \phi(\mathbf{x}_{cl}) | \hat{\mathbf{x}} | \phi(\mathbf{x}_{cl}) \rangle$.

1.11 Wickova rotace a kvantová teorie při konečné teplotě

Vraťme se nyní k obecné formuli (176)⁵⁴. Jak jsme viděli v předchozím příkladu, tato formule předpokládá, že evoluční operátor, (stejně jako Heisenbergovu reprezentaci operátoru souřadnice) má smysl definovat pro libovolné komplexní t pomocí analytického prodloužení. Předpokládáme-li, že totéž prodloužení má smysl i pro klasickou trajektorii $x(t)$ a klasický zdroj $F(t)$, potom analytické prodloužení dráhového integrálu pro $T_{f,i} \rightarrow \mp i T_{f,i}$ lze chápat jako dráhový integrál s akcí v exponenciále, která je dána křivkovým integrálem v rovině komplexního času⁵⁵ t

$$S_C[F(t)] = \int_C dt (L(x(t), \dot{x}(t)) + E_0 + x(t)F(t)). \quad (285)$$

Křivka C se skládá ze tří úseček spojujících po řadě body iT_i, t_i , dále t_i, t_f a nakonec $t_f, -iT_f$. Tato “zalomená” cesta není z hlediska dalších aplikací příliš vhodná. Zmíňme se o metodě jejího “napřímění”, známé jako Wickova rotace. Tato metoda spočívá v analytickém prodloužení $t_{i,f} \rightarrow -i\tau_{i,f}$, křivka C pak přejde celá na část imaginární osy. Akce $S_C[F(t)]$ pak odpovídá tzv. euklidovské akci (srov. (40))

$$S_C[F(t)] \rightarrow iS_E[F(t)] = -i \int_{T_i}^{T_f} d\tau (L(x_E(\tau), i\dot{x}_E(\tau)) + E_0 + F(\tau)x_E(\tau)), \quad (286)$$

kde $x_E(\tau) = x(-i\tau)$. Výsledný euklidovský vytvořující funkcionál $Z_E[F(\tau)](\tau_f, \tau_i)$, pro který máme následující reprezentaci dráhovým integrálem

$$Z_E[F(\tau)](\tau_f, \tau_i) \Omega(x_f) \Omega^*(x_i) = \lim_{T_{f,i} \rightarrow \pm\infty} \int_{x_E(T_i)=x_i}^{x_E(T_f)=x_f} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp(-S_E[F(\tau)]/\hbar), \quad (287)$$

generuje τ -uspořádané součiny operátorů $\hat{x}_E(\tau) = \exp(H_0\tau/\hbar) \hat{x} \exp(-H_0\tau/\hbar)$, t.j. heisenbergovských operátorů v imaginárním čase $t = -i\tau$. T-součiny se pak obdrží zpětným analytickým prodloužením výsledku pro $\tau \rightarrow it$. Ukažme, jak lze toto analytické prodloužení heuristicky pochopit.

Všimněme si, že k vydělení příspěvku základního stavu z formule (173) stačí limita $T_{i,f} \rightarrow \mp e^{-i\delta}\infty$, $\delta \in (0, \pi/2)$. Prodloužíme-li ještě analyticky $t_{i,f} \rightarrow e^{-i\delta}\tau_{i,f}$, přejde křivka C do pootočené reálné osy. Označíme-li $x_\delta(\tau) = x(e^{-i\delta}\tau)$, máme pro křivkovou akci $S_C[F(t)]$

$$S_C[F(t)] \rightarrow e^{i\delta} S_\delta[F(t)] = e^{-i\delta} \int_{T_i}^{T_f} d\tau (L(x_\delta(\tau), e^{i\delta}\dot{x}_\delta(\tau)) + E_0 + F(\tau)x_\delta(\tau)). \quad (288)$$

Akce $S_\delta[F(t)]$ tedy interpoluje mezi obvyklou akcí v reálném čase a euklidovskou akcí v imaginárním čase. Přechod k euklidovské akci pak odpovídá rotaci reálné osy pro $\delta = \pi/2$

⁵⁴Upozorníme, že následující poznámky mají heuristický charakter a nelze jim přikládat rigorózní matematický význam.

⁵⁵Jak uvidíme v dalším, podobné úvahy jsou typické pro kvantovou teorii při konečné teplotě. Zde také dochází k “míchání” reálného a imaginárního času (čas a inverzní teplota).

- to je tzv. Wickova rotace. Přechodu k T-součinům v reálném čase odpovídá analytické prodloužení inverzní k Wickově rotaci, t.j. podél křivky $t = e^{i\delta}\tau$, $\delta \in (0, \pi/2)$

Dodejme ještě několik poznámek k reprezentaci (287). Položíme-li v této formuli $x_f = x_i = x$ a přeintegrujeme-li přes x , dostaneme díky normalizaci vlastního stavu

$$Z_E[F(\tau)](\tau_f, \tau_i) = \lim_{T_{f,i} \rightarrow \pm\infty} \int_{x_E(T_i)=x_E(T_f)} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp(-S_E[F(\tau)]/\hbar), \quad (289)$$

kde dráhová integrace probíhá přes všechny *periodické* trajektorie. Jak uvidíme v dalším, tato formule umožňuje interpretovat euklidovskou teorii v termínech statistické mechaniky pro nekonečnou (inverzní) teplotu.

Dále si všimněme, že pro euklidovskou akci (286) neexistuje obecně limita $T_{f,i} \rightarrow \pm\infty$ díky přítomnosti divergentního členu $E_0(T_f - T_i)$. Chceme-li se tedy vyhnout výpočtu dráhového integrálu pro konečné euklidovské časy a počítat (např. gaussovské integrály) přímo pro nekonečný interval, je třeba vhodně normalizovat výraz (287) a zkrátit potenciálně divergentní výrazy. Řešením je formule

$$Z_E[F(\tau)](\tau_f, \tau_i) = \frac{\int_{x_E(-\infty)=x_i}^{x_E(\infty)=x_f} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau (L_E(x_E(\tau), \dot{x}_E(\tau)) - F(\tau)x_E(\tau))\right)}{\int_{x_E(-\infty)=x_i}^{x_E(\infty)=x_f} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau L_E(x_E(\tau), \dot{x}_E(\tau))\right)}, \quad (290)$$

kde $L_E(x_E(\tau), \dot{x}_E(\tau)) = -L(x_E(\tau), i\dot{x}_E(\tau))$. Poznamenejme, že čitatel ani jmenovatel tohoto výrazu neexistuje odděleně jako konečná limita pro $T_{f,i} \rightarrow \pm\infty$.

Ilustrujme tuto metodu na příkladu harmonického oscilátoru. Euklidovská akce má tvar (v limitě $T_{f,i} \rightarrow \pm\infty$, t.j. již bez nebezpečného E_0 členu)

$$S_E[F(\tau)] = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx_E(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \frac{m\omega^2 x_E(\tau)^2}{2} - F(\tau)x_E(\tau) \right) \quad (291)$$

Vytvořující funkcionál pro euklidovské τ -uspořádané součiny je

$$Z_E[F(\tau)](\tau_f, \tau_i) = \frac{\int_{x_E(\pm\infty)=0} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp(-S_E[F(\tau)]/\hbar)}{\int_{x_E(\pm\infty)=0} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp(-S_E[0]/\hbar)}, \quad (292)$$

kde jsme ve formuli (290) zvolili⁵⁶ $x_{f,i} = 0$. Pro Fourierův obraz řešení klasické euklidovské pohybové rovnice (předpoklad o existenci Fourierova obrazu automaticky zaručuje splnění okrajových podmínek pro dráhový integrál) máme

$$\tilde{x}_E(E) = \frac{1}{m} \frac{\tilde{F}(E)}{E^2 + \omega^2}. \quad (293)$$

kde

$$\tilde{F}(E) = \int d\tau e^{iE\tau} F(\tau) \quad (294)$$

⁵⁶Jedině tato volba je konzistentní s neomezeným časovým intervalem $(-\infty, +\infty)$. Na druhé straně bychom mohli při *konečném* T_f, T_i fixovat okrajové podmínky libovolně, potom spočítat euklidovskou akci pro tento konečný časový interval a teprve ve výsledném výrazu provést limitu $T_{f,i} \rightarrow \pm\infty$. Výsledek by závisel na zvolených okrajových podmínkách pouze prostřednictvím faktoru $\Omega(x_f)\Omega^*(x_i)$ který by se zkrátit s podobným faktorem ve jmenovateli.

je Fourierův obraz vnějšího zdroje. Pro extrémální euklidovskou akci tak máme s užitím Parsevalovy rovnosti

$$S_E^{min}[F(\tau)] = -\frac{1}{4\pi m} \int dE \frac{\tilde{F}^*(E)\tilde{F}(E)}{E^2 + \omega^2}. \quad (295)$$

Dosazením za $\tilde{F}(E)$ z (294) a s uvážením podmínky normalizace $Z_E[0] = 1$ máme

$$Z_E[F(\tau)](\tau_f, \tau_i) = \exp\left(\frac{1}{2\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau d\sigma F(\tau)F(\sigma)G_E(\tau, \sigma)\right), \quad (296)$$

kde $G_E(\tau, \sigma)$ je Greenova funkce operátoru $m(\omega^2 - (d^2/d\tau^2))$ daná výrazem

$$\begin{aligned} G_E(\tau, \sigma) &= -\langle \tau | \left(m \left(d^2/d\tau^2 - \omega^2 \right) \right)^{-1} | \sigma \rangle \\ &= \frac{1}{m} \int \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-iE(\tau-\sigma)}}{E^2 + \omega^2} = \frac{1}{2m\omega} e^{-\omega|\tau-\sigma|}. \end{aligned} \quad (297)$$

Ilustrujme nyní na tomto příkladu zpětné analytické prodloužení $\tau \rightarrow it$, $\sigma \rightarrow is$. K tomu se nejlépe hodí vyjádření $G_E(\tau, \sigma)$ pomocí Fourierovy transformace. Pro $\tau - \sigma > 0$ lze deformovat integrační cestu v komplexní rovině proměnné E tak, že polopřímku $(0, \infty)$ pootočíme o úhel $-\delta \in (0, -\pi/2)$, aniž bychom změnili hodnotu integrálu (pro $E \rightarrow \infty$ je integrál po oblouku $Ee^{-i\phi}$, $\phi \in (0, \delta)$ potlačen faktorem $\exp(-E(\tau - \sigma) \sin \phi)/(E^2 + \omega^2)$). Při takto deformované integrační cestě integrál existuje i pro komplexní $\tau - \sigma$, pro něž $\text{Arg}(\tau - \sigma) \in (-\pi, 0)$, $\delta > 0$ a je analytickým prodloužením původní funkce $G_E(\tau, \sigma)$. Pro komplexní $\tau - \sigma = |\tau - \sigma|e^{i\delta}$ (které je z výše uvedeného oboru) lze (opět beze změny hodnoty integrálu) napřímit “zalomenou” integrační cestu pootočením polopřímky $(-\infty, 0)$ o úhel $-\delta$. Zcela analogicky lze postupovat pro $\tau - \sigma < 0$.

Při analytickém prodloužení $\tau \rightarrow e^{i\delta}\tau$, $\sigma \rightarrow e^{i\delta}\sigma$ jsme tedy efektivně pootočili integrační cestu v komplexní rovině proměnné E na $E \rightarrow e^{-i\delta}E$, dostaneme tak

$$\begin{aligned} G_E(e^{i\delta}\tau, e^{i\delta}\sigma) &= e^{-i\delta} \frac{1}{m} \int \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-iE(\tau-\sigma)}}{e^{-2i\delta}E^2 + \omega^2} \\ &\xrightarrow{\delta \rightarrow \pi/2} \frac{i}{m} \int \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-iE(\tau-\sigma)}}{E^2 - \omega^2 + 2iE^2((\pi/2) - \delta)} \end{aligned} \quad (298)$$

což dává stejné pravidlo obcházení pólů jako původní výraz (180).

Zmíňme se krátce ještě o jednom aspektu analytického prodloužení $t \rightarrow -i\hbar\tau$ do imaginárních časů. Jak již víme z úvodní podkapitoly, tato operace odpovídá přechodu od evolučního operátoru $U(t)$ ke kanonické matici hustoty $\rho(\beta)$ při konečné inverzní teplotě $\beta = 1/kT = \tau$. Kanonická partiční suma $Z(\beta)$ (jejíž logaritmus souvisí s volnou energií vztahem $\Omega = -(1/\beta)\ln Z(\beta)$) a tepelné střední hodnoty jsou dány výrazy

$$Z(\beta) = \text{tr}\rho(\beta) = \int dx \langle x | \rho(\beta) | x \rangle \quad (299)$$

a

$$\langle \mathcal{O}(\hat{x}, \hat{p}) \rangle = Z^{-1} \text{tr}\rho(\beta) \mathcal{O}(\hat{x}, \hat{p}) = Z^{-1} \int dx \langle x | \rho(\beta) \mathcal{O}(\hat{x}, \hat{p}) | x \rangle \quad (300)$$

Poslední veličinu lze obdržet pomocí tepelných Greenových funkcí definovaných pro $\tau_j \in (0, \beta)$

$$G_\beta(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n) = \langle T_\tau \hat{x}(\tau_1) \hat{x}(\tau_2) \dots \hat{x}(\tau_n) \rangle, \quad (301)$$

(kde pro $0 \leq \tau \leq \beta$ je $\hat{x}(\tau) = \exp(\tau H)\hat{x}\exp(-\tau H)$ a T_τ značí τ -uspořádání) postupem analogickým formuli (186) (s tím rozdílem, že nyní platí $\hat{p}(\tau) = m(i/\hbar)(d/d\tau)\hat{x}(\tau)$).

Veličiny tohoto typu lze reprezentovat dráhovým integrálem s euklidovskou akcí, např.

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \int dx \int_{x(0)=x}^{x(\beta)=x} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp\left(\int_0^\beta d\tau L(x_E(\tau), \frac{i}{\hbar}\dot{x}_E(\tau))\right) \\ &= \int_{x(0)=x(\beta)} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp(-S_E(\beta)), \end{aligned} \quad (302)$$

v posledním výrazu se integruje přes všechny periodické trajektorie. Podobně vytvořující funkcionál tepelných Greenových funkcí má reprezentaci

$$\begin{aligned} Z_\beta[F(\tau)] &= \langle T_\tau \exp\left(-\int_0^\beta d\tau F(\tau)\hat{x}(\tau)\right) \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr}\rho(\beta) T_\tau \exp\left(-\int_0^\beta d\tau F(\tau)\hat{x}(\tau)\right) \\ &= \frac{\int_{x(0)=x(\beta)} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp\left(-S_E(\beta) - \int_0^\beta d\tau F(\tau)x_E(\tau)\right)}{\int_{x(0)=x(\beta)} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp(-S_E(\beta))}. \end{aligned} \quad (303)$$

Platnost poslední formule je důsledkem identity (167), jejíž euklidovská forma zní

$$T_\tau \exp\left(-\int_0^\beta d\tau F(\tau)\hat{x}(\tau)\right) = \exp(\beta H)\rho[F(\tau)](\beta), \quad (304)$$

podobně, jako formule (172) byla důsledkem této formule pro reálné časy.

Jak jsme již uvedli, tepelné Greenovy funkce jsou definovány pro $\tau_j \in (0, \beta)$. Pravá strana (301) je formálně definovaná pro libovolná τ_j , pokud však nejsou τ_j z výše uvedeného oboru, vztah (304) neplatí a neplatí ani jeho důsledek (303). Přirozené prodloužení na všechna reálná τ je prodloužení periodické⁵⁷ s periodou β , toto prodloužení je efektivně zahrnuto ve formuli (303), chápeme-li $F(\tau)$ jako β periodickou funkci. Ilustrujme to na obligátním případě harmonického oscilátoru.

Spočítejme nejdříve partiční sumu. Protože integrace je gaussovská, je partiční suma úměrná determinantu operátoru $-(d/\hbar d\tau)^2 + \omega^2$, který je definován na prostoru funkcí periodických s periodou β . Příslušné vlastní hodnoty jsou $\lambda_k = \omega^2 + (2\pi k/\beta\hbar)^2$, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, takže máme

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= N \mathcal{D}et \left(m(-(d/\hbar d\tau)^2 + \omega^2)/2\pi \right)^{-1/2} = N \prod_{k=-\infty}^{\infty} \left(m(\omega^2 + \left(\frac{2\pi k}{\hbar\beta}\right)^2)/2\pi \right)^{-1/2} \\ &= N \left(\prod_{k=-\infty}^{\infty} \frac{m}{2\pi} \right)^{-1/2} \frac{1}{\omega} \prod_{j=1}^{\infty} \left(\frac{2\pi j}{\hbar\beta}\right)^{-2} \left(\prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \left(\frac{\hbar\omega\beta}{2\pi n}\right)^2\right) \right)^{-1} \\ &= N \left(\prod_{k=-\infty, k \neq 0}^{\infty} m \left(\frac{2\pi k}{\hbar\beta}\right)^2 \frac{1}{2\pi} \right)^{-1/2} \frac{1}{\omega} \left(\frac{2\pi}{m}\right)^{1/2} \frac{\hbar\omega\beta/2}{\sin i\hbar\omega\beta/2} \end{aligned}$$

⁵⁷Pro fermionové stupně volnosti je přirozené prodloužení antiperiodické, viz dále.

$$\begin{aligned}
&= N \left(\prod_{k=-\infty, k \neq 0}^{\infty} m \left(\frac{2\pi k}{\hbar\beta} \right)^2 \frac{1}{2\pi} \right)^{-1/2} \left(\frac{2\pi}{m} \right)^{1/2} \hbar\beta \frac{1}{2 \sinh(\hbar\omega\beta/2)} \\
&= N \left(\prod_{k=-\infty, k \neq 0}^{\infty} m \left(\frac{2\pi k}{\hbar\beta} \right)^2 \frac{1}{2\pi} \right)^{-1/2} \left(\frac{2\pi}{m} \right)^{1/2} \hbar\beta \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta\hbar\omega(n+1/2)) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta\hbar\omega(n+1/2)), \tag{305}
\end{aligned}$$

kde jsme do normalizační konstanty N zahrnuli (nekonečné) faktory, nezávislé na energetických hladinách systému (t.j. na ω), explicitě

$$\begin{aligned}
N &= \frac{1}{\hbar\beta} \left(\frac{m}{2\pi} \right)^{1/2} \left(\prod_{k=-\infty, k \neq 0}^{\infty} m \left(\frac{2\pi k}{\hbar\beta} \right)^2 / 2\pi \right)^{1/2} \\
&= \frac{1}{\hbar\beta} \left(\frac{m}{2\pi} \right)^{1/2} \mathcal{D}et' \left(-\frac{1}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \frac{d^2}{d\tau^2} \right)^{1/2}, \tag{306}
\end{aligned}$$

zde čárka u znaménka determinantu značí vynechání nulové vlastní hodnoty. Rovnost (305) dokazuje shodnost takto získané partiční sumy s obvyklou definicí.

V průběhu předchozího výpočtu jsme dokázali následující analog formule (127) pro předexponenciální faktor euklidovského gaussovského integrálu s kvadratickou formou definovanou operátorem \mathbf{A} na prostoru periodických trajektorií:

$$\frac{1}{\hbar\beta} \left(\frac{m}{2\pi} \right)^{1/2} \mathcal{D}et_R^{-1/2} \mathbf{A}, \tag{307}$$

kde regularizovaný determinant je formální podíl

$$\mathcal{D}et_R(\mathbf{A}/2\pi) := \mathcal{D}et \mathbf{A} / \mathcal{D}et' \left(-\frac{m}{\hbar^2} \frac{d^2}{d\tau^2} \right). \tag{308}$$

Tento výsledek lze chápat také jako vztah mezi dvěma vyjádřeními funkcionální míry. Rozvineme-li trajektorii $x_E(\tau)$ do vlastních funkcí (módů) $f_n(\tau)$ operátoru \mathbf{A}

$$x_E(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} x_n f_n(\tau), \tag{309}$$

lze symbolicky psát

$$\mathcal{D}x_E(\tau) = N \prod_{n=0}^{\infty} dx_n. \tag{310}$$

Dále je třeba najít Greenovu funkci, t.j. inverzi operátoru $m(-(d/\hbar dt)^2 + \omega^2)$ na prostoru

β -periodických funkcí. Výsledný vytvořující funkcionál $Z_\beta[F(\tau)]$ potom bude⁵⁸

$$Z_\beta[F(\tau)] = \exp\left(\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau d\sigma F(\tau)F(\sigma)G_\beta(\tau, \sigma)\right). \quad (311)$$

Metodou, popsanou v podkapitole 1.7, dostaneme

$$G_\beta(\tau, \sigma) = \frac{1}{\beta m} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i2\pi k(\tau - \sigma)/\beta)}{(2\pi k/\beta\hbar)^2 + \omega^2}. \quad (312)$$

K vysumování této řady použijeme metodu, která je typická pro kvantovou teorii pole při konečné teplotě. Všimněme si, že funkce $f(E) = (1/2)\beta \cot(1/2)\beta E$ má póly na reálné ose v bodech $E_n = (2\pi n/\beta)$, s rezidui rovnými jedné. Můžeme proto psát

$$G_\beta(\tau, \sigma) = \frac{\hbar^2}{\beta m} \frac{1}{2\pi i} \left(\int_{-\infty-i\varepsilon}^{\infty-i\varepsilon} + \int_{\infty+i\varepsilon}^{-\infty+i\varepsilon} \right) dE \frac{1}{2} \beta \cot\left(\frac{1}{2}\beta E\right) \frac{e^{iE(\tau-\sigma)}}{E^2 + \hbar^2\omega^2}. \quad (313)$$

Rozepíšeme-li ještě

$$\frac{1}{2}\beta \cot\left(\frac{1}{2}\beta E\right) = \pm \frac{i\beta}{2} \left(1 + 2\frac{1}{e^{\pm i\beta E} - 1}\right), \quad (314)$$

dostaneme

$$\begin{aligned} G_\beta(\tau, \sigma) &= \frac{\hbar^2}{2\pi m} \int_{-\infty-i\varepsilon}^{\infty-i\varepsilon} dE \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{i\beta E} - 1}\right) \frac{e^{iE(\tau-\sigma)}}{E^2 + \hbar^2\omega^2} \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2\pi m} \int_{\infty+i\varepsilon}^{-\infty+i\varepsilon} dE \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{-i\beta E} - 1}\right) \frac{e^{iE(\tau-\sigma)}}{E^2 + \hbar^2\omega^2} \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \int \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{iE(\tau-\sigma)}}{E^2 + \hbar^2\omega^2} + \frac{\hbar^2}{\pi m} \int_{-\infty-i\varepsilon}^{\infty-i\varepsilon} dE \frac{\cos E(\tau - \sigma)}{E^2 + \hbar^2\omega^2} \frac{1}{e^{i\beta E} - 1}. \end{aligned} \quad (315)$$

V prvním teplotně nezávislém integrálu snadno rozeznáme euklidovskou Greenovu funkci (297), druhý spočteme pomocí reziduové věty⁵⁹, takže výsledek zní

$$\begin{aligned} G_\beta(\tau, \sigma) &= \hbar G_E(\hbar\tau, \hbar\sigma) + \left(\frac{\hbar}{\omega m}\right) \frac{\cosh \hbar\omega(\tau - \sigma)}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} e^{-\hbar\omega|\tau-\sigma|} + \left(\frac{\hbar}{\omega m}\right) \frac{\cosh \hbar\omega(\tau - \sigma)}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}. \end{aligned} \quad (316)$$

Výše uvedená metoda sumace přes diskrétní frekvence umožňuje přirozeně vydělit teplotně nezávislý příspěvek, který není ničím jiným než příspěvkem základního stavu, a příspěvek

⁵⁸Klasická akce je v tomto případě rovna

$$S_E(\beta) = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau F(\tau) x_\beta(\tau),$$

povrchové členy tentokrát nepřispívají díky periodicitě řešení euklidovské pohybové rovnice $x_\beta(\tau) = -\int_0^\beta d\sigma G_\beta(\tau, \sigma)F(\sigma)$.

⁵⁹Integrační cestu lze uzavřít v dolní komplexní polorovině, $\text{Im}E < 0$; pro $E \rightarrow \infty$ je pak integrand potlačený faktorem alespoň $\exp(-\text{Im}E(|\tau - \sigma| - \beta))$, neboť pro $\tau, \sigma \in (0, \beta)$ je $|\tau - \sigma| - \beta < 0$. Do integrálu přispívá pól $E = -i\hbar\omega$.

tepelných excitovaných stavů (který vymizí v limitě $\beta \rightarrow \infty$), úměrný tepelné střední hodnotě operátoru⁶⁰ $\langle \hat{N} \rangle = \langle a^\dagger a \rangle$. Skutečně, užitím “redukčních formulí” typu (186) máme

$$\langle \hat{N} \rangle = \lim_{0 < \sigma < \tau \rightarrow 0^+} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right) \left(1 - \frac{1}{\hbar\omega} \frac{\partial}{\partial \sigma} \right) \left(1 + \frac{1}{\hbar\omega} \frac{\partial}{\partial \tau} \right) G_\beta(\tau, \sigma) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}. \quad (317)$$

V tomto smyslu lze tedy interpretovat euklidovskou teorii jako statistickou mechaniku při nekonečné (inverzní) teplotě. Poznamenejme, že naivní limita vytvořujícího funkcionálu (311) (a obecně vytvořujícího funkcionálu (303)) pro $\beta \rightarrow \infty$ nepřechází ve vytvořující funkcionály (296), resp. (289). Díky periodicitě trajektorií a klasického zdroje lze však formuli (303) přepsat na tvar

$$Z_\beta[F(\tau)] = \frac{\int_{x(-\beta/2)=x(\beta/2)} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp\left(-\int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau (L_E(\tau) + F(\tau)x_E(\tau))\right)}{\int_{x(-\beta/2)=x(\beta/2)} \mathcal{D}x_E(\tau) \exp\left(-\int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau L_E(\tau)\right)}, \quad (318)$$

který už dává v limitě euklidovský vytvořující funkcionál (289).

Na závěr této kapitoly spočteme ještě jeden příklad, na kterém budeme ilustrovat jisté jemnosti gaussovského integrování, spojené se symetriemi euklidovské akce a existencí nulových módů operátoru, definujícího kvadratickou formu v exponenciále integrandu. Tímto příkladem bude partiční suma volné částice v d dimenzích. Protože je takový systém translačně invariantní, závisí jádro matice hustoty $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ pouze na rozdílu $\mathbf{x} - \mathbf{y}$. Partiční suma, t.j. stopa matice hustoty je tedy nekonečná

$$Z(\beta) = \int d^d \mathbf{x} \rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \rho(\mathbf{0}, \mathbf{0}) \int d^d \mathbf{x}. \quad (319)$$

Původ tohoto nekonečna je zřejmý, uzavřeme-li nejprve systém do konečného objemu V , potom $\int d^d \mathbf{x} = V$ a divergence se objeví až v termodynamické limitě $V \rightarrow \infty$. Tento jev však nepředstavuje z fyzikálního hlediska žádnou patologii, neboť fyzikální význam nemá partiční suma, ale její logaritmus, který je úměrný volné energii a ta je určena až na aditivní konstantu.

Ve formalismu dráhového integrálu je příčina divergence partiční sumy spojená s translační invariancí euklidovské akce. Trajektorie, které se liší až na translaci, přispívají do dráhového integrálu stejně a jejich příspěvek je úměrný objemu grupy symetrie, t.j. grupě translací \mathbf{R}^d , který je nekonečný.

Ukažme, jak lze v rámci tohoto formalismu faktorizovat objem grupy symetrie z partiční sumy. Jak víme z předchozího, lze psát

$$Z(\beta) = \int \mathcal{D}\mathbf{x}(\tau) \exp\left(-\int_0^\beta d\tau \frac{m}{2\hbar^2} \dot{\mathbf{x}}^2(\tau)\right). \quad (320)$$

Integrál na pravé straně je gaussovský, je tedy formálně roven⁶¹

$$Z(\beta) = N^d \mathcal{D}\text{et}^{-d/2} \left(-\frac{1}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \frac{d^2}{d\tau^2} \right),$$

kde N je normalizační faktor (306). Protože však operátor $-d^2/d\tau^2$ má nulový mód, výraz diverguje. To je další příčina divergence, těsně svázaná s předchozími. Vložme do integrandu

⁶⁰Tento faktor odpovídá střední hodnotě počtu boseovských částic ve stavu s energií $\hbar\omega$.

⁶¹Připomeňme, že jsme v d dimenzích.

(320) jedničku, vhodně zapsanou ve tvaru

$$1 = \int d^d \mathbf{a} \delta^{(d)} \left(\frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau \mathbf{x}(\tau) - \mathbf{a} \right) = \int d^d \mathbf{a} \delta^{(d)} \left(\frac{1}{\sqrt{\beta}} \mathbf{x}_0 - \mathbf{a} \right), \quad (321)$$

kde \mathbf{x}_0 je konstantní člen rozvoje obecné trajektorie $\mathbf{x}(\tau)$ do módů operátoru $-d^2/dt^2$:

$$\mathbf{x}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \mathbf{x}_0 + \sqrt{\frac{2}{\beta}} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{x}_n \sin \left(\frac{2\pi n}{\beta} \tau \right) + \sqrt{\frac{2}{\beta}} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{y}_n \cos \left(\frac{2\pi n}{\beta} \tau \right). \quad (322)$$

Po úpravě máme

$$Z(\beta) = \int d^d \mathbf{a} \int \mathcal{D}\mathbf{x}(\tau) \exp \left(- \int_0^\beta d\tau \frac{m}{2\hbar^2} \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) \right) \beta^{d/2} \delta^{(d)}(\mathbf{x}_0 - \sqrt{\beta} \mathbf{a}). \quad (323)$$

Dráhový integrál snadno spočítáme s užitím formule (310). Nebezpečná integrace přes proměnnou \mathbf{x}_0 je nasyčena δ funkcí, takže se netriviálně integruje pouze přes prostor nenulových módů; jako výsledek obdržíme

$$Z(\beta) = N^d \beta^{d/2} \mathcal{D}\text{et}' \left(- \frac{1}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \frac{d^2}{d\tau^2} \right)^{-d/2} \int d^d \mathbf{a}, \quad (324)$$

kde čárkovaný determinant je opět součinem pouze nenulových vlastních hodnot. V případě konečného objemu máme podobně

$$Z(\beta) = N^d \beta^{d/2} \mathcal{D}\text{et}' \left(- \frac{1}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \frac{d^2}{d\tau^2} \right)^{-d/2} \int d^d \mathbf{a} \chi_V(\mathbf{a}), \quad (325)$$

kde $\chi_V(\mathbf{a})$ je charakteristická funkce objemu V . Přítomnost δ -funkce v integrandu dráhového integrálu totiž vybírá pouze ty trajektorie, jejichž "časová střední hodnota" je rovna \mathbf{a} . Pro \mathbf{a} mimo objem V žádná taková trajektorie neexistuje a příspěvek dráhového integrálu je roven nule. Konečný výsledek tedy zní, využijeme-li explicitního tvaru normovacího faktoru (306)

$$Z(\beta) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{d/2} V. \quad (326)$$

Ve výše uvedeném postupu jsme tedy nejdříve zafixovali volnost spojenou se symetrií požadavkem $\bar{\mathbf{x}}(\tau) = \mathbf{a}$, který není invariantní vzhledem k translacím trajektorie $\mathbf{x}(\tau) \rightarrow \mathbf{x}(\tau) + \mathbf{b}$ a vybírá tak ze všech trajektorií, dávající stejný příspěvek do dráhového integrálu právě jeden exemplář, a teprve potom prováděli dráhovou integraci. Ta už neobsahovala nulové módy (symetrie byla narušena) a tudíž byla bezproblémová. Extrakce integrace přes \mathbf{x}_0 je známa jako metoda kolektivní souřadnice. Podobný postup se používá v teorii kalibračních polí, roli symetrie zde hraje příslušná (lokální) kalibrační grupa.

1.12 Fermionové stupně volnosti a Berezinův integrál

Uvažujme 2^N -hladinový kvantový systém, odpovídající N fermionovým stupňům volnosti⁶². Hilbertův prostor stavů je pak lineárním obalem stavových vektorů tvaru

$$|i_1, i_2, \dots, i_k\rangle = a_{i_1}^+ a_{i_2}^+ \dots a_{i_k}^+ |0\rangle, \quad (327)$$

⁶²Výklad této podkapitoly je "volně převyprávěným" podle [8]. Alternativní přístup, založený na Fockově-Bargmanově reprezentaci lze nalézt např. v [7].

kde $i_1 < i_2 < \dots < i_k$, $k \leq N$, kreační a anihilační operátory a_i^+ , a_i , $i = 1, 2, \dots, N$ splňují fermionové antikomutační relace

$$\{a_i, a_j^+\} = \delta_{ij}, \quad \{a_i, a_j\} = \{a_i^+, a_j^+\} = 0 \quad (328)$$

a základní stav je definován relací

$$a_i|0\rangle = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (329)$$

Na kvantově mechanické úrovni lze tento systém modelovat např. souborem N spinů $s = 1/2$ interagujícím s vnějším statickým magnetickým polem, operátory a_i , a_i^+ lze ztotožnit s posunovacími operátory $s_i^\pm = s_i^1 \pm is_i^2$ a základní stav $|0\rangle$ odpovídá např. stavu se všemi spiny orientovanými ve směru vnějšího magnetického pole.

Dimenze Hilbertova prostoru stavů takového systému je konečná, rovná 2^N . V této podkapitole ukážeme, že i pro takovýto systém lze definovat reprezentaci evolučního operátoru, vytvářejícího funkcionálu resp. partiční sumy dráhovým integrálem.

Sestrojíme pomocí operátorů a_i , a_j^+ antikomutující operátory “impulsů” a “souřadnic”⁶³

$$Q_i := a_i^+, \quad P_i := i\hbar a_i = i\hbar Q_i^+, \quad (330)$$

pro něž platí

$$\{P_i, Q_j\} = i\hbar\delta_{ij}, \quad \{P_i, P_j\} = \{Q_i, Q_j\} = 0. \quad (331)$$

V Hilbertově prostoru stavů neexistují společné vlastní vektory operátorů Q_i (a podobně ani společné vlastní stavy operátorů P_i), neboť kdyby existoval takový vlastní stav $|\tilde{q}\rangle$ s nenulovými c-číselnými vlastními hodnotami \tilde{q}_i , kde $Q_i|\tilde{q}\rangle = \tilde{q}_i|\tilde{q}\rangle$, a předpokládali-li bychom tedy $[Q_i, \tilde{q}_j] = 0$, měli bychom

$$0 = (Q_i Q_j + Q_j Q_i)|\tilde{q}\rangle = (\tilde{q}_i \tilde{q}_j + \tilde{q}_j \tilde{q}_i)|\tilde{q}\rangle, \quad (332)$$

t.j. “vlastní hodnoty” \tilde{q}_j by musely *antikomutovat*! Připustíme-li však tuto nezvyklou možnost, lze i pro operátory Q_i a P_i sestřit “souřadnicovou” resp. “impulsovou” reprezentaci, analogickou reprezentaci sestřené pomocí vlastních vektorů obvyklých operátorů \hat{x}_i , \hat{p}_i v Hilbertově prostoru orbitálních stupňů volnosti.

Nezbytným matematickým objektem, potřebným k tomuto zobecnění, je tzv. Grassmannova algebra - t.j. asociativní algebra s jednotkou nad tělesem reálných nebo komplexních čísel s N antikomutujícími generátory

$$\{q_i, q_j\} = 0, \quad i, j = 1, 2, \dots, N. \quad (333)$$

Elementy této algebry jsou formální řady typu

$$f(q) = f_0 + \sum_{i=1}^N f_i q_i + \sum_{i < j < N} f_{ij} q_i q_j + \dots + f_{12\dots N} q_1 q_2 \dots q_N, \quad (334)$$

(kde $f_{i_1 i_2 \dots i_k}$ jsou reálná nebo komplexní čísla) které se v tomto kontextu nazývají funkcemi antikomutujících proměnných q_i . Protože kvadrát každého generátoru je roven nule, řada má vždy konečný počet členů a dimenze Grassmannovy algebry s N generátory je 2^N . Lineární

⁶³Všimněte si analogie s Diracovým polem, kde zobecněným impulsem k poli $\psi(\mathbf{x})$ je $i\psi^+(\mathbf{x})$.

kombinace a součiny elementů tohoto typu jsou opět zapsatelné v tomto tvaru, použijeme-li antikomutační relace k uspořádání generátorů q_i do standardního pořadí, např. $(1 + q_3)(q_3 + q_1 q_2) = q_3 + q_1 q_2 + q_1 q_2 q_3$, atd.

Pro funkce antikomutujících proměnných lze zavést analog derivace a integrálu. Levá (pravá) derivace se definuje pomocí následujících operátorových relací

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial q_i}, q_j \right\} = \delta_{ij}, \quad \left\{ \frac{\partial}{\partial q_i}, \frac{\partial}{\partial q_j} \right\} = 0; \quad (335)$$

zde q_j se chápe jako lineární operátor působící na funkce antikomutujících proměnných podle předpisu $q_j : f(\mathbf{q}) \rightarrow q_j f(\mathbf{q})$. Tato definující relace je zobecněním obvyklých relací

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_i}, x_j \right] = \delta_{ij}, \quad \left[\frac{\partial}{\partial x_i}, \frac{\partial}{\partial x_j} \right] = 0, \quad (336)$$

platných pro operátor derivace funkcí c-číselných proměnných. Podobně jako v tomto případě, kdy platí

$$\frac{\partial}{\partial x_i} f(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial}{\partial x_i}, f(\mathbf{x}) \right], \quad (337)$$

definujeme levou derivaci monomu $q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_k}$

$$\frac{\partial}{\partial q_i} q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_k} := \left[\frac{\partial}{\partial q_i}, q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_k} \right]_{(-)^{k+1}}, \quad (338)$$

analogicky pravou derivaci

$$q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_k} \frac{\partial}{\partial q_i} := \left[q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_k}, \frac{\partial}{\partial q_i} \right]_{(-)^{k+1}}. \quad (339)$$

Zde $[\cdot, \cdot]_{\pm}$ je (anti)komutátor příslušných operátorů (opět se monom chápe jako operátor násobení sebou samým). Na libovolnou funkci antikomutujících proměnných se levá (pravá) derivace dodefinuje lineárně. Při praktických výpočtech to znamená proantikomutovat operátor derivace $\partial/\partial q_i$ v každém členu rozvoje $f(q)$ do řady v antikomutujících proměnných, který obsahuje q_i , až na pozici před (za) q_i a tuto proměnnou vyškrtnout⁶⁴.

Tato definice (levé) derivace spolu s faktem, že dimenze Grassmannovy algebry s N generátory je 2^N , umožňuje reprezentovat Hilbertův prostor stavů N fermionových stupňů volnosti prostorem funkcí N grassmannovských generátorů prostřednictvím následujícího ztotožnění bází obou vektorových prostorů

$$|i_1 i_2 \dots i_n\rangle \rightarrow q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_n}, \quad |0\rangle \rightarrow 1. \quad (340)$$

Stavu

$$f = f_0 |0\rangle + f_i |i\rangle + \dots + f_{12\dots N} |12\dots N\rangle$$

v této reprezentaci odpovídá následující vlnová funkce antikomutujících proměnných

$$f(q) = f_0 + f_i q_i + f_{ij} q_i q_j + \dots + f_{12\dots N} q_1 q_2 \dots q_N. \quad (341)$$

⁶⁴Nebo, což je totéž, proantikomutovat proměnnou q_i na první pozici zleva (zprava) a vyškrtnout ji.

Operátory P_j, Q_j jsou reprezentovány operacemi násobení grassmannovským generátorem a levou derivací

$$Q_j \rightarrow q_j, \quad (342)$$

$$P_j \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j}. \quad (343)$$

Takto definovaná reprezentace je analogií x reprezentace kanonických komutačních relací, které jsme využívali při konstrukci dráhového integrálu, prvek (341) Grassmannovy algebry odpovídá vlnové funkci. Ukažme, že v této analogii lze jít ještě dále.

Rozšíříme-li původní Grassmannovu algebru o další kopii N antikomutujících generátorů $\tilde{q}_j, j = 1, 2, \dots, N$, lze se snadno přesvědčit, že zobecněný stav s vlnovou funkcí

$$f_{\tilde{q}}(q) = \prod_{i=1}^N (q_i - \tilde{q}_i) = \exp \left(- \sum_{j=1}^N \tilde{q}_j \frac{\partial}{\partial q_j} \right) q_1 q_2 \dots q_N \quad (344)$$

je “společným vlastním vektorem” operátorů Q_j s *antikomutujícími* vlastními hodnotami \tilde{q}_j :

$$(Q_j - \tilde{q}_j) f_{\tilde{q}}(q) = (q_j - \tilde{q}_j) \prod_{i=1}^N (q_i - \tilde{q}_i) = (-1)^{j-1} (q_j - \tilde{q}_j)^2 \prod_{i=1, i \neq j}^N (q_i - \tilde{q}_i) = 0. \quad (345)$$

V termínech původního Hilbertova prostoru stavů tomu odpovídá formální lineární kombinace stavových vektorů s grassmannovskými koeficienty, (které kvůli konzistenci s Q -reprezentací musí antikomutovat s operátory P_j, Q_j):

$$|\tilde{q}\rangle = \prod_{i=1}^N (Q_i - \tilde{q}_i) |0\rangle = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{q}_j P_j \right) Q_1 Q_2 \dots Q_N |0\rangle. \quad (346)$$

Podobně lze zkonstruovat zobecněné bra-vektory, které jsou společnými vlastními stavy operátorů Q_j ,

$$\langle \tilde{q} | = \langle 0 | \exp \left(- \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{q}_j P_j \right), \quad (347)$$

pro něž platí

$$\begin{aligned} \langle \tilde{q} | (Q_i - \tilde{q}_i) &= \langle 0 | \exp \left(- \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{q}_j P_j \right) (Q_i - \tilde{q}_i) \\ &= \langle 0 | \left(1 - \frac{i}{\hbar} \tilde{q}_i P_i \right) (Q_i - \tilde{q}_i) \exp \left(- \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1, j \neq i}^N \tilde{q}_j P_j \right) \\ &= \langle 0 | \left(-\tilde{q}_i - \frac{i}{\hbar} \tilde{q}_i P_i Q_i \right) \exp \left(- \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1, j \neq i}^N \tilde{q}_j P_j \right) = 0. \end{aligned} \quad (348)$$

Normalizace vlastních stavů operátorů Q_j je tedy

$$\langle \tilde{q} | \tilde{q} \rangle = \langle \tilde{q} | \prod_{i=1}^N (Q_i - \tilde{q}_i) |0\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \prod_{i=1}^N (\tilde{q}'_i - \tilde{q}_i) \langle \tilde{q}' | 0 \rangle \\
&= \prod_{i=1}^N (\tilde{q}'_i - \tilde{q}_i)
\end{aligned} \tag{349}$$

Vlnovou funkci stavů $|i_1 i_2 \dots i_n\rangle$ lze pak získat podobně jako ve standardním případě jako skalární součin

$$\langle q | i_1 i_2 \dots i_n \rangle = \langle q | Q_{i_1} Q_{i_2} \dots Q_{i_n} | 0 \rangle = q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_n}. \tag{350}$$

Spočtíme ještě Q -reprezentace bra-vektorů

$$\begin{aligned}
\langle i_1 i_2 \dots i_n | \tilde{q} \rangle &= (i\hbar)^{-n} \langle 0 | P_{i_n} P_{i_{n-1}} \dots P_{i_1} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{q}_j P_j\right) Q_1 Q_2 \dots Q_N | 0 \rangle \\
&= (i\hbar)^{-n} \langle 0 | P_{i_n} P_{i_{n-1}} \dots P_{i_1} (Q_1 - \tilde{q}_1)(Q_2 - \tilde{q}_2) \dots (Q_N - \tilde{q}_N) | 0 \rangle \\
&= (-1)^{N-n} \varepsilon_{i_1, \dots, i_n, k_1, \dots, k_{N-n}} \tilde{q}_{k_1} \tilde{q}_{k_2} \dots \tilde{q}_{k_{N-n}},
\end{aligned} \tag{351}$$

(v posledním řádku je $\varepsilon_{i_1 \dots i_k}$ N -dimenzionální Levi-Civitův symbol a sčítání přes indexy $k_1 \dots k_{N-n}$, které jsou různé od indexů $i_1 \dots i_n$, se neprovádí).

Analogicky lze nalézt společné vlastní stavy operátorů P_j s vlnovými funkcemi v Q -reprezentaci

$$f_{\tilde{p}}(q) = \mathcal{N} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{p}_j q_j\right) = \mathcal{N} \prod_{j=1}^N \left(1 + \frac{i}{\hbar} \tilde{p}_j q_j\right), \tag{352}$$

kde \mathcal{N} je vhodný normalizační faktor.

Pro takto definované vlnové funkce platí

$$\begin{aligned}
(P_j - \tilde{p}_j) f_{\tilde{p}}(q) &= \mathcal{N} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j} - \tilde{p}_j\right) \prod_{i=1}^N \left(1 + \frac{i}{\hbar} \tilde{p}_i q_i\right) \\
&= \mathcal{N} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j} - \tilde{p}_j\right) \left(1 + \frac{i}{\hbar} \tilde{p}_j q_j\right) \prod_{i=1, i \neq j}^N \left(1 + \frac{i}{\hbar} \tilde{p}_i q_i\right) \\
&= \mathcal{N} (\tilde{p}_j - \tilde{p}_j) \prod_{i=1, i \neq j}^N \left(1 + \frac{i}{\hbar} \tilde{p}_i q_i\right) = 0.
\end{aligned} \tag{353}$$

V termínech původního Hilbertova prostoru máme

$$|\tilde{p}\rangle = \mathcal{N} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{p}_j Q_j\right) | 0 \rangle. \tag{354}$$

Příslušné bra-stavy jsou

$$\langle \tilde{p} | = \mathcal{N} (i\hbar)^{-N} \langle 0 | P_N P_{N-1} \dots P_1 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{p}_j Q_j\right). \tag{355}$$

Pro skalární součiny těchto stavů s vlastními stavy operátorů Q_j máme tedy

$$\langle \tilde{q} | \tilde{p} \rangle = \mathcal{N} \langle \tilde{q} | \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{p}_j Q_j\right) | 0 \rangle = \mathcal{N} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{p}_j \tilde{q}_j\right) = f_{\tilde{p}}(\tilde{q}) \tag{356}$$

a podobně

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{p} | \tilde{q} \rangle &= \mathcal{N} (i\hbar)^{-N} \langle 0 | P_N P_{N-1} \dots P_1 \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{p}_j Q_j \right) | \tilde{q} \rangle \\
&= \mathcal{N} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{p}_j \tilde{q}_j \right) (i\hbar)^{-N} \langle 0 | P_N P_{N-1} \dots P_1 | \tilde{q} \rangle \\
&= \mathcal{N} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{p}_j \tilde{q}_j \right).
\end{aligned} \tag{357}$$

Normalizace vlastních stavů operátorů P_j je

$$\langle \tilde{p}' | \tilde{p} \rangle = \mathcal{N}^2 (-i\hbar)^{-N} (\tilde{p}'_N - \tilde{p}_N) (\tilde{p}'_{N-1} - \tilde{p}_{N-1}) \dots (\tilde{p}'_1 - \tilde{p}_1). \tag{358}$$

Volbou $\mathcal{N} = (-1)^{N(N-1)/4} (-i\hbar)^{N/2}$ dostaneme

$$\langle \tilde{p}' | \tilde{p} \rangle = \prod_{j=1}^N (\tilde{p}'_j - \tilde{p}_j), \tag{359}$$

což je tatáž normalizace jako pro vlastní stavy $|\tilde{q}\rangle$.

Aby analogie s x reprezentací byla kompletní, potřebujeme ještě vhodně zformulovat relace úplnosti pro zobecněné stavy $|\tilde{q}\rangle$ a $|\tilde{p}\rangle$ a skalární součin v Q reprezentaci. Má-li být přiřazení (340) izomorfismem Hilbertových prostorů, je nutně skalární součin dvou vlnových funkcí (341) $f(q) = \sum_{i_1 < \dots < i_n} f_{i_1 \dots i_n} q_{i_1} \dots q_{i_n}$ a $g(q) = \sum_{i_1 < \dots < i_n} g_{i_1 \dots i_n} q_{i_1} \dots q_{i_n}$ v Q -reprezentaci roven

$$\langle f(q) | g(q) \rangle = \sum_{i_1 < \dots < i_n} f_{i_1 \dots i_n}^* g_{i_1 \dots i_n}. \tag{360}$$

Tento skalární součin bychom chtěli psát v analogii s x -reprezentací pomocí vhodně definované operace integrování na Grassmannově algebře ve tvaru⁶⁵

$$\langle f | g \rangle = \int \langle f | \tilde{q} \rangle d^N \tilde{q} \langle \tilde{q} | g \rangle. \tag{361}$$

Integrál na Grassmannově algebře by měl splňovat požadavek linearity, t.j. pro libovolná (komutující) c -čísla α, β a funkce grassmannovských generátorů $f(q), g(q)$ musí platit

$$\int d^N q (\alpha f(q) + \beta g(q)) = \alpha \int d^N q f(q) + \beta \int d^N q g(q). \tag{362}$$

Stačí tedy tuto operaci definovat pro uspořádané monomy. Abychom splnili relaci (360), musí platit (srov. (350,351))

$$\langle i_1 i_2 \dots i_n \int |\tilde{q}\rangle d^N \tilde{q} \langle \tilde{q} | j_1 j_2 \dots j_m \rangle = \delta_{nm} \delta_{i_1, j_1} \dots \delta_{i_n, j_n}, \tag{363}$$

tyto vztahy vyjadřují relaci úplnosti pro stavy $|\tilde{q}\rangle$,

$$\int |\tilde{q}\rangle d^N \tilde{q} \langle \tilde{q} | = 1, \tag{364}$$

⁶⁵Poznamenejme, že v následujícím vztahu záleží na pořadí faktorů za integračním znaméním, jak uvidíme v dalším, symbol $d^N q$ obecně nekomutuje s funkcemi grassmannovských proměnných.

v termínech maticových elementů v bazi $|i_1 i_2 \dots i_n\rangle$. Totéž explicitě, pomocí vlnových funkcí, znamená požadavek platnosti formulí

$$\int (-1)^{N-n} \varepsilon_{i_1, \dots, i_n, k_1, \dots, k_{N-n}} q_{k_1} q_{k_2} \dots q_{k_{N-n}} d^N q q_{j_1} \dots q_{j_m} = \delta_{nm} \delta_{i_1, j_1} \dots \delta_{i_n, j_n}. \quad (365)$$

Tento požadavek lze splnit, postulujeme-li

$$\int d^N q q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_n} = \delta_{nN} \varepsilon_{i_1, i_2, \dots, i_N}, \quad (366)$$

kde $\varepsilon_{i_1, i_2, \dots, i_N}$ je N -dimenzionální Levi-Civitův symbol⁶⁶, a následující antikomutační vlastnosti formálních diferencíálů

$$\{dq_i, dq_j\} = \{dq_i, q_j\} = 0, \quad (367)$$

přičemž definujeme

$$d^N q = dq_N dq_{N-1} \dots dq_1. \quad (368)$$

Máme pak totiž

$$\begin{aligned} \int q_{k_1} \dots q_{k_{N-n}} d^N q q_{j_1} \dots q_{j_m} &= \delta_{nm} (-1)^{N(N-n)} \varepsilon_{k_1 \dots k_{N-n} j_1 \dots j_n} \\ &= \delta_{nm} (-1)^{N(N-n)+n(N-n)} \varepsilon_{j_1 \dots j_n k_1 \dots k_{N-n}}, \end{aligned} \quad (369)$$

což s uvážením relace $(-1)^{r^2} = (-1)^r$ kompenzuje dodatečný znaménkový faktor na levé straně formule (365); přechod k pravé straně pak plyne z vlastností ε -symbolu.

Poznamenejme, že takto definovaný “ N -dimenzionální” integrál lze chápat jako N -násobný “jednodimenzionální” integrál⁶⁷, t.j. počítaný podle analogu Fubiniovy věty, definujeme-li

$$\int dq_j = 0, \quad \int dq_j q_j = 1. \quad (370)$$

Integrál na Grassmannově algebře byl zaveden F.A. Berezinem [10], na jeho počest se nazývá Berezinův integrál.

Pomocí Berezinova integrálu jsme tedy obdrželi relace úplnosti

$$\int |\tilde{q}\rangle d^N \tilde{q} \langle \tilde{q}| = 1, \quad (371)$$

umožňující reprezentovat stavové vektory $|f\rangle$ pomocí vlnových funkcí $f(q) = \langle q|f\rangle$ a operátory $\mathcal{O}(P, Q)$ pomocí maticových elementů $\langle q'|\mathcal{O}(P, Q)|q\rangle$. Speciálně jednotkový operátor je reprezentován pomocí⁶⁸

$$\langle q'|1|q\rangle = \prod_{j=1}^N (q'_j - q_j) = \Delta(q', q), \quad (372)$$

⁶⁶Pro libovolnou funkci tvaru (341) tedy máme

$$\int d^N q f(q) = f_{12 \dots N}.$$

⁶⁷Všimněme si, že jednodimenzionální integrál se shoduje s operací (levé) derivace.

⁶⁸Ukažme, že součin $\Delta(q', q) = (q'_1 - q_1)(q'_2 - q_2) \dots (q'_N - q_N)$ se vzhledem k Berezinovu integrálu skutečně chová jako δ -funkce. Rozvineme-li libovolnou funkci $f(q) = f(q' - (q' - q))$ do monomů v $(q' - q)$, zůstane po vynásobení $\Delta(q', q)$ pouze člen “nultého řádu” $f(q')$; Berezinův integrál $\Delta(q', q)$ -funkce přes proměnné q je roven $(-1)^N$.

kde výraz na pravé straně představuje Grassmannovský analog δ -funkce. Ukažme, jak lze pomocí maticových elementů operátorů v Q -reprezentaci spočítat stopu operátoru $\mathcal{O}(P, Q)$. Vedení analogií v x reprezentaci, počítejme následující integrál

$$\begin{aligned} \int d^N \tilde{q} \langle -\tilde{q} | \mathcal{O}(P, Q) | \tilde{q} \rangle &= \sum_{\{i\}, \{j\}} (-1)^n \langle i_1 i_2 \dots i_n | \mathcal{O}(P, Q) | j_1 j_2 \dots j_m \rangle \\ & (-1)^{N-m} \varepsilon_{j_1, \dots, j_m, k_1, \dots, k_{N-m}} \int d^N \tilde{q} \tilde{q}_{i_1} \tilde{q}_{i_2} \dots \tilde{q}_{i_n} \tilde{q}_{k_1} \tilde{q}_{k_2} \dots \tilde{q}_{k_{N-m}} \\ &= (-1)^N \text{Tr } \mathcal{O}(P, Q) \end{aligned}$$

Tedy

$$\text{Tr } \mathcal{O}(P, Q) = (-1)^N \int d^N \tilde{q} \langle -\tilde{q} | \mathcal{O}(P, Q) | \tilde{q} \rangle. \quad (373)$$

Dále dokažme relace úplnosti i pro stavy $|\tilde{p}\rangle$,

$$\int |\tilde{p}\rangle d^N \tilde{p} \langle \tilde{p}| = 1. \quad (374)$$

V Q -reprezentaci platí

$$\begin{aligned} \int \langle q' | p \rangle d^N p \langle p | q \rangle &= (-i\hbar)^N (-1)^{N(N-1)/2} \int d^N p \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N p_j (q'_j - q_j) \right) \\ &= (-1)^{N(N-1)/2} \int d^N p p_1 (q'_1 - q_1) \dots p_N (q'_N - q_N) \\ &= \Delta(q', q), \end{aligned}$$

což je totéž jako (374), srov. (372).

Nyní máme vytvořený vhodný formalismus pro konstrukci Q -reprezentace evolučního operátoru fermionového systému dráhovým integrálem. Budeme předpokládat, že hamiltonián systému je sudá funkce operátorů P a Q (t.j. že v rozvoji hamiltoniánu do monomů v P , Q se vyskytnou jen sudé monomy) a že je pomocí antikomutačních relací převeden do tzv. PQ formy (t.j. všechny operátory P jsou přantikomutovány nalevo od všech operátorů Q). Potom můžeme psát v analogii s x -reprezentací pro M -tou aproximací maticového elementu evolučního operátoru v Q -reprezentaci

$$\begin{aligned} \langle \tilde{q}'' | \exp \left(-\frac{i}{\hbar} H(P, Q) T \right) | \tilde{q}' \rangle_M &= \langle \tilde{q}'' | \left(\exp \left(-\frac{i}{\hbar} H(P, Q) \varepsilon \right) \right)^M | \tilde{q}' \rangle \\ &= \int \langle \tilde{q}_M | \tilde{p}_M \rangle d\tilde{p}_M \langle \tilde{p}_M | e^{-\frac{i}{\hbar} H(P, Q) \varepsilon} | \tilde{q}_{M-1} \rangle \dots d\tilde{q}_1 \langle \tilde{q}_1 | \tilde{p}_1 \rangle d\tilde{p}_1 \langle \tilde{p}_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} H(P, Q) \varepsilon} | \tilde{q}_0 \rangle \\ &= \mathcal{N}^{2M} \int d\tilde{p}_M \left(\prod_{i=M-1}^1 d\tilde{q}_i d\tilde{p}_i \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^M (\tilde{p}_j (\tilde{q}_j - \tilde{q}_{j-1}) - H(\tilde{p}_j, \tilde{q}_{j-1}) \varepsilon) \right) \\ &= (-1)^{N(M-1)} \mathcal{N}^{2M} \int d\tilde{p}_M \left(\prod_{i=1}^{M-1} d\tilde{p}_i d\tilde{q}_i \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^M (\tilde{p}_j (\tilde{q}_j - \tilde{q}_{j-1}) - H(\tilde{p}_j, \tilde{q}_{j-1}) \varepsilon) \right). \end{aligned} \quad (375)$$

Zde jsme rozvinuli $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(P, Q)\varepsilon\right) = 1 - \frac{i}{\hbar}H(P, Q)\varepsilon + O(\varepsilon^2)$ a položili $\langle \tilde{p}|H(P, Q)|\tilde{q}\rangle = H(\tilde{p}, \tilde{q})$, zřejmě tento maticový element je stejnou funkcí antikomutujících proměnných, jako původní PQ -uspořádaná funkce operátorových argumentů P, Q . Zahrneme-li normalizační faktor do funkcionální míry, t.j. píšeme-li formálně

$$\mathcal{D}\tilde{p}(t)\mathcal{D}\tilde{q}(t) = \lim_{M \rightarrow \infty} (-1)^{N(M-1)} \mathcal{N}^{2M} dp_M \prod_{i=1}^{M-1} dp_i dq_i, \quad (376)$$

máme tedy následující reprezentaci evolučního operátoru dráhovým integrálem přes antikomutující proměnné⁶⁹

$$\begin{aligned} & \langle \tilde{q}'' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(P, Q)T\right) | \tilde{q}' \rangle = \\ & = \int_{\tilde{q}(0)=\tilde{q}'}^{\tilde{q}(T)=\tilde{q}''} \mathcal{D}\tilde{p}(t)\mathcal{D}\tilde{q}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt (\tilde{p}(t)\dot{\tilde{q}}(t) - H(\tilde{p}(t), \tilde{q}(t)))\right). \end{aligned} \quad (377)$$

Provedeme-li analytické prodloužení $T \rightarrow -i\hbar\beta$, lze s využitím formule pro stopu v Q -reprezentaci okamžitě psát vyjádření partiční sumy dráhovým integrálem přes antiperiodické trajektorie

$$Z_\beta = \int_{\tilde{q}(0)=-\tilde{q}(\beta)} \mathcal{D}\tilde{p}(\tau)\mathcal{D}\tilde{q}(\tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^\beta d\tau (\tilde{p} \frac{d}{d\tau} \tilde{q} + i\hbar H(\tilde{p}(\tau), \tilde{q}(\tau)))\right), \quad (378)$$

kde formálně

$$\mathcal{D}\tilde{p}(t)\mathcal{D}\tilde{q}(t) = \lim_{M \rightarrow \infty} (-1)^{NM} \mathcal{N}^{2M} \prod_{i=1}^M dp_i dq_i. \quad (379)$$

Greenovy funkce fermionových operátorů lze podobně jako v bozonovém případě získat z vytvářejícího funkcionálu. Protože však fermionové operátory pod znakem T -součinu antikomutují, nelze použít jako vnější zdroje komutující c-číselné funkce. Vhodným zobecněním je v tomto případě použití antikomutujících vnějších zdrojů⁷⁰. Pro vytvářející funkcionál tepelných Greenových funkcí lze pak psát

$$\begin{aligned} Z_\beta[J_p, J_q] &= \text{Tre}^{-\beta H(P, Q)} e^{-\int_0^\beta d\tau (P(\tau)J_p(\tau) + J_q(\tau)Q(\tau))} \\ &= \int_{\tilde{q}(0)=-\tilde{q}(\beta)} \mathcal{D}\tilde{p}(\tau)\mathcal{D}\tilde{q}(\tau) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^\beta d\tau (\tilde{p}(\tau) \frac{d}{d\tau} \tilde{q}(\tau) + i\hbar H(\tilde{p}(\tau), \tilde{q}(\tau)) + i\hbar \tilde{p}(\tau)J_p(\tau) + i\hbar J_q(\tau)\tilde{q}(\tau))}. \end{aligned} \quad (380)$$

Podobně (až na normalizační faktor) máme pro vyvořující funkcionál Greenových funkcí v reálném čase

$$\begin{aligned} Z[J_p, J_q] &= \langle 0 | T e^{\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt (P(t)J_p(t) + J_q(t)Q(t))} | 0 \rangle = \\ &= \int \mathcal{D}\tilde{p}(t)\mathcal{D}\tilde{q}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt (\tilde{p}(t) \frac{d}{dt} \tilde{q}(t) - H(\tilde{p}(t), \tilde{q}(t)) + \tilde{p}(t)J_p(t) + J_q(t)\tilde{q}(t))}, \end{aligned} \quad (381)$$

⁶⁹Formální výraz na pravé straně je třeba chápat jako symbolický zápis pro limitu výrazů (375). T.j. formule (375) je definicí dráhového integrálu s fermionovými stupni volnosti.

⁷⁰T.j. funkcí s hodnotami v lichém sektoru Grassmannovy algebry, resp. prvků Grassmannovy algebry se spojitě nekonečně mnoha generátory $J(t)$, splňující relace

$$\{J(t), J(t')\} = 0,$$

a antikomutující s operátory P, Q .

kde se integrace provádí přes všechny trajektorie bez omezení a H_c obsahuje vhodné $i\epsilon$ členy potřebné k vydělení příspěvku základního stavu. Zcela analogicky lze reprezentovat vytvářející funkcionál euklidovské teorie.

Greenovy funkce se z vytvářejících funkcionálů získají funkcionálním derivováním podle antikomutujících zdrojů. Podobně jako v bozonovém případě se funkcionální derivace definuje formulí

$$\frac{\delta}{\delta J(t')} Z[J(t)] = \frac{d}{da} Z[J(t) + a\delta(t-t')] |_{a=0},$$

kde však nyní a je grassmannovský generátor antikomutující s $J(t)$ (a s ostatními podobnými generátory v případě vícenásobných derivací). Takto definované funkcionální derivace navzájem antikomutují, což zabezpečuje požadovanou vlastnost antisymetrie výsledných Greenových funkcí.

1.13 Gaussovské integrály přes antikomutující proměnné

Podobně jako v případě bozonových (t.j. komutujících) stupňů volnosti tvoří gaussovské integrály důležitou třídu exaktně spočitatelných dráhových integrálů, platí totéž i o fermionových dráhových integrálech s kvadratickou akcí, které se v tomto kontextu také nazývají gaussovské. Diskusi takovýchto integrálů je věnována tato podkapitola.

Nejprve uvedeme několik vlastností Berezinových integrálů, které budou důležité i v dalším a které jsou analogické vlastnostem obyčejných integrálů s komutujícími proměnnými. První z těchto vlastností je translační invariance. Jsou-li q' libovolné grassmannovské generátory, různé od lineárních kombinací monomů generátorů q_i , platí

$$\int dq f(q+q') = \int dq f(q), \quad (382)$$

jak se snadno přesvědčíme rozvojem funkce $f(q+q')$ do monomů v generátorech q_i . Platí také analog věty o substituci. Nechť \mathbf{A} je regulární matice $N \times N$, potom můžeme psát

$$\begin{aligned} \int d^N q f(\mathbf{A}q) &= \sum_{\{i\}} \int d^N q f_{12\dots N} A_{1i_1} A_{2i_2} \dots A_{Ni_N} q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_N} = \\ &= f_{12\dots N} \sum_{\{i\}} \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_N} A_{1i_1} A_{2i_2} \dots A_{Ni_N} \\ &= f_{12\dots N} \det \mathbf{A} = \det \mathbf{A} \int d^N q f(q), \end{aligned} \quad (383)$$

t.j.

$$\int d^N q f(\mathbf{A}q) = \det \mathbf{A} \int d^N q f(q). \quad (384)$$

Všimněte si rozdílu mezi touto formulí a větou o substituci pro obyčejné N -dimenzionální integrály, spočívající v záměně jacobíanu inverzním jacobíánem.

Nyní máme připraveny prostředky pro výpočet N -dimenzionálního gaussovského integrálu přes antikomutující proměnné. Nechť \mathbf{A} je regulární matice $N \times N$. Potom můžeme psát

$$\int \prod_{k=1}^N d\tilde{p}_k d\tilde{q}_k \exp \left(\sum_{i,j=1}^N \tilde{p}_i A_{ij} \tilde{q}_j \right) = (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \int d^N \tilde{p} d^N \tilde{q} \frac{1}{N!} \left(\sum_{i,j=1}^N \tilde{p}_i A_{ij} \tilde{q}_j \right)^N$$

$$\begin{aligned}
&= (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \frac{1}{N!} \sum_{\{i\},\{j\}} \int d^N \tilde{p} d^N \tilde{q} \tilde{p}_{i_1} A_{i_1 j_1} \tilde{q}_{j_1} \tilde{p}_{i_2} A_{i_2 j_2} \tilde{q}_{j_2} \cdots \tilde{p}_{i_N} A_{i_N j_N} \tilde{q}_{j_N} \\
&= (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \frac{1}{N!} \sum_{\{i\},\{j\}} \int d^N \tilde{p} d^N \tilde{q} (-1)^{\frac{N(N+1)}{2}} \tilde{q}_{j_1} \cdots \tilde{q}_{j_N} \tilde{p}_{i_1} A_{i_1 j_1} \cdots \tilde{p}_{i_N} A_{i_N j_N} \\
&= (-1)^N \frac{1}{N!} \sum_{\{i\},\{j\}} \varepsilon_{j_1 j_2 \cdots j_N} \varepsilon_{i_1 i_2 \cdots i_N} A_{i_1 j_1} A_{i_2 j_2} \cdots A_{i_N j_N} = (-1)^N \det \mathbf{A}. \quad (385)
\end{aligned}$$

V následující formuli jsou J_p a J_q navzájem antikomutující generátory. Platí

$$\begin{aligned}
&\int \prod_{k=1}^N d\tilde{p}_k d\tilde{q}_k \exp(p^T \cdot \mathbf{A} \cdot q + p^T \cdot J_p + J_q^T \cdot q) \\
&= \int \prod_{k=1}^N d\tilde{p}_k d\tilde{q}_k \exp\left((p + (\mathbf{A}^{-1})^T \cdot J_q)^T \cdot \mathbf{A} \cdot (q + \mathbf{A}^{-1} \cdot J_p) - J_q^T \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot J_p\right) \\
&= \exp\left(-J_q^T \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot J_p\right) \int \prod_{k=1}^N d\tilde{p}_k d\tilde{q}_k \exp\left(p^T \cdot \mathbf{A} \cdot q\right) \\
&= (-1)^N \det \mathbf{A} \exp\left(-J_q^T \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot J_p\right), \quad (386)
\end{aligned}$$

kde jsme užili translační invariance. Máme tedy následující analog formule (17):

$$\int \prod_{k=1}^N dp_k dq_k \exp(p^T \cdot \mathbf{A} \cdot q + p^T \cdot J_p + J_q^T \cdot q) = (-1)^N \det \mathbf{A} \exp\left(-J_q^T \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot J_p\right). \quad (387)$$

Ukažme použití této formule k výpočtu berezinovského dráhového integrálu pro konkrétní fermionový systém. Uvažujme částici se spinem 1/2 ve vnějším homogenním magnetickém poli orientovaném ve směru třetí souřadnicové osy s indukcí B . Odhlédneme-li od orbitálních stupňů volnosti, lze interakci systému s magnetickým polem popsat hamiltoniánem

$$H = -2\mu B s_3, \quad (388)$$

kde μ je magnetický moment. Základní stav odpovídá orientaci magnetického momentu do směru indukce, excitovaný stav odpovídá opačné orientaci, t.j.

$$|0\rangle = |\uparrow\rangle, \quad |1\rangle = |\downarrow\rangle,$$

kde

$$s_3 |\uparrow\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, \quad s_3 |\downarrow\rangle = -\frac{1}{2} |\downarrow\rangle.$$

Posunovací operátory $s_{\pm} = s_1 \pm i s_2$ působí na tyto stavy standardním způsobem:

$$\begin{aligned}
s^+ |\uparrow\rangle &= 0, & s^- |\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle \\
s^- |\downarrow\rangle &= 0, & s^+ |\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle,
\end{aligned}$$

přičemž

$$[s^+, s^-] = 2s_3, \quad \{s^+, s^-\} = 1;$$

poslední vztah lze ověřit přímým dosazením. Operátory s_{\pm} jsou tedy analogem fermionových kreačních a anihilačních operátorů. Hamiltonián lze pak přepsat na tvar

$$H = -\mu B[s^+, s^-] = -\mu B(2s^+s^- - 1)$$

system je tudíž fermionovým analogem harmonického oscilátoru. Zavedeme-li operátory P a Q stejně, jako v předchozí podkapitole, t.j. $Q = s^-$, $P = i\hbar s^+$, máme

$$H = -\frac{1}{i\hbar}\mu B(2PQ - i\hbar),$$

s užitím formule (375) můžeme psát následující vyjádření jádra evolučního operátoru v Q -reprezentaci pomocí dráhového berezinovského integrálu (v dalším vynecháváme znaménko limity pro $M \rightarrow \infty$ pro zjednodušení zápisu):

$$\begin{aligned} & \langle \tilde{q}'' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(P, Q)T\right) | \tilde{q}' \rangle \\ &= -(i\hbar)^M \int d\tilde{p}_M \prod_{i=1}^{M-1} d\tilde{p}_i d\tilde{q}_i \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^M (\tilde{p}_j(\tilde{q}_j - \tilde{q}_{j-1}) + \frac{1}{i\hbar}\mu B\varepsilon(2\tilde{p}_j\tilde{q}_{j-1} - i\hbar))\right) \\ &= -(i\hbar)^M e^{(-\frac{i}{\hbar}\mu BT)} \int d\tilde{p}_M e^{\frac{i}{\hbar}\tilde{p}_M\tilde{q}_M} \prod_{i=1}^{M-1} d\tilde{p}_i d\tilde{q}_i \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\tilde{p}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \tilde{q} + \tilde{p}^T \cdot J_p + J_q^T \cdot \tilde{q})\right). \end{aligned} \quad (389)$$

V posledním výrazu

$$J_p = -(1 + 2\frac{i}{\hbar}\mu B\varepsilon) \begin{pmatrix} \tilde{q}' \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad J_q = -(1 + 2\frac{i}{\hbar}\mu B\varepsilon) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \tilde{p}_M \end{pmatrix}, \quad (390)$$

a dále

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -(1 + 2\frac{i}{\hbar}\mu B\varepsilon) & 1 & & & 0 \\ 0 & -(1 + 2\frac{i}{\hbar}\mu B\varepsilon) & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -(1 + 2\frac{i}{\hbar}\mu B\varepsilon) & 1 \end{pmatrix}. \quad (391)$$

K výpočtu tohoto integrálu podle formule (386) potřebujeme znát determinant matice \mathbf{A} a prvek $A_{M-1,1}^{-1}$ inverzní matice k matici \mathbf{A} . Snadno spočítáme

$$\det \mathbf{A} = 1, \quad A_{M-1,1}^{-1} = (-1)^M (-1)^{M-2} (1 + 2\frac{i}{\hbar}\mu B\varepsilon)^{M-2}.$$

Po dosazení za gaussovský integrál obdržíme

$$\begin{aligned} & \langle \tilde{q}'' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(P, Q)T\right) | \tilde{q}' \rangle \\ &= -(i\hbar)^M e^{-\frac{i}{\hbar}\mu BT} \int d\tilde{p}_M e^{\frac{i}{\hbar}\tilde{p}_M\tilde{q}_M} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{M-1} (-1)^{M-1} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\tilde{p}_M\tilde{q}'(1 + 2\frac{i}{\hbar}\mu B\varepsilon)^M\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -i\hbar \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu BT\right) \int d\tilde{p}_M \exp\left(\frac{i}{\hbar}\tilde{p}_M(\tilde{q}_M - \tilde{q}'(1 + 2\frac{i}{\hbar}\mu B\varepsilon)^M)\right) \\
&\rightarrow -i\hbar \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu BT\right) \int d\tilde{p}_M \exp\left(\frac{i}{\hbar}\tilde{p}_M(\tilde{q}_M - \tilde{q}'e^{2\frac{i}{\hbar}\mu BT})\right) \\
&= -\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu BT\right) (\tilde{q}'e^{2\frac{i}{\hbar}\mu BT} - \tilde{q}'').
\end{aligned}$$

Předchozí výpočet umožňuje najít další charakteristiky uvažovaného systému. Analytickým prodloužením $T \rightarrow -i\hbar\beta$ obdržíme Q -reprezentaci matice hustoty a užitím formule (373) pro stopu máme pro partiční sumu

$$\begin{aligned}
Z_\beta &= -\int dq \langle -q | \exp(-\beta H(P, Q)) | q \rangle = \int dq \exp(-\mu B\beta) (qe^{2\mu B\beta} + q) \\
&= e^{-\mu B\beta} + e^{\mu B\beta},
\end{aligned} \tag{392}$$

což je standardní fermionová dvouhladinová partiční suma.

Vraťme se ještě k evolučnímu operátoru. Porovnáním s formulí (375) máme

$$\langle \tilde{q}'' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(P, Q)T\right) | \tilde{q}' \rangle = (-i\hbar)^{1/2} \int d\tilde{p}_M e^{\frac{i}{\hbar}\tilde{p}_M\tilde{q}''} \langle \tilde{p}_M | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(P, Q)T\right) | \tilde{q}' \rangle \tag{393}$$

tzn. pro maticový element evolučního operátoru ve “smíšené” PQ reprezentaci je

$$\langle \tilde{p} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(P, Q)T\right) | \tilde{q} \rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu BT\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\tilde{p}\tilde{q}e^{2\frac{i}{\hbar}\mu BT}\right). \tag{394}$$

Stejně jako v případě gaussovských integrálů s bozonovými proměnnými lze i berezinovské gaussovské integrály počítat klasickými metodami, t.j místo mnohonásobné integrace přes antikomutující proměnné stačí spočítat “klasickou” akci podél extrémální trajektorie s vhodnými okrajovými podmínkami. Protože gaussovská integrace vyžaduje stejný počet proměnných p a q , hodí se ke spojitému zobecnění formule (386) maticový element ve smíšené PQ reprezentaci. Pro něj máme následující vyjádření dráhovým integrálem⁷¹ (srov. (375)):

$$\begin{aligned}
&\langle \tilde{p} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(P, Q)T\right) | \tilde{q} \rangle \\
&= (i\hbar)^{1/2} \int_{\tilde{q}(0)=\tilde{q}}^{\tilde{p}(T)=\tilde{p}} \mathcal{D}\tilde{p}(t) \mathcal{D}\tilde{q}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(-\tilde{p}(T)\tilde{q}(T) + \int_0^T dt (\tilde{p}(t)\dot{\tilde{q}}(t) - H(\tilde{p}(t), \tilde{q}(t))))\right).
\end{aligned} \tag{395}$$

Pro interakci obsahující nejvýše jednu první derivaci je v případě gaussovských integrálů diferenciální operátor určující kvadratickou formu v exponenciále integrandu operátorem prvního řádu, nadto nehermitovským. Ve výše uvažovaném příkladu je tento operátor dán formulí

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{A}_M = \frac{d}{dt} - 2\frac{i}{\hbar}\mu B \tag{396}$$

a klasická akce vymizí pro trajektorie, které jsou řešením klasických pohybových rovnic

$$\dot{q}(t) - 2\frac{i}{\hbar}\mu Bq(t) = 0, \quad q(0) = q \tag{397}$$

$$\dot{p}(t) + 2\frac{i}{\hbar}\mu Bp(t) = 0, \quad p(T) = p \tag{398}$$

⁷¹Opět je třeba formální dráhový integrál chápat ve smyslu limity diskrétních aproximací.

Je tedy

$$q(t) = q \exp\left(2\frac{i}{\hbar}\mu B t\right).$$

Dosadíme-li toto řešení do exponenciály dráhového integrandu, zreprodukujeme maticový element (394).

1.14 Cvičení

1. Obecnou kvantovací proceduru

$$H(p, x) \longrightarrow \widehat{H}(\widehat{p}, \widehat{x}),$$

přiřazující klasické fyzikální pozorovatelné reprezentované (reálnou) funkcí $H(p, x)$ na fázovém prostoru samosdružený operátor $\widehat{H}(\widehat{p}, \widehat{x})$, který je operátorovou funkcí nekomutujících operátorů \widehat{p} a \widehat{x} na Hilbertově prostoru stavů, lze formálně popsat relací

$$\widehat{H}(\widehat{p}, \widehat{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dp dx d\alpha d\beta F(\alpha, \beta) H(p, x) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\alpha(\widehat{x} - x) + \beta(\widehat{p} - p))\right).$$

Zde funkce $F(\alpha, \beta)$ rozlišuje jednotlivá kvantovací schémata. Ukažte, že

(a) požadavek samosdruženosti operátoru $\widehat{H}(\widehat{p}, \widehat{x})$ a přirozený požadavek korespondence

$$\begin{aligned} f(p) &\longrightarrow f(\widehat{p}) \\ f(x) &\longrightarrow f(\widehat{x}) \end{aligned}$$

je zaručena splněním relací

$$\begin{aligned} F^*(-\alpha, -\beta) &= F(\alpha, \beta), \\ F(0, \beta) &= F(\alpha, 0) = 1 \end{aligned}$$

(b) pro px , resp. xp kvantovací předpis je $F(\alpha, \beta) = \exp\left(\pm\frac{i}{2\hbar}\alpha\beta\right)$ a pro Weylovo kvantování je $F(\alpha, \beta) = 1$

(c) inverzní relace, přiřazující operátoru \widehat{H} funkci $H(p, x)$ (která se v této souvislosti nazývá symbolem operátoru \widehat{H} odpovídajícím danému kvantovacímu schématu) je⁷²

$$\begin{aligned} H(p, x) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int \int dp' dx' d\xi \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px' + p'x)\right) \\ &\times F(p', x')^{-1} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p'\xi\right) \mathcal{H}(\xi - x'/2, \xi + x'/2), \end{aligned}$$

kde $\mathcal{H}(x'', x') = \langle x'' | \widehat{H} | x' \rangle$ je maticový element operátoru \widehat{H} v x -reprezentaci.

2. Ukažte, že Weylův symbol operátoru $\widehat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\widehat{\mathbf{x}}) + \mathbf{A}(\widehat{\mathbf{x}}) \cdot \widehat{\mathbf{p}}$, kde $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ je hladká funkce, je roven $2\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x})$.

3. Dokažte, že je-li \widehat{H}_W weylovsky prokvantovaná klasická pozorovatelná $H(p, x)$ (t.j. $H(p, x)$ je Weylovým symbolem operátoru \widehat{H}_W), potom platí

$$\langle x'' | \widehat{H}_W | x' \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p(x'' - x')} H\left(p, \frac{x'' + x'}{2}\right).$$

⁷²Všimněme si, že v této formulaci nemusí operátor \widehat{H} odpovídat nějaké fyzikální pozorovatelné (t.j. např. nemusí být samosdružený) a tedy symbol $H(p, x)$ nemusí být reálná funkce odpovídající nějaké klasické pozorovatelné. Typickým příkladem operátoru, pro který má smysl konstruovat příslušný symbol a který není fyzikální pozorovatelnou, je matice hustoty, jejíž symbol v jistém smyslu představuje "kvantovou distribuční funkci na fázovém prostoru".

4. Dokažte následující transformační vlastnosti Wienerovy míry

(a) pro d - dimenzionální rotaci $\mathbf{R} \in SO(d)$ platí

$$\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') F[\mathbf{R} \cdot \mathbf{x}(t)] = \int dW(\mathbf{R} \cdot \mathbf{x}'', \mathbf{R} \cdot \mathbf{x}', t'', t') F[\mathbf{x}(t)]$$

(b) pro dostatečně hladkou trajektorii $\mathbf{a}(t)$ platí

$$\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') F[\mathbf{x}(t) + \mathbf{a}(t)] = \int dW(\mathbf{x}'' + \mathbf{a}(t''), \mathbf{x}' + \mathbf{a}(t'), t'', t') F[\mathbf{x}(t)] \\ \times \exp\left(-\frac{M}{2} \left(\int_{t'}^{t''} d\tau \left(\dot{\mathbf{a}}(\tau)^2 + 2\mathbf{x}(\tau) \cdot \ddot{\mathbf{a}}(\tau)\right) - \mathbf{x}'' \cdot \dot{\mathbf{a}}(t'') + \mathbf{x}' \cdot \dot{\mathbf{a}}(t')\right)\right).$$

5. Najděte řešení x_j , ($j = 1, 2, \dots$) “diskrétní pohybové rovnice” pro lineární harmonický oscilátor

$$\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{(x_j - x_{j-1})}{\varepsilon} - \frac{(x_{j-1} - x_{j-2})}{\varepsilon} \right) + \omega^2 x_{j-1}^2 = 0$$

(zde $\varepsilon = T/n$) s okrajovými podmínkami

$$x_0 = x, \quad x_n = x''$$

a ukažte, že v limitě $n \rightarrow \infty$ přechází v řešení⁷³ diferenciální rovnice

$$\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) = 0$$

s okrajovými podmínkami

$$x(0) = x, \quad x(T) = x''.$$

6. Najděte charakteristický funkcionál (t.j. Fourierovu transformaci) $Z[\mathbf{F}(t)]$ Wienerovy míry

$$Z[\mathbf{F}(t)] = \int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') \exp\left(i \int_{t'}^{t''} d\tau \mathbf{F}(\tau) \cdot \mathbf{x}(\tau)\right).$$

a pomocí něho spočítejte následující střední hodnoty

(a) střední hodnotu souřadnice

$$\langle x_i(t) \rangle = \frac{\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') x_i(t)}{\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t')}$$

(b) korelační funkci

$$\langle (x(s) - x(t))_i (x(s) - x(t))_j \rangle = \frac{\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t') (x(s) - x(t))_i (x(s) - x(t))_j}{\int dW(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', t'', t')}.$$

Spočítejte také $\langle x_i(t) \rangle$ přímo pomocí formule pro Wienerův integrál cylindrické funkce.

7. Spočítejte

⁷³Zde klademe $j\varepsilon \rightarrow t$ pro $n \rightarrow \infty$.

(a) regularizovaný funkcionální determinant operátoru \mathbf{A} zadaného formulí⁷⁴

$$\mathbf{A} = m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \theta(t) \right)$$

na prostoru funkcí $\psi(t)$, $t \in (-T/2, T/2)$ s okrajovými podmínkami $\psi(-T/2) = \psi(T/2) = 0$,

(b) užitím předchozího výsledku spočítejte gaussovský dráhový integrál

$$\int_{x(-T/2)=x'}^{x(T/2)=x''} \mathcal{D}x(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} dt \left(\frac{m\dot{x}(t)^2}{2} - \frac{m\omega^2 x(t)^2 \theta(t)}{2} \right) \right).$$

8. Pro lineární harmonický oscilátor s hamiltoniámen $H = \hat{p}^2/2m + m\omega^2 \hat{x}^2/2$ spočítejte funkcionálními metodami následující maticové elementy:

(a) střední hodnotu souřadnice x v čase $t = s$, jestliže se systém nacházel v čase $t = 0$, resp. $t = T$ ve stavech s ostrou hodnotou souřadnice $|x'\rangle$, resp. $|x''\rangle$

$$\begin{aligned} & \langle x'' | e^{-\frac{i}{\hbar} H(T-s)} \hat{x} e^{-\frac{i}{\hbar} H(s)} | x' \rangle \\ &= \int_{x(0)=x'}^{x(T)=x''} \mathcal{D}x(t) x(s) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left(\frac{m\dot{x}(t)^2}{2} - \frac{m\omega^2 x(t)^2}{2} \right) \right) \end{aligned}$$

(b) střední hodnotu kvadrátu souřadnice x v čase $t = s$ při témže časovém vývoji

$$\begin{aligned} & \langle x'' | e^{-\frac{i}{\hbar} H(T-s)} \hat{x}^2 e^{-\frac{i}{\hbar} H(s)} | x' \rangle \\ &= \int_{x(0)=x'}^{x(T)=x''} \mathcal{D}x(t) x(s)^2 \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left(\frac{m\dot{x}(t)^2}{2} - \frac{m\omega^2 x(t)^2}{2} \right) \right). \end{aligned}$$

9. Uvažujme nerelativistickou bezspinovou částici s elektrickým nábojem e nacházející se ve vnějším homogenním magnetickém poli $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Spočítejte dráhovým integrálem

(a) propagátor $\langle x'' | e^{-\frac{i}{\hbar} HT} | x' \rangle$

(b) energii základního stavu

(c) partiční funkci.

Poznámka: Vektorový potenciál berte ve tvaru $\mathbf{A} = (1/2)\mathbf{B} \times \mathbf{x}$.

⁷⁴Zde $\theta(t) = 0$ pro $t < 0$ a $\theta(t) = 1$ pro $t > 0$ je skoková funkce.

2 Funkcionální integrál v kvantové teorii pole

2.1 Teorie pole ve Schrödingerově reprezentaci

Formálně znamená přechod od kvantové mechaniky ke kvantové teorii pole náhradu systému s konečně mnoha stupni volnosti systémem se (spojitě) nekonečně mnoha stupni volnosti. Z hlediska kvantové teorie však tento formální přechod zdaleka není triviální a vede k podstatně novým kvalitativním vlastnostem kvantově polních systémů.

Pro jednoduchost uvažujme v dalším reálné skalární pole v konečném objemu V . V (bozonové) teorii hrají roli zobecněných souřadnic hodnoty pole $\phi(\mathbf{x})$ v každém bodě \mathbf{x} objemu V . Tedy každá klasická konfigurace je v lagrangeovském formalismu zadána všemi hodnotami pole $\phi(\mathbf{x})$ a hodnotami derivace podle času $\dot{\phi}(\mathbf{x})$, které hrají roli zobecněných rychlostí. Dynamika systému je určena pomocí lagrangiánu, zapsaného jako prostorový integrál z lagrangeovské hustoty

$$L = \int_V d^d \mathbf{x} \mathcal{L}(\phi(\mathbf{x}), \dot{\phi}(\mathbf{x}), \nabla \phi(\mathbf{x}), \dots). \quad (399)$$

Přechod k hamiltonovkému formalismu, potřebnému pro proceduru kanonického kvantování, lze provést náhradou polního systému “regularizovaným” systémem s konečně mnoha stupni volnosti, pro který se formuluje hamiltonovská mechanika standardním způsobem, a následným zpětným limitním přechodem k systému s nekonečně mnoha stupni volnosti (a eventuelně limitou $V \rightarrow \infty$). Jedna z možností, jak to provést, má těsný vztah k formulaci funkcionálního integrálu v teorii pole. Metoda spočívá v rozdělení objemu V na N buněk objemu $\Delta V = V/N$. S každou buňkou ΔV_j se asociuje proměnná ϕ_j , definovaná jako střední hodnota pole ϕ v této buňce,

$$\phi_j = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V_j} d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) \quad (400)$$

a původní polní konfigurace a její prostorové derivace se v lagrangiánu nahradí po částech konstantními funkcemi

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}) &\rightarrow \phi_{\text{reg}}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \phi_j \chi_{\Delta V_j}(\mathbf{x}) \\ \nabla \phi(\mathbf{x}) &\rightarrow \nabla \phi_{\text{reg}}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \nabla \phi_j(\{\phi_k\}) \chi_{\Delta V_j}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (401)$$

kde $\chi_{\Delta V_j}(\mathbf{x})$ jsou charakteristické funkce buněk ΔV_j . $\nabla \phi_j(\{\phi_k\})$ jsou pak vhodné diskrétní aproximace parciálních derivací, vyjádřené pomocí středních hodnot pole v buňkách blízkých j -té. Tímto postupem se obdrží regularizovaný systém s N stupni volnosti s lagrangiánem

$$L_{\text{reg}} = \sum_{j=1}^N \Delta V_j \mathcal{L}(\phi_j, \dot{\phi}_j, \nabla \phi_j(\{\phi_k\}), \dots). \quad (402)$$

Zobecněné impulsy Π_j k souřadnicím ϕ_j pak jsou

$$\Pi_j = \Delta V_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_j} = \Delta V_j \pi_j. \quad (403)$$

Pro Hamiltonián máme

$$H = \sum_{j=1}^N \Pi_j \dot{\phi}_j - L = \sum_{j=1}^N \Delta V_j (\pi_j \dot{\phi}_j - \mathcal{L}(\phi_j, \dots)) = \sum_{j=1}^N \Delta V_j \mathcal{H}(\pi_j, \phi_j, \dots). \quad (404)$$

Hamiltonovy pohybové rovnice jsou

$$\dot{\phi}_j = \frac{\partial}{\partial \Pi_j} H = \frac{\partial}{\partial \pi_j} \mathcal{H} \quad (405)$$

$$\dot{\pi}_j = \frac{1}{\Delta V_j} \dot{\Pi}_j = -\frac{1}{\Delta V_j} \frac{\partial}{\partial \phi_j} H = -\frac{\partial}{\partial \phi_j} \mathcal{H} \quad (406)$$

Tím je zformulována hamiltonovská *klasická* mechanika regularizovaného systému. Přechod k nekonečnému počtu stupňů volnosti je přímočarý a bezproblémový, spočívá v záměně $\phi_j \rightarrow \phi(\mathbf{x})$ a $\pi_j \rightarrow \pi(\mathbf{x})$.

Regularizovaný systém lze kvantovat postulováním standardních kanonických komutačních relací⁷⁵

$$[\phi_i, \Pi_j] = \Delta V_j [\phi_i, \pi_j] = i\delta_{ij}. \quad (407)$$

V prostoru stavů existují zobecněné vlastní stavy operátorů ϕ_j

$$\phi_j |\Phi\rangle = \Phi_j |\Phi\rangle. \quad (408)$$

Kvantové stavy $|\psi\rangle$ lze reprezentovat v ϕ -reprezentaci jako vlnové funkce N proměnných Φ_j , definované skalárním součinem $\psi(\Phi_j) = \langle \Phi | \psi \rangle$, z Hilbertova prostoru $L_2(\mathbf{R}_N)$. Operátory ϕ_j jsou pak standardně reprezentovány operátorem násobení, operátory π_j pak pomocí diferenciálních operátorů, t.j.

$$\phi_j \psi(\Phi) = \Phi_j \psi(\Phi) \quad (409)$$

$$\pi_j \psi(\Phi) = -\frac{i}{\Delta V} \frac{\partial}{\partial \Phi_j} \psi(\Phi). \quad (410)$$

Všimněme si, že komutační relace (407) lze zformulovat “spojitě” v termínech po částech konstantních polí $\phi_{\text{reg}}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \phi_j \chi_{\Delta V_j}(\mathbf{x})$ a $\pi_{\text{reg}}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \pi_j \chi_{\Delta V_j}(\mathbf{x})$ ve tvaru

$$[\phi_{\text{reg}}(\mathbf{x}), \pi_{\text{reg}}(\mathbf{y})] = i \frac{1}{\Delta V} \delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (411)$$

kde $\delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \{0, 1\}$ podle toho, patří-li \mathbf{x} a \mathbf{y} do téže buňky. Limitní přechod k původní polní teorii $N \rightarrow \infty$ (t.j. $\Delta V_i \rightarrow 0$) tedy vyžaduje postulovat komutační relace ve “spojitém tvaru”

$$[\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y})] = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} [\phi_{\text{reg}}(\mathbf{x}), \pi_{\text{reg}}(\mathbf{y})] = i\delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (412)$$

Formální limitní přechod od Hilbertova prostoru $L_2(\mathbf{R}_N)$ a operátorů (409) k Hilbertovu prostoru stavů spojité kvantové teorie pole a příslušným polním operátorům však není přímočarý. Na rozdíl od relací (407) odpovídajících konečně mnoha stupňům volnosti, které měly až na unitární transformaci jednoznačnou reprezentaci (409), (410), existuje nekonečně mnoho unitárně neekvivalentních reprezentací komutačních relací spojité teorie (412). V dalším zavedeme formalismus, který nám umožní tento jev ilustrovat.

⁷⁵Od tohoto okamžiku až na výjimky budeme používat soustavu jednotek s $c = \hbar = 1$.

V analogii s ϕ reprezentací a v souladu s formálním limitním přechodem $N \rightarrow \infty$, $\Delta V \rightarrow 0$ reprezentujeme stavy kvantové teorie pole pomocí vlnových funkcionalů $\Psi[\Phi(\mathbf{x})]$, jejichž argumentem je klasická polní konfigurace $\Phi(\mathbf{x})$, aniž bychom blíže specifikovali podmínky na vlastnosti těchto funkcionalů. Reprezentací relací (412) na vlnových funkcionalích jsou operátory násobení a funkcionální derivace

$$\phi(\mathbf{y})\Psi[\Phi(\mathbf{x})] = \Phi(\mathbf{y})\Psi[\Phi(\mathbf{x})] \quad (413)$$

$$\pi(\mathbf{y})\Psi[\Phi(\mathbf{x})] = -i\frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{y})}\Psi[\Phi(\mathbf{x})]. \quad (414)$$

Reprezentaci prostoru stavů lze chápat jako analogii x -reprezentace v kvantové mechanice, předpokládáme-li existenci zobecněných společných vlastních stavů operátorů $\phi(\mathbf{x})$, t.j. stavů $|\Phi(\mathbf{x})\rangle$, indexovaných klasickými konfiguracemi $\Phi(\mathbf{x})$, splňujících

$$\phi(\mathbf{y})|\Phi(\mathbf{x})\rangle = \Phi(\mathbf{y})|\Phi(\mathbf{x})\rangle, \quad (415)$$

vlnové funkcionály lze pak chápat jako formální skalární součiny $\Psi[\Phi(\mathbf{x})] = \langle\Phi(\mathbf{x})|\Psi\rangle$. Jako příklad uveďme vlnové funkcionály vlastních stavů operátoru $\pi(\mathbf{x})$, t.j. stavů splňujících

$$\pi(\mathbf{y})|\Pi(\mathbf{x})\rangle = \Pi(\mathbf{y})|\Pi(\mathbf{x})\rangle. \quad (416)$$

V analogii s kvantovou mechanikou máme

$$\Psi_{\Pi}[\Phi(\mathbf{x})] = \langle\Phi(\mathbf{x})|\Pi(\mathbf{x})\rangle = \mathcal{N} \exp\left(i \int d^d\mathbf{y} \Pi(\mathbf{y})\Phi(\mathbf{y})\right), \quad (417)$$

kde \mathcal{N} je vhodný normalizační faktor.

Hilbertův prostor regularizované teorie lze chápat jako podprostor funkcionalů tvaru $\Psi_{\text{reg}}[\phi(\mathbf{x})] = \psi(\{\frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V_j} d^d\mathbf{x} \phi(\mathbf{x})\})$, kde $\psi \in L_2(\mathbf{R}_N)$ jsou původní vlnové funkce⁷⁶. Ztotožníme-li dále původní operátory ϕ_j a π_j s operátory $(1/\Delta V) \int_{\Delta V_j} d^d\mathbf{x} \phi(\mathbf{x})$, resp. $(1/\Delta V) \int_{\Delta V_j} d^d\mathbf{x} \pi(\mathbf{x})$, zreprodukujeme zpětně reprezentaci (409).

Ukažme, jak stavový prostor vlnových funkcionalů souvisí s Fockovým prostorem formalismu druhého kvantování. Uvažujme (neinteragující) teorii reálného skalárního pole s kvadratickým hamiltoniánem

$$H = \int d^d\mathbf{x} \frac{1}{2} \left(\pi(\mathbf{x})^2 + \phi(\mathbf{x})\Omega^2\phi(\mathbf{x}) \right), \quad (418)$$

kde Ω je jednočásticový (poprvé kvantovaný) hamiltonián (např. $\sqrt{-\nabla^2 + m^2}$ pro případ Kleinova-Gordonova pole s hmotou m). V dalším budeme pro jednoduchost předpokládat, že operátor Ω je diagonální v impulsové reprezentaci. Ve ϕ -reprezentaci lze napsat Schrödingrovu rovnici pro stacionární stavy

$$\frac{1}{2} \int d^d\mathbf{x} \left(-\frac{\delta^2}{\delta\Phi(\mathbf{x})^2} + \Phi(\mathbf{x})\Omega^2\Phi(\mathbf{x}) \right) \Psi_E[\Phi] = E\Psi_E[\Phi] \quad (419)$$

V analogii s kvantově mechanickým harmonickým oscilátorem máme pro základní stav

$$\Psi_0[\Phi] = \mathcal{N}_0 \exp\left(-\frac{1}{2} \int d^d\mathbf{x} \Phi(\mathbf{x})\Omega\Phi(\mathbf{x})\right), \quad (420)$$

⁷⁶Ekvivalentně lze ztotožnit Hilbertův prostor stavů regularizované teorie s funkcionaly na po částech konstantních polních konfiguracích $\phi_{\text{reg}}(\mathbf{x})$

kde \mathcal{N}_0 je vhodná normalizační konstanta. Odpovídající vlastní hodnota, jak se lze přesvědčit přímým dosazením do (419), je

$$E_0 = \frac{1}{2} \text{Tr} \Omega = \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{x} \langle \mathbf{x} | \Omega | \mathbf{x} \rangle, \quad (421)$$

kde Tr je funkcionální stopa operátoru. Pomocí operátorů $\pi(\mathbf{x})$, $\phi(\mathbf{x})$ lze sestrojít kreační a anihilační operátory předpisem⁷⁷

$$a(\mathbf{p}) = \int d^d \mathbf{x} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} (E(\mathbf{p})\phi(\mathbf{x}) + i\pi(\mathbf{x})) \quad (422)$$

$$a^+(\mathbf{p}) = \int d^d \mathbf{x} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} (E(\mathbf{p})\phi(\mathbf{x}) - i\pi(\mathbf{x})), \quad (423)$$

(kde funkce $E(\mathbf{p})$ je definována relací $\Omega e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} = E(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}$), přičemž platí

$$a(\mathbf{p})\Psi[\Phi] = 0, \quad (424)$$

a jsou splněny kanonické komutační relace⁷⁸

$$[a(\mathbf{p}), a^+(\mathbf{p}')] = (2\pi)^d 2E(\mathbf{p})\delta^{(d)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (425)$$

Tyto definiční relace lze snadno invertovat a vyjádřit operátory $\phi(\mathbf{x})$ a $\pi(\mathbf{x})$ pomocí kreačních a anihilačních operátorů⁷⁹

⁷⁷Pokud by operátor Ω nebyl diagonální v impulsové reprezentaci, konstruovali bychom kreační a anihilační operátory pomocí úplného systému vlastních stavů, splňujících

$$\Omega f_\alpha(\mathbf{x}) = E_\alpha f_\alpha(\mathbf{x}), \quad \int d^d \mathbf{x} f_\beta^*(\mathbf{x}) f_\alpha(\mathbf{x}) = (2\pi)^d \delta_{\alpha\beta},$$

kde α je soubor kvantových čísel, jednoznačně určující daný vlastní stav a $\delta_{\alpha\beta}$ je Diracova delta funkce pro spojité spektrum α , resp. Kroneckerovo delta pro diskrétní vlastní hodnoty. Příslušné formule pro kreační a anihilační operátory pak znějí

$$a_\alpha = \int d^d \mathbf{x} f_\alpha^*(\mathbf{x}) (E_\alpha \phi(\mathbf{x}) + i\pi(\mathbf{x}))$$

$$a_\alpha^+ = \int d^d \mathbf{x} f_\alpha(\mathbf{x}) (E_\alpha \phi(\mathbf{x}) - i\pi(\mathbf{x})).$$

Ostatní relace zůstávají v platnosti po záměně $\mathbf{p} \rightarrow \alpha$, $\int d\mathbf{p} \rightarrow \int d\alpha$, kde poslední integrál je symbolickým zápisem pro sumu přes diskrétní hodnoty α a integraci přes spojitou část spektra veličin α , tedy např. komutační relace jsou

$$[a_\alpha, a_\beta^+] = (2\pi)^d 2E_\alpha \delta_{\alpha\beta}$$

a inverzní relace mají tvar

$$\Phi(\mathbf{x}) = \int d\alpha \frac{1}{(2\pi)^d 2E_\alpha} (a_\alpha f_\alpha(\mathbf{x}) + a_\alpha^+ f_\alpha^*(\mathbf{x}))$$

$$\pi(\mathbf{x}) = \int d\alpha \frac{1}{2i(2\pi)^d} (a_\alpha f_\alpha(\mathbf{x}) - a_\alpha^+ f_\alpha^*(\mathbf{x})).$$

⁷⁸Následující formule odpovídá nekonečnému objemu V , v případě konečného objemu máme

$$[a(\mathbf{p}), a^+(\mathbf{p}')] = V 2E(\mathbf{p})\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}.$$

⁷⁹V této a následující formuli používáme integrání formule platné pro nekonečný objem V . V případě, že

$$\phi(\mathbf{x}) = \int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{2E(\mathbf{p})} \left(a(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + a^\dagger(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \right) \quad (426)$$

$$\pi(\mathbf{x}) = \int \frac{d^d \mathbf{p}}{2i(2\pi)^d} \left(a(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} - a^\dagger(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \right). \quad (427)$$

Hamiltonián v termínech anihilačních a kreačních operátorů má až na (obecně nekonečnou) konstantu standardní tvar podruhé kvantovaného jednočásticového operátoru⁸⁰ Ω

$$H = \int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d 2E(\mathbf{p})} \left(E(\mathbf{p}) a^\dagger(\mathbf{p}) a(\mathbf{p}) + V E(\mathbf{p})^2 \right). \quad (428)$$

Tedy $\Psi_0[\Phi]$ lze interpretovat jako fockovské vakuum a vlastní stavy tohoto hamiltoniánu lze reprezentovat vlnovými funkcionaly tvaru

$$\Psi_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_n}[\Phi] = a^\dagger(\mathbf{p}_1) \dots a^\dagger(\mathbf{p}_n) \Psi[\Phi], \quad (429)$$

interpretovanými jako n -částicové stavy s energií $E = \sum_i E(\mathbf{p}_i)$, t.j. např. jednočásticový stav má vlnový funkcional

$$\Psi_{\mathbf{p}}[\Phi] = \int d^d \mathbf{x} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} 2E(\mathbf{p}) \Phi(\mathbf{x}) \Psi_0[\Phi]. \quad (430)$$

n -částicové stavy tvoří zobecněnou bazi Fockova prostoru stavů. Formule (426) lze tedy chápat tak, že jsme zkonstruovali reprezentaci kanonických komutačních relací (412) na Fockově prostoru stavů, který je fyzikálně interpretovatelným Hilbertovým prostorem stavů (t.j. prostorem s korektně definovaným skalárním součinem, fixovaným relacemi (425)).

Jak nyní ukážeme, je Fockův prostor vlastním podprostorem plného prostoru funkcionalů $\Psi[\Phi]$, t.j. existují funkcionaly, které nelze vyjádřit jako (nekonečnou) superpozici těchto stavů. Ukážeme dokonce, že existují celé fockovské prostory takovýchto funkcionalů; jako takové budou tedy realizovat reprezentace kanonických komutačních relací, které však nebudou souviset navzájem unitární transformací.

Příklad takového prostoru sestojíme pomocí Fockova vakua $\Psi_0[\Phi]$ následovně. Uvažujme vlnový funkcional tvaru

$$\Psi_\eta[\Phi] = \Psi_0[\Phi - \eta] = \exp \left(- \int d^d \mathbf{x} \eta(\mathbf{x}) \frac{\delta}{\delta \Phi(\mathbf{x})} \right) \Psi_0[\Phi], \quad (431)$$

kde $\eta(\mathbf{x})$ je vhodná pevně zvolená klasická konfigurace. Snadno se přesvědčíme, že toto “posunuté” vakuum je anihilováno “posunutými” anihilačními operátory

$$a(\mathbf{p})_\eta = \int d^d \mathbf{x} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \left(E(\mathbf{p}) (\phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x})) + i\pi(\mathbf{x}) \right), \quad (432)$$

uvažujeme konečný objem, je třeba zaměnit impulsové integrály za diskrétní sumy

$$\int d^d \mathbf{p} \rightarrow \frac{(2\pi)^d}{V} \sum_{\mathbf{p} \in (2\pi/V^{1/d}) \mathbf{Z}_d}.$$

⁸⁰Zde jsme výraz zapsali v limitě $V \rightarrow \infty$ a formálně ztotožnili $\delta^{(d)}(0) = \frac{V}{(2\pi)^d}$.

sdružené kreační operátory mají tvar

$$a^+(\mathbf{p})_\eta = \int d^d \mathbf{x} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} (E(\mathbf{p})(\phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x})) - i\pi(\mathbf{x})). \quad (433)$$

Tyto operátory opět splňují relace (425), s jejich pomocí lze zkonstruovat Fockův prostor s vakuem $\Psi_\eta[\Phi]$.

Zkoumejme nyní vztah mezi původním a “posunutým” Fockovým prostorem. Zdánlivě přechod mezi původním a posunutým vakuem zprostředkovává unitární operátor

$$U[\eta] = \exp\left(-i \int d^d \mathbf{x} \eta(\mathbf{x}) \pi(\mathbf{x})\right), \quad (434)$$

neboť formálně

$$a(\mathbf{p})_\eta = U[\eta]a(\mathbf{p})U^+[\eta], \quad a^+(\mathbf{p})_\eta = U[\eta]a^+(\mathbf{p})U^+[\eta]. \quad (435)$$

Musíme však být opatrní, neboť na jednotlivých Fockových prostorech je třeba každý operátor vyjádřit pomocí normálně uspořádaných součinů odpovídajících kreačních a anihilačních operátorů. S využitím relace $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$, platné pro operátory komutující s komutátorem $[A, B]$, máme

$$\begin{aligned} U[\eta] &= \exp\left(-\int d^d \mathbf{x} \eta(\mathbf{x}) \int \frac{d^d \mathbf{p}}{2(2\pi)^d} (a(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} - a^+(\mathbf{p})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}})\right) \\ &= \exp\left(-\int \frac{d^d \mathbf{p}}{2(2\pi)^d} (a(\mathbf{p})\tilde{\eta}^*(\mathbf{p}) - a^+(\mathbf{p})\tilde{\eta}(\mathbf{p}))\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2} \int \frac{d^d \mathbf{p}}{2(2\pi)^d} E(\mathbf{p})|\tilde{\eta}(\mathbf{p})|^2\right) \exp\left(\int \frac{d^d \mathbf{p}}{2(2\pi)^d} a^+(\mathbf{p})\tilde{\eta}(\mathbf{p})\right) \\ &\times \exp\left(-\int \frac{d^d \mathbf{p}}{2(2\pi)^d} a(\mathbf{p})\tilde{\eta}^*(\mathbf{p})\right) \end{aligned} \quad (436)$$

kde $\tilde{\eta}(\mathbf{p}) = \int d^d \mathbf{x} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \eta(\mathbf{x})$ je Fourierova transformace funkce $\eta(\mathbf{x})$. Z poslední formule je zřejmé, že pro funkci $\tilde{\eta}(\mathbf{p})$, dostatečně hladkou a dostatečně rozumně se chovající v nekonečnu, je $U[\eta]$ dobře definovaný unitární operátor na původním Fockově prostoru a “posunutý” Fockův prostor je unitárně ekvivalentní původnímu. Je-li však⁸¹

$$\int \frac{d^d \mathbf{p}}{2(2\pi)^d} E(\mathbf{p})|\tilde{\eta}(\mathbf{p})|^2 \rightarrow \infty, \quad (437)$$

⁸¹Např. volíme-li $\eta(\mathbf{x}) = \eta = konst.$, máme v konečném objemu

$$\tilde{\eta}(\mathbf{p}) = \eta V \delta_{\mathbf{p},\mathbf{0}}$$

a tedy

$$\int \frac{d^d \mathbf{p}}{2(2\pi)^d} E(\mathbf{p})|\tilde{\eta}(\mathbf{p})|^2 \rightarrow \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p})|\tilde{\eta}(\mathbf{p})|^2 = \frac{1}{2} V \eta^2.$$

V limitě nekonečného objemu tedy dostáváme singulární chování operátoru $U[\eta]$. Poznamenejme, že nekonečný objem není jediným zdrojem tohoto jevu, dalším zdrojem jsou singularity v impulsových integrálech v ultrafialové oblasti $\mathbf{p} \rightarrow \infty$.

nastávají problémy, neboť jednotlivé faktory ve vyjádření operátoru $U[\eta]$ přestávají být dobře definované. Typickým projevem takovýchto singularit je fakt, že posunuté vakuum je ortogonální všem zobecněným vektorům baze původního prostoru. Skutečně,

$$\langle \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \dots \mathbf{p}_n | \Psi_\eta \rangle = \exp \left(-\frac{1}{2} \int \frac{d^d \mathbf{p}}{2(2\pi)^d} E(\mathbf{p}) |\tilde{\eta}(\mathbf{p})|^2 \right) \prod_{j=1}^n E(\mathbf{p}_j) \tilde{\eta}(\mathbf{p}_j) \rightarrow 0. \quad (438)$$

Totéž lze ukázat i pro ostatní normované stavy posunutého Fockova prostoru. Oba prostory jsou tudíž navzájem ortogonální a nejsou unitárně ekvivalentní. Podobně jsou unitárně neekvivalentní Fockovy prostory volných částic s různými hmotami a obecně s různými operátory Ω , t.j. různými⁸² $E(\mathbf{p})$.

Jak jsme viděli, prostor vlnových funkcionalů obsahuje podprostory, na nichž lze korektně definovat skalární součin. Vedle různých (obecně neekvivalentních) Fockových prostorů zahrnuje také přirozeným způsobem Hilbertův prostor regularizované teorie. Na posledním podprostoru bylo možné definovat skalární součin pomocí konečného součinu Lebesgueových měr $d\Phi_j$:

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int \prod_{j=1}^N d\Phi_j \Psi_1^*[\Phi] \Psi_2[\Phi] \quad (439)$$

Bylo by přirozené rozšířit tento způsob zápisu skalárního součinu na celý funkcionální prostor, t.j. definovat vhodně míru $\mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})$ na prostoru vlnových funkcionalů a psát

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}) \Psi_1^*[\Phi] \Psi_2[\Phi]. \quad (440)$$

Tento program lze korektně realizovat právě na Fockových podprostorech $\mathcal{F}_{\Omega,\eta}$, vybudovaných pomocí základních stavů typu

$$\Psi_{\Omega,\eta}[\Phi] = \mathcal{N}_\Omega^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} (\Phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x})) \langle \mathbf{x} | \Omega | \mathbf{y} \rangle (\Phi(\mathbf{y}) - \eta(\mathbf{y})) \right) \quad (441)$$

a kreačních a anihilačních operátorů (433). Funkcionály z takovéhoho prostoru jsou lineárním obalem funkcionalů typu

$$\Psi_{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n}[\Phi] = \Phi(\mathbf{x}_1) \Phi(\mathbf{x}_2) \dots \Phi(\mathbf{x}_n) \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi]. \quad (442)$$

Stačí tedy definovat následující funkcionální integrály

$$\int \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}) \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi] \Psi_{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n}[\Phi] \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi] \quad (443)$$

a nebo příslušný vytvořující funkcionál, z něhož tyto integrály plynou funkcionálním derivováním podle zdroje⁸³ $J(\mathbf{x})$:

$$Z_{\Omega,\eta}[J] = \int \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}) \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi] \exp \left(i \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x}) \right) \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi]. \quad (444)$$

⁸²T.j. s takovými $E_1(\mathbf{p})$, $E_2(\mathbf{p})$, že jejich podíl nekonverguje pro $\mathbf{p} \rightarrow \infty$ dostatečně rychle k jedničce.

⁸³Což není nic jiného než Fourierův obraz míry $\mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}) \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi] \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi]$.

Zřejmě musí být (má-li funkcionální integrace zreprodukovat skalární součin ve Fockově prostoru $\mathcal{F}_{\Omega,\eta}$)

$$\begin{aligned}
Z_{\Omega,\eta}[J] &= \langle \Psi_{\Omega,\eta} | \exp \left(i \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \right) | \Psi_{\Omega,\eta} \rangle = \\
&= e^{i \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x})} \langle \Psi_{\Omega,\eta} | \exp \left(i \int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d 2E(\mathbf{p})} \left(a(\mathbf{p})_{\eta} \tilde{J}^*(\mathbf{p}) + a^\dagger(\mathbf{p})_{\eta} \tilde{J}(\mathbf{p}) \right) \right) | \Psi_{\Omega,\eta} \rangle \\
&= \exp \left(i \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d 2E(\mathbf{p})} |\tilde{J}(\mathbf{p})|^2 \right) \\
&= \exp \left(i \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x}) - \frac{1}{4} \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} J(\mathbf{x}) \langle \mathbf{x} | \Omega^{-1} | \mathbf{y} \rangle J(\mathbf{y}) \right). \tag{445}
\end{aligned}$$

Máme tedy celkem, dosadíme-li explicitní tvar vlnového funkcionálu základního stavu,

$$\begin{aligned}
&\int \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}) \exp \left(- \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} (\Phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x})) \langle \mathbf{x} | \Omega | \mathbf{y} \rangle (\Phi(\mathbf{y}) - \eta(\mathbf{y})) + i \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x}) \right) \\
&= \mathcal{N}_{\Omega}^{-1} \exp \left(i \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x}) - \frac{1}{4} \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} J(\mathbf{x}) \langle \mathbf{x} | \Omega^{-1} | \mathbf{y} \rangle J(\mathbf{y}) \right), \tag{446}
\end{aligned}$$

což není nic jiného, než formule pro gaussovské integrování⁸⁴!

Uvažovaný Fockův prostor $\mathcal{F}_{\Omega,\eta}$ je tedy izomorfní prostoru $L_2(X, d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi])$ kvadraticky integrovatelných funkcionálů vzhledem ke gaussovské funkcionální míře⁸⁵

$$d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi] = \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}) \Psi_{\Omega,\eta}^*[\Phi] \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi]$$

(zde X je prostor polních konfigurací, na němž je definována gaussovská míra $d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi]$). Tento izomorfismus Hilbertových prostorů, zadaný prostřednictvím korespondence

$$\mathcal{F}_{\Omega,\eta} \ni \phi(\mathbf{x}_1) \phi(\mathbf{x}_2) \dots \phi(\mathbf{x}_n) | \Psi_{\Omega,\eta} \rangle \leftrightarrow \Phi(\mathbf{x}_1) \Phi(\mathbf{x}_2) \dots \Phi(\mathbf{x}_n) \in L_2(X, d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi]), \tag{447}$$

definuje novou analogii kvantověmechanické x -reprezentace, v níž jsou operátory $\phi(\mathbf{x})$ diagonální. Tato reprezentace se liší od schrödingerovské reprezentace se kterou jsme dosud pracovali. Protože vlnový funkcionál základního stavu je “vtažen” do míry, máme v této reprezentaci korespondenci

$$| \Psi_{\Omega,\eta} \rangle \leftrightarrow 1 \tag{448}$$

a obecně stav, původně popsáný vlnovým funkcionálem $\Psi[\Phi]$ se nyní popíše funkcionálem $\Psi_{\Omega,\eta}[\Phi]^{-1} \Psi[\Phi]$, kde $\Psi_{\Omega,\eta}[\Phi]$ je původní vlnový funkcionál základního stavu (Fockova vakua) (441). Odpovídajícím způsobem se také změní reprezentace operátoru $\pi(\mathbf{x})$:

$$\pi(\mathbf{x}) = -i \frac{\delta}{\delta \Phi(\mathbf{x})} + i \Omega(\Phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x})), \tag{449}$$

zatímco operátor $\phi(\mathbf{x})$ zůstane beze změny operátorem násobení funkcionálem $\Phi(\mathbf{x})$.

⁸⁴ Položíme-li $\mathcal{N}_{\Omega} = (\text{Det} \Omega / \pi)^{1/2}$

⁸⁵ Z matematického hlediska je to za jistých podmínek korektně definovaná míra, která je jednoznačně určena svým Fourierovým obrazem $Z_{\Omega,\eta}[J]$, chápaným jako zobrazení z prostoru Schwartzových testfunkcí $\mathcal{S}(\mathbf{R}_d)$ do komplexních čísel. Je-li tento funkcionál spojitý, pozitivně definitní a normovaný, je míra definovaná na prostoru temperovaných distribucí $\mathcal{S}'(\mathbf{R}_d)$, podrobněji viz [6]. Obráceně, je-li dána gaussovská míra na $\mathcal{S}'(\mathbf{R}_d)$, lze zrekonstruovat příslušný Fockův prostor. Některé vlastnosti gaussovských měř uvedeme v následující kapitole.

Výše zmiňovaná gaussovská míra $d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi]$ je charakterizována střední hodnotou

$$\langle \Phi(\mathbf{x}) \rangle = \int d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi] \Phi(\mathbf{x}) = \frac{\delta}{i\delta J(\mathbf{x})} Z_{\Omega,\eta}[J]|_{J=0} = \eta(\mathbf{x}) \quad (450)$$

a dvoubodovou korelační funkcí (v této souvislosti se též nazývá kovariančním operátorem)

$$\begin{aligned} \langle \Phi(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{y}) \rangle - \langle \Phi(\mathbf{x}) \rangle \langle \Phi(\mathbf{y}) \rangle &= \int d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi] \Phi(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{y}) - \eta(\mathbf{x})\eta(\mathbf{y}) \\ &= \frac{\delta^2}{i\delta J(\mathbf{x})i\delta J(\mathbf{y})} Z_{\Omega,\eta}[J]|_{J=0} - \eta(\mathbf{x})\eta(\mathbf{y}) = \langle \mathbf{x} | (2\Omega)^{-1} | \mathbf{y} \rangle. \end{aligned} \quad (451)$$

Samotná funkcionální “míra” $\mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})$ však neexistuje v rozumném matematickém smyslu. Abychom tedy mohli zobecnit kvantově mechanické formule pro reprezentaci Greenových funkcí dráhovým integrálem, což bude náš hlavní cíl v dalších podkapitolách, musíme se uchýlit buďto k regularizovanému systému s konečným počtem stupňů volnosti, nebo zafixovat pevně Fockův prostor (a tedy příslušnou gaussovskou funkcionální míru). První možnost vede k formulaci kvantové teorie pole na mříži, druhá pak k formální poruchové definici funkcionálního integrálu.

Na závěr poznamenejme, že alternativou k funkcionální ϕ -reprezentaci, která je analogem x -reprezentace v kvantové mechanice, je funkcionální π -reprezentace, odpovídající impulsové reprezentaci v případě konečně mnoha stupňů volnosti. Stav systému jsou v této reprezentaci popsány vlnovými funkcionály $\Psi[\Pi(\mathbf{x})]$ a operátory $\pi(\mathbf{x})$ jsou diagonální, zatímco operátory $\phi(\mathbf{x})$ působí jako funkcionální derivace:

$$\pi(\mathbf{x})\Psi[\Pi] = \Pi(\mathbf{x})\Psi[\Pi] \quad (452)$$

$$\phi(\mathbf{x})\Psi[\Pi] = i\frac{\delta}{\delta\Pi(\mathbf{x})}\Psi[\Pi]. \quad (453)$$

Fockovské vakuum, odpovídající poprvé kvantovanému hamiltoniánu Ω , má v π -reprezentaci vlnový funkcionál

$$\Psi_{\Omega}[\Pi] = \widetilde{\mathcal{N}}_{\Omega} \exp\left(-\frac{1}{2} \int d^d\mathbf{x} d^d\mathbf{y} \Pi(\mathbf{x}) \langle \mathbf{x} | \Omega^{-1} | \mathbf{y} \rangle \Pi(\mathbf{y})\right) \quad (454)$$

a lze zopakovat postup vedoucí na vyjádření skalárního součinu na příslušném Fockově prostoru funkcionálním integrálem. Gaussovská míra, spojená s tímto základním stavem, má kovarianční operátor roven $\Omega/2$ a platí o ní totéž, co o analogické míře v ϕ -reprezentaci.

2.2 Vlastnosti gaussovských funkcionálních měř

Podobně jako v případě kvantově mechanického dráhového integrálu neexistovala míra $\mathcal{D}\mathbf{x}(t)$, neexistuje ani funkcionální míra $\mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})$ v rigorózním matematickém smyslu. Dobře definovaná míra $d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi]$ vzniká analogicky jako Wienerova míra až “donásobením” vhodným faktorem, formálně

$$d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi] = \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}) \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi] \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi]^*. \quad (455)$$

V této podkapitole naznačíme, jak lze tuto a jí podobné míry - tzv. gaussovské míry na lineárních prostorech - rigorózně definovat, ukážeme některé jejich vlastnosti a typické početní postupy, které pak využijeme v konkrétních výpočtech.

Nejprve zavedeme několik pojmů, které budou užitečné i v dalším. Je přirozené požadovat, aby prostor argumentů vlnových funkcionalů, t.j. prostor polních konfigurací $\Phi(\mathbf{x})$, byl lineárním topologickým prostorem, nebo dokonce Hilbertovým prostorem nad reálnými čísly. Označme tento prostor X a jeho duál⁸⁶ (t.j. prostor spojitých lineárních funkcionalů) označme X^* . Hodnotu funkcionalu $J \in X^*$ na konfiguraci $\Phi(\mathbf{x})$ budeme nadále psát zkráceně $\langle J\Phi \rangle$. Soubor $\Lambda = \{j_i\}_{i=1}^n \subset X^*$ konečného počtu lineárně nezávislých spojitých lineárních funkcionalů j_i definuje lineární zobrazení $f_\Lambda : X \rightarrow \mathbf{R}^n$ předpisem

$$f_\Lambda[\Phi] = \Phi_\Lambda = [\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_n] = [\langle j_1\Phi \rangle, \langle j_2\Phi \rangle, \dots, \langle j_n\Phi \rangle], \quad (456)$$

tedy každé konfiguraci přiřadí n -tici reálných “souřadnic”. Například pro teorii pole v konečném objemu V lze vzít za prostor konfigurací X Hilbertův prostor (poprvé kvantovaných) vlnových funkcí jednočásticových stavů⁸⁷ a jako Λ např. prvních n normalizovaných vlastních vektorů operátoru Ω , v tomto případě odpovídá souřadnicím prvních n koeficientů rozvoje obecné konfigurace $\Phi(\mathbf{x})$ do této baze.

Je-li nyní na prostoru X definována míra $d\mu[\Phi]$, lze definovat její *konečnorozměrné projekce* jakožto míry $d\mu_\Lambda[\Phi_\Lambda]$ na \mathbf{R}^n

$$\mu_\Lambda(M) = \int_{f_\Lambda^{-1}(M)} d\mu[\Phi], \quad (457)$$

tedy míra $\mu_\Lambda(M)$ podmnožiny $M \in \mathbf{R}^n$ je rovna míře $\mu(f_\Lambda^{-1}M)$ tzv. cylindrické množiny⁸⁸ v X “se základnou M ”:

$$f_\Lambda^{-1}(M) = \{\Phi \in X, f_\Lambda[\Phi] \in M\} \quad (458)$$

Všimněme si analogie se stejnojmenným pojmem použitým při konstrukci Wienerovy míry - v obou případech je cylindrická množina určena konečně mnoha “souřadnicemi” na prostoru konfigurací (resp. trajektorií v případě Wienerovy míry) a podmnožinou přípustných hodnot těchto “souřadnic” v \mathbf{R}^n .

Známe-li konečnorozměrné projekce míry μ , lze podobně jako při konstrukci Wienerovy míry integrovat snadno tzv. cylindrické funkcionaly, které závisejí jen na konečném počtu “souřadnic”. Tyto funkcionaly mají obecně tvar

$$F[\Phi] = \varphi(f_\Lambda[\Phi]), \quad (459)$$

kde $\varphi(\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_n)$ je funkce n reálných proměnných. Integrál cylindrického funkcionalu je pak dán formulí

$$\int d\mu[\Phi] F[\Phi] = \int d\mu_\Lambda[\Phi_\Lambda] \varphi(\Phi_\Lambda). \quad (460)$$

Platnost této rovnosti lze snadno dokázat pro jednoduché cylindrické funkcionaly, pro něž funkce φ je lineární kombinace charakteristických funkcí množin v \mathbf{R}^n . Tyto funkcionaly jsou tudíž lineárními kombinacemi charakteristických funkcionalů cylindrických množin,

$$F[\Phi] = \sum_j F_j \chi_{M_j}(f_\Lambda[\Phi]) = \sum_j F_j \chi_{f_\Lambda^{-1}(M_j)}[\Phi].$$

⁸⁶Poznamenejme, že je-li X Hilbertův prostor, je $X^* = X$.

⁸⁷Obvykle se prostor X konstruuje jako vhodné zúplnění prostoru nataženého na vlastní stavy jednočásticového hamiltoniánu.

⁸⁸Zde samozřejmě předpokládáme, že cylindrické množiny jsou měřitelné vzhledem k míře μ .

Odpovídající funkce $\varphi(\Phi_\Lambda)$ je pak jednoduchou měřitelnou funkcí vzhledem ke konečnorozměrné projekci $d\mu_\Lambda[\Phi_\Lambda]$,

$$\varphi(\Phi_\Lambda) = \sum_j F_j \chi_{M_j}(\Phi_\Lambda)$$

a platí

$$\begin{aligned} \int d\mu[\Phi] F[\Phi] &= \int d\mu[\Phi] \sum_j F_j \chi_{f_\Lambda^{-1}(M_j)}[\Phi] \\ &= \sum_j F_j \int_{f_\Lambda^{-1}(M_j)} d\mu[\Phi] \\ &= \sum_j F_j \mu_\Lambda(M_j) \\ &= \int d\mu_\Lambda[\Phi_\Lambda] \varphi(\Phi_\Lambda). \end{aligned}$$

Vyjádříme-li obecný cylindrický funkcionál jako limitu posloupnosti jednoduchých cylindrických funkcionálů, dostaneme formuli (460) limitním přechodem.

Vraťme se nyní ke gaussovským mírám. Každou funkcionální míru lze jednoznačně definovat pomocí charakteristického funkcionálu (Fourierova obrazu). Pro gaussovské míry má tento funkcionál obecný tvar⁸⁹

$$Z[J] = \int d\mu[\Phi] \exp(i\langle J\Phi \rangle) = \exp\left(i\langle J\eta \rangle - \frac{1}{2}\langle J C J \rangle\right), \quad (461)$$

kde η je prvek prostoru polních konfigurací a $C : X^* \rightarrow X$ je symetrický pozitivně definitní operátor⁹⁰.

Nalezneme nyní konečnorozměrné projekce míry $d\mu[\Phi]$. Zvolme $\Lambda = \{j_i\}_{i=1}^n$ a pišme $J = \sum_{i=1}^n j_i J_i$, $\mathbf{J}_\Lambda = [J_1, \dots, J_n]$, $\Phi_\Lambda = [\langle j_1 \Phi \rangle, \dots, \langle j_n \Phi \rangle]$ a obdobně $\eta_\Lambda = [\langle j_1 \eta \rangle, \dots, \langle j_n \eta \rangle]$. Integrand v definičním výrazu pro $Z[J]$ je pak cylindrickým funkcionálem ve smyslu předchozí definice - závisí totiž pouze na "souřadnicích" $\langle j_i \Phi \rangle$. Pro integraci tohoto funkcionálu lze použít formuli (460); pravá strana této formule má v tomto případě význam charakteristické funkce (t.j. Fourierova obrazu) $Z(\alpha)$ konečnorozměrné projekce $d\mu_\Lambda[\Phi_\Lambda]$. Dosadíme-li za J do pravé strany formule (461), obdržíme

$$Z(\alpha) = \int d\mu_\Lambda[\Phi_\Lambda] \exp(i\alpha^T \cdot \Phi_\Lambda) = \exp\left(i\alpha^T \cdot \eta_\Lambda - \frac{1}{2}\alpha^T \cdot \mathbf{C}_\Lambda \cdot \alpha\right). \quad (462)$$

Zde $\mathbf{C}_\Lambda = \{\langle j_i C j_k \rangle\}_{i,k=1}^n$ je matice $n \times n$, odpovídající konečnorozměrné projekci kovariančního operátoru C . Snadno se lze přesvědčit⁹¹ užitím inverzní Fourierovy transformace, že

⁸⁹Nadále budeme užívat zkrácený zápis $\langle J\eta \rangle = \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x})$, $\langle J C J \rangle = \int d^d \mathbf{x} \int d^d \mathbf{y} J(\mathbf{x}) C(\mathbf{x}, \mathbf{y}) J(\mathbf{y})$, atd.

⁹⁰Je-li míra definovaná na lineárním prostoru funkcí $\Phi(\mathbf{x})$, (obvykle tyto funkce tvoří Hilbertův prostor, případně prostor distribucí na vhodných testfunkcích), je argumentem charakteristického funkcionálu prvek duálu k tomuto prostoru (tedy prvek téhož Hilbertova prostoru, resp. testfunkce). Střední hodnota η pak náleží do téhož prostoru jako funkce $\Phi(\mathbf{x})$ a (symetrický) kovarianční operátor C zobrazuje prvky duálního prostoru do prostoru funkcí $\Phi(\mathbf{x})$. Nutnou a postačující podmínkou σ -aditivity gaussovské míry na Hilbertově prostoru je, aby operátor C byl nezáporný a jaderný (t.j. omezený s konečnou stopou). Pokud však poslední podmínka není splněna, lze vždy Hilbertův prostor vhodně rozšířit.

⁹¹Předpokládáme, že operátor C je pozitivně definitní a symetrický, tedy i matice \mathbf{C}_Λ má tyto vlastnosti.

tímto vytvořujícím funkcioálem je určena míra

$$d\mu_\Lambda[\Phi_\Lambda] = d^n \Phi_\Lambda \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi \mathbf{C}_\Lambda)}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\Phi_\Lambda - \eta_\Lambda)^T \cdot \mathbf{C}_\Lambda^{-1} \cdot (\Phi_\Lambda - \eta_\Lambda)\right). \quad (463)$$

Tedy všechny konečnorozměrné projekce míry μ s charakteristickým funkcioálem (461) jsou konečněrozměrnými gaussovskými mírami na \mathbf{R}^n .

Ilustrujme tyto obecné pojmy na důležitém speciálním příkladu. V předchozí podkapitole jsme naznačili souvislost mezi Fockovým prostorem $\mathcal{F}_{\Omega,\eta}$, sestrojeným pomocí působení kreačních operátorů

$$a^+(\mathbf{p}) = \int d^d \mathbf{x} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} (E(\mathbf{p})(\Phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x})) - i\pi(\mathbf{x}))$$

na fockovské vakuum $|\Psi_{\Omega,\eta}\rangle$ s vlnovým funkcioálem $\langle \Phi | \Psi_{\Omega,\eta} \rangle = \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi]$ a prostorem kvadraticky integrovatelných funkcioálů vzhledem ke gaussovské funkcioální míře, formálně zapsané ve tvaru $d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi] = \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}) \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi] \Psi_{\Omega,\eta}[\Phi]^*$. Pro charakteristický funkcioál této míry jsme z požadavku možnosti vyjádřit skalární součin na Fockově prostoru $\mathcal{F}_{\Omega,\eta}$ funkcioálním integrálem dostali

$$Z_{\Omega,\eta}[J] = \int d\mu[\Phi] \exp\left(i\langle J\eta \rangle - \frac{1}{2}\langle J \frac{1}{2\Omega} J \rangle\right).$$

V tomto případě hraje roli kovariančního operátoru operátor $(2\Omega)^{-1}$. Konečnorozměrné projekce této gaussovské míry na podprostorech souřadnic odpovídajícím koeficientům rozkladu obecné konfigurace do vlastních stavů $f_j(\mathbf{x})$ jednočásticového hamiltoniánu Ω příslušných vlastním hodnotám $E_0 \leq E_1 \leq \dots \leq E_j \leq \dots$ jsou⁹²

$$d\mu_N(\Phi_j) = \prod_{j=1}^N \sqrt{\frac{E_j}{\pi}} e^{-E_j(\Phi_j - \eta_j)^2} d\Phi_j, \quad (464)$$

kde $\Phi(\mathbf{x}) = \sum_j \Phi_j f_j(\mathbf{x})$ a $\eta(\mathbf{x}) = \sum_j \eta_j f_j(\mathbf{x})$. Ve smyslu formule (464) lze chápat symbolický zápis

$$d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi] = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \sqrt{\frac{E_j}{\pi}} e^{-E_j(\Phi_j - \eta_j)^2} d\Phi_j \quad (465)$$

jako rozklad gaussovské míry na přímý součin jednorozměrných gaussovských měr odpovídajících jednotlivým módům jednočásticového hamiltoniánu Ω . Náhrada míry $d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi]$ její konečněrozměrnou projekcí (464) je příkladem regularizace gaussovské míry odřezáním ultrafialové části spektra.

Znalost konečněrozměrných projekcí umožňuje vedle integrálů cylindrických funkcioálů často počítat i integrály z funkcioálů, které jsou bodovými limitami posloupnosti cylindrických funkcioálů⁹³. Souvislost gaussovské míry a Fockova prostoru umožňuje ještě další "algebraické" metody výpočtu gaussovských funkcioálních integrálů. K tomu je vhodné podrobněji studovat reprezentaci Fockova prostoru $\mathcal{F}_{\Omega,\eta}$ kvantové teorie volného reálného skalárního pole Hilbertovým prostorem $L_2(X, d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi])$ kvadraticky integrovatelných funkcioálů vzhledem k míře $d\mu_{\Omega,\eta}[\Phi]$.

⁹²Předpokládáme mlčky konečný objem a tedy diskrétní spektrum operátoru Ω .

⁹³Abychom mohli použít větu o záměně limity a integrace, potřebujeme integrovatelnou majorantu - tou často může být konstantní funkcioál, neboť $\int d\mu[\Phi] = 1$.

Připomeňme, že v této reprezentaci je operátor $\pi(\mathbf{x})$ dán vztahem

$$\pi(\mathbf{x}) = -i\frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} + i\Omega(\Phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x})), \quad (466)$$

a operátor $\phi(\mathbf{x})$ má následující rozklad pomocí kreačních a anihilačních operátorů:

$$\phi(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{x}) = \int \tilde{d}\mathbf{p}(a(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + a^+(\mathbf{p})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}) + \eta(\mathbf{x}), \quad (467)$$

kde používáme označení $\tilde{d}\mathbf{p} = d^d\mathbf{p}/(2\pi)^d 2E(\mathbf{p})$.

Díky korespondenci (447) lze interpretovat v této nové Schrödingerově reprezentaci monomy $\Phi(\mathbf{x}_1)\Phi(\mathbf{x}_2)\dots\Phi(\mathbf{x}_n)$ jednak jako vlnové funkcionály (zobecněných) stavů z Fockova prostoru $\mathcal{F}_{\Omega,\eta}$, jednak jako operátory, které tyto stavy generují z vakua. Tato dvojaká interpretace umožňuje zavést operaci normálního uspořádání monomů

$$\Phi(\mathbf{x}_1)\Phi(\mathbf{x}_2)\dots\Phi(\mathbf{x}_n) \rightarrow: \Phi(\mathbf{x}_1)\Phi(\mathbf{x}_2)\dots\Phi(\mathbf{x}_n): \quad (468)$$

chápaných jakožto vlnové funkcionály prostřednictvím normálního uspořádání odpovídajících operátorů - totiž vyjádřením těchto operátorů pomocí kreačních a anihilačních operátorů a následným přeuspořádáním všech anihilačních operátorů napravo od kreačních. Tedy například (pro jednoduchost budeme předpokládat $\eta = 0$)

$$\begin{aligned} &: \Phi(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{y}): = \\ &= \int \tilde{d}\mathbf{p}(a(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + a^+(\mathbf{p})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}) \int \tilde{d}\mathbf{q}(a(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}} + a^+(\mathbf{q})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}}) : \\ &= \int \tilde{d}\mathbf{p}\tilde{d}\mathbf{q}(a(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}a(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}} + a^+(\mathbf{p})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}a(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}} \\ &\quad + a^+(\mathbf{q})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}}a(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + a^+(\mathbf{p})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}a^+(\mathbf{q})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}}) \\ &= \Phi(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{y}) - \int \tilde{d}\mathbf{p}\tilde{d}\mathbf{q}[a(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}, a^+(\mathbf{q})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}}] \\ &= \Phi(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{y}) - \int \tilde{d}\mathbf{p}e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \\ &= \Phi(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{y}) - \frac{1}{2}\Omega^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \end{aligned}$$

Definici normálního uspořádání lze rozšířit na libovolný funkcionál tvaru (funkcionály tohoto typu se někdy nazývají analytické)

$$F[\Phi] = \sum_{n=0}^{\infty} \int d^d\mathbf{x}_1 \dots d^d\mathbf{x}_n f_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \Phi(\mathbf{x}_1) \dots \Phi(\mathbf{x}_n) \quad (469)$$

předpisem

$$: F[\Phi] := \sum_{n=0}^{\infty} \int d^d\mathbf{x}_1 \dots d^d\mathbf{x}_n f_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) : \Phi(\mathbf{x}_1) \dots \Phi(\mathbf{x}_n) : \quad (470)$$

Tato definice umožňuje operaci normálního uspořádání s výhodou kompaktně zapsat pomocí vytvářejícího funkcionálu normálně uspořádaných monomů

$$: \Phi(\mathbf{x}_1)\Phi(\mathbf{x}_2)\dots\Phi(\mathbf{x}_n) := \frac{\delta^n}{i\delta J(\mathbf{x}_1)\dots i\delta J(\mathbf{x}_n)} : \exp\left(i \int d^d\mathbf{x} J(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{x})\right) : |_{J=0}. \quad (471)$$

Pro vytvářející funkcionál dostáváme s užitím kanonických komutačních relací:

$$\begin{aligned}
& : \exp \left(i \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x}) \right) : \\
&= \exp \left(i \int \tilde{d}\mathbf{p} d^d \mathbf{x} a^\dagger(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} J(\mathbf{x}) \right) \exp \left(i \int \tilde{d}\mathbf{p} d^d \mathbf{x} a(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} J(\mathbf{x}) \right) \\
&\times \exp \left(i \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x}) \right) \\
&= \exp \left(i \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int \tilde{d}\mathbf{p} d^d \mathbf{x} d^d \mathbf{y} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} J(\mathbf{x}) J(\mathbf{y}) \right) \\
&= \exp \left(\frac{1}{2} \int d^d \mathbf{x} d^d \mathbf{y} J(\mathbf{x}) (2\Omega)^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) J(\mathbf{y}) \right) \exp \left(i \int d^d \mathbf{x} J(\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x}) \right),
\end{aligned}$$

kde druhá řádka představuje definici normálního uspořádání a při přechodu na třetí řádku jsme užili formuli $e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}$. V kompaktním značení:

$$: \exp(i\langle J\Phi \rangle) := \exp(i\langle J\Phi \rangle) \exp\left(\frac{1}{2}\langle J \frac{1}{2\Omega} J \rangle\right). \quad (472)$$

Je užitečné zobecnit korespondenci s Fockovým prostorem na případ libovolné gaussovské míry s kovariančním operátorem C a střední hodnotou η - příslušný “jednočásticový hamiltonián” je dán operátorem $\Omega_C = (1/2)C^{-1}$. Pro nás bude v dalším důležitá právě zobecněná operace normálního uspořádání vzhledem ke kovarianci C , odvození jejíchž vlastností se budeme nyní blíže věnovat.

Formule pro vytvářející funkcionál normálně uspořádaných monomů vzhledem ke kovarianci C je přímým zobecněním formule (472):

$$\begin{aligned}
: \exp(i\langle J\Phi \rangle) :_C &= \exp(i\langle J\Phi \rangle) \exp\left(\frac{1}{2}\langle JCJ \rangle\right) \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2}\langle \frac{\delta}{\delta\Phi} C \frac{\delta}{\delta\Phi} \rangle\right) \exp(i\langle J\Phi \rangle).
\end{aligned} \quad (473)$$

Poslední výraz plyne z formule $F[\delta/i\delta\Phi] \exp(i\langle J\Phi \rangle) = F[J] \exp(i\langle J\Phi \rangle)$, platné pro funkcionály typu (469). Tatáž formule dává

$$\begin{aligned}
: F[\Phi] :_C &= : F \left[\frac{\delta}{i\delta J} \right] \exp(i\langle J\Phi \rangle) :_C |_{J=0} \\
&= F \left[\frac{\delta}{i\delta J} \right] : \exp(i\langle J\Phi \rangle) :_C |_{J=0} \\
&= F \left[\frac{\delta}{i\delta J} \right] \exp\left(-\frac{1}{2}\langle \frac{\delta}{\delta\Phi} C \frac{\delta}{\delta\Phi} \rangle\right) \exp(i\langle J\Phi \rangle) |_{J=0}.
\end{aligned}$$

Uvědomíme-li si záměnnost funkcionálních derivací vzhledem k J a Φ , dostaneme konečně užitečnou formuli

$$: F[\Phi] :_C = \exp\left(-\frac{1}{2}\langle \frac{\delta}{\delta\Phi} C \frac{\delta}{\delta\Phi} \rangle\right) F[\Phi]. \quad (474)$$

Odtud plyne následující pravidlo pro derivování normálně uspořádaných funkcionálů:

$$\frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} : F[\Phi] :_C =: \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} F[\Phi] :_C. \quad (475)$$

Jak je vidět z předešlých dvou formulí (474,475), lze každý funkcionál $F[\Phi]$ typu (469) vyjádřit pomocí normálně uspořádaného funkcionálu $\exp\left(\frac{1}{2}\langle\frac{\delta}{\delta\Phi}C\frac{\delta}{\delta\Phi}\rangle\right)F[\Phi]$,

$$F[\Phi] =: \exp\left(\frac{1}{2}\langle\frac{\delta}{\delta\Phi}C\frac{\delta}{\delta\Phi}\rangle\right)F[\Phi] :_C . \quad (476)$$

Jak uvidíme v dalším, funkcionály tvaru $:F[\Phi]:$ lze velmi snadno integrovat vzhledem ke gaussovské míře. Odvodíme proto nyní několik pravidel pro počítání s operací normálního uspořádání. Aplikujeme-li na formuli pro součin normálně uspořádaných exponenciál

$$: \exp(i\langle J\Phi \rangle) :_C : \exp(i\langle K\Phi \rangle) :_C =: \exp(i\langle (J+K)\Phi \rangle) :_C \exp(-\langle JCK \rangle) \quad (477)$$

operátor $\delta/i\delta K(\mathbf{x})$, položíme-li ve výsledku $K=0$ a uvážíme-li, že $: \Phi(\mathbf{x}) :_C = \Phi(\mathbf{x})$, dostaneme po úpravě

$$: \Phi(\mathbf{x}) \exp(i\langle J\Phi \rangle) :_C = \Phi(\mathbf{x}) : \exp(i\langle J\Phi \rangle) :_C - C \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} : \exp(i\langle J\Phi \rangle) :_C, \quad (478)$$

odkud, působením operátoru $F[\delta/i\delta J]$ pro $J=0$, obdržíme konečně

$$: \Phi(\mathbf{x}) F[\Phi] :_C = \Phi(\mathbf{x}) : F[\Phi] :_C - C \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} : F[\Phi] :_C . \quad (479)$$

Tuto formuli lze použít k rekurentnímu výpočtu normálně uspořádaných monomů.

V dalším budeme potřebovat explicitní formu výrazu $: \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C$, kde A je operátor takový, že operátor CA má konečnou stopu a operátor $1+AC$ je invertibilní.

Nejprve odvodíme funkcionální rovnici pro $: \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C$. Pomocí pravidel (475), (479) dostáváme postupně

$$\begin{aligned} & \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} : \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C \\ &= : A\Phi(\mathbf{x}) \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C \\ &= A\Phi(\mathbf{x}) : \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C - AC \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} : \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C . \end{aligned}$$

Tedy

$$(1+AC) \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} : \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C = A\Phi(\mathbf{x}) : \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C .$$

Obecné řešení této rovnice snadno nalezneme ve tvaru

$$\begin{aligned} & : \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C = K \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi(1+AC)^{-1}A\Phi\rangle\right) \\ &= K \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi(A^{-1}+C)^{-1}\Phi\rangle\right) \end{aligned}$$

kde K je konstanta, jak je vidět z poslední formule, platí

$$K =: \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C |_{\Phi=0} .$$

Uvažujme pomocnou funkci $K(\alpha) =: \exp\left(\frac{\alpha}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C |_{\Phi=0}$, pro její derivaci máme

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial K(\alpha)}{\partial \alpha} = \frac{\partial}{\partial \alpha} : \exp\left(\frac{\alpha}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C |_{\Phi=0} \\
& = : \frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle \exp\left(\frac{\alpha}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C |_{\Phi=0} \\
& = \frac{1}{2}\langle\Phi A : \Phi\rangle \exp\left(\frac{\alpha}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C |_{\Phi=0} - : \frac{1}{2}\langle\frac{\delta}{\delta\Phi}CA\Phi\rangle \exp\left(\frac{\alpha}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C |_{\Phi=0} \\
& = -\frac{1}{2}\text{Tr}CA : \exp\left(\frac{\alpha}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C |_{\Phi=0} - \frac{\alpha}{2} : \langle\Phi ACA\Phi\rangle \exp\left(\frac{\alpha}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C |_{\Phi=0} \\
& = \left(-\frac{1}{2}\text{Tr}CA + \frac{\alpha}{2}\text{Tr}CACACA - \frac{\alpha^2}{2}\text{Tr}CACACACA + \dots\right) : \exp\left(\frac{\alpha}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C |_{\Phi=0} \\
& = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^j \alpha^{j-1} \text{Tr}(CA)^j K(\alpha).
\end{aligned}$$

Zde jsme opět užíli pravidla (475), (479). Integrací v mezích $(0, \alpha)$ máme

$$\ln \frac{K(\alpha)}{K(0)} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^j \frac{\alpha^j}{j} \text{Tr}(CA)^j = -\frac{1}{2} \text{Tr} \ln(1 + \alpha CA), \quad (480)$$

řada je konvergentní pro $-1 < \alpha CA < 1$. tedy

$$K = K(1) = \exp\left(-\frac{1}{2}\text{Tr} \ln(1 + CA)\right).$$

Konečná forma hledané formule tudíž zní

$$: \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) :_C = \exp\left(-\frac{1}{2}\text{Tr} \ln(1 + CA)\right) \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi(A^{-1} + C)^{-1}\Phi\rangle\right) \quad (481)$$

a inverzní formule je:

$$\exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) = \exp\left(-\frac{1}{2}\text{Tr} \ln(1 - CA)\right) : \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi(A^{-1} - C)^{-1}\Phi\rangle\right) :_C. \quad (482)$$

Důležitost normálně uspořádaných funkcionalů spočívá v následující formuli pro jejich integrál vzhledem ke gaussovské míře s kovariancí C a střední hodnotou η :

$$\int d\mu[\Phi] : F[\Phi] :_C = F[\eta], \quad (483)$$

která je důsledkem formule⁹⁴

$$\begin{aligned}
\int d\mu[\Phi] : \exp(i\langle J\Phi\rangle) :_C &= \exp\left(\frac{1}{2}\langle J C J\rangle\right) \int d\mu[\Phi] \exp(i\langle J\Phi\rangle) \\
&= \exp\left(\frac{1}{2}\langle J C J\rangle\right) Z[J] \\
&= \exp(i\langle J\eta\rangle),
\end{aligned}$$

⁹⁴Tuto formuli lze snadno pochopit, uvědomíme-li si korespondenci $\int d\mu[\Phi] F[\Phi] = \langle 0|F[\widehat{\Phi}]|0\rangle$, kde $|0\rangle$ je vakuum Fockova prostoru odpovídajícímu jednočásticovému hamiltoniánu $\Omega_C = 1/(2C)$ a polním operátorům (467).

z níž vyplývá

$$\int d\mu[\Phi] : \Phi(\mathbf{x}_1) \dots \Phi(\mathbf{x}_n) :_C = \eta(\mathbf{x}_1) \dots \eta(\mathbf{x}_n). \quad (484)$$

Jsme-li tedy schopni vyjádřit daný funkcionál pomocí normálně uspořádaného funkcionálu, je jeho integrace triviální. Ilustrujme to na důležitém speciálním případě $\exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle + i\langle J\Phi\rangle\right)$. Nejprve tento funkcionál vyjádříme pomocí normálně uspořádané formy užitím formule (482)

$$\begin{aligned} & \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle + i\langle J\Phi\rangle\right) \\ = & \exp\left(\frac{1}{2}\langle(\Phi + iA^{-1}J)A(\Phi + iA^{-1}J)\rangle\right) \exp\left(\frac{1}{2}\langle JA^{-1}J\rangle\right) \\ = & \exp\left(\frac{1}{2}\langle JA^{-1}J\rangle\right) \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle\right) |_{\Phi \rightarrow \Phi + iA^{-1}J} \\ = & \exp\left(\frac{1}{2}\langle JA^{-1}J\rangle\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\text{Tr} \ln(1 - CA)\right) \\ \times & : \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi(A^{-1} - C)^{-1}\Phi\rangle\right) :_C |_{\Phi \rightarrow \Phi + iA^{-1}J}. \end{aligned}$$

Nyní snadno zintegrujeme podle pravidla (483):

$$\begin{aligned} & \int d\mu[\Phi] \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle + i\langle J\Phi\rangle\right) \\ = & \exp\left(\frac{1}{2}\langle JA^{-1}J\rangle\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\text{Tr} \ln(1 - CA)\right) \\ \times & \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi(A^{-1} - C)^{-1}\Phi\rangle\right) |_{\Phi \rightarrow \eta + iA^{-1}J}. \end{aligned}$$

Pomocí identity

$$A^{-1} - A^{-1}(A^{-1} - C)^{-1}A^{-1} = (A - C^{-1})^{-1}$$

obdržíme výslednou formuli, kterou často upotřebíme v dalším:

$$\begin{aligned} & \int d\mu[\Phi] \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi A\Phi\rangle + i\langle J\Phi\rangle\right) \\ = & \exp\left(-\frac{1}{2}\text{Tr} \ln(1 - CA)\right) \exp\left(\frac{1}{2}\langle J(A - C^{-1})^{-1}J\rangle\right) \\ \times & \exp\left(\frac{1}{2}\langle\eta(A^{-1} - C)^{-1}\eta\rangle\right) \exp\left(i\langle\eta(1 - AC)^{-1}J\rangle\right). \end{aligned} \quad (485)$$

Platnost této formule je omezena platností vztahu (482), tedy musí být CA jaderný operátor, $-1 < CA < 1$.

Uveďme ještě dvě vlastnosti gaussovské míry vzhledem k transformacím a formuli, která je funkcionálním zobecněním integrace per partes. Uvažujme zobrazení

$$f_\lambda : \Phi(\mathbf{x}) \rightarrow \Psi(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{x}) + \lambda(\mathbf{x}) \quad (486)$$

kde $\lambda(\mathbf{x})$ je pevně zvolená konfigurace a definujme posunutou míru relací

$$\mu_\lambda(M) = \mu(f_\lambda^{-1}(M)), \quad (487)$$

takže platí

$$\int d\mu_\lambda[\Psi]F[\Psi] = \int d\mu[\Phi]F[\Phi + \lambda].$$

Pro charakteristický funkcionál (Fourierův obraz) míry $d\mu_\lambda$ dostáváme (srov. (461))

$$\begin{aligned} Z_\lambda[J] &= \int d\mu_\lambda[\Psi] \exp(i\langle J\Psi \rangle) = \int d\mu[\Phi] \exp(i\langle J(\Phi + \lambda) \rangle) \\ &= \exp\left(i\langle J(\eta + \lambda) \rangle - \frac{1}{2}\langle J C J \rangle\right), \end{aligned} \quad (488)$$

tedy “posunutá” míra $d\mu_\lambda$ má stejnou kovarianci a posunutou střední hodnotu. Zcela analogicky, definujeme-li transformaci na prostoru konfigurací předpisem

$$f_L : \Phi(\mathbf{x}) \rightarrow \Psi(\mathbf{x}) = L\Phi(\mathbf{x}), \quad (489)$$

kde L je lineární operátor, a míru

$$\mu_L(M) = \mu(f_L^{-1}(M)), \quad (490)$$

takže platí

$$\int d\mu_L[\Psi]F[\Psi] = \int d\mu[\Phi]F[L\Phi] \quad (491)$$

a máme

$$\begin{aligned} Z_L[J] &= \int d\mu_L[\Psi] \exp(i\langle J\Psi \rangle) = \int d\mu[\Phi] \exp(i\langle JL\Phi \rangle) \\ &= \exp\left(i\langle JL\eta \rangle - \frac{1}{2}\langle J L C L^T J \rangle\right). \end{aligned} \quad (492)$$

Kovariance transformované míry $d\mu_L[\Psi]$ je tedy $C_L = L C L^T$, kde L^T značí transponovaný operátor a nová střední hodnota je $\eta_L = L\eta$.

Počítejme konečně integrál z funkcionálu $C^{-1}(\Phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x}))F[\Phi]$. Definujme pomocný funkcionál $G[\Phi] = \exp\left(\frac{1}{2}\langle \frac{\delta}{\delta\Phi} C \frac{\delta}{\delta\Phi} \rangle\right) F[\Phi]$, potom $F[\Phi] =: G[\Phi] :_C$. Máme postupně s užitím (479) a pravidla (483)

$$\begin{aligned} \int d\mu[\Phi]C^{-1}(\Phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x}))F[\Phi] &= \int d\mu[\Phi]C^{-1}(\Phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x})) : G[\Phi] :_C \\ &= \int d\mu[\Phi] : C^{-1}(\Phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x}))G[\Phi] :_C + \int d\mu[\Phi] \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} : G[\Phi] :_C \\ &= C^{-1}(\Phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x}))G[\Phi]|_{\Phi \rightarrow \eta} + \int d\mu[\Phi] \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} F[\Phi] \\ &= \int d\mu[\Phi] \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} F[\Phi]. \end{aligned}$$

Tedy máme formuli

$$\int d\mu[\Phi] \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} F[\Phi] = \int d\mu[\Phi] C^{-1}(\Phi(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{x}))F[\Phi], \quad (493)$$

kterou lze chápat jako pravidlo integrace per partes.

Výsledky této podkapitoly lze shrnout v sérii intuitivních pravidel, která umožňují snadno manipulovat s gaussovskými integrály. Tato pravidla obsahují některé neexistující (samostatně nedefinované nebo divergentní) objekty, jako “míru” $\mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})$, funkcionální determinanty neomezených operátorů atd., proto je třeba chápat je spíše jako mnemotechnické pomůcky. Nicméně právě v této formě se obvykle vyskytují ve fyzikální literatuře, proto uveďme na závěr jejich přehled.

Zapišeme-li (normalizovanou) gaussovskou míru s charakteristickým funkcionálem (461) symbolicky ve tvaru

$$d\mu[\Phi] = \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})\mathcal{D}\text{et} \left(\frac{1}{2\pi C} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \langle (\Phi - \eta) C^{-1} (\Phi - \eta) \rangle \right), \quad (494)$$

je rovnice (461) interpretovatelná jako nekonečnědimenzionální zobecnění formule pro gaussovský integrál:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\text{et} \left(\frac{1}{2\pi C} \right)^{1/2} \int \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}) \exp \left(-\frac{1}{2} \langle (\Phi - \eta) C^{-1} (\Phi - \eta) \rangle + i \langle J\Phi \rangle \right) \\ = \exp \left(i \langle J\eta \rangle - \frac{1}{2} \langle J C J \rangle \right). \end{aligned} \quad (495)$$

Formule (485) je pak naivně důsledkem pravidla (495) pro $C^{-1} \rightarrow C^{-1} - A$, píšeme-li pro libovolné operátory M a N (bez ohledu na existenci příslušných determinantů a stop)

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\text{et} M &= \exp \text{Tr} \ln M, \\ \mathcal{D}\text{et} M \mathcal{D}\text{et} N &= \mathcal{D}\text{et} MN \end{aligned} \quad (496)$$

a interpretujeme-li v duchu těchto pravidel součin funkcionálních determinantů neexistujících samostatně:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\text{et} \left(\frac{1}{2\pi C} \right) \mathcal{D}\text{et} \left(\frac{2\pi}{C^{-1} - A} \right) &= \mathcal{D}\text{et} \left(\frac{1}{C(C^{-1} - A)} \right) = \frac{1}{\mathcal{D}\text{et}(1 - CA)} \\ &= \exp(-\text{Tr} \ln(1 - CA)). \end{aligned} \quad (497)$$

Vztahy (488, 492) lze chápat jako důsledek pravidel (496) a transformačních vlastností “míry” $\mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})$ vzhledem k translaci a lineárnímu zobrazení

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\Phi(\mathbf{x}) + \lambda(\mathbf{x})) &= \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}), \\ \mathcal{D}(L\Phi(\mathbf{x})) &= \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})\mathcal{D}\text{et} L, \end{aligned} \quad (498)$$

uvědomíme-li si, že ve “fyzikálním” značení

$$\begin{aligned} d\mu_\lambda[\Phi] &= \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})\mathcal{D}\text{et} \left(\frac{1}{2\pi C} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \langle (\Phi - \lambda - \eta) C^{-1} (\Phi - \lambda - \eta) \rangle \right) \\ d\mu_L[\Phi] &= \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})\mathcal{D}\text{et} \left(\frac{1}{2\pi L C L} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \langle (\Phi - L\eta) L^{-1T} C^{-1} L^{-1} (\Phi - L\eta) \rangle \right), \end{aligned} \quad (499)$$

a provedeme-li formálně substituci $\Phi \rightarrow \Phi + \lambda$, resp. $\Phi \rightarrow L\Phi$.

Píšeme-li ve formuli (493)

$$G[\Phi] = \mathcal{D}\text{et} \left(\frac{1}{2\pi C} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \langle (\Phi - \eta) C^{-1} (\Phi - \eta) \rangle \right) F[\Phi],$$

lze ji naivně chápat jako tvrzení, že integrál podle “míry” $\mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})$ z funkcionální derivace se anuluje:

$$\int \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}) \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})} G[\Phi] = 0, \quad (500)$$

tedy jako zobecnění formule pro integraci per partes s nulovými povrchovými členy.

Konečně popis míry pomocí konečnědimenzionálních projekcí umožňuje psát formuli pro přechod od proměnných $\Phi(\mathbf{x})$ ke koeficientům rozkladu $\Phi(\mathbf{x}) = \sum_n \varphi_n \psi_n(\mathbf{x})$ do baze vlastních vektorů $\psi_n(\mathbf{x})$ operátoru C příslušných vlastním hodnotám c_n

$$d\mu[\Phi] = \prod_{n=1}^{\infty} d\varphi_n \left(\frac{1}{2\pi c_n} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2c_n} (\varphi_n - \eta_n)^2 \right). \quad (501)$$

2.3 Funkcionální integrál jako dráhový integrál na prostoru polních konfigurací

Jak jsme již naznačili v předchozích podkapitolách, jednou z možností jak konstruovat dráhový integrál pro kvantovou teorii pole je zafixovat pevně podprostor plného prostoru vlnových funkcionálů tak, aby jej bylo možné reprezentovat kvadraticky integrovatelnými funkcionály vzhledem k vhodné míře. To lze jednak prostřednictvím mřížové regularizace, kdy je tento podprostor tvořen polními konfiguracemi konstantními v buňkách konečného objemu a příslušná míra je přímým součinem konečného počtu Lebesgueových měr, jednak výběrem Fockova prostoru, odpovídajícímu vhodnému volnému hamiltoniánu - v tomto případě máme k dispozici gaussovskou funkcionální míru, popsanou v předchozích podkapitolách. V této podkapitole se budeme zabývat druhou z těchto dvou možností.

Pro jednoduchost budeme uvažovat Fockův prostor \mathcal{F}_Ω , odpovídající jednočásticovému hamiltoniánu Ω , s nulovou vakuovou střední hodnotou operátoru $\phi(\mathbf{x})$, t.j. $\eta = \langle \Psi_\Omega | \phi(\mathbf{x}) | \Psi_\Omega \rangle = 0$, vybudovaný z vlastních stavů $|\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \dots \mathbf{p}_n\rangle$ hamiltoniánu

$$H =: \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{x} \left(\pi(\mathbf{x})^2 + \phi(\mathbf{x}) \Omega^2 \phi(\mathbf{x}) \right) := \int \tilde{d}\mathbf{p} E(\mathbf{p}) a^+(\mathbf{p}) a(\mathbf{p}). \quad (502)$$

V reprezentaci $\mathcal{F}_\Omega \approx L_2(X, d\mu_\Omega[\Phi])$ jsou tyto vlastní stavy reprezentovány funkcionály

$$\Psi_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \dots \mathbf{p}_n}[\Phi] = \langle \Phi | \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \dots \mathbf{p}_n \rangle.$$

V dalším bude pro nás technicky výhodné zahrnout tyto funkcionály do jednoho vytvořujícího funkcionálu $Z[\alpha, \Phi]$

$$\Psi_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \dots \mathbf{p}_n}[\Phi] = (-i)^n \frac{\delta^n}{\delta\alpha(\mathbf{p}_1) \delta\alpha(\mathbf{p}_2) \dots \delta\alpha(\mathbf{p}_n)} Z[\alpha, \Phi] |_{\alpha=0}. \quad (503)$$

Není obtížné nalézt explicitní tvar pro $Z[\alpha, \Phi]$.

$$Z[\alpha, \Phi] = \langle \Phi | \exp \left(i \int d^d \mathbf{p} \alpha(\mathbf{p}) a^+(\mathbf{p}) \right) | \Psi_\Omega \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \exp \left(i \int d^d \mathbf{p} \alpha(\mathbf{p}) \int d^d \mathbf{x} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} (2E(\mathbf{p})\Phi(\mathbf{x}) - \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{x})}) \right) 1 \\
&= \exp \left(i \int d^d \mathbf{p} \alpha(\mathbf{p}) \int d^d \mathbf{x} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} 2E(\mathbf{p})\Phi(\mathbf{x}) \right) \\
&\times \exp \left(\int d^d \mathbf{q} \alpha(\mathbf{q}) \int d^d \mathbf{y} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{y}} \int d^d \mathbf{p} \alpha(\mathbf{p}) \int d^d \mathbf{x} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} E(\mathbf{p}) [\Phi(\mathbf{x}), \frac{\delta}{\delta\Phi(\mathbf{y})}] \right),
\end{aligned}$$

kde jsme při přechodu na druhý řádek využili explicitního výrazu pro kreační operátor a korespondence

$$\begin{aligned}
\Psi_\Omega[\Phi] &= \langle \Phi | \Psi_\Omega \rangle = 1, \\
\pi(\mathbf{x}) &= -i\delta/\delta\Phi(\mathbf{x}) + i\Omega\Phi(\mathbf{x}),
\end{aligned}$$

platné v použité reprezentaci. Třetí řádek plyne z identity $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$. Výslednou formuli zapišme ve tvaru normálně uspořádané exponenciály

$$\begin{aligned}
Z[\alpha, \Phi] &= \exp \left((2\pi)^d \int d^d \mathbf{p} E(\mathbf{p}) \alpha(\mathbf{p}) \alpha(-\mathbf{p}) + 2i \int d^d \mathbf{p} d^d \mathbf{x} \Phi(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} E(\mathbf{p}) \alpha(\mathbf{p}) \right) \\
&= : \exp \left(i \int d^d \mathbf{x} \Phi(\mathbf{x}) \tilde{\alpha}(\mathbf{x}) \right) :_{C=1/(2\Omega)},
\end{aligned}$$

kde jsme zavedli

$$\tilde{\alpha}(\mathbf{x}) = 2 \int d^d \mathbf{p} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} E(\mathbf{p}) \alpha(\mathbf{p}). \quad (504)$$

Pro konstrukci dráhového integrálu budeme potřebovat zobecněné společné vlastní stavy operátorů $\phi(\mathbf{x})$, splňující relace uzavřenosti ve tvaru

$$\int d\mu_\Omega[\Phi] |\Phi\rangle \langle \Phi| = 1. \quad (505)$$

S využitím relací uzavřenosti, napsaných pomocí vlastních stavů operátoru H ,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \tilde{d}\mathbf{p}_1 \dots \tilde{d}\mathbf{p}_n | \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \dots \mathbf{p}_n \rangle \langle \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \dots \mathbf{p}_n | = 1 \quad (506)$$

dostaneme následující rozklad stavu $|\Phi\rangle$ do zobecněné fockovské baze $| \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \dots \mathbf{p}_n \rangle$:

$$| \Phi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \tilde{d}\mathbf{p}_1 \dots \tilde{d}\mathbf{p}_n | \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \dots \mathbf{p}_n \rangle \Psi_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \dots \mathbf{p}_n} [\Phi]^*. \quad (507)$$

S pomocí vytvořujícího funkcionálu $Z[\alpha, \Phi]$ a formule (503) máme pak

$$\begin{aligned}
| \Phi \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \tilde{d}\mathbf{p}_1 \dots \tilde{d}\mathbf{p}_n \Psi_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \dots \mathbf{p}_n} [\Phi]^* a^+(\mathbf{p}_1) \dots a^+(\mathbf{p}_n) | \Psi_\Omega \rangle \\
&= \exp \left(\int \tilde{d}\mathbf{p} a^+(\mathbf{p}) \frac{i\delta}{\delta\alpha(\mathbf{p})} \right) Z[\alpha, \Phi]^* | \Psi_\Omega \rangle |_{\alpha=0} \\
&= Z^* \left[\frac{ia^+(\mathbf{p})}{(2\pi)^d 2E(\mathbf{p})}, \Phi \right] | \Psi_\Omega \rangle,
\end{aligned}$$

tedy explicitě

$$| \Phi \rangle = \exp \left(-\frac{1}{2} \int \tilde{d}\mathbf{p} a^+(\mathbf{p}) a^+(-\mathbf{p}) + 2 \int d^d \mathbf{x} \Phi(\mathbf{x}) \int \tilde{d}\mathbf{p} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} E(\mathbf{p}) a^+(\mathbf{p}) \right) | \Psi_\Omega \rangle. \quad (508)$$

Všimněme si, že stavy $|\Phi\rangle$ podobně jako stavy $|\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\dots\mathbf{p}_n\rangle$ nejsou normalizovatelné, nepatří tedy do Fockova prostoru, ale do jeho vhodného distributivního rozšíření⁹⁵.

Zcela obdobně lze získat zobecněné společné vlastní stavy operátorů $\pi(\mathbf{x})$

$$|\Pi\rangle = \exp\left(\frac{1}{2}\int\tilde{d}\mathbf{p}a^+(\mathbf{p})a^+(-\mathbf{p}) + 2i\int d^d\mathbf{x}\Pi(\mathbf{x})\int\tilde{d}\mathbf{p}e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}a^+(\mathbf{p})\right)|\Psi_\Omega\rangle, \quad (509)$$

kteřé splňují relaci úplnosti ve tvaru

$$\int d\mu_{\Omega^{-1}}|\Pi\rangle\langle\Pi| = 1. \quad (510)$$

Naším nejbližším cílem bude zkonstruovat reprezentaci evolučního operátoru (analyticky prodlouženého do euklidovské oblasti $t \rightarrow -i\tau$) pro systém s hamiltoniánem $H + H_I$, kde H je volný hamiltonián (502) a $H_I = H_I[\phi]$ je interakční hamiltonián, o kterém budeme předpokládat, že je funkcí pouze operátorů $\phi(\mathbf{x})$. Budeme postupovat analogicky jako v kvantové mechanice - nejprve sestojíme jádro operátoru $\exp(-\tau H)$, tedy funkcionál $\mathcal{K}[\Phi', \Phi, -i\tau] = \langle\Phi'|\exp(-\tau H)|\Phi\rangle$ a potom podobně jako v kvantověmechanickém případě užijeme Lieovu formuli, případně její modifikaci pro časově závislé interakční hamiltoniány.

Přistupme k realizaci první části tohoto programu. Pomocí rovnosti

$$\exp(-\tau H)|\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\dots\mathbf{p}_n\rangle = e^{-\tau\sum_{j=1}^n E(\mathbf{p}_j)}|\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\dots\mathbf{p}_n\rangle$$

máme

$$\begin{aligned} \mathcal{K}[\Phi', \Phi, -i\tau] &= \langle\Phi'|\exp(-\tau H)|\Phi\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int\tilde{d}\mathbf{p}_1\dots\tilde{d}\mathbf{p}_n e^{-\tau\sum_{j=1}^n E(\mathbf{p}_j)}\Psi_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\dots\mathbf{p}_n}[\Phi']\Psi_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\dots\mathbf{p}_n}[\Phi]^*. \end{aligned} \quad (511)$$

Vyjádříme-li na pravé straně této rovnosti vlnové funkcionály $\Psi_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\dots\mathbf{p}_n}[\Phi]$ pomocí vytvořujícího funkcionálu (503) $Z[\alpha, \Phi]$, dostaneme

$$\begin{aligned} \mathcal{K}[\Phi', \Phi, -i\tau] &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int\tilde{d}\mathbf{p}_1\dots\tilde{d}\mathbf{p}_n e^{-\tau\sum_{j=1}^n E(\mathbf{p}_j)} \\ &\times \frac{\delta^n}{\delta\alpha'(\mathbf{p}_1)\delta\alpha'(\mathbf{p}_2)\dots\delta\alpha'(\mathbf{p}_n)}Z[\alpha', \Phi']|_{\alpha'=0} \\ &\times \frac{\delta^n}{\delta\alpha(\mathbf{p}_1)\delta\alpha(\mathbf{p}_2)\dots\delta\alpha(\mathbf{p}_n)}Z^*[\alpha, \Phi]|_{\alpha=0} \\ &= \exp\left(\int\tilde{d}\mathbf{p}e^{-\tau E(\mathbf{p})}\frac{\delta^2}{\delta\alpha(\mathbf{p})\delta\alpha'(\mathbf{p})}\right)Z[\alpha', \Phi']Z^*[\alpha, \Phi]|_{\alpha=\alpha'=0}. \end{aligned} \quad (512)$$

⁹⁵Naproti tomu stavy, které patří do Fockova prostoru realizujícího unitárně neekvivalentní reprezentaci kanonických komutačních relací, které jsme diskutovali v předchozích podkapitolách, mohou být normalizované a přesto nepatří do žádného distributivního rozšíření původního Fockova prostoru, neboť jsou k němu “orthogonální”.

Pomocí Fourierovy transformace zdrojů do x -reprezentace

$$\begin{aligned}\alpha(\mathbf{x}) &= 2 \int d^d \mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} E(\mathbf{p}) \alpha(\mathbf{p}) \\ \alpha'(\mathbf{x}) &= 2 \int d^d \mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} E(\mathbf{p}) \alpha'(\mathbf{p})\end{aligned}\quad (513)$$

přepíšeme funkcionální derivace a obdržíme

$$\begin{aligned}\int \tilde{d}\mathbf{p} e^{-\tau E(\mathbf{p})} \frac{\delta^2}{\delta\alpha(\mathbf{p})\delta\alpha'(\mathbf{p})} &= \int d^d \mathbf{x} d^d \mathbf{y} \tilde{d}\mathbf{p} e^{-\tau E(\mathbf{p})} (2E(\mathbf{p}))^2 \\ &\times e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \frac{\delta}{\delta\alpha(\mathbf{x})} \frac{\delta}{\delta\alpha'(\mathbf{y})} \\ &= 2 \left\langle \frac{\delta}{\delta\alpha} \Omega e^{-\tau\Omega} \frac{\delta}{\delta\alpha'} \right\rangle,\end{aligned}\quad (514)$$

což umožňuje zapsat formuli pro $\mathcal{K}[\Phi', \Phi, -i\tau]$ v kompaktním tvaru

$$\begin{aligned}\mathcal{K}[\Phi', \Phi, -i\tau] &= \exp\left(2 \left\langle \frac{\delta}{\delta\alpha} \Omega e^{-\tau\Omega} \frac{\delta}{\delta\alpha'} \right\rangle\right) \\ &\times : \exp(i\langle \Phi' \alpha' \rangle) :: \exp(-i\langle \Phi \alpha \rangle) |_{\alpha=\alpha'=0} \\ &= \exp\left(2 \left\langle \frac{\delta}{\delta\alpha} \Omega e^{-\tau\Omega} \frac{\delta}{\delta\alpha'} \right\rangle\right) \exp\left(-\frac{1}{4} \left\langle \frac{\delta}{\delta\Phi} \Omega^{-1} \frac{\delta}{\delta\Phi} \right\rangle\right) \\ &\times \exp\left(-\frac{1}{4} \left\langle \frac{\delta}{\delta\Phi'} \Omega^{-1} \frac{\delta}{\delta\Phi'} \right\rangle\right) \exp(i\langle \Phi' \alpha' \rangle) \exp(-i\langle \Phi \alpha \rangle) |_{\alpha=\alpha'=0}.\end{aligned}\quad (515)$$

Protože funkcionální derivace vzhledem k Φ , Φ' a α , α' komutují, máme

$$\begin{aligned}\mathcal{K}[\Phi', \Phi, -i\tau] &= \exp\left(-\frac{1}{4} \left\langle \frac{\delta}{\delta\Phi} \Omega^{-1} \frac{\delta}{\delta\Phi} \right\rangle\right) \exp\left(-\frac{1}{4} \left\langle \frac{\delta}{\delta\Phi'} \Omega^{-1} \frac{\delta}{\delta\Phi'} \right\rangle\right) \\ &\times \exp\left(2 \langle \Phi \Omega e^{-\tau\Omega} \Phi' \rangle\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{4} \left\langle \frac{\delta}{\delta\Phi} \Omega^{-1} \frac{\delta}{\delta\Phi} \right\rangle\right) \\ &\times \exp\left(-\langle \Phi \Omega e^{-2\tau\Omega} \Phi \rangle\right) \exp\left(2 \langle \Phi \Omega e^{-\tau\Omega} \Phi' \rangle\right) \\ &= : \exp\left(2 \langle \Phi \Omega e^{-\tau\Omega} \Phi' \rangle - \langle \Phi \Omega e^{-2\tau\Omega} \Phi \rangle\right) :.\end{aligned}\quad (516)$$

Výslednou formuli obdržíme aplikací pravidla pro normální uspořádání (481), v němž položíme $A = -2\Omega e^{-2\tau\Omega}$ a $C = 1/2\Omega$:

$$\begin{aligned}\mathcal{K}[\Phi', \Phi, -i\tau] &= \exp\left(\langle \Phi' \Omega \Phi' \rangle\right) : \exp\left(-\langle \Phi \Omega e^{-2\tau\Omega} \Phi \rangle\right) : |_{\Phi \rightarrow \Phi - e^{\tau\Omega} \Phi'} \\ &= \exp\left(\langle \Phi' \Omega \Phi' \rangle\right) \exp\left(-\frac{1}{2} \text{Tr} \ln(1 - e^{-2\tau\Omega})\right) \\ &\times \exp\left(-\langle \Phi (1 - e^{-2\tau\Omega})^{-1} \Omega e^{-2\tau\Omega} \Phi \rangle\right) |_{\Phi \rightarrow \Phi - e^{\tau\Omega} \Phi'} \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2} \text{Tr} \ln(1 - e^{-2\tau\Omega})\right) \\ &\times \exp\left(\langle (\Phi - \Phi') (1 - e^{2\tau\Omega})^{-1} \Omega (\Phi - \Phi') \rangle\right) \\ &\times \exp\left(2 \langle \Phi (1 + e^{\tau\Omega})^{-1} \Omega \Phi' \rangle\right).\end{aligned}\quad (517)$$

Konečná formule tedy zní

$$\begin{aligned}\mathcal{K}[\Phi', \Phi, -i\tau] &= \exp\left(-\frac{1}{2}\text{Tr}\ln(1 - e^{-2\tau\Omega})\right) \\ &\times \exp\left(\langle(\Phi - \Phi')(1 - e^{2\tau\Omega})^{-1}\Omega(\Phi - \Phi')\rangle\right) \\ &\times \exp\left(2\langle\Phi(1 + e^{\tau\Omega})^{-1}\Omega\Phi'\rangle\right).\end{aligned}\quad (518)$$

Zkoumejme nyní blíže získaný výsledek. Jak víme z předchozí kapitoly, znalost $\mathcal{K}[\Phi', \Phi, -i\tau]$ umožňuje spočítat partiční sumu systému jako funkcionální integrál

$$\begin{aligned}Z_\beta &= \text{Tr}\exp(-\beta H) = \int d\mu_\Omega[\Phi]\mathcal{K}[\Phi, \Phi, -i\beta] \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}\text{Tr}\ln(1 - e^{-2\beta\Omega})\right) \int d\mu_\Omega[\Phi] \exp\left(2\langle\Phi(1 + e^{\beta\Omega})^{-1}\Omega\Phi\rangle\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}\text{Tr}\ln(1 - e^{-2\beta\Omega})\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\text{Tr}\ln(1 - 2(1 + e^{\beta\Omega})^{-1})\right),\end{aligned}$$

tedy pro dostatečně velký objem $V \rightarrow \infty$, kdy lze nahradit sumaci přes diskretní hodnoty \mathbf{p} integrálem, máme

$$Z_\beta = \exp\left(-\text{Tr}\ln(1 - e^{-\beta\Omega})\right) = \exp\left(-\frac{V}{(2\pi)^d} \int d^d\mathbf{p}\ln(1 - e^{-\beta E(\mathbf{p})})\right). \quad (519)$$

To je, jak jsme ostatně očekávali, standardní partiční suma systému stejných bosonů s jednočásticovými hladinami $E(\mathbf{p})$.

Nalezneme ještě euklidovskou matici hustoty $\mathcal{K}[\Phi', \Phi, -i\tau]$ v limitě infinitesimálních $\tau \rightarrow 0$. Rozvojem operátorových funkcí dostaneme

$$\begin{aligned}\mathcal{K}[\Phi', \Phi, -i\tau \rightarrow 0] &\approx \\ &\approx \exp\left(-\frac{1}{2}\text{Tr}\ln(2\tau\Omega)\right) \exp\left(\frac{1}{2}\langle\Phi\Omega\Phi\rangle + \frac{1}{2}\langle\Phi'\Omega\Phi'\rangle\right) \\ &\times \exp\left(-\frac{1}{2\tau}\langle(\Phi - \Phi')^2\rangle - \frac{1}{2}\tau\frac{1}{3}(\langle\Phi\Omega^2\Phi\rangle + \langle\Phi'\Omega^2\Phi\rangle + \langle\Phi'\Omega^2\Phi'\rangle)\right) \\ &= \mathcal{N}(\tau)\Psi_\Omega[\Phi']^{-1}\Psi_\Omega^*[\Phi]^{-1} \\ &\times \exp\left(-\frac{1}{2\tau}\langle(\Phi - \Phi')^2\rangle - \frac{1}{2}\tau\frac{1}{3}(\langle\Phi\Omega^2\Phi\rangle + \langle\Phi'\Omega^2\Phi\rangle + \langle\Phi'\Omega^2\Phi'\rangle)\right).\end{aligned}\quad (520)$$

V posledním řádku jsme zahrnuli na Φ nezávislý předexponenciální (τ -závislý) faktor a normovací faktory explicitě vydělených funkcionálů základního stavu v původní funkcionální reprezentaci (tyto faktory odlišují původní funkcionální reprezentaci od reprezentace na $L_2(X, d\mu_\Omega[\Phi])$, kterou v této podkapitole používáme) do společné předexponenciální funkce $\mathcal{N}(\tau)$. V původní reprezentaci je tedy jádro euklidovského evolučního operátoru pro $\tau \rightarrow 0$ dáno formulí⁹⁶

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{K}}[\Phi', \Phi, -i\tau \rightarrow 0] &\approx \\ &\approx \tilde{\mathcal{N}}(\tau) \exp\left(-\frac{1}{2\tau}\langle(\Phi - \Phi')^2\rangle - \frac{1}{2}\tau\frac{1}{3}(\langle\Phi\Omega^2\Phi\rangle + \langle\Phi'\Omega^2\Phi\rangle + \langle\Phi'\Omega^2\Phi'\rangle)\right).\end{aligned}\quad (521)$$

⁹⁶Použijeme-li naivní formuli pro normalizaci základního stavu $\mathcal{N}_\Omega = \det\left(\frac{\Omega}{\pi}\right)^{1/4}$ a vztah $\det A = \exp\text{Tr}\ln A$, dostaneme pro níže zavedenou normalizační funkci naivní výraz $\tilde{\mathcal{N}}(\tau) = \det\left(\frac{1}{2\pi\tau}\right)^{1/2}$. Zde se nabízí srovnání s předexponenciálním faktorem propagátoru volné částice.

Výraz v exponenciále lze interpretovat (až na znaménko) jako klasickou (euklidovskou) akci pro volné skalární pole

$$S_E[\Phi] = \frac{1}{2} \int_{t \in (0, \tau)} d^{d+1}x \left((\partial_t \Phi(x))^2 + \Phi(x) \Omega^2 \Phi(x) \right), \quad (522)$$

počítané na trajektorii $\Phi(x) = \Phi(t, \mathbf{x})$ v konfiguračním prostoru, která lineárně interpoluje mezi konfiguracemi $\Phi(\mathbf{x})$ v čase $t = 0$ a $\Phi'(\mathbf{x})$ v čase $t = \tau$. Tato formule bude východiskem pro “fyzikální” interpretaci dráhových integrálů v teorii pole.

Lieova formule dává⁹⁷ pro jádro evolučního operátoru interagujícího systému

$$\langle \Phi' | \exp(-\tau(H + H_I)) | \Phi \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \Phi' | (\exp(-\tau H_I/N) \exp(-\tau H/N))^N | \Phi \rangle, \quad (523)$$

resp. pro časově závislou interakci

$$\langle \Phi' | U(\tau_f, \tau_i) | \Phi \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \Phi' | \prod_{j=1}^N \exp(-\tau H_I(\tau_j)/N) \exp(-\tau H/N) | \Phi \rangle. \quad (524)$$

Intuitivní odvození reprezentace těchto veličin dráhovým integrálem je přímou analogií postupu užitého v kvantově mechanickém případě. Vložme do těchto formulí $N - 1$ krát rozklad jednotky ve tvaru (505), kde pišme formálně $d\mu_\Omega[\Phi] = \mathcal{D}\Phi(\mathbf{x}) \Psi_\Omega[\Phi] \Psi_\Omega^*[\Phi]$ a pro dostatečně velká N použijme formu volného evolučního operátoru pro infinitesimální časy (520). Donásobíme-li ještě výslednou formuli faktorem $\Psi_\Omega[\Phi'] \Psi_\Omega^*[\Phi]$, která převádí reprezentaci na $L_2(X, d\mu_\Omega[\Phi])$ zpět do původní funkcionální reprezentace, dostaneme formální vyjádření jádra $\tilde{\mathcal{K}}[\Phi', \Phi, -i\tau]$ ve tvaru

$$\begin{aligned} & \tilde{\mathcal{K}}[\Phi', \Phi, -i\tau] = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{N-1} \mathcal{D}\Phi_j(\mathbf{x}) \tilde{\mathcal{N}}(\epsilon) \exp(-\epsilon H_I[\Phi_j, \tau_j]) \\ & \times \exp\left(-\frac{1}{2\epsilon} \langle (\Phi_j - \Phi_{j-1})^2 \rangle - \frac{1}{2} \epsilon \frac{1}{3} (\langle \Phi_j \Omega^2 \Phi_j \rangle + \langle \Phi_j \Omega^2 \Phi_{j-1} \rangle + \langle \Phi_{j-1} \Omega^2 \Phi_{j-1} \rangle)\right) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \tilde{\mathcal{N}} \int \prod_{j=1}^{N-1} \mathcal{D}\Phi_j(\mathbf{x}) \exp(-S_E^N[\Phi]) \end{aligned} \quad (525)$$

kde jsme označili $\epsilon = \tau/N$, $\tau_j = j\epsilon$, $\tilde{\mathcal{N}} = \prod_{j=1}^N \tilde{\mathcal{N}}(\epsilon)$, $\Phi_0 = \Phi$, $\Phi_N = \Phi'$ a

$$\begin{aligned} S_E^N[\Phi] &= \sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{2\epsilon} \langle (\Phi_j - \Phi_{j-1})^2 \rangle \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \epsilon \frac{1}{3} (\langle \Phi_j \Omega^2 \Phi_j \rangle + \langle \Phi_j \Omega^2 \Phi_{j-1} \rangle + \langle \Phi_{j-1} \Omega^2 \Phi_{j-1} \rangle) + \epsilon H_I[\Phi_j, \tau_j] \right). \end{aligned} \quad (526)$$

Poslední výraz lze interpretovat jako hodnotu klasické euklidovské akce

$$S_E[\Phi] = \frac{1}{2} \int_0^\tau d^{d+1}x \left((\partial_t \Phi(x))^2 + \Phi(x) \Omega^2 \Phi(x) \right) + \int_0^\tau dt H_I[\Phi, t], \quad (527)$$

⁹⁷Zde blíže nespécifikujeme vlastnosti interakčního hamiltoniánu, pro něž je Lieova formule použitelná.

interagující teorie počítané (do řádu $\mathcal{O}(\epsilon)$) pro po částech lineární trajektorii v prostoru polních konfigurací. Naivní limita $N \rightarrow \infty$ dává konečně

$$\tilde{\mathcal{K}}[\Phi', \Phi, -i\tau] = \int_{\Phi(0, \mathbf{x})=\Phi(\mathbf{x})}^{\Phi(\tau, \mathbf{x})=\Phi'(\mathbf{x})} \mathcal{D}\Phi(x) \exp(-S_E[\Phi]), \quad (528)$$

což lze chápat jako dráhový integrál přes všechny trajektorie v konfiguračním prostoru, splňující zadané okrajové podmínky. Přitom “míra”, formálně vyjádřená jako limita

$$\mathcal{D}\Phi(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N-1} \mathcal{D}\Phi_j(\mathbf{x}) \quad (529)$$

neexistuje v rigorózním smyslu podobně jako míry $\mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})$ a $\mathcal{D}\mathbf{x}(t)$.

2.4 Vytvořující funkcionál Greenových funkcí volného skalárního pole a gaussovská funkcionální míra

V předchozí podkapitole jsme uvedli intuitivní argumenty, dovolující vyjádřit jádro evolučního operátoru pro interagující skalární pole pomocí formálního funkcionálního integrálu

$$\tilde{\mathcal{K}}[\Phi', \Phi, -i\tau] = \int_{\Phi(0, \mathbf{x})=\Phi(\mathbf{x})}^{\Phi(\tau, \mathbf{x})=\Phi'(\mathbf{x})} \mathcal{D}\Phi(x) \exp(-S_E[\Phi]). \quad (530)$$

Spíše než jádro evolučního operátoru se využívá v kvantové teorii pole vytvořující funkcionál $Z_E[J]$ (euklidovských) Greenových funkcí. Připomeňme, že funkcionální derivace $Z_E[J]$ podle J dávají vakuové střední hodnoty T_τ -uspořádaných součinů Heisenbergovy reprezentace operátorů pole $\phi(x) = \phi(\tau, \mathbf{x}) = e^{-\tau H} \phi(\mathbf{x}) e^{\tau H}$ v imaginárním čase, t.j.

$$\begin{aligned} Z_E[J] &= \langle 0 | T_\tau \exp \left(i \int d^{d+1}x J(x) \phi(x) \right) | 0 \rangle \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr} \exp(-HT) T_\tau \exp \left(i \int_{-T/2}^{T/2} d\tau d^d \mathbf{x} J(\tau, \mathbf{x}) \phi(\tau, \mathbf{x}) \right)}{\text{Tr} \exp(-HT)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int d^{d+1}x_1 \dots d^{d+1}x_n J(x_1) \dots J(x_n) \langle 0 | T_\tau \phi(x_1) \dots \phi(x_n) | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (531)$$

kde $|0\rangle$ je základní stav interagující teorie. Definice $Z_E[J]$ je přímým zobecněním kvantově mechanické definice, uvedené v předchozí kapitole⁹⁸, na případ nekonečně mnoha stupňů volnosti. Naivní reprezentace $Z_E[J]$ dráhovým integrálem, založená na formuli (528) a výsledcích předchozí kapitoly, zní

$$\begin{aligned} Z_E[J] &= \frac{\int_{\Phi(-\infty, \mathbf{x})=\Phi(\mathbf{x})}^{\Phi(\infty, \mathbf{x})=\Phi'(\mathbf{x})} \mathcal{D}\Phi(x) \exp(-S_E[\Phi] + i \int d^{d+1}x \Phi(x) J(x))}{\int_{\Phi(-\infty, \mathbf{x})=\Phi(\mathbf{x})}^{\Phi(\infty, \mathbf{x})=\Phi'(\mathbf{x})} \mathcal{D}\Phi(x) \exp(-S_E[\Phi])} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\int_{\Phi(-T/2, \mathbf{x})=\Phi(T/2, \mathbf{x})}^{\Phi(-T/2, \mathbf{x})=\Phi(T/2, \mathbf{x})} \mathcal{D}\Phi(x) \exp(-S_E[\Phi] + i \int_{-T/2}^{T/2} d^{d+1}x \Phi(x) J(x))}{\int_{\Phi(-T/2, \mathbf{x})=\Phi(T/2, \mathbf{x})}^{\Phi(-T/2, \mathbf{x})=\Phi(T/2, \mathbf{x})} \mathcal{D}\Phi(x) \exp(-S_E[\Phi])} \end{aligned} \quad (532)$$

⁹⁸Volba faktoru i v argumentu exponenciály, kterým se zde lišíme od předchozích kapitol, je motivovaná výrazem pro charakteristický funkcionál míry.

Formule (530, 532) obsahují neexistující funkcionální míru $\mathcal{D}\Phi(x)$. Obdobně jako již dříve zavedené formální míry $\mathcal{D}\Phi(\mathbf{x})$ a $\mathcal{D}\mathbf{x}(t)$ ji však lze donásobit vhodným funkcionálním faktorem tak, aby výsledná míra byla dobře definovaná. Naznačme proto, jak lze intuitivní úvahy z předchozí podkapitoly formalizovat pomocí dosud vybudovaného aparátu gaussovských funkcionálních měr.

Na pravou stranu formule (532) lze nahlížet jako na charakteristický funkcionál míry, symbolicky zadané vztahem $\mathcal{D}\Phi(x) \exp(-S_E[\Phi])/\mathcal{N}$, kde normovací faktor \mathcal{N} odpovídá jmenovateli na pravé straně (532). Proto se v dalším soustředíme právě na tuto veličinu a spočteme ji pro případ volného skalárního pole s hamiltoniánem

$$H =: \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{x} \left(\pi(\mathbf{x})^2 + \phi(\mathbf{x}) \Omega^2 \phi(\mathbf{x}) \right) : \quad (533)$$

se základním stavem $|0\rangle = |\Psi_\Omega\rangle$. Námí zvolený způsob výpočtu $Z_E[J]$ není nejkratší možný, jeho výhodou je, že názorně ilustruje “feynmanovskou” konstrukci míry na prostoru trajektorií polního systému s nekonečně mnoha stupni volnosti.

Zvolme tedy speciálně interakční hamiltonián ve tvaru $H_I = -i \int d^d \mathbf{x} J(t, \mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) = i \langle J(t) \phi \rangle$. Pro euklidovský evoluční operátor systému s hamiltoniánem $H + H_I$ máme vztah

$$\begin{aligned} U[iJ](T/2, -T/2) &= T_\tau \exp \left(- \int_{-T/2}^{T/2} d\tau (H + i \langle J(\tau) \phi \rangle) \right) \\ &= \exp(-HT/2) T_\tau \exp \left(i \int_{-T/2}^{T/2} d\tau \langle J(\tau) \phi(\tau) \rangle \right) \exp(-HT/2), \end{aligned} \quad (534)$$

druhý ze vztahů je důsledkem relace mezi Schrödingerovým a Diracovým obrazem evolučního operátoru. K výpočtu $Z_E[J]$ použijeme druhou z formulí (532) kterou lze díky (534) a cykličnosti stopy přepsat do tvaru

$$\begin{aligned} Z_E[J] &= \frac{\text{Tr} U[iJ](T/2, -T/2)}{\text{Tr} U[0](T/2, -T/2)} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\int d\mu_\Omega[\Phi] \langle \Phi | U[iJ](T/2, -T/2) | \Phi \rangle}{\int d\mu_\Omega[\Phi] \langle \Phi | U[0](T/2, -T/2) | \Phi \rangle}. \end{aligned} \quad (535)$$

neboť ve funkcionální Schrödingerově reprezentaci $\text{Tr}(\cdot) = \int d\mu_\Omega[\Phi] \langle \Phi | \cdot | \Phi \rangle$. Poznamenejme, že předlimitní výraz na pravé straně (535) odpovídá generujícímu funkcionálu tepelných Greenových funkcí pro $\beta \rightarrow \infty$; normalizační faktor ve jmenovateli je identický s partiční sumou Z_β danou vztahem (519) pro $\beta = T$.

Pomocí formule (524) a vložení $(N-1)$ relací úplnosti (505) upravíme poslední výraz na tvar

$$\begin{aligned} Z_E[J] &= \lim_{T \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty} \frac{1}{Z_T} \int \prod_{-N/2 < j \leq N/2} d\mu_\Omega[\Phi_j] \langle \Phi_j | e^{-\epsilon H} | \Phi_{j-1} \rangle \exp(i\epsilon \langle J(\tau_j) \Phi_j \rangle) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty} \frac{1}{Z_T} \int \exp \left(i\epsilon \sum_{j=-N/2}^{N/2} \langle J(\tau_j) \Phi_j \rangle \right) \prod_{-N/2 < j \leq N/2} d\mu_\Omega[\Phi_j] \mathcal{K}[\Phi_j, \Phi_{j-1}, -i\epsilon], \end{aligned} \quad (536)$$

kde $\epsilon = T/N$, $\tau_j = -T/2 + j\epsilon$ a $\Phi_{j+N}(\mathbf{x}) = \Phi_j(\mathbf{x})$.

Předlimitní výraz na pravé straně (536) má obecný tvar

$$Z_T^{-1} \int \prod_{-N/2 < j \leq N/2} d\mu_\Omega[\Phi_j] \mathcal{K}[\Phi_j, \Phi_{j-1}, -i(\tau_j - \tau_{j-1})] F(\Phi(\tau_{-N/2+1}), \dots, \Phi(\tau_{N/2})) \quad (537)$$

(kde $0 < \tau_{-N/2+1} < \dots < \tau_{N/2} = T$), svou formou připomínající integrál z cylindrické funkce podle Wienerovy míry (srov. (46)). Tato podobnost není náhodná. Podobně jako při konstrukci Wienerovy míry lze pomocí formule (537) definovat objekt, kterému se v matematické literatuře říká kvazimíra, definovaná na množině spojitých (v našem případě periodických) trajektorií $\Phi(\tau)$ s hodnotami v prostoru, na němž jsou definovány míry $d\mu_\Omega[\Phi_j] \mathcal{K}[\Phi_j, \Phi_{j-1}, -i(\tau_j - \tau_{j-1})]$, t.j. v našem případě v prostoru polních konfigurací. Podle kvazimíry lze integrovat cylindrické funkce, závisující na konečně mnoha hodnotách trajektorií v konečně mnoha časech $0 < \tau_{-N/2+1} < \dots < \tau_{N/2} = T$, a to právě podle formule (537), a také funkce, které lze získat limitním přechodem jejich aproximací pomocí cylindrických funkcí (pokud výsledek nezávisí na výběru aproximace). Za jistých okolností kvazimíra definuje σ -aditivní míru na spojitých trajektoriích, popř. na vhodně rozšířenem prostoru trajektorií. Integrál podle kvazimíry funkce $\exp(i \int_0^T dt \langle J(t) \Phi(t) \rangle)$, existuje-li, se nazývá charakteristickým funkcionálem příslušné kvazimíry. Výraz (536) tedy představuje cylindrickou aproximaci charakteristického funkcionálu kvazimíry definované pomocí (537). Tato kvazimíra, resp. její případné σ -aditivní rozšíření, je tedy kandidátem na objekt, dávající symbolu $\mathcal{D}\Phi(x) \exp(-S_E[\Phi]) / \mathcal{N}$ rigorózní význam.

Spčítejme nyní $Z_E[J]$. Přepišme (536) na tvar

$$Z_E[J] = \lim_{T \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty} \mathcal{N}_N \int \prod_{-N/2 < j \leq N/2} d\mu_\Omega[\Phi_j] \exp \left(-S_E^N + i\epsilon \sum_{j=-N/2}^{N/2} \langle J(\tau_j) \Phi_j \rangle \right), \quad (538)$$

kde $\mathcal{N}_N = Z_T^{-1} \exp(-N/2 \text{Tr} \ln(1 - e^{-2\Omega T/N}))$. V předchozí formuli $d\mu_\Omega^N = \prod_{-N/2 < j \leq N/2} d\mu_\Omega[\Phi_j]$, jakožto přímý součin gaussovských měr s kovariancemi $C = (2\Omega)^{-1}$, je opět gaussovská míra s kovariancí $C_{ij} = (2\Omega)^{-1} \delta_{ij}$. Výraz v exponenciále integrandu zní

$$\begin{aligned} -S_E^N &= \sum_{-N/2 < j \leq N/2} \left(2 \langle \Phi_j (1 - e^{2\epsilon\Omega})^{-1} \Omega \Phi_j \rangle - 2 \langle \Phi_j (1 - e^{2\epsilon\Omega})^{-1} \Omega e^{\epsilon\Omega} \Phi_{j-1} \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{-N/2 < i, j \leq N/2} \langle \Phi_i A_{ij} \Phi_j \rangle \end{aligned} \quad (539)$$

kde jsme označili symetrickou matici

$$A_{ij} = 4(1 - e^{2\epsilon\Omega})^{-1} \Omega \delta_{ij} - 2(1 - e^{2\epsilon\Omega})^{-1} \Omega e^{\epsilon\Omega} (\delta_{i-1, j} + \delta_{j-1, i}). \quad (540)$$

Integrand integrálu (538) má tedy v exponenciále kvadratickou formu a pro jeho výpočet lze užít formuli (485). K tomu potřebujeme inverovat operátorovou matici $A_{ij} - C_{ij}^{-1}$. To lze snadno přechodem k nové bazi v \mathbf{R}^N pomocí unitární matice $U_{kn} = e^{i\frac{2\pi}{N}nk} / \sqrt{N}$ kde $-N/2 < n, k \leq N/2$, což je konečná analogie Fourierovy transformace:

$$\Phi(k, \mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{-N/2 < n \leq N/2} \Phi_n(\mathbf{x}) e^{i\frac{2\pi}{N}nk}. \quad (541)$$

Inverzní transformace je

$$\Phi_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{-N/2 < k \leq N/2} \Phi(k, \mathbf{x}) e^{-i \frac{2\pi}{N} nk}, \quad (542)$$

neboť platí $U^+U = 1$, neboli

$$\frac{1}{N} \sum_{-N/2 < k \leq N/2} e^{i \frac{2\pi}{N} (n-m)k} = \delta_{nm}.$$

Přejdeme-li podobně od $J_n(\mathbf{x})$ k $J(k, \mathbf{x})$, dostaneme

$$\sum_{-N/2 < j \leq N/2} \langle J(j\epsilon) \Phi_j \rangle = \sum_{-N/2 < k \leq N/2} \langle \Phi(k) J(-k) \rangle$$

a kvadratická forma v exponenciále funkcionálního integrandu přejde na tvar

$$-S_E^N = \sum_{-N/2 < k \leq N/2} 2 \langle \Phi(k) (1 - e^{2\frac{T}{N}\Omega})^{-1} \Omega (1 - e^{\frac{T}{N}\Omega} \cos \frac{2\pi}{N} k) \Phi(-k) \rangle, \quad (543)$$

tedy operátorová matice A je v nové bazi antidiagonální, totéž platí o kovarianční matici C ,

$$\begin{aligned} A(k, l) &= 4(1 - e^{2\frac{T}{N}\Omega})^{-1} \Omega (1 - e^{\frac{T}{N}\Omega} \cos \frac{2\pi}{N} k) \delta_{k, -l} \\ C(k, l) &= (2\Omega)^{-1} \delta_{k, -l}. \end{aligned}$$

Odtud snadno dostaneme

$$\begin{aligned} (A - C^{-1})(k, l) &= 2\Omega \left(2 \frac{1 - e^{\frac{T}{N}\Omega} \cos \frac{2\pi}{N} k}{1 - e^{2\frac{T}{N}\Omega}} - 1 \right) \delta_{k, -l} \\ &= -2\Omega \frac{\cosh \frac{T}{N}\Omega - \cos \frac{2\pi}{N} k}{\sinh \frac{T}{N}\Omega} \delta_{k, -l}. \end{aligned} \quad (544)$$

Tuto operátorovou matici lze snadno invertovat a zpětnou transformací do původních proměnných dostaneme

$$(A - C^{-1})_{mn}^{-1} = -\frac{1}{N} \sum_{-N/2 < k \leq N/2} \frac{1}{2\Omega} \frac{\sinh \frac{T}{N}\Omega}{\cosh \frac{T}{N}\Omega - \cos \frac{2\pi}{N} k} e^{i \frac{2\pi}{N} (m-n)k}. \quad (545)$$

Dále potřebujeme předexponenciální faktor rovný

$$\exp\left(-\frac{1}{2} \text{Tr} \ln(1 - CA)\right) \prod_{-N/2 < j \leq N/2} \exp\left(-\frac{1}{2} \text{Tr} \ln(1 - e^{-2T\Omega/N})\right).$$

Ten nezávisí funkcionálně na J a lze ho spočítat pomocí gaussovského integrálu (538) pro $J = 0$. Tomu však odpovídá stopa volného euklidovského evolučního operátoru, neboť jádro

\mathcal{K} splňuje semigrupovou podmínku. Tento faktor se tedy zkrátí s normalizačním faktorem ve jmenovateli výrazu (535). Máme tedy

$$Z_E[J] = \lim_{T \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0, N \rightarrow \infty, \epsilon N = T} \exp \left(-\frac{\epsilon^2}{2} \sum_{-N/2 < k, m, n \leq N/2} \langle J(\tau_m) \frac{1}{T} \frac{\epsilon}{2\Omega} \frac{\sinh \epsilon \Omega}{\cosh \epsilon \Omega - \cos \frac{2\pi}{T} \epsilon k} e^{i \frac{2\pi}{T} \epsilon (m-n) k} J(\tau_n) \rangle \right) \quad (546)$$

Pro výpočet limity $N \rightarrow \infty$ označme $E = \frac{2\pi}{T} k$ a $(t - t') = (j - k)T/N$ a máme

$$-(A - C^{-1})_{mn}^{-1} \rightarrow G_T(t, t') = \frac{1}{T} \sum_{E = \frac{2\pi}{T} n} \frac{e^{i(t-t')E}}{E^2 + \Omega^2} \quad (547)$$

Předpokládáme-li spojitou závislost J na t , přejde sumace přes m, n v exponenciále (546) v limitě $N \rightarrow \infty$ v integraci a dostaneme konečně

$$Z_E[J] = \lim_{T \rightarrow \infty} \exp \left(-\frac{1}{2} \int_{-T/2}^{T/2} dt dt' \langle J(t) G_T(t, t') J(t') \rangle \right). \quad (548)$$

V limitě $T \rightarrow \infty$ přejde ve výrazu (547) pro $G_T(t, t')$ suma přes diskrétní E v integrál,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} G_T(t, t') = G_E(t, t') = \int \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{i(t-t')E}}{E^2 + \Omega^2}. \quad (549)$$

Euklidovský vytvořující funkcionál $Z_E[J]$ je tudíž dán formulí

$$Z_E[J] = \exp \left(-\frac{1}{2} \int dt dt' \langle J(t) G_E(t, t') J(t') \rangle \right). \quad (550)$$

Diskutujme nyní získané výsledky. Spočítejme dvoubodovou Greenovu funkci

$$\langle \Psi_\Omega | T_\tau \phi(t, \mathbf{x}) \phi(t', \mathbf{x}') | \Psi_\Omega \rangle = \langle \mathbf{x} | G_E(t, t') | \mathbf{x}' \rangle = \int \frac{d^{d+1} \mathbf{p}}{(2\pi)^{d+1}} \frac{e^{i(p_4(t-t') + \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}'))}}{p_4^2 + E(\mathbf{p})^2}, \quad (551)$$

poslední výraz platí pro jednočásticový hamiltonián Ω , který je diagonální v impulsové reprezentaci. Z formule (550) je zřejmé, že jedinou netriviální souvislou Greenovou funkcí je právě dvoubodová funkce; vytvořující funkcionál souvislých Greenových funkcí je totiž

$$W_E[J] = -\ln Z_E[J] = \frac{1}{2} \int dt dt' \langle J(t) G_E(t, t') J(t') \rangle. \quad (552)$$

Klasické pole $\phi_{\text{cl}}(x)$ je rovno

$$\phi_{\text{cl}}(x) = -i \frac{1}{Z_E[J]} \frac{\delta Z_E[J]}{\delta J(x)} = i \frac{\delta W_E[J]}{\delta J(x)} = i \int dt' \langle G_E(t, t') J(t') \rangle. \quad (553)$$

Odtud snadno dostaneme efektivní akci (generující funkcionál vlastních vertexů) ve tvaru

$$\Gamma_E[\phi_{\text{cl}}] = W_E[J] + i \int dt \langle J(t) \phi_{\text{cl}}(t) \rangle = \frac{1}{2} \int dt dt' \langle \phi_{\text{cl}}(t) G_E^{-1}(t, t') \phi_{\text{cl}}(t') \rangle. \quad (554)$$

Všimněme si, že operátorové jádro $G_E(t, t')$ je inverzí operátoru

$$G_E^{-1} = -\partial_t^2 + \Omega^2 \quad (555)$$

na funkcích $d + 1$ proměnných, majících Fourierův obraz vzhledem k proměnné t . Máme tedy

$$\Gamma_E[\phi_{\text{cl}}] = \frac{1}{2} \int dt \langle \phi_{\text{cl}}(t) (-\partial_t^2 + \Omega^2) \phi_{\text{cl}}(t) \rangle = \frac{1}{2} \int dt \langle \partial_t \phi_{\text{cl}} \partial_t \phi_{\text{cl}} + \phi_{\text{cl}} \Omega^2 \phi_{\text{cl}} \rangle, \quad (556)$$

kde jsme provedli integraci per partes a předpokládali dostatečně rychlé ubývání ϕ_{cl} pro $t \rightarrow \pm\infty$ umožňující anulovat povrchové členy. Efektivní akce je tedy totožná s klasickou euklidovskou akcí volného pole bez kvantových korekcí. Volné skalární pole je tedy v tomto smyslu klasickým systémem.

Předlimitní výraz⁹⁹ na pravé straně (548) je generátorem tepelných Greenových funkcí při $\beta = T$ (srov. podkapitulu 1.11), tedy

$$Z_\beta[J] = \exp \left(-\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau d\tau' \langle J(\tau) G_\beta(\tau, \tau') J(\tau') \rangle \right). \quad (557)$$

Speciálně dvoubodová tepelná Greenova funkce je rovna

$$\langle T_\tau \phi(\tau, \mathbf{x}) \phi(\tau', \mathbf{x}') \rangle = \langle \mathbf{x} | G_\beta(\tau, \tau') | \mathbf{x}' \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n = \frac{2\pi}{\beta} n} \int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i(\omega_n(\tau - \tau') + \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}'))}}{\omega_n^2 + E(\mathbf{p})^2}. \quad (558)$$

Diskrétní sumu na pravé straně této formule lze vysčítat užitím stejného postupu jako v kapitole 1.11; jako výsledek obdržíme

$$\langle T_\tau \phi(\tau, \mathbf{x}) \phi(\tau', \mathbf{x}') \rangle = \int \frac{d^{d+1} p}{(2\pi)^{d+1}} \frac{e^{i(p_4(\tau - \tau') + \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}'))}}{p_4^2 + E(\mathbf{p})^2} + \int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{E(\mathbf{p})} \frac{\cosh E(\mathbf{p})(\tau - \tau')}{e^{\beta E(\mathbf{p})} - 1}. \quad (559)$$

První člen představuje příspěvek základního stavu, druhý je pak výsledek středování přes excitované stavy při (inverzní) teplotě β .

Vytvořující funkcionál (550) má tvar identický s tvarem charakteristického funkcionálu gaussovské míry $d\mu[\Phi(x)]$ s nulovou střední hodnotou a kovariančním operátorem $C = (-\partial_t^2 + \Omega^2)^{-1}$, definované na vhodném prostoru¹⁰⁰ trajektorií $\Phi(x) = \Phi(t, \mathbf{x})$ v prostoru polních konfigurací.

Ukázali jsme tedy, že kvazimíra (537), resp. její limita pro $T \rightarrow \infty$, formálně zapsaná jako

$$d\mu[\Phi(x)] = \lim_{T \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty} Z_T^{-1} \prod_{j=-N/2}^{N/2} d\mu_\Omega[\Phi_j] \mathcal{K}[\Phi_j, \Phi_{j-1}, -iT/N] \quad (560)$$

pro volné pole je rozšiřitelná do dobře definované gaussovské míry s kovariancí $(-\partial_t^2 + \Omega^2)^{-1}$ jak napovídalo její naivní vyjádření

$$d\mu[\Phi(x)] = \mathcal{D}\Phi(x) \exp(-S_E[\Phi]) / \mathcal{N}, \quad (561)$$

⁹⁹Prodloužíme-li zdroj $J(t)$ i jádro $G_T(t, t')$ periodicky s periodou $\beta = T$.

¹⁰⁰Specifikace tohoto prostoru závisí na konkrétním tvaru kovariančního operátoru; aby míra byla σ -aditivní stačí vzít Hilbertův prostor, v němž je tento operátor jaderný.

přičemž naivní normalizační faktor je formálně roven

$$\mathcal{N} = \mathcal{D}\text{et} \left(\frac{-\partial_t^2 + \Omega^2}{2\pi} \right)^{-1/2}. \quad (562)$$

Není obtížné se přesvědčit, že projekce této míry na prostor hodnot obecné trajektorie $\Phi(t)$ v zafixovaném euklidovské čase $t = \tau$ (což není nic jiného než prostor polních konfigurací) je míra $d\mu_\Omega[\Phi]$.

Uvažujme nyní interagující pole s euklidovskou akcí (527). Pomocí formulí (523,524) a zopakováním úvah, které v kvantové mechanice v případě Wienerovy míry vedly k Feynmanově-Kacově formuli, lze psát pro vytvořující funkcionál

$$Z_E[J] = \frac{\int d\mu[\Phi(x)] \exp \left(- \int dt H_I[\Phi(t), t] + i \int dt \langle J(t) \Phi(t) \rangle \right)}{\int d\mu[\Phi(x)] \exp \left(- \int dt H_I[\Phi(t), t] \right)}. \quad (563)$$

Tato formule je základem kvantově-polní poruchové teorie, kterou se budeme podrobněji zabývat v následujících podkapitolách.

2.5 Kvantová teorie pole na mříži

Zmiňme se ještě o druhém, neporuchovém způsobu konstrukce funkcionální míry pro kvantovou teorii pole. V podkapitole 2 jsme zavedli kvantově mechanický systém, regularizující spojitou teorii pole s nekonečně mnoha stupni volnosti. Konstrukce spočívala v rozdělení uvažovaného objemu V na N buněk a náhradou polní konfigurace M -ticí středních hodnot pole v těchto buňkách. Pro určitost předpokládejme, že objem V je d -dimenzionální hyperkrychle s délkou hrany L , který rozdělíme na $M = N^d$ hyperkrychlíček s délkou hrany $a = L/N$. Středů buněk tvoří d -dimenzionální mřížku s mřížovou konstantou a , s mřížovými body asociujeme příslušné střední hodnoty pole v jednotlivých buňkách. Stupně volnosti regularizované teorie budou tedy indexovány polohami mřížových bodů $\mathbf{x} = a\mathbf{e}_j n^j$, kde $n_j \in \mathbf{Z}$ jsou celočíselné souřadnice a \mathbf{e}_j jsou jednotkové souřadnicové vektory ve směru jednotlivých os. Pro určitost uvažujme rálné skalární pole $\Phi(\mathbf{x})$. Aproximujme prostorové derivace polní konfigurace předpisem

$$\nabla_i \Phi(\mathbf{x}) \rightarrow a^{-1} (\Phi(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_i) - \Phi(\mathbf{x})). \quad (564)$$

Hamiltonián regularizované teorie pišme ve tvaru

$$H = a^d \sum_{\mathbf{x}} \mathcal{H}(\Phi(\mathbf{x}), \nabla_j \Phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})) \quad (565)$$

V dalším nás bude zajímat vyjádření vytvořujícího funkcionálu pro euklidovské Greenovy funkce regularizované teorie pomocí funkcionálního integrálu. Budeme vycházet z definice dráhového integrálu na fázovém prostoru.

S užitím obecných formulí máme pro vytvořující funkcionál euklidovských Greenových funkcí regularizované teorie následující výraz:

$$Z[J(\mathbf{x}, \tau)] = \lim_{T_{f,i} \rightarrow \pm\infty} \lim_{N_\tau \rightarrow \infty} Z[0]^{-1} \\ \times \int \prod_{\mathbf{x}} \frac{d\pi(\mathbf{x}, \tau_{N_\tau}) a^d}{2\pi} \prod_{j=1}^{N_\tau-1} \frac{d\Phi(\mathbf{x}, \tau_j) d\pi(\mathbf{x}, \tau_j) a^d}{2\pi} \exp(-S_E^{reg}[\pi, \Phi, J]), \quad (566)$$

kde

$$\begin{aligned}
-S_E^{reg}[\pi, \Phi, J] &= ia^d \sum_{j=1}^{N_\tau} \sum_{\mathbf{x}} \pi(\mathbf{x}, \tau_j) (\Phi(\mathbf{x}, \tau_j) - \Phi(\mathbf{x}, \tau_{j-1})) \\
&- a^d \epsilon \sum_{j=1}^{N_\tau} \sum_{\mathbf{x}} (\mathcal{H}(\pi(\mathbf{x}, \tau_j), \Phi(\mathbf{x}, \tau_{j-1}), \nabla \Phi(\mathbf{x}, \tau_{j-1}) + \mathcal{J}(\mathbf{x}, \tau_{j-1}) \Phi(\mathbf{x}, \tau_{j-1})), \quad (567)
\end{aligned}$$

$\tau_j = T_i + j\epsilon$, $\epsilon = (T_f - T_i)/N_\tau$ a kde jsme přeškálovali zdroj $J = a^d \mathcal{J}$. Pro teorii s hamiltoniánem kvadratickým vzhledem ke sdruženým impulsům lze podobně jako v případě volné částice v podkapitole 1.1. přes sdružené impulsy vyintegrovat a obdržet tak ¹⁰¹

$$Z[J(\mathbf{x}, \tau)] = \lim_{T_{f,i} \rightarrow \pm\infty} \lim_{N_\tau \rightarrow \infty} Z[0]^{-1} \int \prod_{\mathbf{x}} \prod_{j=1}^{N_\tau-1} d\Phi(\mathbf{x}, \tau_j) \exp(-S_E^{reg}[\Phi(\mathbf{x}, \tau_j), J]), \quad (568)$$

kde $S_E^{reg}[\Phi(\mathbf{x}, \tau_j), J]$ závisí na hodnotách pole $\Phi(\mathbf{x}, \tau_j)$ a na diskretních aproximacích jeho derivací

$$\nabla_i \Phi(\mathbf{x}, \tau_j) = a^{-1} (\Phi(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_i, \tau_j) - \Phi(\mathbf{x}, \tau_j)) \quad (569)$$

$$\partial_\tau \Phi(\mathbf{x}, \tau_j) = \epsilon^{-1} (\Phi(\mathbf{x}, \tau_{j+1}) - \Phi(\mathbf{x}, \tau_j)) \quad (570)$$

Protože nás bude zajímat limita $T_{f,i} \rightarrow \pm\infty$ a současně “termodynamická” limita $V \rightarrow \infty$, vezmeme $T_{f,i} \rightarrow \pm L/2$ a sjednotíme oba limitní procesy požadavkem $L \rightarrow \infty$. Podobně definice dráhového integrálu obsahuje limitní proces $\epsilon \rightarrow 0$, kde ϵ je délka elementárních intervalů, na které dělíme časový interval $T_f - T_i = L$. Tuto limitu lze provést současně s přechodem $a \rightarrow 0$ od regularizovaného kvantově mechanického systému ke spojitě teorii pole položením ¹⁰² $\epsilon = a$. Předlimitní výraz má tedy tvar

$$Z[J(\mathbf{x}, \tau)]_{reg} = Z[0]_{reg}^{-1} \int \prod_{\mathbf{x}} d\Phi(x) \exp(-S_E^{reg}[\Phi(x), \partial_\mu \Phi(x), J(x)]), \quad (571)$$

kde $x = (\mathbf{x}, \tau) = an_\mu e_\mu$, celočíselné souřadnice $n_\mu \in (-N/2, N/2)$, e_μ jsou jednotkové vektory ve směru souřadnicových os, μ nyní nabývá hodnot $1, 2, \dots, d, d+1$ a diskretní derivace jsou určeny formulí (569) s $\partial_\tau = \partial_{d+1}$ a $\epsilon = a$.

Poslední předlimitní formule definuje (euklidovskou) kvantovou teorii pole na hyperkubické $d+1$ -dimenzionální mříži. Tak jak je zformulovaná odpovídá klasickému statisticko-mechanickému systému, $Z[J]_{reg}$ není nic jiného než klasická partiční suma. Výhodou této analogie je možnost aplikovat na výraz (571) metody typické pro tuto oblast (klastrové a vysokoteplotní rozvoje a.p.), přičemž spojitá limita $a \rightarrow 0$ odpovídá kritickému bodu ekvivalentního statistického systému. Blíže viz např. [6] a [9].

Přechod ke spojitě limitě zdaleka není triviální. Naivní limita $a \rightarrow 0$ vede obecně na divergentní výrazy, podobně jako formální sejmutí ultrafialového obřezání v poruchové teorii. Mřížová regularizace představuje alternativní neporuchovou verzi takového UV obřezání, neboť ignoruje detaily kompletní spojitě teorie na malých vzdálenostech. Z tohoto důvodu

¹⁰¹V dalším vynecháváme normalizační faktor míry $\mathcal{D}\Phi$, neboť se krátí s podobným faktorem ve jmenovateli.

¹⁰²Poznamenejme, zatímco limita $\epsilon \rightarrow 0$, $a \neq 0$ nevede v principiálním problému (jde o výpočet dráhového integrálu pro systém s konečně mnoha stupni volnosti), limita $a \rightarrow 0$ je netriviální, neboť představuje přechod k nekonečně mnoha stupňům volnosti se všemi obtížemi naznačenými v předchozí kapitole. Totéž platí o limitě $\epsilon = a \rightarrow 0$.

je třeba vhodně “naladit” hodnoty konstant v lagrangiánu regularizované teorie, tak, aby jejich závislost na a vedla ve spojitě limitě ke konečným výsledkům. Tyto závislosti se obdrží zafixováním několika málo renormalizačních podmínek na Greenovy funkce. Ukažme podstatu tohoto postupu na následujícím jednoduchém příkladu.

Uvažujme teorii reálného skalárního pole na mříži s kvadratickou euklidovskou akcí, závislých pouze na prvních derivacích. Nejobecnější tvar příslušné mřížové akce je ¹⁰³

$$S_E[\Phi] = Z_\Phi(-2\kappa \sum_{x,\mu} \Phi(x + ae_\mu)\Phi(x) + \sum_x \Phi(x)^2), \quad (572)$$

kde se sčítá přes mřížové body. Parametr κ je tzv. hopping parametr, který je zodpovědný za interakci¹⁰⁴ pole v různých bodech a zajišťuje netriviálnost korelačních funkcí. Jak uvidíme v dalším, bude nutné právě tento parametr správně “naladit” pro limitní přechod ke spojitě teorii. Regularizovaný vytvářející funkcionál je dán gaussovským integrálem; zapíšeme-li akci se zdrojem ve tvaru

$$S_E[\Phi, J] = \frac{1}{2} \sum_{x,y} \Phi(x)M_{x,y}\Phi(y) + \sum_x J(x)\Phi(x), \quad (573)$$

je roven

$$Z_{reg}[J] = \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{x,y} J(x)M_{x,y}^{-1}J(y)\right). \quad (574)$$

Inverzi matice $M_{x,y}$ lze snadno provést v impulsové reprezentaci. V termodynamické limitě $L \rightarrow \infty$, lze psát

$$\Phi(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{(d+1)/2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} d^{d+1}k \tilde{\Phi}(k) e^{-ik \cdot x}. \quad (575)$$

Všimněme si ultrafialového obřezání v impulsové reprezentaci, odpovídající integraci přes první Brillouinovu zónu hyperkubické mříže. V termínech proměnných $\tilde{\Phi}$ má mřížová akce tvar

$$S_E[\Phi] = Z_\Phi \int_{-\pi/a}^{\pi/a} d^{d+1}k \tilde{\Phi}(k)\tilde{\Phi}(-k)(1 - 2\kappa \sum_\mu \cos k_\mu a), \quad (576)$$

což s využitím vztahu (575) dává

$$S_E[\Phi] = Z_\Phi \sum_{x,y} \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{d+1} \Phi(x)\Phi(y) \int_{-\pi/a}^{\pi/a} d^{d+1}k e^{ik \cdot (x-y)} (1 - 2\kappa \sum_\mu \cos k_\mu a). \quad (577)$$

Inverze matice $M_{x,y}$, která odpovídá dvoubodové Greenově funkci tedy je

$$\langle \Phi(x)\Phi(y) \rangle = M_{x,y}^{-1} = \frac{1}{2} Z_\Phi^{-1} \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{d+1} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} d^{d+1}k \frac{e^{ik \cdot (x-y)}}{1 - 2\kappa \sum_\mu \cos k_\mu a}. \quad (578)$$

Pro malá $a \rightarrow 0$

$$1 - 2\kappa \sum_\mu \cos k_\mu a = 1 - 2(d+1)\kappa + \kappa a^2 k^2 + \mathcal{O}(a^4), \quad a \rightarrow 0, \quad (579)$$

¹⁰³Společnou multiplikatívni konstantu Z_Φ lze eliminovat redefinicí pole $\Phi(x)$. V následujícím ji ponecháváme z důvodů, které budou zřejmé později.

¹⁰⁴Ve statistické fyzice se často provádí rozvoj právě v hopping parametru.

tedy přibližná poloha pólu dvoubodové funkce v impulsové reprezentaci je

$$k^2 = \frac{2(d+1)\kappa - 1}{\kappa a^2} + \mathcal{O}(a^2) \quad (580)$$

a reziduum v pólu má hodnotu

$$z_\Phi = \frac{a^{d-1}}{2\kappa} Z_\Phi^{-1}. \quad (581)$$

Poloha pólu souvisí s hmotou částic, kreovaných z vakua operátory $\Phi(x)$, jednotkové reziduum zaručuje splnění kanonických komutačních relací. Je tedy přirozené požadovat, aby fyzikální obsah regularizované teorie, t.j. poloha pólu a reziduum fyzikálního pole v tomto pólu nezávisel v limitě $a \rightarrow 0$ na a . Toho lze dosáhnout volbou¹⁰⁵

$$z_\Phi = 1, \text{ t.j. } Z_\Phi = \frac{a^{d-1}}{2\kappa} \quad (582)$$

a zafixováním polohy pólu relací

$$\frac{2(d+1)\kappa - 1}{\kappa a^2} = -m^2, \quad (583)$$

kde m je fyzikální hmota, nezávislá na a . Poslední vztahy definují závislost “holých” vazbových konstant regularizovaného lagrangiánu na mřížkové konstantě a (t.j. na parametru ultrafialového obřezání), v parametrickém prostoru Z_Φ, κ tak dostaneme “linie konstantní fyziky” (ty se v realistických mřížových výpočtech obvykle zkoumají “experimentálně” pomocí numerických simulací). Výše popsaná procedura je nejjednodušším příkladem renormalizační procedury, užívané v kvantové teorii pole. Zajišťuje existenci netriviální spojitě limity

$$\langle \Phi(x)\Phi(y) \rangle = M_{x,y}^{-1} \rightarrow \int \frac{d^{d+1}k}{(2\pi)^{d+1}} \frac{e^{ik \cdot (x-y)}}{k^2 + m^2} \quad (584)$$

což není nic jiného než euklidovská dvoubodová funkce volného reálného skalárního pole. Přejdem k přeškálovanému zdroji $J = a^{d+1} \mathcal{J}$ máme pro vytvářející funkcionál spojitě teorie

$$Z[\mathcal{J}] = \exp \left(\frac{1}{2} \int d^{d+1}x d^{d+1}y \mathcal{J}(x) \langle \Phi(x)\Phi(x) \rangle \mathcal{J}(y) \right). \quad (585)$$

Všimněme si, že limitním přechodem $a \rightarrow 0$ byla restaurována symetrie $O(d+1)$, narušená přechodem k regularizovanému systému.

Poznamenejme, že v našem příkladu jsme z ilustračních důvodů zavedli nutnost renormalizační procedury poněkud uměle. Skutečně, řešíme-li renormalizační podmínky vzhledem ke κ a dosadíme výsledek zpětně do regularizované akce, obdržíme

$$S_E[\Phi] = \frac{1}{2} a^{d+1} \sum_{x,\mu} \left(\frac{\Phi(x+e_\mu) - \Phi(x)}{a} \right)^2 + \frac{1}{2} a^{d+1} \sum_x m^2 \Phi(x)^2, \quad (586)$$

tedy mřížovou regularizaci euklidovské akce reálného skalárního pole s hmotou m .

V případě interagujícího pole, t.j. obsahuje-li regularizovaná akce člen $\sum_x V(\Phi(x))$ s nekvadratickou funkcí V , je renormalizace nezbytná.

¹⁰⁵Ekvivalentně lze položit ve výchozím vztahu pro regularizovanou akci $Z_\Phi = 1$ a v posledním kroku přejít ke Greenovým funkcím renormalizovaného pole $\Phi_R(x) = z_\Phi^{-1/2}(x)\Phi(x)$.

2.6 Schrödingerova reprezentace pro fermiony a fermionový funkcionální integrál

V této podkapitole zobecníme konstrukci Berezinova integrálu na případ nekonečně mnoha fermionových stupňů volnosti. Postup bude v mnohém analogický bosonovému případu, proto bude výklad těch částí, kde se lze odvolat na podobné postupy z předchozí kapitoly, stručnější a podrobněji se zaměříme spíše na rozdílné rysy obou typů systémů.

Uvažujme fermionové pole $\psi_\alpha(\mathbf{x})$ (kde α je spinorový index - v dalším budeme často tento index vynechávat a chápat $\psi(\mathbf{x})$ jako sloupec s prvky $\psi_\alpha(\mathbf{x})$, podobně $\psi^+(\mathbf{x})$ bude řádka s elementy $\psi_\alpha^+(\mathbf{x})$) splňující standardní d -dimenzionální fermionové antikomutační relace

$$\{\psi_\alpha^+(\mathbf{x}), \psi_\beta(\mathbf{y})\} = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(d)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \{\psi_\alpha(\mathbf{x}), \psi_\beta(\mathbf{y})\} = \{\psi_\alpha^+(\mathbf{x}), \psi_\beta^+(\mathbf{y})\} = 0. \quad (587)$$

Jak jsme již ukázali v případě konečně mnoha stupňů volnosti, lze antikomutační relace tohoto typu reprezentovat pomocí operátorů násobení a derivace na vhodné Grassmannově algebře. V případě nekonečně mnoha stupňů volnosti lze tuto algebru ztotožnit s prostorem funkcionálů antikomutujících generátorů $\Psi_\alpha(\mathbf{x})$,

$$\{\Psi_\alpha(\mathbf{x}), \Psi_\beta(\mathbf{y})\} = 0. \quad (588)$$

Výsledná Grassmannova algebra je pak nekonečně dimenzionální a její elementy (funkcionály) $F[\Psi_\alpha(\mathbf{x})]$ mají obecný tvar

$$F[\Psi_\alpha(\mathbf{x})] = \sum_{j=0}^{\infty} \int d^d \mathbf{x}_1 \dots d^d \mathbf{x}_j F_{\alpha_1, \dots, \alpha_j}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_j) \Psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1) \dots \Psi_{\alpha_j}(\mathbf{x}_j). \quad (589)$$

Na rozdíl od bosonového pole je reprezentace kanonických antikomutačních relací (587) na prostoru funkcionálů (589) zatížena dodatečnou nejednoznačností. Je totiž třeba identifikovat, které operátory budeme považovat za kreační (resp. za operátory souřadnice - a ty pak budeme reprezentovat pomocí operátoru násobení grassmannovským generátorem) a které za anihilační (resp. za sdružené impulsy, jenž se reprezentují operátorem (funkcionálního) derivování podle grassmannovské proměnné). Zatímco v případě konečného počtu fermionových stupňů volnosti tato nejednoznačnost nehrála roli, neboť vedla na unitárně ekvivalentní reprezentace kanonických antikomutačních relací, v případě teorie pole lze takto získat unitárně neekvivalentní reprezentace.

Ilustrujme to na případě volné teorie s hamiltoniánem

$$H = \int d^d \mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}) h \psi(\mathbf{x}) = \langle \psi^+ h \psi \rangle, \quad (590)$$

(kde h je jednočásticový hamiltonián, např. $-\nabla^2/(2m)$ pro nerelativistické fermiony nebo $-i\alpha \cdot \nabla + \beta m$ pro Diracovy fermiony - srov. s odpovídající teorií bosonového pole); zde výše zmíněná nejednoznačnost odpovídá možným výběrům fockovského vakua, resp. zaplnění Diracova moře. Nechť je pro jednoduchost hamiltonián h diagonální v impulsové reprezentaci a $u(\mathbf{p}, \sigma)$ jsou odpovídající vlastní funkce h , t.j.

$$h u(\mathbf{p}, \sigma) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} = E(\mathbf{p}) u(\mathbf{p}, \sigma) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}. \quad (591)$$

s normalizací

$$u^+(\mathbf{p}, \sigma) u(\mathbf{p}, \sigma') = 2E(\mathbf{p}) \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (592)$$

kde σ je souhrn vlastních hodnot dodatečných jednočásticových operátorů, komutujících s h (např. komponenty spinu) takových, že dvojici $(\mathbf{p}\sigma)$ odpovídá právě jeden vlastní stav. Označme ještě

$$u_{\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{x}) = u(\mathbf{p}, \sigma)e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}. \quad (593)$$

Z fyzikálního hlediska je dostatečně obecná následující volba reprezentace operátorů ψ , ψ^+ (srov. podkapitulu 1.12)

$$\psi(\mathbf{x}) = \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} \left(u_{\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{x}) \left(\langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \Psi \rangle \chi_M(E(\mathbf{p})) + \langle \frac{\delta}{\delta\Psi} u_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \chi_{S-M}(E(\mathbf{p})) \right) \right) \quad (594)$$

$$\psi^+(\mathbf{x}) = \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} \left(u_{\mathbf{p}\sigma}^+(\mathbf{x}) \left(\langle \frac{\delta}{\delta\Psi} u_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \chi_M(E(\mathbf{p})) + \langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \Psi \rangle \chi_{S-M}(E(\mathbf{p})) \right) \right), \quad (595)$$

kde $\tilde{d}\mathbf{p} = d^d\mathbf{p}/((2\pi)^d 2E(\mathbf{p}))$, M je vybraná podmnožina spektra S operátoru h a χ_M značí charakteristickou funkci množiny M . Pro operátor H dostáváme v této reprezentaci

$$H = \int \tilde{d}\mathbf{p}\tilde{d}\mathbf{q} \sum_{\sigma\rho} \langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ h u_{\mathbf{q}\rho} \rangle \left(\chi_M(E(\mathbf{p})) \chi_M(E(\mathbf{q})) \langle \frac{\delta}{\delta\Psi} u_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \langle u_{\mathbf{q}\rho}^+ \Psi \rangle + \chi_{S-M}(E(\mathbf{p})) \chi_{S-M}(E(\mathbf{q})) \langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \Psi \rangle \langle \frac{\delta}{\delta\Psi} u_{\mathbf{q}\rho} \rangle \right). \quad (596)$$

Definujeme-li ortogonální projektor Π_M formulí

$$\Pi_M(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} \chi_M(E(\mathbf{p})) u_{\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{x}) u_{\mathbf{p}\sigma}^+(\mathbf{y})$$

a analogicky projektor Π_{S-M} , lze H zapsat v kompaktním tvaru

$$H = \text{Tr} \Pi_M h - \text{Tr} h \Pi_M \Psi \frac{\delta}{\delta\Psi} + \text{Tr} h \Pi_{S-M} \Psi \frac{\delta}{\delta\Psi}. \quad (597)$$

Odtud snadno najdeme vlnové funkcionály odpovídající vlastním stavům operátoru H . Speciálním vlastním stavem je Fockovo vakuum s vlnovým funkcionálem $F_{vac}[\Psi] = \langle \Psi|0\rangle = 1$, kterému odpovídá energie $E_{vac} = \text{Tr} \Pi_M h$. To lze interpretovat jako zobecněné Diracovo moře, se zaplněnými všemi jednočásticovými stavy, jejichž energie leží v zafixované podmnožině M spektra jednočásticového hamiltoniánu h .

Další vlastní stavy $|\mathbf{p}_1\sigma_1 \dots \mathbf{p}_n\sigma_n; \mathbf{q}_1\rho_1 \dots \mathbf{q}_m\rho_m\rangle$ mají vlnové funkcionály

$$\begin{aligned} F_{\mathbf{p}_1\sigma_1 \dots \mathbf{p}_n\sigma_n; \mathbf{q}_1\rho_1 \dots \mathbf{q}_m\rho_m}[\Psi] &= \langle \Psi | \mathbf{p}_1\sigma_1 \dots \mathbf{p}_n\sigma_n; \mathbf{q}_1\rho_1 \dots \mathbf{q}_m\rho_m \rangle \\ &= \langle u_{\mathbf{p}_1\sigma_1}^+ \Psi \rangle \dots \langle u_{\mathbf{p}_n\sigma_n}^+ \Psi \rangle \langle u_{\mathbf{q}_1\rho_1}^+ \Psi \rangle \dots \langle u_{\mathbf{q}_m\rho_m}^+ \Psi \rangle \end{aligned} \quad (598)$$

a odpovídají n “částicím” s impulsy \mathbf{p}_j , spiny σ_j a energiemi $E(\mathbf{p}_j) \in S - M$ a m “děrám” s impulsy $-\mathbf{q}_j$, spiny $-\rho_j$, pro něž $E(\mathbf{q}_j) \in M$. Energie takového stavu je pak

$$E_{\mathbf{p}_1\sigma_1 \dots \mathbf{p}_n\sigma_n; \mathbf{q}_1\rho_1 \dots \mathbf{q}_m\rho_m} = \sum_{j=1}^n E(\mathbf{p}_j) - \sum_{j=1}^m E(\mathbf{q}_j) + E_{vac}. \quad (599)$$

Stavy $F_{\mathbf{p}_1\sigma_1\dots\mathbf{p}_n\sigma_n,\mathbf{q}_1\rho_1\dots\mathbf{q}_m\rho_m}[\Psi]$ lze získat z Fockova vakua pomocí kreačních operátorů “částic” a “děr”:

$$b^+(\mathbf{p}, \sigma) = \langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \Psi \rangle \chi_{S-M}(E(\mathbf{p})), \quad (600)$$

$$d^+(\mathbf{q}, \sigma) = \langle u_{-\mathbf{q}-\sigma}^+ \Psi \rangle \chi_M(E(\mathbf{q})). \quad (601)$$

Anihilační operátory

$$b(\mathbf{p}, \sigma) = \left\langle \frac{\delta}{\delta \Psi} u_{\mathbf{p}\sigma} \right\rangle \chi_{S-M}(E(\mathbf{p})) \quad (602)$$

$$d(\mathbf{q}, \sigma) = \left\langle \frac{\delta}{\delta \Psi} u_{-\mathbf{q}-\sigma} \right\rangle \chi_M(E(\mathbf{q})) \quad (603)$$

anihilují Fockovo vakuum, $b(\mathbf{p}, \sigma)|0\rangle = d(\mathbf{p}, \sigma)|0\rangle = 0$ a platí následující kanonické antikomutační relace

$$\begin{aligned} \{b(\mathbf{p}, \sigma), b^+(\mathbf{p}', \sigma')\} &= (2\pi)^d 2E(\mathbf{p}) \delta^{(d)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{\sigma\sigma'}, \\ \{d(\mathbf{p}, \sigma), d^+(\mathbf{p}', \sigma')\} &= (2\pi)^d 2E(\mathbf{p}) \delta^{(d)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{\sigma\sigma'}, \end{aligned} \quad (604)$$

(všechny ostatní antikomutátory jsou nulové). Tyto relace definují skalární součin na Fockově prostoru, který je uzávěrem lineárního obalu stavů $|\mathbf{p}_1\sigma_1\dots\mathbf{p}_n\sigma_n, \mathbf{q}_1\rho_1\dots\mathbf{q}_m\rho_m\rangle$. Vzhledem k tomuto skalárnímu součinu jsou kreační a anihilační operátory (podle definice) navzájem hermitovsky sdružené a v důsledku toho na Fockově prostoru platí relace

$$\left(\frac{\delta}{\delta \Psi(\mathbf{x})} \right)^+ = \Psi(\mathbf{x}).$$

Pomocí kreačních a anihilačních operátorů zapíšeme operátory ψ a ψ^+ ve tvaru

$$\psi(\mathbf{x}) = \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} \left(u(\mathbf{p}, \sigma) b(\mathbf{p}, \sigma) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + u(-\mathbf{p}, -\sigma) d^+(\mathbf{p}, \sigma) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \right) \quad (605)$$

$$\psi^+(\mathbf{x}) = \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} \left(u^+(\mathbf{p}, \sigma) b^+(\mathbf{p}, \sigma) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + u^+(-\mathbf{p}, -\sigma) d(\mathbf{p}, \sigma) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \right). \quad (606)$$

Dvě takové reprezentace kanonických antikomutačních relací odpovídající výběru podmnožin M_1 a M_2 nemusí být obecně unitárně ekvivalentní. To nastane např. tehdy, obsahuje-li množina $M_1 - M_2$ nekonečný počet stavů. Stavy z $M_1 - M_2$ jsou totiž v teorii 2 interpretovány jako částice a tedy Fockovo vakuum odpovídající teorii 1 je zaplněno nekonečným počtem těchto částic a nepatří tedy do Fockova prostoru¹⁰⁶ teorie 2.

Pro hamiltonián H odvodíme

$$\begin{aligned} H &= \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} E(\mathbf{p}) \left(b^+(\mathbf{p}, \sigma) b(\mathbf{p}, \sigma) + d(\mathbf{p}, \sigma) d^+(\mathbf{p}, \sigma) \right) \\ &= \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} E(\mathbf{p}) \left(b^+(\mathbf{p}, \sigma) b(\mathbf{p}, \sigma) - d^+(\mathbf{p}, \sigma) d(\mathbf{p}, \sigma) \right) + E_{vac} \end{aligned} \quad (607)$$

¹⁰⁶Připomeňme, že Fockův prostor vznikne úplněním lineárního obalu stavů s konečným počtem částic.

V konkrétních fyzikálních situacích se volí podmnožina M různě. Např. pro nerelativistický fermionový plyn, kdy $E(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/(2m) > 0$, je M množina energetických hladin $E < E_F$, kde E_F je Fermiho energie a Fockovo vakuum pak odpovídá zaplnění všech jenočásticových stavů až po Fermiho mez. Operátory $b^+(\mathbf{p}, \sigma)$ kreují částice s energií $E(\mathbf{p}) > E_F$, operátory $d^+(\mathbf{p}, \sigma)$ kreují díry, t.j. anihilují částice s energií $E(\mathbf{p}) < E_F$. Pokud se zachovává celkový počet částic, t.j. omezíme-li se na podprostor Fockova prostoru s ostrou hodnotou operátoru počtu částic $N = \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} (b^+(\mathbf{p}, \sigma)b(\mathbf{p}, \sigma) + d(\mathbf{p}, \sigma)d^+(\mathbf{p}, \sigma))$, částice i díry se kreují v párech¹⁰⁷ a celková energie každého páru je pozitivní. Fockovo vakuum je tedy základním stavem systému pevného počtu neinteragujících fermionů.

V relativistickém případě (např. pro Diracovy fermiony) je $E(\mathbf{p}) = \pm\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ a M je množina všech jednočásticových stavů s $E(\mathbf{p}) < 0$. Fockovo vakuum $|0\rangle$ odpovídá potom zaplněnému Diracovu moři, díry kreované pomocí operátorů $d^+(\mathbf{p}, \sigma)$ mají pozitivní energii a interpretují se jako antičástice k částicím, které se kreují operátory $b^+(\mathbf{p}, \sigma)$. V tomto smyslu je tedy Diracovo moře základním stavem bez částic a antičástic.

Podobně jako v konečně dimenzionálním případě lze i pro fermionová pole zkonstruovat grassmannovské rozšíření Hilbertova prostoru stavů, umožňující nalézt zobecněné vlastní stavy $|\Psi\rangle$ a $\langle\Psi|$ operátoru¹⁰⁸ $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ odpovídajícímu násobení vlnového funkcionálu grassmannovským generátorem $\Psi(\mathbf{x})$. Ne všechny konečně dimenzionální formule však mají odpovídající jednoduchý nekonečně dimenzionální protějšek.

Ve Fockově prostoru, který byl zkonstruován v první části této podkapitoly, máme pro operátor $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ následující vyjádření pomocí kreačních operátorů

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} \left(u(\mathbf{p}, \sigma)b^+(\mathbf{p}, \sigma)e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + u(-\mathbf{p}, -\sigma)d^+(\mathbf{p}, \sigma)e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \right), \quad (608)$$

hermitovsky sdružený operátor (který odpovídá operátoru $\delta/\delta\Psi$) je pak

$$\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}) = \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} \left(u^+(\mathbf{p}, \sigma)b(\mathbf{p}, \sigma)e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + u^+(-\mathbf{p}, -\sigma)d(\mathbf{p}, \sigma)e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \right). \quad (609)$$

Explicitní tvar zobecněného bra-vektoru $\langle\Psi|$, splňujícího rovnici pro vlastní hodnoty operátorů $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ ve tvaru $\langle\Psi|\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \langle\Psi|\Psi(\mathbf{x})$, lze snadno získat přímočarým zobecněním příslušné konečně dimenzionální formule $\langle q| = \langle 0|\exp(-i\sum_j q_j P_j)$ (připomeňme, že $P_j = iQ_j^+$; srov. také (347)):

$$\langle\Psi| = \langle 0|\exp\left(\langle -\hat{\Psi}^+\Psi\rangle\right). \quad (610)$$

Podobně jednoduché zobecnění konečně dimenzionální formule $|q\rangle = \prod_j(Q_j - q_j)|0\rangle$ (srov. (346)) pro ket vektor $|\Psi\rangle$ však není možné.

Zcela analogicky lze setrojit zobecněné vlastní stavy $|\Psi^+\rangle$ a $\langle\Psi^+|$ operátorů $\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}) = \delta/\delta\Psi(\mathbf{x})$. Ket vektory $|\tilde{\Psi}^+\rangle$ jsou podobně jako v konečnědimenzionálním případě, kde pro vlastní vektory operátorů P_j máme $|p\rangle = \mathcal{N}\exp(i\sum_j p_j Q_j)|0\rangle$, dány vztahem

$$|\tilde{\Psi}^+\rangle = \mathcal{N}\exp\left(-\langle\tilde{\Psi}^+\hat{\Psi}\rangle\right)|0\rangle, \quad (611)$$

¹⁰⁷Tzn. v uvedeném podprostoru leží pouze stavy $F_{\mathbf{p}_1\sigma_1\dots\mathbf{p}_n\sigma_n, \mathbf{q}_1\rho_1\dots\mathbf{q}_n\rho_n}[\Psi]$ se stejným počtem n částic a děr.

¹⁰⁸Zde jsou možná poněkud nevhodně použity stejné symboly Ψ^+ a Ψ jak pro operátory na Fockově prostoru (ve výrazu $\langle 0|\exp(-\langle\tilde{\Psi}^+K\rangle)\exp(\langle J\tilde{\Psi}\rangle)|0\rangle$), tak i pro grassmannovské proměnné. V dalším budeme, pokud význam nebude patrný z kontextu, rozlišovat tyto objekty pomocí symbolu stříšky.

kde \mathcal{N} je vhodný normovací faktor; tyto ket-vektory definují analogii P -reprezentace, kterou jsme zavedli v konečně dimenzích. Formule pro bra vektor $\langle p|$ však nemá přímočaré zobecnění.

Vlnové funkcionály $F[\Psi]$ lze pak formálně chápat jako skalární součin

$$F[\Psi] = \langle \Psi | F \rangle. \quad (612)$$

Speciálně označme

$$\Delta[\Psi', \Psi] = \langle \Psi' | \Psi \rangle, \quad (613)$$

což je nekonečně dimenzionální analogie grassmannovské δ -funkce¹⁰⁹.

Sdružený funkcionál k funkcionálu $F[\Psi]$ tvaru (589) reprezentujícímu stav $|F\rangle$ z Fockova prostoru, t.j. formální skalární součin $F^*[\Psi] = \langle F | \Psi \rangle$, lze pak formálně získat následující operací

$$F^*[\Psi] = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \int d^d \mathbf{x}_1 \dots d^d \mathbf{x}_j F_{\alpha_1 \dots \alpha_j}^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_j) \frac{\delta}{\delta \Psi_{\alpha_j}(\mathbf{x}_j)} \dots \frac{\delta}{\delta \Psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1)} \Delta[0, \Psi]. \quad (614)$$

Ta je vhodným nekonečně dimenzionálním zobecněním vztahů

$$\begin{aligned} \langle q | i_1 \dots i_n \rangle &= q_{i_1} \dots q_{i_n} \\ \langle i_1 \dots i_n | q \rangle &= (-1)^{N-n} \varepsilon_{i_1 \dots i_n k_1 \dots k_{N-n}} q_{k_1} \dots q_{k_{N-n}}, \end{aligned} \quad (615)$$

platných pro případ N párů fermionových operátorů (srov. podkapitulu 1.12).

Analogicky jako v konečnoměrném případě bychom chtěli skalární součin stavů $F[\Psi]$ a $G[\Psi]$ z Fockova prostoru formálně reprezentovat fermionovým funkcionálním integrálem

$$\langle F | G \rangle = \int F^*[\Psi] \mathcal{D}\Psi(\mathbf{x}) G[\Psi]. \quad (616)$$

Podobně by bylo přirozené reprezentovat funkcionální δ -funkci integrálním výrazem zobecňujícím odpovídající konečnědimenzionální formuli ve tvaru¹¹⁰

$$\Delta[\tilde{\Psi}', \tilde{\Psi}] = \int \exp\left(-\langle \Psi^+(\tilde{\Psi}' - \tilde{\Psi}) \rangle\right) \mathcal{D}\Psi^+(\mathbf{x}), \quad (617)$$

(zde Ψ^+ je grassmannovská integrační proměnná nezávislá na Ψ v předchozí formuli). Postulujeme proto tyto dva požadavky spolu s definicí sdruženého funkcionálu (614) a pokusme se, podobně jako v bosonovém případě, nalézt důsledky korespondence mezi takto vymezeným fermionovým funkcionálním integrálem a fermionovým Fockovým prostorem.

¹⁰⁹Připomeňme, že v konečně dimenzionálním případě máme formuli

$$\Delta[q', q] = \prod_j (q'_j - q_j),$$

která nepřipouští přímočaré zobecnění.

¹¹⁰Konečnorozměrným předobrazem tohoto vztahu je formule

$$\Delta[q', q] = (-1)^{N(N+1)/2} \int d^N p \exp\left(-\sum_{j=1}^N p_j (q'_j - q_j)\right).$$

Znaménkový faktor $(-1)^{N(N+1)/2}$ je ve formuli (617) formálně vtažen do míry $\mathcal{D}\Psi^+$.

Ve Fockově prostoru jsou stavy $|F\rangle$ lineárním obalem stavů $\hat{\Psi}_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1) \dots \hat{\Psi}_{\alpha_n}(\mathbf{x}_n)|0\rangle$, jejichž vlnové funkcionály jsou

$$F_{\alpha_1 \mathbf{x}_1 \dots \alpha_n \mathbf{x}_n}[\Psi] = \Psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1) \dots \Psi_{\alpha_n}(\mathbf{x}_n). \quad (618)$$

Podobně jako v bosonovém případě stačí tedy definovat fermionový funkcionální integrál typu

$$\int F_{\alpha_1 \mathbf{x}_1 \dots \alpha_n \mathbf{x}_n}^*[\Psi] \mathcal{D}\Psi(\mathbf{x}) G_{\beta_1 \mathbf{y}_1 \dots \beta_m \mathbf{y}_m}[\Psi], \quad (619)$$

resp., s použitím vztahů (617) a (614), “dvojný” fermionový integrál

$$\int \mathcal{D}\Psi^+(\mathbf{x}) \mathcal{D}\Psi(\mathbf{x}) \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) \Psi_{\alpha_n}^+(\mathbf{x}_n) \dots \Psi_{\alpha_1}^+(\mathbf{x}_1) \Psi_{\beta_1}(\mathbf{y}_1) \dots \Psi_{\beta_m}(\mathbf{y}_m). \quad (620)$$

Uvážíme-li, že platí

$$F_{\alpha_1 \mathbf{x}_1 \dots \alpha_n \mathbf{x}_n}[\Psi] = \frac{\delta^n}{\delta J_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1) \dots \delta J_{\alpha_n}(\mathbf{x}_n)} F[J]|_{J=0}, \quad (621)$$

kde J je grassmannovský zdroj a

$$F[J] = \exp(\langle J \Psi \rangle) = \langle \Psi | \exp(\langle J \hat{\Psi} \rangle) | 0 \rangle, \quad (622)$$

a podobně podle (614) (zde K je grassmannovský zdroj)

$$F_{\alpha_1 \mathbf{x}_1 \dots \alpha_n \mathbf{x}_n}^*[\Psi] = \frac{\delta^n}{\delta K_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1) \dots \delta K_{\alpha_n}(\mathbf{x}_n)} G[K]|_{K=0}, \quad (623)$$

kde

$$\begin{aligned} G[K] &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d^d \mathbf{x}_1 \dots d^d \mathbf{x}_n K_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1) \dots K_{\alpha_n}(\mathbf{x}_n) F_{\alpha_1 \mathbf{x}_1 \dots \alpha_n \mathbf{x}_n}^*[\Psi] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int d^d \mathbf{x}_1 \dots d^d \mathbf{x}_n K_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1) \dots K_{\alpha_n}(\mathbf{x}_n) \frac{\delta}{\delta \Psi_{\alpha_n}(\mathbf{x}_n)} \dots \frac{\delta}{\delta \Psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1)} \Delta[0, \Psi] \\ &= \exp\left(\left\langle \frac{\delta}{\delta \Psi} K \right\rangle\right) \Delta[0, \Psi] = \Delta[0, \Psi - K] \\ &= \Delta[K, \Psi] = \langle 0 | \exp(-\langle \hat{\Psi}^+ K \rangle) | \Psi \rangle, \end{aligned} \quad (624)$$

vidíme, že integrály (619, 620) lze formálně získat z vytvářejícího funkcionálu

$$\begin{aligned} Z[K, J] &= \int G[K] \mathcal{D}\Psi(\mathbf{x}) F[J] = \int \Delta[K, \Psi] \mathcal{D}\Psi(\mathbf{x}) \exp(\langle J \Psi \rangle) \\ &= \int \mathcal{D}\Psi^+(\mathbf{x}) \mathcal{D}\Psi(\mathbf{x}) \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) \exp(-\langle \Psi^+ K \rangle + \langle J \Psi \rangle) \end{aligned} \quad (625)$$

odkud plynou všechny integrály (619) levým funkcionálním derivováním podle antikomutujících zdrojů J a K . Porovnáním s přímým výpočtem v termínech kreačních a anihilačních operátorů

$$\begin{aligned} Z[K, J] &= \langle G[K] | F[J] \rangle = \langle 0 | \exp(-\langle \hat{\Psi}^+ K \rangle) \exp(\langle J \hat{\Psi} \rangle) | 0 \rangle \\ &= \exp(-[\langle \hat{\Psi}^+ K \rangle, \langle J \hat{\Psi} \rangle]) \\ &= \exp(\langle JK \rangle) \end{aligned} \quad (626)$$

obdržíme formuli, kterou lze chápat jako definici fermionového funkcionálního integrálu

$$\begin{aligned}
Z[K, J] &= \int \Delta[K, \Psi] \mathcal{D}\Psi(\mathbf{x}) \exp(\langle J\Psi \rangle) \\
&= \int \mathcal{D}\Psi^+(\mathbf{x}) \mathcal{D}\Psi(\mathbf{x}) \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) \exp(-\langle \Psi^+ K \rangle + \langle J\Psi \rangle) \\
&= \exp(\langle JK \rangle).
\end{aligned} \tag{627}$$

To odpovídá nekonečně dimenzionálnímu zobecnění formule pro gaussovský fermionový integrál s jednotkovým operátorem definujícím kvadratickou formu v exponenciále integrandu. Všimněme si, že tyto formule nejsou ve sporu s integrální reprezentací fermionové δ -funkce (617).

Díky korespondenci s fermionovým Fockovým prostorem umíme tedy, alespoň v principu, integrovat funkcionály antikomutujících proměnných Ψ^+ a Ψ ve tvaru $F[\Psi^+, \Psi] \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle)$, kde

$$F[\Psi^+, \Psi] = \sum_{n,m=0}^{\infty} \int d^d \mathbf{x}_1 \dots d^d \mathbf{x}_n d^d \mathbf{y}_1 \dots d^d \mathbf{y}_m F_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta_1 \dots \beta_m}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{y}_m) \Psi_{\alpha_1}^+(\mathbf{x}_1) \dots \Psi_{\beta_m}(\mathbf{y}_m). \tag{628}$$

Odvoďme ještě, v analogii s bosonovým případem, vhodné algebraické metody výpočtu gaussovských fermionových funkcionálních integrálů, založené na operaci normálního uspořádání fermionových operátorů. Píšeme-li

$$\int \mathcal{D}\Psi^+(\mathbf{x}) \mathcal{D}\Psi(\mathbf{x}) \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) \exp(-\langle \Psi^+ K \rangle + \langle J\Psi \rangle) = \langle 0 | \exp(-\langle \hat{\Psi}^+ K \rangle) \exp(\langle J\hat{\Psi} \rangle) | 0 \rangle, \tag{629}$$

dostaneme vztah, který je jiným zápisem formulí (626) a (627) a který má tvar

$$\int \mathcal{D}\Psi^+(\mathbf{x}) \mathcal{D}\Psi(\mathbf{x}) \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) F[\Psi^+, \Psi] = \langle 0 | F[\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}] | 0 \rangle. \tag{630}$$

Na pravé straně této formule je vakuová střední hodnota operátorového funkcionálu $F[\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}]$ a operátory $\hat{\Psi}^+$ a $\hat{\Psi}$ jsou dány formulí (608, 609). Operátor $F[\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}]$ vznikne z odpovídajícího funkcionálu grassmannovských proměnných náhradou těchto proměnných za operátory a následným antinormálním uspořádáním (t.j. všechny kreační operátory se přesunou napravo od anihilačních, přičemž se považují za antikomutující). Naopak každému operátoru lze přiřadit funkcionál Ψ a Ψ^+ , upravíme-li ho nejprve pomocí kanonických antikomutačních relací na tvar s anihilačními operátory nalevo od kreačních. V tomto smyslu je tedy jednoznačná korespondence mezi funkcionály antikomutujících generátorů a operátory na Fockově prostoru stavů.

Pravou stranu (630) lze podobně jako v bosonovém případě snadno spočítat pro normálně uspořádané operátory (t.j. naopak s kreačními operátory nalevo od anihilačních): Platí totiž

$$\langle 0 | : F[\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}] : | 0 \rangle = \langle 0 | F[0, 0] | 0 \rangle. \tag{631}$$

Díky výše uvedené korespondenci lze zcela analogicky jako v bosonovém případě rozšířit pojem normálního uspořádání i pro funkcionály antikomutujících proměnných Ψ a Ψ^+ tak, aby

$$\int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) : F[\Psi^+, \Psi] := F[0, 0] \tag{632}$$

Vytvořujícím funkciónálem pro normální uspořádaní operátorových monomů tvaru

$$\hat{\Psi}_{\alpha_1}^+(\mathbf{x}_1)\hat{\Psi}_{\alpha_2}^+(\mathbf{x}_2)\dots\hat{\Psi}_{\beta_1}(\mathbf{y}_1)\dots\hat{\Psi}_{\beta_m}(\mathbf{y}_m)$$

je normálně uspořádaná operátorová exponenciála s antikomutujícími zdroji, pro níž máme:

$$\begin{aligned} & : \exp(\langle \hat{\Psi}^+ K \rangle) \exp(\langle J \hat{\Psi} \rangle) := \exp(\langle J \hat{\Psi} \rangle) \exp(\langle \hat{\Psi}^+ K \rangle) \\ & = \exp(\langle \hat{\Psi}^+ K \rangle) \exp(\langle J \hat{\Psi} \rangle) \exp([\langle J \hat{\Psi} \rangle, \langle \hat{\Psi}^+ K \rangle]) \\ & = \exp(\langle \hat{\Psi}^+ K \rangle) \exp(\langle J \hat{\Psi} \rangle) \exp(\langle JK \rangle), \end{aligned} \quad (633)$$

zde jsme využili definici normálního uspořádaní a kanonické antikomutační relace. Proto definujeme pro funkciónály grassmannovských generátorů normální uspořádaní formulí

$$: \exp(\langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle) : = \exp(\langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle + \langle JK \rangle) \quad (634)$$

$$= \exp\left(-\langle \frac{\delta}{\delta \Psi} \frac{\delta}{\delta \Psi^+} \rangle\right) \exp(\langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle). \quad (635)$$

Pro libovolný funkciónál odtud máme

$$: F[\Psi^+, \Psi] := \exp\left(-\langle \frac{\delta}{\delta \Psi} \frac{\delta}{\delta \Psi^+} \rangle\right) F[\Psi^+, \Psi]. \quad (636)$$

Zcela analogicky jako v bosonovém případě se odvodí ze vztahu pro součin normálně uspořádaných exponenciál

$$\begin{aligned} & : \exp(\langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle) :: \exp(\langle J' \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K' \rangle) : \\ & = : \exp(\langle (J + J') \Psi \rangle + \langle \Psi^+ (K + K') \rangle) : \exp(-\langle J' K \rangle - \langle JK' \rangle) \end{aligned}$$

formule

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\Psi}{\Psi^+} \right) : \exp(\langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle) : \\ & =: \left(\frac{\Psi}{\Psi^+} \right) \exp(\langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle) : - \left(\frac{K}{J} \right) : \exp(\langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle) : \\ & =: \left(\frac{\Psi}{\Psi^+} \right) \exp(\langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle) : + : \left(-\frac{\frac{\delta}{\delta \Psi^+}}{\frac{\delta}{\delta \Psi}} \right) \exp(\langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle) :, \end{aligned}$$

resp. pro obecný funkciónál $F[\Psi^+, \Psi]$

$$: \left(\frac{\Psi}{\Psi^+} \right) F[\Psi^+, \Psi] := \left(\frac{\Psi}{\Psi^+} \right) : F[\Psi^+, \Psi] : - : \left(-\frac{\frac{\delta}{\delta \Psi^+}}{\frac{\delta}{\delta \Psi}} \right) F[\Psi^+, \Psi] :. \quad (637)$$

Odtud plyne (takřka doslovným zopakováním postupu použitého pro důkaz obdobného tvrzení pro bosony) relace pro normální uspořádaní “gaussovské” exponenciály

$$: \exp(\langle \Psi^+ A \Psi \rangle) := \exp \operatorname{Tr} \ln(1 - A) \exp(\langle \Psi^+ (1 - A)^{-1} A \Psi \rangle) \quad (638)$$

a inverzní vztah

$$\exp(\langle \Psi^+ A \Psi \rangle) = \exp \operatorname{Tr} \ln(1 + A) : \exp(\langle \Psi^+ (1 + A)^{-1} A \Psi \rangle) :. \quad (639)$$

Nyní snadno dostaneme formuli pro fermionový gaussovský integrál (srov. bosonový případ)

$$\begin{aligned}
& \int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) \exp(\langle \Psi^+ A \Psi \rangle + \langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle) \\
&= \exp \operatorname{Tr} \ln(1 + A) \int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) \\
&\quad \times \exp(-\langle J A^{-1} K \rangle) : \exp(\langle (\Psi^+ + J A^{-1})(1 + A)^{-1} A (\Psi + A^{-1} K) \rangle) : \\
&= \exp \operatorname{Tr} \ln(1 + A) \exp(-\langle J(1 + A)^{-1} K \rangle). \tag{640}
\end{aligned}$$

Dalším důsledkem relace (637) a vztahu pro integraci normálně uspořádaných funkcionalů (631) je formule pro “integraci per partes”, která má tvar (srov. odpovídající bosonovou formuli (493))

$$\int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) \left(-\frac{\delta}{\delta \Psi^+} \right) F[\Psi^+, \Psi] = \int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) \left(\frac{\Psi}{\Psi^+} \right) F[\Psi^+, \Psi]. \tag{641}$$

Podobně jako v bosonovém případě lze na základě vztahů (630) a (640) zformulovat sadu intuitivních pravidel pro manipulaci s fermionovými funkcionalními integrály. Píšeme-li v (640) místo operátoru A operátor $A - 1$, a položíme-li $\operatorname{Tr} \ln A = \ln \mathcal{D} \operatorname{et} A$, dostaneme formální pravidlo pro gaussovskou integraci ve tvaru používaném ve fyzikální literatuře:

$$\int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ A \Psi \rangle + \langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle) = \mathcal{D} \operatorname{et} A \exp(-\langle J A^{-1} K \rangle). \tag{642}$$

Vztah pro integraci per partes lze ve fyzikálním značení psát ve tvaru

$$\int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \left(-\frac{\delta}{\delta \Psi^+} \right) F[\Psi^+, \Psi] = 0 \tag{643}$$

Všimněme si dále, že dosadíme-li do formule (642) $J(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^N J_n f_n^+(\mathbf{x})$, $K(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^N K_n f_n(\mathbf{x})$, kde f_n jsou vlastní funkce operátoru A , t.j. $A f_n = a_n f_n$, můžeme psát

$$\int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp\left(\langle \Psi^+ A \Psi \rangle + \sum_{n=1}^N J_n \langle f_n^+ \Psi \rangle + \sum_{n=1}^N \langle \Psi^+ f_n \rangle K_n\right) = \mathcal{D} \operatorname{et} A \exp\left(-\sum_{n=1}^N J_n \frac{1}{a_n} K_n\right). \tag{644}$$

Na pravou stranu lze nahlížet jako na vytvořující funkcional gaussovských fermionových integrálů z “cylindrických funkcionalů”¹¹¹, závisejících pouze na prvních N grassmannovských souřadnicích $\psi_n = \langle f_n^+ \Psi \rangle$, $\psi_n^+ = \langle \Psi^+ f_n \rangle$ rozvoje antikomutujících generátorů Ψ^+ , Ψ do baze f_n . Na druhé straně platí

$$\begin{aligned}
& \exp\left(-\sum_{n=1}^N J_n \frac{1}{a_n} K_n\right) \\
&= (-1)^N \prod_{n=1}^N \frac{1}{a_n} \int \prod_{n=1}^N d\psi_n^+ d\psi_n \exp\left(\sum_{n=1}^N \psi_n^+ a_n \psi_n + \sum_{n=1}^N J_n \psi_n + \sum_{n=1}^N \psi_n^+ K_n\right), \tag{645}
\end{aligned}$$

¹¹¹Zde si vypůjčujeme terminologii z předchozích podkapitol věnovaných bosonovým gaussovským mírám.

kde v posledním řádku jsme využili známý vztah pro konečněrozměrný Berezinův gaussovský integrál přes nezávislé antikomutující proměnné ψ_n^+ a ψ_n . Gaussovskou fermionovou funkcionální míru lze tedy chápat podobně jako v případě bosonové míry jakožto limitu “konečně-rozměrných projekcí”¹¹²

$$\mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ A \Psi \rangle) = \lim_{N \rightarrow \infty} (-1)^N \prod_{n=1}^N d\psi_n^+ d\psi_n \exp\left(\sum_{n=1}^N \psi_n^+ a_n \psi_n\right) \quad (646)$$

Dosadíme-li dále do integrandu formule (642) $\Psi \rightarrow L\Psi$, $\Psi^+ \rightarrow \Psi^+ R$, máme

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ R A L \Psi \rangle + \langle J L \Psi \rangle + \langle \Psi^+ R K \rangle) \\ &= \text{Det } R \text{ Det } L \text{ Det } A \exp(-\langle J A^{-1} K \rangle) \\ &= \text{Det } R \text{ Det } L \int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ A \Psi \rangle + \langle J \Psi \rangle + \langle \Psi^+ K \rangle) \end{aligned} \quad (647)$$

Tento výsledek lze formálně interpretovat jako následující vlastnost fermionové funkcionální “míry” při lineárních transformacích

$$\mathcal{D}(\Psi^+ R) \mathcal{D}(L \Psi) = (\text{Det } R \text{ Det } L)^{-1} \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi. \quad (648)$$

Poznamenejme, že na rozdíl od bosonového případu stojí na pravé straně této formule namísto jakobiánu inverzní jakobián. Podobně odvodíme transformační vlastnosti vzhledem translacím. Platí

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle (\Psi^+ + \Phi^+) A (\Psi + \Phi) \rangle + \langle J (\Psi + \Phi) \rangle + \langle (\Psi^+ + \Phi^+) K \rangle) \\ &= \int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ A \Psi \rangle + \langle (J + \Phi^+ A) \Psi \rangle + \langle \Psi^+ (K + A \Phi) \rangle) \\ & \quad \times \exp(\langle \Phi^+ A \Phi \rangle + \langle J \Phi \rangle + \langle \Phi^+ K \rangle) \\ &= \text{Det } A \exp(-\langle J A^{-1} K \rangle), \end{aligned} \quad (649)$$

tedy formálně

$$\mathcal{D}(\Psi^+ + \Phi^+) \mathcal{D}(\Psi + \Phi) = \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi. \quad (650)$$

Uveďme ještě jednu možnou reprezentaci gaussovského fermionového integrálu, plynoucí z předchozích formulí a korespondence mezi fermionovým integrálem a vakuovou střední hodnotou operátorů na Fockově prostoru, kterou lze také chápat jako jinou formu definice (630)

$$\text{Det } S \int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ S^{-1} \Psi \rangle) F[\Psi^+, \Psi] = \langle 0 | F[\hat{\Psi}^+ S^{1/2}, S^{1/2} \hat{\Psi}] | 0 \rangle = \langle 0 | F[\hat{\Psi}_S^+, \hat{\Psi}_S] | 0 \rangle. \quad (651)$$

Zde operátory $\hat{\Psi}_S^+ = \hat{\Psi}^+ S^{1/2}$ a $\hat{\Psi}_S = S^{1/2} \hat{\Psi}$ splňují antikomutační relace

$$\{\hat{\Psi}_S(\mathbf{x}), \hat{\Psi}_S^+(\mathbf{y})\} = S(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (652)$$

na jejichž pravé straně stojí maticový element operátoru S v \mathbf{x} -reprezentaci.

¹¹²Viz poznámku 111.

Jistou nevýhodou výše popsaného Schrödingerova obrazu je fakt, že nejednoznačnost ve výběru reprezentace kanonických komutačních relací bylo nutno fixovat ještě před řešením funkcionální rovnice pro vlastní stavy hamiltoniánu H . Tato nejednoznačnost se tak promítla do konkrétního tvaru H v termínech operátorů Ψ a $\delta/\delta\Psi$, zatímco funkcionální závislost fockovského vakua $F_{vac}[\Psi] = 1$ v důsledku toho nezávisela na reprezentaci kanonických anti-komutačních relací.

Existuje však ještě jedna forma Schrödingerovy reprezentace pro fermionová pole, která je bližší bosonovému případu [11]. V této reprezentaci se naopak nejednoznačnost přenáší do tvaru vakuového funkcionálu, zatímco reprezentace kanonických komutačních relací je zvolena pevně.

Funkcionálním prostorem tohoto alternativního Schrödingerova obrazu je nekonečně dimenzionální Grassmannova algebra s nezávislými antikomutujícími generátory $\Psi_\alpha(\mathbf{x})$ a $\Psi_\alpha^+(\mathbf{x})$, vlnové funkcionály mají tedy tvar (628). Na této algebře lze reprezentovat operátory $\psi_\alpha(\mathbf{x})$ a $\psi_\alpha^+(\mathbf{x})$ relacemi

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi + \frac{\delta}{\delta\Psi^+} \right) \\ \psi^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi^+ + \frac{\delta}{\delta\Psi} \right).\end{aligned}\quad (653)$$

Hamiltonián volné teorie má tudíž tvar

$$\begin{aligned}H &= \int d^d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}) h \psi(\mathbf{x}) = \langle \psi^+ h \psi \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(\langle \Psi^+ h \Psi \rangle + \left\langle \frac{\delta}{\delta\Psi} h \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi^+ h \frac{\delta}{\delta\Psi^+} \right\rangle + \left\langle \frac{\delta}{\delta\Psi} h \frac{\delta}{\delta\Psi^+} \right\rangle \right).\end{aligned}\quad (654)$$

Najdeme nyní řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice pro vlastní stavy H . V analogii s bosonovým případem hledejme funkcionál základního stavu ve tvaru

$$F_{vac}[\Psi^+, \Psi] = \mathcal{N}_\Omega \exp\left(-\langle \Psi^+ \Omega \Psi \rangle\right), \quad (655)$$

kde \mathcal{N}_Ω je normalizační faktor a Ω vhodný jednočásticový operátor. S využitím následujících vztahů

$$\left\langle \frac{\delta}{\delta\Psi} h \Psi \right\rangle \exp\left(-\langle \Psi^+ \Omega \Psi \rangle\right) = \left(\text{Tr}h + \langle \Psi^+ \Omega h \Psi \rangle\right) \exp\left(-\langle \Psi^+ \Omega \Psi \rangle\right) \quad (656)$$

$$\left\langle \Psi^+ h \frac{\delta}{\delta\Psi^+} \right\rangle \exp\left(-\langle \Psi^+ \Omega \Psi \rangle\right) = -\langle \Psi^+ h \Omega \Psi \rangle \exp\left(-\langle \Psi^+ \Omega \Psi \rangle\right) \quad (657)$$

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{\delta}{\delta\Psi} h \frac{\delta}{\delta\Psi^+} \right\rangle \exp\left(-\langle \Psi^+ \Omega \Psi \rangle\right) &= -\left\langle \frac{\delta}{\delta\Psi} h \Omega \Psi \right\rangle \exp\left(-\langle \Psi^+ \Omega \Psi \rangle\right) \\ &= \left(-\text{Tr}h\Omega - \langle \Psi^+ \Omega h \Omega \Psi \rangle\right) \exp\left(-\langle \Psi^+ \Omega \Psi \rangle\right)\end{aligned}\quad (658)$$

dostaneme

$$H F_{vac}[\Psi^+, \Psi] = \frac{1}{2} \left(\text{Tr}h(1 - \Omega) + \langle \Psi^+ (1 + \Omega) h (1 - \Omega) \Psi \rangle \right) F_{vac}[\Psi^+, \Psi]. \quad (659)$$

Nutnou a postačující podmínkou splnění rovnice $H F_{vac}[\Psi] = E F_{vac}[\Psi]$ je tedy

$$(1 + \Omega)h(1 - \Omega) = 0, \quad (660)$$

energie fockovského vakua je pak $E_{vac} = \frac{1}{2}\text{Tr}h(1 - \Omega)$ Předpokládáme-li navíc $[h, \Omega] = 0$, máme postačující podmínku $\Omega^2 = 1$ a vlastní hodnoty operátoru Ω jsou ± 1 , tzn.

$$\Omega = \Pi_{S-M} - \Pi_M, \quad (661)$$

kde Π_M a $\Pi_{S-M} = 1 - \Pi_M$ jsou jako prve projektory na podprostory odpovídající podmnožinám M a $S - M$ spektra S operátoru h . Potom $E_{vac} = \text{Tr}h\Pi_M$ a $F_{vac}[\Psi]$ odpovídá Diracovu moři podobně jako předchozím případě. Funkcionál (655) je anihilován anihilačními operátory

$$b(\mathbf{p}, \sigma) = \langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \Pi_{S-M} \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \Pi_{S-M} (\Psi + \frac{\delta}{\delta\Psi^+}) \rangle \quad (662)$$

$$d(\mathbf{p}, \sigma) = \langle \psi^+ \Pi_M u_{-\mathbf{p}-\sigma} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (\Psi^+ + \frac{\delta}{\delta\Psi}) \Pi_M u_{-\mathbf{p}-\sigma} \rangle, \quad (663)$$

kde $u_{\mathbf{p}\sigma}$ jsou vlastní funkce (593) jednočásticového hamiltoniánu h . Platí totiž např.

$$\begin{aligned} b(\mathbf{p}, \sigma) F_{vac}[\Psi^+, \Psi] &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \Pi_{S-M} (\Psi + \frac{\delta}{\delta\Psi^+}) \rangle \mathcal{N}_\Omega \exp(-\langle \Psi^+ \Omega \Psi \rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \Pi_{S-M} (1 - \Omega) \Psi \rangle \mathcal{N}_\Omega \exp(-\langle \Psi^+ \Omega \Psi \rangle) = 0, \end{aligned}$$

neboť $\Pi_{S-M}(1 - \Omega) = 2\Pi_{S-M}\Pi_M = 0$. Další vlastní stavy obdržíme aplikací monomů z kreačních operátorů

$$b^+(\mathbf{p}, \sigma) = \langle \psi^+ \Pi_{S-M} u_{\mathbf{p}\sigma} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (\Psi^+ + \frac{\delta}{\delta\Psi}) \Pi_{S-M} u_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \quad (664)$$

$$d^+(\mathbf{p}, \sigma) = \langle u_{-\mathbf{p}-\sigma}^+ \Pi_M \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle u_{-\mathbf{p}-\sigma}^+ \Pi_M (\Psi + \frac{\delta}{\delta\Psi^+}) \rangle \quad (665)$$

na fockovské vakuum (655). Stavy s n částicemi a m dírami (antičásticemi) má pak vlnový funkcionál

$$\begin{aligned} F_{\mathbf{p}_1, \sigma_1 \dots \mathbf{q}_m, \rho_m}[\Psi^+, \Psi] &= \langle \Psi^+, \Psi | b^+(\mathbf{p}_1, \sigma_1) \dots b^+(\mathbf{p}_n, \sigma_n) d^+(\mathbf{q}_1, \rho_1) \dots d^+(\mathbf{q}_m, \rho_m) | 0 \rangle \\ &= \sqrt{2} \langle \Psi^+ \Pi_{S-M} u_{\mathbf{p}_1, \sigma_1} \rangle \dots \sqrt{2} \langle u_{-\mathbf{q}_m, -\rho_m}^+ \Pi_M \Psi \rangle F_{vac}[\Psi^+, \Psi]. \end{aligned} \quad (666)$$

Kreační a anihilační operátory splňují relace (604) a operátory ψ a ψ^+ lze opět vyjádřit pomocí (606). Podobně hamiltonián H je v termínech kreačních a anihilačních operátorů dán vztahem (607), což umožňuje stejnou interpretaci F_{vac} jako tu jež byla diskutována výše.

Obdobně jako v předchozím případě lze definovat skalární součin, vzhledem k němuž jsou kreační a anihilační operátory navzájem hermitovsky sdružené. Ke každému funkcionálu tvaru (628) přiřadíme sdružený funkcionál

$$\begin{aligned} F^*[\Psi^+, \Psi] &= \sum_{n,m=0}^{\infty} (-1)^{n+m} \int d^d \mathbf{x}_1 \dots d^d \mathbf{y}_m F_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta_1 \dots \beta_m}^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{y}_m) \\ &\quad \times \frac{\delta}{\delta \Psi_{\beta_m}(\mathbf{y}_m)} \dots \frac{\delta}{\delta \Psi_{\alpha_1}^+(\mathbf{x}_1)} \Delta[0, \Psi^+] \Delta[0, \Psi]. \end{aligned} \quad (667)$$

Např. sdružený stav k základnímu stavu je

$$F_{vac}^*[\Psi^+, \Psi] = \mathcal{N}_\Omega^* \exp(-\langle \Psi^+ (\Omega^+)^{-1} \Psi \rangle). \quad (668)$$

Pomocí relací

$$(\Psi(\mathbf{x})F[\Psi^+, \Psi])^* = F^*[\Psi^+, \Psi] \frac{\overleftarrow{\delta}}{\delta\Psi(\mathbf{x})}$$

$$(\Psi^+(\mathbf{x})F[\Psi^+, \Psi])^* = F^*[\Psi^+, \Psi] \frac{\overleftarrow{\delta}}{\delta\Psi^+(\mathbf{x})}$$

také snadno najdeme sdružené funkcionály ke stavům¹¹³ (666):

$$\begin{aligned} F_{\mathbf{p}_1, \sigma_1 \dots \mathbf{q}_m, \rho_m}^*[\Psi^+, \Psi] &= F_{vac}^*[\Psi^+, \Psi] \sqrt{2} \left\langle \frac{\overleftarrow{\delta}}{\delta\Psi} \Pi_M u_{-\mathbf{q}_m, -\rho_m} \right\rangle \dots \sqrt{2} \left\langle u_{\mathbf{p}_1, \sigma_1}^+ \Pi_{S-M} \frac{\overleftarrow{\delta}}{\delta\Psi^+} \right\rangle \\ &= F_{vac}^*[\Psi^+, \Psi] \sqrt{2} \left\langle \Psi^+ \Pi_M u_{-\mathbf{q}_m, -\rho_m} \right\rangle \dots \sqrt{2} \left\langle u_{\mathbf{p}_1, \sigma_1}^+ \Pi_{S-M} \Psi \right\rangle \end{aligned} \quad (669)$$

Skalární součin stavů $|F\rangle$ a $|G\rangle$ s vlnovými funkcionály $F[\Psi^+, \Psi]$ a $G[\Psi^+, \Psi]$ je pak dán formulí

$$\langle F | G \rangle = \int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi F^*[\Psi^+, \Psi] G[\Psi^+, \Psi], \quad (670)$$

tedy integrálem s “gaussovskou fermionovou funkcionální mírou” $\mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi |\mathcal{N}_\Omega|^2 \exp(-2\langle \Psi^+ \Omega \Psi \rangle)$. Odtud dostáváme pro normalizační faktor formální vztah $\mathcal{N}_\Omega = \text{Det}^{-1/2}(-2\Omega)$.

Není obtížné se přesvědčit, že záměna proměnných

$$\Psi(\mathbf{x}) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} \left(u_{\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{x}) \left(\langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \Psi \rangle \chi_M(E(\mathbf{p})) + \langle \Psi^+ u_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \chi_{S-M}(E(\mathbf{p})) \right) \right) \quad (671)$$

$$\Psi^+(\mathbf{x}) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \int \tilde{d}\mathbf{p} \sum_{\sigma} \left(u_{\mathbf{p}\sigma}^+(\mathbf{x}) \left(\langle \Psi^+ u_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \chi_M(E(\mathbf{p})) + \langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \Psi \rangle \chi_{S-M}(E(\mathbf{p})) \right) \right), \quad (672)$$

spolu s identifikací vlnových funkcionálů, vyjádřených pomocí nových proměnných

$$F[\Psi^+, \Psi] \rightarrow \exp(-\langle \Psi^+ \Psi \rangle) F[\Psi^+, \Psi] \quad (673)$$

převádí novou Schrödingerovu reprezentaci na původní, zavedenou v počátku této podkapitoly.

2.7 Vytvořující funkcionál Greenových funkcí pro fermiony a fermionový dráhový integrál

V této podkapitole sestrojíme dvěma způsoby reprezentaci dráhovým integrálem pro vytvořující funkcionál euklidovských Greenových funkcí pro systém neinteragujících fermionů, se kterým jsme pracovali v předchozí podkapitole. Obě možnosti budou analogií bosonového případu. Jednak využijeme Lieovu formuli spolu s relacemi úplnosti, vyjádřenými fermionovým

¹¹³Při odvození této formule jsme použili vztah

$$\frac{\overrightarrow{\delta}}{\delta q} F(q) = (-1)^{n+1} F(q) \frac{\overleftarrow{\delta}}{\delta q},$$

kde šipky rozlišují mezi levou a pravou derivací a n je grassmannovská parita funkce $F(q)$

funkcionálním integrálem, jednak sestrojíme mřížovou formulaci fermionové teorie a zmíníme se krátce o těžkostech spojených s “dublováním” počtu stupňů volnosti výsledné teorie. Jak uvidíme, obě reprezentace budou odpovídat jisté gaussovské fermionové míře na prostoru “trajektorií ve fermionovém konfiguračním prostoru”.

Začněme nejprve se “spojitou” konstrukcí. Stejně jako v bosonovém případě vyjdeme z formule

$$Z[J, K] = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr}U[J, K](-T/2, T/2)}{\text{Tr}U[0, 0](-T/2, T/2)}, \quad (674)$$

kde $U[J, K](-T/2, T/2)$ je euklidovský evoluční operátor pro systém s časově závislým hamiltoniánem

$$H = \langle \psi^+ h \psi \rangle + \langle J(t) \psi \rangle + \langle \psi^+ K(t) \rangle, \quad (675)$$

a $J(t)$, $K(t)$ jsou vnější (antikomutující) zdroje.

V předchozí podkapitole jsme ukázali, že skalární součin ve na Fockově prostoru lze zapsat pomocí “dvojného” funkcionálního integrálu

$$\langle F|G \rangle = \int \mathcal{D}\Psi^+(\mathbf{x}) \mathcal{D}\Psi(\mathbf{x}) \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) F^+[\Psi^+] G[\Psi]. \quad (676)$$

Zde $F^+[\Psi^+]$ vznikl z vlnového funkcionálu $F[\Psi]$ komplexním sdružením koeficientních funkcí a záměnou monomů podle pravidla

$$\Psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1) \dots \Psi_{\alpha_n}(\mathbf{x}_n) \rightarrow \Psi_{\alpha_n}^+(\mathbf{x}_n) \dots \Psi_{\alpha_1}^+(\mathbf{x}_1).$$

Není těžké se přesvědčit, že zatímco vlnový funkcionál odpovídá skalárnímu součinu $F[\Psi] = \langle \Psi | F[\hat{\Psi}] | 0 \rangle$, kde $\langle \Psi |$ je zobecněný vlastní stav operátorů $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$, je funkcionál $F^+[\Psi^+]$ roven (až na normalizační konstantu)

$$F^+[\Psi^+] = \langle 0 | F[\hat{\Psi}]^+ | \Psi^+ \rangle, \quad (677)$$

kde $|\Psi^+ \rangle$ je zobecněný vlastní stav operátorů $\hat{\Psi}^+(\mathbf{x})$. Tedy, uvědomíme-li si, že

$$\langle \Psi^+ | \Psi \rangle = \mathcal{N} \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle)$$

lze (676) chápat jako důsledek relace úplnosti ve “smíšené reprezentaci”

$$1 = \int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) |\Psi^+ \rangle \langle \Psi|, \quad (678)$$

kde normalizační faktor \mathcal{N} je vtažen do míry $\mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi$. V důsledku této relace lze psát pro stopu libovolného operátoru $O[\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}]$ vztah

$$\text{Tr}O[\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}] = \int \mathcal{D}\Psi^+ \mathcal{D}\Psi \exp(\langle \Psi^+ \Psi \rangle) \langle \Psi | O[\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}] | - \Psi^+ \rangle. \quad (679)$$

Maticový element na pravé straně této formule lze snadno spočítat pro operátory v normální formě, tj. s kreačními operátory nalevo od anihilačních. Potom stačí nahradit operátory odpovídajícími grassmannovskými generátory. Například normální forma hamiltoniánu (675) je (pro $J = 0$, $K = 0$)

$$H(\hat{\Psi}, \hat{\Psi}^+) = \text{Tr}\Pi_M h - \text{Tr}\Pi_M h \hat{\Psi} \hat{\Psi}^+ + \text{Tr}\Pi_{S-M} h \hat{\Psi} \hat{\Psi}^+ \quad (680)$$

- zde stopa je přes diracovské indexy a “spojitý” index \mathbf{x} (nikoliv tedy přes fockovské stupně volnosti). Nadále budeme konstantu $\text{Tr}\Pi_M h$ vynechávat, neboť se její příspěvek formálně vykrátí v podílu (674).

Užitím analogu Lieovy formule a vložení $N - 1$ relací úplnosti dostaneme v analogii s bosonovým případem s přesností do řádu $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$, (kde $\varepsilon = T/N$)

$$\text{Tr}U[J, K](-T/2, T/2) = \int \prod_{-N/2 < n \leq N/2} \mathcal{D}\Psi_n^+ \mathcal{D}\Psi_n \exp(-S_E^N), \quad (681)$$

zde diskrétní aproximace euklidovské akce má tvar

$$-S_E^N = \sum_{-N/2 < n \leq N/2} \langle (\Psi_n^+ - \Psi_{n-1}^+) \Psi_n \rangle - \varepsilon \langle \Psi_{n-1}^+ \tilde{h} \Psi_n \rangle - \varepsilon \langle J_n \psi_n \rangle - \varepsilon \langle \psi_n^+ K_n \rangle. \quad (682)$$

V této formuli jsme položili $\Psi_{n+N}^+ = -\Psi_n^+$, $\Psi_{n+N} = -\Psi_n$, $\tilde{h} = \Pi_M h - \Pi_{S-M} h$ a

$$\psi = \Pi_M \Psi + \int \tilde{d}\mathbf{p} \langle \Psi^+ u_{\mathbf{p}\sigma} \rangle u_{\mathbf{p}\sigma} \chi_{S-M}(E(\mathbf{p})) \quad (683)$$

$$\psi^+ = \Psi^+ \Pi_M + \int \tilde{d}\mathbf{p} \langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \Psi \rangle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \chi_{S-M}(E(\mathbf{p})), \quad (684)$$

poslední vztahy odpovídají “smíšené” reprezentaci polních operátorů $\psi(\mathbf{x})$ a $\psi^+(\mathbf{x})$. Integrální reprezentace (681) představuje N -násobný gaussovský fermionový funkcionální integrál, který může být spočten pomocí formule (642). K tomu potřebujeme invertovat matici kvadratické formy. Úplně stejným postupem jako v případě skalárního pole dostaneme pomocí diskrétní Fourierovy transformace¹¹⁴

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{-N/2 < k \leq N/2} \Psi(k) e^{\frac{\pi i}{N}(2k-1)n} \quad (685)$$

$$\Psi_n^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{-N/2 < k \leq N/2} \Psi^+(k) e^{-\frac{\pi i}{N}(2k-1)n} \quad (686)$$

akci v diagonálním tvaru

$$\begin{aligned} -S_E^N &= \sum_{-N/2 < n \leq N/2} \langle (\Psi_n^+ - \Psi_{n-1}^+) \Psi_n \rangle - \varepsilon \langle \Psi_{n-1}^+ \tilde{h} \Psi_n \rangle - \varepsilon \langle J_n \psi_n \rangle - \varepsilon \langle \psi_n^+ K_n \rangle \\ &= \sum_{-N/2 < n \leq N/2} \langle \Psi_n^+ M_{nm} \Psi_m \rangle - \varepsilon \langle J_n \psi_n \rangle - \varepsilon \langle \psi_n^+ K_n \rangle \\ &= \sum_{-N/2 < k \leq N/2} \langle \Psi^+(k) (1 - e^{\frac{\pi i}{N}(2k-1)}) (1 + \varepsilon \tilde{h}) \Psi(k) \rangle - \varepsilon \langle J(k) \psi(k) \rangle - \varepsilon \langle \psi^+(k) K(k) \rangle, \end{aligned} \quad (687)$$

kde

$$K_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{-N/2 < k \leq N/2} K(k) e^{\frac{\pi i}{N}(2k-1)n} \quad (688)$$

$$J_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{-N/2 < k \leq N/2} J(k) e^{-\frac{\pi i}{N}(2k-1)n}. \quad (689)$$

¹¹⁴Na rozdíl od bosonového případu odpovídají diskrétní frekvence antiperiodickým okrajovým podmínkám.

Odtud snadno dostaneme inverzní matici M_{mn}^{-1} potřebnou pro výpočet gaussovského integrálu v limitě $N \rightarrow \infty$.

$$\begin{aligned}\tilde{\Sigma}_T(t, t') &= \lim_{N \rightarrow \infty} M_{nm}^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{-N/2 < k \leq N/2} \frac{e^{\frac{\pi i}{N}(n-m)(2k-1)}}{1 - e^{\frac{\pi i(2k-1)}{N}}(1 + \varepsilon \tilde{h})} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{T} \sum_{E = \frac{\pi}{T}(2k-1)} \frac{e^{iE(t-t')}}{1 - e^{iE\varepsilon}(1 + \varepsilon \tilde{h})} = -\frac{1}{T} \sum_{E = \frac{\pi}{T}(2k-1)} \frac{e^{iE(t-t')}}{iE + \tilde{h}},\end{aligned}\quad (690)$$

zde jsme položili $t-t' = (n-m)\varepsilon$ a $E_k = \pi(2k-1)/T$. Uvědomíme-li si normalizaci $Z[0, 0] = 1$, máme konečně

$$Z[J, K] = \lim_{T \rightarrow \infty} \exp\left(-\int dt dt' \langle j(t) \tilde{\Sigma}_T(t, t') k(t') \rangle\right), \quad (691)$$

kde

$$j = J\Pi_M + \int \tilde{d}\mathbf{p} \langle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ K \rangle u_{\mathbf{p}\sigma}^+ \chi_{S-M}(E(\mathbf{p})) \quad (692)$$

$$k = \Pi_M K + \int \tilde{d}\mathbf{p} \langle J u_{\mathbf{p}\sigma} \rangle u_{\mathbf{p}\sigma} \chi_{S-M}(E(\mathbf{p})) \quad (693)$$

resp. po dosazení

$$Z[J, K] = \lim_{T \rightarrow \infty} \exp\left(-\int dt dt' \langle J(t) \Sigma_T(t, t') K(t') \rangle\right). \quad (694)$$

Všimněme si, že výsledek je nezávislý na reprezentaci kanonických komutačních relací (t.j. na výběru projektorů Π_M a Π_{S-M}). Zde

$$\Sigma_T(t, t') = -\frac{1}{T} \sum_{E = \frac{\pi}{T}(2k-1)} \frac{e^{iE(t-t')}}{iE + h} \quad (695)$$

je dvoubodová tepelná Greenova funkce při inverzní teplotě $\beta = T$

$$\langle \psi(t, \mathbf{x}) \psi^+(t', \mathbf{x}') \rangle = -\langle \mathbf{x} | \Sigma_T(t, t') | \mathbf{x}' \rangle. \quad (696)$$

Všimněme si dále, že $\Sigma_T(t, t')$ splňuje podmínku antiperiodicity

$$\Sigma_T(t+T, t') = \Sigma_T(t, t'+T) = -\Sigma_T(t, t'). \quad (697)$$

To odpovídá faktu, že $\Sigma_T(t, t')$ je inverze k operátoru $\partial_t + h$ na prostoru antiperiodických funkcí. V limitě $T \rightarrow \infty$ přejde $\Sigma_T(t, t')$ v dvoubodovou euklidovskou Greenovu funkci (euklidovský propagátor)

$$\Sigma_E(t, t') = -\int \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{iE(t-t')}}{iE + h}, \quad (698)$$

formálně

$$\Sigma_E = -\frac{1}{\partial_t + h} \quad (699)$$

na prostoru temperovaných distribucí. Tedy formule, kterou lze získat formálním limitním přechodem $N \rightarrow \infty$ z výrazu (681)

$$Z[J, K] = \frac{\int_{\Psi^+(T/2) = -\Psi^+(-T/2)}^{\Psi(T/2) = -\Psi(-T/2)} \mathcal{D}\Psi^+(x) \mathcal{D}\Psi(x) \exp\left(-S_E - \int_{-T/2}^{T/2} dt(\langle J(t)\Psi(t) \rangle + \langle \Psi^+(t)K(t) \rangle)\right)}{\int_{\Psi^+(T/2) = -\Psi^+(-T/2)}^{\Psi(T/2) = -\Psi(-T/2)} \mathcal{D}\Psi^+(x) \mathcal{D}\Psi(x) \exp(-S_E)} \quad (700)$$

kde

$$S_E = \int_{-T/2}^{T/2} dt \langle \Psi^+(t)(\partial_t + h)\Psi(t) \rangle, \quad (701)$$

je euklidovská akce, lze interpretovat jakožto gaussovský fermionový funkcionální integrál odpovídající integrování přes prostor antiperiodických "trajektorií" v konfiguračním prostoru - tedy gaussovský integrál na nekonečnědimenzionální Grassmannově algebře s generátory $\Psi^+(x)$, $\Psi(x)$, kde $x = (t, \mathbf{x})$.

Ilustrujme předchozí obecnou konstrukci na příkladu Diracových fermionů ve čtyřdimenzionálním prostoročase. Jednočásticový hamiltonián má tvar

$$h = -i\alpha \cdot \nabla + \beta m, \quad (702)$$

kde α_i a β jsou Diracovy matice s vlastnostmi

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij} \quad (703)$$

$$\{\beta, \alpha_i\} = 0, \quad \beta^2 = 1 \quad (704)$$

$$\alpha_i^+ = \alpha_i, \quad \beta^+ = \beta. \quad (705)$$

Pro dvoubodovou euklidovskou Greenovu funkci máme

$$\begin{aligned} \Sigma_E &= -\frac{1}{\partial_t - i\alpha \cdot \nabla + \beta m} = -\frac{1}{\beta \partial_t - i\beta \alpha \cdot \nabla + m} \beta \\ &= -\frac{i}{i\gamma \cdot \partial - m} \gamma_4, \end{aligned} \quad (706)$$

kde

$$\gamma_i = \beta \alpha_i, \quad \gamma_4 = i\beta,$$

jsou euklidovské antihermitovské Diracovy γ -matice splňující následující antikomutační relace

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = -2\delta_{\mu\nu}, \quad (707)$$

$$\gamma_\mu^+ = -\gamma_\mu, \quad (708)$$

a $\partial = (\nabla, \partial_t)$. Pro dvoubodovou korelační funkci v x -reprezenaci tak máme

$$\langle \psi(x) \bar{\psi}(y) \rangle = -\frac{i}{i\gamma \cdot \partial - m} \delta^{(4)}(x - y) = -\int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{i}{p \cdot \gamma - m} e^{-ip \cdot (x-y)}, \quad (709)$$

kde $\bar{\psi} = \psi^+ \gamma_4$ je diracovsky sdružený spinor. Euklidovská akce má pak tvar

$$S_E = i \int d^4 x \bar{\Psi}(x) (i\gamma \cdot \partial - m) \Psi(x). \quad (710)$$

Přechod k Minkowského prostoročasu odpovídá analytickému prodloužení $x_4 \rightarrow ix_0$, a položením $\gamma_4 = i\gamma_0$.

Druhou možností jak konstruovat spojitou teorii fermionů je podobně jako v bosonovém případě formulace teorie na mříži. Přitom se však naráží na technické obtíže spojené s “naivní” mřížovou formulací této teorie. Ilustrujme to na příkladu Diracových fermionů s akcí (710). Mřížová teorie se nyní konstruuje jako diskrétní fermionový systém na hyperkubické mříži s mřížkovou konstantou a , přičemž v každém mřížovém bodě “sedí” čtyřkomponentní fermionové proměnné $\Psi_x, \bar{\Psi}_x$. Zapišme nyní příslušnou fermionovou akci. Existuje několik možností jak nahradit derivaci funkce $f(x)$ konečnými diferencemi hodnot v mřížových bodech. Zvolme např. předpis

$$\partial_\mu f(x) \rightarrow \frac{1}{2a}(f(x + ae_\mu) - f(x - ae_\mu)), \quad (711)$$

kde e_μ jednotkový vektor ve směru μ -té osy. Pro mřížově regularizovanou euklidovskou akci (710) tak dostaneme

$$S_E = ia^4 \sum_{x,\mu} \left(\frac{i}{2a} \bar{\Psi}_x \gamma_\mu (\Psi_{x+ae_\mu} - \Psi_{x-ae_\mu}) - m \bar{\Psi}_x \Psi_x \right). \quad (712)$$

Pomocí Fourierovy transformace podobně jako v bosonové případě dostaneme akci ve tvaru s diagonální maticí kvadratické formy

$$a^4 \Sigma_E^{-1}(k) = i(a^3 \sum_\mu \gamma_\mu \sin k_\mu a - a^4 m), \quad (713)$$

jejíž inverze definuje mřížový propagátor Σ_E ,

$$\Sigma_E(x, y) = - \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{i}{a^{-1} \sum_\mu \gamma_\mu \sin k_\mu a - m} e^{-ik \cdot (x-y)} \quad (714)$$

Zde komponenty impulsu k probíhají první Brillouinovu zónu (nekonečné) hyperkubické mříže, $\pi/a \leq k_\mu \leq \pi/a$. V limitě $a \rightarrow 0$ máme naivně $\Sigma_E^{-1}(k) \rightarrow k \cdot \gamma - m$, a tedy rekonstruuje zdánlivě ve spojitě limitě propagátor (709).

Situace je však složitější. Rozdělíme-li integrační oblast ve vztahu (714) na části $|k_\mu| \leq \pi/(2a)$ a $\pi/(2a) \leq |k_\mu| \leq \pi/a$ a provedeme-li ve druhé z nich substituci¹¹⁵ $k_\mu \rightarrow k_\mu \mp \pi/a$, rozpadne se Brillouinova zóna na 2^4 oblastí $(-\pi/(2a), \pi/(2a))^4$, v každé z nichž se v limitě $a \rightarrow 0$ chová inverzní mřížový propagátor jako $\Sigma_E^{-1}(k) \rightarrow k \cdot \gamma^{(\alpha)} - m$; zde $\gamma^{(\alpha)} = (-1)^\alpha \gamma$ a α udává počet složek impulsu k , které před substitucí probíhaly oblast hodnot $\pi/(2a) \leq |k_\mu| \leq \pi/a$. Máme tedy 16 oblastí v impulsovém prostoru, ve kterých ve spojitě limitě vzniká volný fermionový propagátor (709)! Ve spojitě limitě tak dospíváme k nežádoucímu dublování fermionových stupňů volnosti. Poznamenejme, že nové γ -matice $\gamma^{(\alpha)}$ představují ekvivalentní reprezentaci antikomutačních relací (707), tedy existuje unitární matice, převádějící je na matice původní - redefinicí fermionových polí tedy dosáhneme kanonického tvaru propagátoru (709)¹¹⁶.

Problém dublování souvisí se způsobem mřížové regularizace akce (710). Místo (711) bychom stejně dobře mohli vzít např. předpis

$$\partial_\mu f(x) \rightarrow \frac{1}{2a}(f(x + ae_\mu) - f(x - ae_\mu)) + \kappa \frac{1}{2a}(f(x + ae_\mu) + f(x - ae_\mu) - 2f(x)), \quad (715)$$

¹¹⁵Zde první znaménko platí pro $k_\mu > \pi/(2a)$, druhé pro $k_\mu < -\pi/(2a)$.

¹¹⁶Při této transformaci se mění znaménko matice $\gamma_5 = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4$. Teorie pak obsahuje stejný počet stavů každé chiraloty, i kdybychom původně vycházeli z akce pro pole s danou chiralitou.

kde κ je libovolný parametr. Dodatečný člen je řádu $\mathcal{O}(a)$ při $a \rightarrow 0$, vymizí tedy ve spojitě limitě¹¹⁷. Proto Wilson navrhl modifikovat naivní akci (712) přidáním členu řádu $\mathcal{O}(a)$

$$\Delta_W S_E = \frac{i\kappa a^3}{2} \bar{\Psi}_x (\Psi_{x+ae_\mu} + \Psi_{x-ae_\mu} - 2\Psi_x) \quad (717)$$

Dodatečný člen (717) dává pro inverzní propagátor v impulsové reprezentaci

$$a^4 \Sigma_E^{-1}(k) = i(a^3 \sum_{\mu} (\gamma_{\mu} \sin k_{\mu} a + \kappa (\cos k_{\mu} a - 1)) - a^4 m). \quad (718)$$

a tím řeší problém dublování. Skutečně, v limitě $a \rightarrow 0$ se nemění chování inverzního propagátoru pro $|k_{\mu}| \leq \pi/(2a)$, zatímco pro $k \approx \pi/a$ se modifikuje na tvar¹¹⁸

$$\Sigma_E^{-1}(k) \rightarrow (-1)^{\alpha} k \cdot \gamma^{(\alpha)} - m - 2\alpha\kappa a^{-1} \quad (719)$$

Přebytečné fermionové stupně volnosti tak získávají hmotu řádu $\mathcal{O}(a^{-1})$, v důsledku toho se dekaplují ve spojitě limitě.

Existují ještě další metody eliminace problému dublování - např. přechodem k nelokální mřížové akci, resp. rozmístěním jednotlivých spinorových komponent do různých mřížových bodů, tyto přístupy zde nebudeme dále diskutovat. Poznamenejme však, že dublování a s ním příbuzné potíže s mřížovou fermionovou akcí jsou jedním z projevů tzv. axiální anomálie, o které bude řeč v následujících podkapitolách. Na tomto místě pouze uvedme, že naivní mřížová akce (712) je, jak se lze snadno přesvědčit, v tzv. chirální limitě $m \rightarrow 0$ invariantní vzhledem k axiální transformaci

$$\Psi_n \rightarrow \exp(i\gamma_5 \theta) \Psi_n, \quad \bar{\Psi}_n \rightarrow \bar{\Psi}_n \exp(i\gamma_5 \theta), \quad (720)$$

kde $\gamma_5 = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4$ a θ je konstantní parametr. Tato transformace je také symetrií spojitě akce (710), není to však symetrie Wilsonovy akce. Pokud se tedy chceme zbavit dodatečných fermionových stupňů volnosti (resp., jak uvidíme v dalším, zachovat některé další “rozumné” vlastnosti teorie, formálně vyplývající z akce (710)), lze očekávat narušení axiální symetrie na kvantové úrovni.

2.8 Funkcionální integrál v poruchové kvantové teorii pole

V předchozích podkapitolách jsme naznačili způsob, jak konstruovat reprezentaci vytvořujícího funkcionálu Greenových funkcí volných polí pomocí dráhového (funkcionálního) integrálu. V případě interagujících polí je situace komplikovanější. Ve “spojité” formulaci, založené na pevně zvoleném Fockově prostoru asymptotických stavů, jsme odvodili reprezentaci funkcionálním integrálem typu (563). Tyto formule byly formální v tom smyslu, že jsme mlčky předpokládali splnění podmínek pro jejich platnost (t.j. vlastnosti interakčního hamiltoniánu H_I , umožňující použít např. Lieovu formuli). Reálné interakce však obvykle tyto podmínky

¹¹⁷Volíme-li např. $\kappa = 1$, dostaneme

$$\partial_{\mu} f(x) \rightarrow \frac{1}{a} (f(x + ae_{\mu}) - f(x)), \quad (716)$$

což je jiná možná “naivní” regularizace.

¹¹⁸Zde opět provádíme substituci $k_{\mu} \rightarrow k_{\mu} \mp \pi/a$.

nesplňují a lokální interakční hamiltoniány nejsou zpravidla dobře definované na uvažovaném Fockově prostoru. Východiskem z této situace je pokusit se přesto dát formulím (563) rigorózní význam, t.j. zformulovat pravidla, jak manipulovat s příslušným funkcionálním integrálem konsistentním způsobem, a považovat tato pravidla za součást definice teorie. Přitom by bylo vhodné zachovat co největší univerzálnost a použitelnost v teoriích různého typu (t.j. s různým lagrangiánem a různým částicovým obsahem).

Jedním ze způsobů jak tento program uskutečnit je (renormalizovaná) poruchová teorie. Ta ve své tradiční podobě odpovídá analýze interagující teorie pole v režimu slabé vazby. Všechny fyzikální veličiny jsou v rámci poruchové teorie vyjádřeny ve tvaru formální mocninné řady v malém parametru, který se interpretuje jako vazbová konstanta (příp. Planckova konstanta). Nultý člen tohoto formálního rozvoje pak odpovídá volné teorii (příp. klasické teorii), další členy popisují korekce vyšších řádů. Vlastnosti, které požadujeme od teorie pole, pak musí být splněny v takto formulované teorii řád po řádu v parametru rozvoje. Je zřejmé, že tak nemůžeme dostat “neporuchové” efekty, pro něž nelze závislost na vazbové konstantě rozvinout do (byť jen asymptotické) řady, nebo které odpovídají režimu silné vazby.

V této kapitole naznačíme definici poruchového funkcionálního integrálu. Východiskem pro nás bude výraz pro vytvořující funkcionál euklidovských Greenových funkcí v d dimenziálním prostoročase

$$Z[J] = \frac{\int \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_E^0[\phi] - gS_E^I[\phi, g] - \int d^d x J\phi\right)}{\int \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_E^0[\phi] - gS_E^I[\phi, g]\right)}. \quad (721)$$

Zde ϕ představuje souhrn polních proměnných (bosonových i fermionových), g je vazbová konstanta, $S_E^0[\phi]$ je volná (t.j. kvadratická v polích) a $gS_E^I[\phi, g]$ je interakční euklidovská akce, která je dána formální mocninnou řadou v g a J je souhrn zdrojových členů pro pole ϕ ; dále píšme kompletní euklidovskou akci jako sumu jednotlivých lokálních členů

$$S_E[\phi, g] = S_E^0[\phi] + gS_E^I[\phi, g] = \sum_i S_E^i[\phi, g]. \quad (722)$$

V limitě $g \rightarrow 0$ chceme obdržet volnou teorii, a pro ni již máme reprezentaci funkcionálním integrálem s gaussovskou funkcionální mírou (bosonovou nebo fermionovou), danou formálním vztahem

$$d\mu[\phi] = \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_E^0[\phi]\right) \quad (723)$$

Je zcela v naší moci volit způsob, jak rozštěpit klasickou akci na volnou a interakční část, pokud volíme interakční část tak, aby vymizela v limitě $g \rightarrow 0$. Stejnou volnost máme ve výběru polních proměnných, přes které budeme integrovat, a vazbové konstanty, v níž budeme rozvíjet. Tato volnost umožňuje např. přeskálovat pole, jednotlivé členy lagrangiánu a vazbovou konstantu renormalizačními koeficienty ve tvaru formální mocninné řady v g , $Z_\phi = 1 + \mathcal{O}(g)$, $Z_i = 1 + \mathcal{O}(g)$ a $Z_g = 1 + \mathcal{O}(g)$, a jako novou interakční akci brát rozdíl

$$gS_E^I[\phi, g]^{new} = \sum_i Z_i S_E^i[Z_\phi \phi, Z_g g] - \sum_i S_E^i[\phi, 0] \quad (724)$$

Jak jsme ukázali v předchozích podkapitolách, míra (723) je spojena s konkrétním Fockovým prostorem stavů v (euklidovském) čase $t = 0$, což umožňuje částicovou interpretaci¹¹⁹,

¹¹⁹Neplést s euklidovským Fockovým prostorem trajektorií v konfiguračním prostoru, který souvisí s kovariančním operátorem gaussovské míry $d\mu[\phi]$ a který umožňuje algebraickou definici funkcionálního integrálu.

v tomto Fockově prostoru splňují polní operátory kanonické (anti)komutační relace. Proto je přirozené fixovat výše popsané renormalizační koeficienty např. tak, aby tento Fockův prostor odpovídal spektru částic interagující teorie - tzn. aby se anulovaly korekce vyšších řádů k hmotám částic, kreovaných ze základního stavu operátory ϕ , a aby tyto operátory měly správné normování kanonických (anti)komutačních relací. Podobně je např. vhodné (pokud je to možné) zvolit takovou definici vazbové konstanty, aby odpovídala klasicky měřitelnému “náboji” popisujícímu sílu interakce ve vhodné kinematické limitě.

Poruchový rozvoj funkcionálního integrálu interagující teorie se pak definuje formálním mocninným rozvojem integrandu v parametru g :

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_n) \exp\left(-S_E^0 - gS_E^I\right) \\ &= \int d\mu[\phi]\phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_n) \exp\left(-gS_E^I\right) \\ &:= \sum_j \frac{(-1)^j}{j!} g^j \int d\mu[\phi]\phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_n) \left(S_E^I\right)^j. \end{aligned} \quad (725)$$

Zde jsme z ilustračních důvodů předpokládali nezávislost interakční akce S_E^I na vazbové konstantě g . Interakce je obvykle popsána lokálním interakčním lagrangianem

$$S_E^I = \int d^d x \mathcal{L}_I(\phi(x), \partial\phi(x), \dots), \quad (726)$$

takže je třeba definovat následující integrály záměnou funkcionální a prostoročasové integrace

$$\begin{aligned} & \int d\mu[\phi]\phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_n) \int d^d x_{n+1} \mathcal{L}_I[\phi(x_{n+1})] \dots \int d^d x_{n+V} \mathcal{L}_I[\phi(x_{n+V})] \\ &:= \int d^d x_{n+1} \dots \int d^d x_{n+V} \int d\mu[\phi]\phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_n) \mathcal{L}_I[\phi(x_{n+1})] \dots \mathcal{L}_I[\phi(x_{n+V})]. \end{aligned} \quad (727)$$

Zbývající integrály s gaussovskou mírou již umíme spočítat

$$\int d\mu[\phi]\phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_{2n}) = \sum_{(l_+l_-)} \prod_l G_E(x_{l_+}, x_{l_-}), \quad (728)$$

kde suma probíhá přes všechna možná spárování (l_+l_-) indexů $1, 2, \dots, 2n$ a $G_E(x, y) = \langle x|G_E|y \rangle$ jsou euklidovské propagátory. Funkcionální integrál (727) se tak rozpadne na sumu příspěvků $A_G(x_1, x_2, \dots, x_n)$ odpovídajících Feynmanovým grafům

$$\begin{aligned} & \int d\mu[\phi]\phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_n) \int d^d x_{n+1} \mathcal{L}_I[\phi(x_{n+1})] \dots \int d^d x_{n+V} \mathcal{L}_I[\phi(x_{n+V})] \\ &= \sum_G A_G(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{aligned} \quad (729)$$

s interakčními vertexy $\mathcal{L}_I(\phi(x_i), \partial\phi(x_i), \dots)$ “pospojovanými” vnitřními liniemi grafu všemi možnými způsoby (to odpovídá všem možným způsobům spárování) jednak mezi sebou, jednak s vnějšími liniemi grafu $\phi(x_1)\dots\phi(x_n)$. Přitom každé vnitřní linii začínající ve vertexu (nebo vnější linii) s prostoročasovými souřadnicemi x_i a končící ve vertexu (nebo vnější linii) s prostoročasovými souřadnicemi x_j odpovídá propagátor $G_E(x_i, x_j)$ a integruje se přes všechny souřadnice interakčních vertexů.

Problémy nastávají pro $x_i \rightarrow x_j$, neboť zobecněné funkce $G_E(x_i, x_j)$ mají obvykle v této limitě neintegrovatelnou singularitu, takže formální výrazy (727) divergují (tzv. ultrafialové neboli UV divergence). V teoriích s částicemi s nulovou hmotou se objevují také tzv. infračervené, IR divergence odpovídající limitě $x_i - x_j \rightarrow \infty$. Aby tedy byly koeficienty poruchového rozvoje konečné, je třeba vhodně regularizovat - t.j. modifikovat celou proceduru tak, aby eliminovala UV divergence. To lze mnoha způsoby, které se tak stávají součástí definice teorie. Všechny tyto způsoby vnášejí do teorie další dodatečný parametr rozměru hmoty, tzv. parametr obřezání, označme ho obecně Λ . UV divergence se pak projeví v limitě sejmutého obřezání $\Lambda \rightarrow \infty$.

Výše uvedená volnost v definici interakční akce (t.j. v parametrizaci teorie pomocí vazbových konstant) umožňuje u jisté třídy tzv. renormalizovatelných teorií eliminovat závislost na parametru obřezání v limitě $\Lambda \rightarrow \infty$ zafixováním hodnot konečného počtu vhodných fyzikálních veličin, které absorbují potenciálně divergentní členy. Tato tzv. renormalizační procedura odpovídá výběru parametrizace pomocí těchto zafixovaných veličin, které se podrží nezávislé na obřezání a konečné.

Renormalizační proceduru lze zformulovat konsistentně a matematicky rigorózně (viz. např. [12]), zde ji nebudeme detailně rozebírat, spíše se v následujících podkapitolách omezíme na její aplikace v konkrétní případech.

Poruchový funkcionální integrál lze tedy chápat jako symbolický a intuitivní zápis poruchové řady, která se z něho “odvodí” výše naznačenými formálními manipulacemi¹²⁰ (725, 727), doplněnými o gaussovskou integraci (728). Tyto formální manipulace je však třeba následně modifikovat procedurami regularizace a renormalizace, takže renormalizované formule nemusejí obecně respektovat vlastnosti, naivně vyplývající ze samotných formálních pravidel (725, 727) a (728). V následující kapitole naznačíme, na jaké problémy lze přitom narazit.

¹²⁰Ve skutečnosti však tyto formální manipulace *definují* poruchový funkcionální integrál.

2.9 Cvičení

1. Uvažujme teorii volného reálného skalárního pole ϕ s hamiltoniánem

$$H = \int d^d \mathbf{x} \left(\pi(\mathbf{x})^2 + \phi(\mathbf{x}) \Omega^2 \phi(\mathbf{x}) \right).$$

Ve funkcionální Π -reprezentaci jsou stavy $|\Psi\rangle$ kvantového pole reprezentovány vlnovými funkcionály $\Psi[\Pi] = \langle \Pi | \Psi \rangle$, kde $|\Pi\rangle$ jsou zobecněné vlastní stavy operátorů $\pi(\mathbf{x})$; $\pi(\mathbf{x})|\Pi\rangle = \Pi(\mathbf{x})|\Pi\rangle$. Kanonické komutační relace $[\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y})] = i\delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ jsou na prostoru vlnových funkcionálů reprezentovány pomocí operátorů

$$\begin{aligned} \pi(\mathbf{x})\Psi[\Pi] &= \Pi(\mathbf{x})\Psi[\Pi] \\ \phi(\mathbf{x})\Psi[\Pi] &= i \frac{\delta}{\delta \Pi(\mathbf{x})} \Psi[\Pi]. \end{aligned}$$

Najděte

- (a) řešení $\Psi_\Omega[\Pi] = \langle \Pi | \Psi_\Omega \rangle$ funkcionální Schrödingerovy rovnice pro základní stav v Π -reprezentaci
- (b) vlnový funkcionál $\Psi_{\mathbf{p}}[\Pi] = \langle \Pi | \mathbf{p} \rangle$ jednočásticového stavu
- (c) vytvářející funkcionál

$$Z_\Omega[K] = \langle \Psi_\Omega | \exp \left(i \int d^d \mathbf{x} K(\mathbf{x}) \pi(\mathbf{x}) \right) | \Psi_\Omega \rangle$$

- (d) funkcionální míru $d\mu[\Pi]$, realizující izomorfismus Fockova prostoru \mathcal{F}_Ω a prostoru $L_2(X, d\mu[\Pi])$ kvadraticky integrovatelných vlnových funkcionálů, splňující vztah $|\Psi_\Omega\rangle \leftrightarrow 1$
- (e) reprezentaci kanonických komutačních relací v této modifikované Π -reprezentaci na $L_2(X, d\mu[\Pi])$.

2. Dokažte, že ket vektory

$$|\Pi\rangle = \exp \left(\frac{1}{2} \int \tilde{d}\mathbf{p} a^+(\mathbf{p}) a^+(-\mathbf{p}) + 2i \int d^d \mathbf{x} \Pi(\mathbf{x}) \int \tilde{d}\mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} a^+(\mathbf{p}) \right) |\Psi_\Omega\rangle,$$

kde $a^+(\mathbf{p})$ jsou kreační operátory Fockově prostoru \mathcal{F}_Ω s vakuem $|\Psi_\Omega\rangle$, jsou zobecněnými vlastními stavy operátorů $\pi(\mathbf{x})$ na \mathcal{F}_Ω .

3. Ukažte, že ve ϕ -reprezentaci $\mathcal{F}_\Omega \approx L_2(X, d\mu_\Omega[\Phi])$ je vlnový funkcionál

$$\Psi_J[\Phi] = \mathcal{N}_J \exp\langle J\Phi \rangle$$

pro vhodnou normalizační konstantu \mathcal{N}_J normalizovaným společným vlastním stavem anihilačních operátorů $a(\mathbf{p})$ - jedná se o tzv. koherentní stav. Spočítejte

- (a) příslušné vlastní hodnoty;
- (b) skalární součin stavů $\Psi_J[\Phi]$ a $\Psi_K[\Phi]$,

$$\langle \Psi_J | \Psi_K \rangle = \int d\mu_\Omega[\Phi] \Psi_J[\Phi]^* \Psi_K[\Phi]$$

a určete odtud normalizační konstantu \mathcal{N}_J ;

- (c) euklidovský časový vývoj stavů $\Psi_J[\Phi](\tau) = e^{-\tau H} \Psi_J[\Phi]$, kde H je hamiltonián volného pole, pomocí formule

$$\Psi_J[\Phi](\tau) = \int d\mu_\Omega[\Phi'] \mathcal{K}[\Phi, \Phi', -i\tau] \Psi_J[\Phi'];$$

- (d) koeficienty $\Psi_J(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n)$ rozvoje stavu $\Psi_J[\Phi]$ do vlastních stavů operátoru H ,

$$\Psi_J[\Phi] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \tilde{d}\mathbf{p}_1 \dots \tilde{d}\mathbf{p}_n \Psi_J(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n) \Psi_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n}[\Phi],$$

(zde $\Psi_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n}[\Phi] = \langle \Phi | \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n \rangle$);

Ukažte dále, že pro (nenormalizované) stavy $\psi_J[\Phi] = \exp(\frac{1}{2} \langle J \frac{1}{2\Omega} J \rangle) \Psi_J[\Phi] =: \exp(\langle J \Phi \rangle)$: platí následující rozklad jednotky

$$1 = \int d\mu_C[J] |\psi_J\rangle \langle \psi_J|,$$

kde $d\mu_C[J]$ je gaussovská míra s nulovou střední hodnotou a kovariancí $C = 2\Omega$.

3 Wardovy identity a anomálie

3.1 Dysonovy - Schwingerovy rovnice

Vyjádření vytvořujícího funkcionálu Greenových funkcí funkcionálním integrálem má tu výhodu, že umožňuje snadno “odvodit” naivní identity, které jsou kvantovým rozšířením vlastností klasické akce (jako např. invariance vzhledem k různým transformacím) a jejichž splnění očekáváme v kvantové teorii.

V rámci renormalizované poruchové kvantové teorie se obvykle postupuje tak, že se vyberou ty charakteristické vlastnosti klasické akce, které ji (spolu s výběrem polí) jednoznačně určují až na multiplikativní renormalizační konstanty u jednotlivých členů. Důsledky těchto vlastností, vhodně zformulované pomocí výše zmíněných identit pro Greenovy funkce, pak musí být splněny v každém řádu poruchové teorie - teorie je tedy *definována* výběrem polí a těmito identitami spíše než konkrétním tvarem klasické akce.

Jedním z těchto vztahů jsou tzv. Dysonovy - Schwingerovy rovnice, které jsou kvantovým analogem klasických pohybových rovnic. Při jejich “odvození” budeme vycházet z formule pro vytvořující funkcionál euklidovských Greenových funkcí

$$Z[J] = \frac{\int \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_E[\phi] - \int d^d x J(x)\phi(x)\right)}{\int \mathcal{D}\phi \exp(-S_E[\phi])}, \quad (730)$$

kde ϕ představuje souhrn polí a J jsou odpovídající klasické zdroje. Jak jsme ukázali v předchozí kapitole, platí formálně vztah pro funkcionální integraci per partes, v našem případě

$$\int \mathcal{D}\phi \frac{\delta}{\delta\phi(x)} \exp\left(-S_E[\phi] - \int d^d x J(x)\phi(x)\right) = 0 \quad (731)$$

nebo po úpravě

$$\int \mathcal{D}\phi \left(\frac{\delta S_E[\phi]}{\delta\phi(x)} + J(x)\right) \exp\left(-S_E[\phi] - \int d^d x J(x)\phi(x)\right) = 0. \quad (732)$$

Užitím identity $F[\phi] \exp(-\int d^d x J\phi) = F[-\delta/\delta J] \exp(-\int d^d x J\phi)$ máme

$$\left(\frac{\delta S_E[-\delta/\delta J]}{\delta\phi(x)} + J(x)\right) \int \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_E[\phi] - \int d^d x J(x)\phi(x)\right) = 0, \quad (733)$$

což v termínech vytvořujícího funkcionálu $Z_E[J]$ znamená

$$\left(\frac{\delta S_E[-\delta/\delta J]}{\delta\phi(x)} + J(x)\right) Z[J] = 0. \quad (734)$$

Funkcionální derivací podle klasických zdrojů dostaneme sadu relací pro Greenovy funkce.

Naopak, definujeme-li teorii pomocí rovnice pro vytvořující funkcionál (734), představuje vyjádření $Z_E[J]$ pomocí funkcionálního integrálu formální řešení této rovnice.

Výše uvedený postup lze zopakovat pro libovolný funkcionál $P[\phi]$, integrace per partes dává

$$\int \mathcal{D}\phi \frac{\delta}{\delta\phi(x)} P[\phi] \exp(-S_E[\phi]) = 0, \quad (735)$$

neboli

$$\int \mathcal{D}\phi \exp(-S_E[\phi]) \left(\frac{\delta}{\delta\phi(x)} P[\phi] - \frac{\delta S_E[\phi]}{\delta\phi(x)} P[\phi]\right) = 0,$$

pro Greenovy funkce tedy máme

$$\langle 0|TP[\phi]\frac{\delta S_E[\phi]}{\delta\phi(x)}|0\rangle = \langle 0|T\frac{\delta}{\delta\phi(x)}P[\phi]|0\rangle. \quad (736)$$

Např. ve skalární teorii s euklidovskou akcí

$$S_E[\phi] = \int d^d x \left(\frac{1}{2}(\partial\phi)^2 + \frac{1}{2}m^2\phi^2 + \frac{\lambda}{4}\phi^4 \right) \quad (737)$$

dostaneme pro vakuovou střední hodnotu pole $\phi(x)$ rovnici

$$(-\partial_x^2 + m^2)\langle 0|\phi(x)|0\rangle + \lambda\langle 0|\phi^3(x)|0\rangle = 0 \quad (738)$$

a pro dvoubodovou funkci

$$(-\partial_x^2 + m^2)\langle 0|T\phi(x)\phi(y)|0\rangle + \lambda\langle 0|T\phi^3(x)\phi(y)|0\rangle = \delta^{(d)}(x-y), \quad (739)$$

atd., obecně

$$\begin{aligned} & (-\partial_{x_1}^2 + m^2)\langle 0|T\phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_n)|0\rangle + \lambda\langle 0|T\phi^3(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_n)|0\rangle \\ &= \sum_{j=2}^n \delta^{(d)}(x_1-x_j)\langle 0|T\phi(x_2)\dots\phi(x_{j-1})\phi(x_{j+1})\dots\phi(x_n)|0\rangle. \end{aligned} \quad (740)$$

Sadu Dysonových-Schwingerových rovnic lze řešit formálním rozvojem do řady,

$$\langle 0|T\phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_n)|0\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j \langle 0|T\phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_n)|0\rangle^{(j)}. \quad (741)$$

Dysonovy-Schwingerovy rovnice pak přejdou v nekonečnou soustavu rekurentních rovnic pro $\langle 0|T\phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_n)|0\rangle^{(j)}$. Ilustrujme to na příkladu dvoubodové funkce. Z rovnice (739) plyne

$$\langle 0|T\phi(x)\phi(y)|0\rangle^{(0)} = \frac{1}{-\partial_x^2 + m^2} \delta^{(d)}(x-y) = G_E^{(0)}(x,y) \quad (742)$$

a odtud a z rovnice (740) máme

$$\begin{aligned} \langle 0|T\phi(x_1)\phi(x_2)\phi(x_3)\phi(x_4)|0\rangle^{(0)} &= G_E^{(0)}(x_1,x_2)G_E^{(0)}(x_3,x_4) \\ &+ G_E^{(0)}(x_1,x_3)G_E^{(0)}(x_2,x_4) \\ &+ G_E^{(0)}(x_1,x_4)G_E^{(0)}(x_2,x_3). \end{aligned} \quad (743)$$

Dosazením do (739) máme

$$\begin{aligned} \langle 0|T\phi(x)\phi(y)|0\rangle^{(1)} &= -\int d^d z G_E^{(0)}(x,z)\langle 0|T\phi(z)\phi(z)\phi(z)\phi(y)|0\rangle^{(0)} \\ &= -3\int d^d z G_E^{(0)}(z,z)G_E^{(0)}(x,z)G_E^{(0)}(z,y). \end{aligned} \quad (744)$$

Podobně lze postupovat dále, znalost $\langle 0|T\phi(x)\phi(y)|0\rangle^{(1)}$ a rovnice (740) umožňují najít další člen rozvoje čtyřbodové funkce $\langle 0|T\phi(x_1)\phi(x_2)\phi(x_3)\phi(x_4)|0\rangle^{(1)}$, který lze znovu dosadit do (739) atd.

Ukažme dále, jak souvisí tento rozvoj s poruchovým funkcionálním integrálem. Všimněme si, že výraz na pravé straně (744) má následující integrální vyjádření

$$\begin{aligned} -3\lambda \int d^d z G_E^{(0)}(z, z) G_E^{(0)}(x, z) G_E^{(0)}(z, y) &= - \int d\mu[\phi] \phi(x) \phi(y) \frac{\lambda}{4} \int d^d z \phi^4(z) \\ &+ \int d\mu[\phi] \phi(x) \phi(y) \int d\mu[\phi] \frac{\lambda}{4} \int d^d z \phi^4(z) \end{aligned} \quad (745)$$

kde $d\mu[\phi]$ je gaussovská funkcionální míra s kovariancí $G_E^{(0)}$. Tedy máme formálně do prvního řádu v λ

$$\langle 0|T\phi(x)\phi(y)|0\rangle = \frac{\int d\mu[\phi] \phi(x) \phi(y) (1 - \frac{\lambda}{4} \int d^d z \phi^4(z))}{\int d\mu[\phi] (1 - \frac{\lambda}{4} \int d^d z \phi^4(z))} + \mathcal{O}(\lambda^2), \quad (746)$$

což souhlasí s prvním členem poruchového rozvoje funkcionálního integrálu

$$\langle 0|T\phi(x)\phi(y)|0\rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi \phi(x) \phi(y) \exp(-S_E[\phi])}{\int \mathcal{D}\phi \exp(-S_E[\phi])} \quad (747)$$

s akcí (737).

Lze i obecně ukázat, že rekurentní postup řešení Dysonových-Schwingerových rovnic vede k standardní formální poruchové teorii a Feynmanovým grafům. Protože je však třeba provést regularizaci divergentních výrazů a následnou renormalizaci, nemáme *a priori* zaručenu platnost těchto rovnic, ale je třeba jejich splnění v rámci renormalizované poruchové teorie *dokázat*.

V rámci poruchové teorie jsou tedy Dysonovy-Schwingerovy rovnice plně ekvivalentní funkcionálnímu integrálu. Jejich význam spočívá v tom, že umožňují také různá aproximativní řešení neporuchového typu. Např. tzv. Hartreeho aproximace odpovídá ansatzu¹²¹

$$Z_E[J] = \exp\left(\frac{1}{2} \int d^d x d^d y J(x) G_E^H(x, y) J(y)\right), \quad (748)$$

jehož dosazením do (734) dostáváme pro teorii s akcí (737) následující rovnici

$$\begin{aligned} (-\partial_{x_1}^2 + m^2) \int d^d y G_E^H(x, y) J(y) + 3\lambda G_E^H(x, x) \int d^d y G_E^H(x, y) J(y) \\ + \lambda \left(\int d^d y G_E^H(x, y) J(y) \right)^3 - J(x) = 0 \end{aligned} \quad (749)$$

ve které zanedbejme předposlední člen na levé straně, který je nelineární v $J(x)$. Obdržíme tak linearizovanou¹²² rovnici pro $G_E^H(x, y)$ v aproximaci středního pole

$$(-\partial_{x_1}^2 + m^2) G_E^H(x, y) + 3\lambda G_E^H(x, x) G_E^H(x, y) = \delta^{(d)}(x - y). \quad (750)$$

Píšeme-li

$$G_E^H(x, y) = \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} e^{-ip \cdot (x-y)} \tilde{G}_E^H(p), \quad (751)$$

¹²¹Fyzikálně odpovídá představě volných částic, interagujících se selfkonsistentním potenciálem, efektivně generovaným ostatními částicemi.

¹²²T.j. zanedbáváme vícečásticovou interakci.

máme

$$\tilde{G}_E^H(p) = \frac{1}{p^2 + m^2 + \Delta m^2} \quad (752)$$

kde podmínka selfkonsistence dává

$$\Delta m^2 = 3\lambda \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \frac{1}{p^2 + m^2 + \Delta m^2}. \quad (753)$$

Interakce se tedy v rámci této aproximace projeví jako selfkonsistentní renormalizace hmoty.

3.2 Wardovy identity

V této podkapitole “odvodíme” identity, které odrážejí na kvantové úrovni symetrie klasické akce vzhledem infinitesimálním transformacím souřadnic a polí s prostoročasově konstantním parametrem θ , zapsané ve tvaru

$$\begin{aligned} x &\rightarrow x' = x + \theta \delta x \\ \phi(x) &\rightarrow \phi'(x') = \phi(x) + \theta \delta \phi[\phi](x), \end{aligned} \quad (754)$$

kde $\delta \phi[\phi](x)$ je obecně funkcionál proměnné ϕ . Označme ještě

$$\theta \delta^0 \phi[\phi](x) = \phi'(x) - \phi(x) = \theta (\delta \phi[\phi](x) - (\delta x \cdot \partial) \phi(x)). \quad (755)$$

Podobně jako při odvození Dysonovy-Schwingerovy rovnice vyjdeme z formule funkcionální integrace per partes, nyní zapsané ve tvaru

$$\int \mathcal{D}\phi \int d^d x \left(\frac{\delta \delta^0 \phi[\phi](x)}{\delta \phi(x)} + \varepsilon \delta^0 \phi[\phi](x) \frac{\delta}{\delta \phi(x)} \right) \exp \left(-S_E[\phi] - \int d^d x J(x) \phi(x) \right) = 0, \quad (756)$$

zde $\varepsilon = 1$ pro bosonová pole a -1 pro fermiony. Zavedme tzv. Wardův operátor

$$\delta = \int d^d x \delta^0 \phi[\phi](x) \frac{\delta}{\delta \phi(x)}. \quad (757)$$

Pro euklidovskou akci $S_E[\phi] = \int d^d x \mathcal{L}_E(x)$ pak máme

$$\begin{aligned} \theta \delta S_E[\phi] &= \int d^d x \theta \delta \mathcal{L}_E[\phi(x)] = \int d^d x (\mathcal{L}_E[\phi(x) + \theta \delta^0 \phi[\phi](x)] - \mathcal{L}_E[\phi(x)]) \\ &= \int d^d x (\mathcal{L}_E[\phi'(x)] - \mathcal{L}_E[\phi(x)]) = \int d^d x' \mathcal{L}_E[\phi'(x')] - \int d^d x \mathcal{L}_E[\phi(x)] \\ &= S_E[\phi'] - S_E[\phi] \end{aligned}$$

tedy Wardův operátor aplikovaný na lokální funkcionály provádí efektivně transformaci (754) prostoročasových souřadnic a polí. Je-li transformace (754) symetrií klasické akce, je $\delta S_E[\phi] = 0$.

Všimněme si dále, že funkcionální determinant “substituce” (754) má tvar

$$\ln \text{Det} \frac{\delta(\phi + \theta \delta^0 \phi[\phi])}{\delta \phi} = \text{Tr} \ln(1 + \theta \frac{\delta^0 \phi[\phi]}{\delta \phi}) = \theta \int d^d x \frac{\delta \delta^0 \phi[\phi](x)}{\delta \phi(x)}, \quad (758)$$

takže identitu (756) lze chápat jako nezávislost funkcionálního integrálu

$$\int \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_E[\phi] - \int d^d x J(x)\phi(x)\right)$$

na výběru integračních proměnných¹²³. Upravme ještě (756) na tvar

$$\int \mathcal{D}\phi \left(\delta S_E[\phi] + \int d^d x J(x) \delta^0 \phi[\phi](x) - \varepsilon \int d^d x \frac{\delta \delta^0 \phi[\phi](x)}{\delta \phi(x)} \right) e^{-S_E[\phi] - \int d^d x J\phi} = 0 \quad (762)$$

nebo, v termínech $Z_E[J]$,

$$\left(\delta S_E\left[-\frac{\delta}{\delta J}\right] + \int d^d x J(x) \delta^0 \phi\left[-\frac{\delta}{\delta J}\right](x) - \varepsilon \int d^d x \frac{\delta \delta^0 \phi[\Phi](x)}{\delta \phi(x)} \Big|_{\Phi \rightarrow -\frac{\delta}{\delta J}} \right) Z_E[J] = 0. \quad (763)$$

Pro Greenovy funkce odtud plyne

$$\langle 0|T\delta F[\phi]|0\rangle = \langle 0|T\delta S_E[\phi]F[\phi]|0\rangle - \varepsilon \langle 0|T \int d^d x \frac{\delta \delta^0 \phi[\phi](x)}{\delta \phi(x)} F[\phi]|0\rangle. \quad (764)$$

Identity (762), (763), resp. (764) jsou globální formou tzv. Wardových identit. Nalezneme dále jejich lokální formu. Lze ji získat standardní noetherovskou technikou záměnou $\theta \rightarrow \theta\lambda(x)$. Platilo-li původně $\delta S_E[\phi] = \int d^d x \delta \mathcal{L}_E(x)$, je nyní

$$\delta_\lambda S_E[\phi] = \int (d^d x \lambda(x) \delta \mathcal{L}_E(x) + j[\phi](x) \cdot \partial \lambda(x)) \quad (765)$$

kde $j_\mu[\phi](x)$ je noetherovský proud. Funkcionální derivací (762) podle $\lambda(x)$ při $\lambda(x) = 0$ získáme Wardovu identitu v lokálním tvaru

$$\int \mathcal{D}\phi \left(\partial \cdot j[\phi](x) - \delta \mathcal{L}_E[\phi](x) - J(x) \delta^0 \phi[\Phi](x) + \varepsilon \frac{\delta \delta^0 \phi[\phi](x)}{\delta \phi(x)} \right) e^{-S_E[\phi] - \int d^d x J(x)\phi(x)} = 0, \quad (766)$$

¹²³Skutečně, provedeme-li ve funkcionálním integrálu $\int \mathcal{D}\phi \exp(-S_E[\phi] - \int d^d x J(x)\phi(x))$, který stojí v čitateli formule (730) pro vytvářející funkcionál $Z_E[J]$, záměnu integračních proměnných indukovanou transformací (754) (a předpokládáme-li pro jednoduchost invarianci formální funkcionální míry, $\mathcal{D}\phi' = \mathcal{D}\phi$, t.j. jednotkový funkcionální determinant) obdržíme

$$\int \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_E[\phi] - \int d^d x J\phi\right) = \int \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_E[\phi] - \int d^d x J\phi - \theta \left(\int d^d x J \delta^0 \phi[\phi] + \delta S_E[\phi] \right)\right) \quad (759)$$

Protože levá strana nezávisí na θ , musí být

$$\int \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_E[\phi] - \int d^d x J\phi\right) \left(\int d^d x J \delta^0 \phi[\phi] + \delta S_E[\phi] \right) = 0, \quad (760)$$

což (až na příspěvek determinantu transformace) je formule (756).

Zde jsme použili vztah $d^d x' = d^d x(1 + \theta \partial \cdot \delta x)$, odkud plyne pro v nekonečno dostatečně rychle ubývající zdroj $J(x)$

$$\begin{aligned} & \int d^d x' J(x') \phi'(x') - \int d^d x J(x) \phi(x) \\ &= \theta \int d^d x ((\partial \cdot \delta x) J(x) \phi(x) + (\delta x \cdot \partial J(x)) \phi(x) + J(x) \delta \phi(x)) \\ &= \theta \int d^d x J(x) \delta^0 \phi(x). \end{aligned} \quad (761)$$

resp. pro vytvořující funkcionál $Z_E[J]$

$$\left(\partial \cdot j[-\frac{\delta}{\delta J}](x) - \delta \mathcal{L}_E[-\frac{\delta}{\delta J}](x) - J(x) \delta^0 \phi[-\frac{\delta}{\delta J}](x) + \varepsilon \frac{\delta \delta^0 \phi[\phi](x)}{\delta \phi(x)} \Big|_{\Phi \rightarrow -\frac{\delta}{\delta J}} \right) Z_E[J] = 0 \quad (767)$$

a odtud pro Greenovy funkce

$$\begin{aligned} \partial \cdot \langle 0|T j[\phi](x) F[\phi]|0 \rangle &= \langle 0|T \delta \mathcal{L}_E[\phi(x)] F[\phi]|0 \rangle + \langle 0|T \delta^0 \phi[\phi](x) \frac{\delta}{\delta \phi(x)} F[\phi]|0 \rangle \\ &- \varepsilon \langle 0|T F[\phi] \frac{\delta \delta^0 \phi[\phi](x)}{\delta \phi(x)} |0 \rangle. \end{aligned} \quad (768)$$

Tyto identity jsou kvantovým analogem bilanční rovnice noetherovského proudu, která má klasicky tvar

$$\partial \cdot j[\phi] = \delta \mathcal{L}_E[\phi(x)]. \quad (769)$$

Uveďme na tomto místě jednoduchý příklad. Položíme-li $\delta x = 0$, $\delta \phi(x) = 1$, je

$$\delta_\lambda S_E[\phi] = \int d^d x \left(\lambda(x) \frac{\partial \mathcal{L}_E}{\partial \phi(x)} + \partial_\mu \lambda(x) \frac{\partial \mathcal{L}_E}{\partial \partial_\mu \phi(x)} \right)$$

a noetherovský proud má tvar

$$j_\mu[\phi](x) = \frac{\partial \mathcal{L}_E}{\partial \partial_\mu \phi(x)}.$$

Jeho klasická bilanční rovnice je totožná s Eulerovou-Lagrangeovou pohybovou rovnicí. Na kvantové úrovni přejdou příslušné (globální) Wardovy identity v Dysonovy-Schwingerovy rovnice. Dysonovy-Schwingerovy rovnice tedy představují Wardovy identity spojené s transformací infinitesimální translace polních konfigurací o konstantní člen $\phi(x) \rightarrow \phi(x) + \theta$.

Obvykle se ve Wardových identitách vynechává příspěvek funkcionálního determinantu (758), tento příspěvek je v mnoha případech formálně roven nule; pak se hovoří o tzv. naivních Wardových identitách. Přívlastek “naivní” znamená, že se neuvažují modifikace, které může přinést procedura regularizace a renormalizace. Jak uvidíme v dalším, příspěvek funkcionálního determinantu představuje většinou špatně definovaný singulární výraz, obvykle typu “ $0 \cdot \infty$ ”, který je třeba vhodně regularizovat. Sejmutí regularizace může generovat nenulový výsledek, tzv. kvantovou anomálii, v tomto případě se hovoří o tzv. anomálních Wardových identitách, které se píší ve tvaru

$$\left(\delta S_E[-\frac{\delta}{\delta J}] + \int d^d x J(x) \delta^0 \phi[-\frac{\delta}{\delta J}](x) \right) Z_E[J] = -A[-\delta/\delta J] Z_E[J] \quad (770)$$

a

$$\left(\partial \cdot j[-\delta/\delta J](x) - \delta \mathcal{L}_E[-\delta/\delta J] - J(x) \delta^0 \phi[-\frac{\delta}{\delta J}](x) \right) Z_E[J] = \mathcal{A}[-\delta/\delta J](x) Z_E[J] \quad (771)$$

kde $A = A[\phi]$ je tzv. anomální funkcionál, který lze zapsat ve tvaru

$$A[\phi] = \int d^d x \mathcal{A}[\phi](x). \quad (772)$$

Zde $\mathcal{A}[\phi](x)$ je lokální polynom v polích $\phi(x)$ a jejich derivacích - tzv. anomální divergence noetherovského proudu¹²⁴. Konkrétní tvar anomálního funkcionálu silně závisí na zvoleném regularizačním a renormalizačním schématu. V některých případech lze rekonstruovat naivní Wardovy identity, resp. zredukovat funkcionál (772) prostřednictvím dodatečné *konečné* renormalizace, odstraňující tzv. zdánlivé (spurious) anomálie. Přítomnost neodstranitelné anomálie znamená narušení klasických transformačních vlastností Greenových funkcí vzhledem k uvažované transformaci; to může mít vážné důsledky pro konsistenci, resp. fyzikální interpretovatelnost teorie (ztráta unitarity, Lorentzovy invariance resp. renormalizovatelnosti). V dalších podkapitolách se budeme zabývat anomáliemi podrobněji.

Jak jsme již naznačili výše, Wardovy identity lze chápat jako identity, *definující* příslušnou teorii. Často umožňují dokázat její renormalizovatelnost (tak je tomu např. v kalibračních teoriích). V některých případech bývá požadavek jejich splnění natolik silný, že umožňuje teorii “vyřešit”, t.j. nalézt tvar Greenových funkcí (příkladem jsou konformní teorie pole ve dvou dimenzích, ale v jistém smyslu také nízkoenergetická QCD, kde se využívají tzv. chirální Wardovy identity). Často jsou Wardovy identity také prostředkem k fyzikální interpretaci teorie, resp., podobně jako požadavek renormalizovatelnosti, požadavek absence anomálií představuje vodítko ke konstrukci konkrétních modelů.

¹²⁴Položíme-li v (768) $F[\phi] = 1$, dostaneme “kvantovou bilanční rovnici noetherovského proudu” ve tvaru

$$\partial \cdot \langle 0|j[\phi](x)|0\rangle = \langle 0|\delta\mathcal{L}_E[\phi(x)]|0\rangle + \langle 0|\mathcal{A}[\phi](x)|0\rangle,$$

srov. (769).

Reference

- [1] R. P. Feynman *Rev. Mod. Phys.* **80** (1948) 440
- [2] R. P. Feynman *Phys. Rev.* **90** (1953) 1116 *Phys.Rev.* **91** (1953) 1291,1301 *Phys. Rev* **94** (1954) 262
- [3] R. P. Feynman *Phys. Rev.* **97** (1955) 660
- [4] R. P. Feynman, A. Hibbs, Quantum Mechanics and Path integrals (*McGraw Hill*, New York, 1965)
- [5] C. Groshe, F. Steiner Table of Feynman Path Integrals *Springer Tracts in Modern Physics*, Feynman Path Integrals, *Springer Lecture Notes in Physics*, 1995
- [6] J. Glimm, A. Jaffe, Quantum Physics. A Functional Integral Point of View, *Springer-Verlag*, New York, Heidelberg, Berlin 1981
- [7] C. Itzykson, J.-B. Zuber, Quantum Field Theory, McGraw-Hill, New York 1980
- [8] S. Weinberg, The Quantum Theory of Fields I., Cambridge University Press, Cambridge, 1995
- [9] C. Itzykson, J.-M. Drouffe, Statistical Field Theory I., Cambridge University Press, Cambridge, 1989
- [10] F.A. Berezin, Metod vtoričnogo kvantovanja, Moskva, Nauka 1965
- [11] R. Jackiw, *Analysis on infinite-dimensional manifolds - Schrödinger representation for quantized fields*, Brasil Summer School 1989, 73-141
- [12] J. C. Collins, *Renormalization*, Cambridge University Press, Cambridge, 1984