

Feynmanovi integrali po putevima

Banožić, Mihael

Master's thesis / Diplomski rad

2024

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Rijeka / Sveučilište u Rijeci**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/um:nbn:hr:194:046239>

Rights / Prava: [In copyright/Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2025-02-22**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the University of Rijeka, Faculty of Physics - PHYRI Repository](#)



SVEUČILIŠTE U RIJECI
FAKULTET ZA FIZIKU
Diplomski studij Fizika



Mihael Banožić

Feynmanovi integrali po putevima

Diplomski rad

Rijeka, 2024.

SVEUČILIŠTE U RIJECI
FAKULTET ZA FIZIKU
Diplomski studij Fizika
Astrofizika i fizika elementarnih čestica



Mihael Banožić

Feynmanovi integrali po putevima

Diplomski rad

Mentor: dr. sc. Tajron Jurić

Komentor: izv. prof. dr. sc. Tomislav Terzić

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Rijeka, 2024.

Srdačno zahvaljujem svom mentoru, dr.sc. Tajronu Juriću, za nesebičnu podršku te korisne upute koje su me usmjeravale kroz proces izrade ovog rada. Također, zahvaljujem komentoru, izv. prof. dr. sc. Tomislavu Terziću, na spremnosti preuzimanja ove uloge.

Posebno hvala mojim roditeljima koji su mi pružili beskrajnu podršku tokom cijelog studija te njima i posvećujem ovaj rad.

Mihael Banožić

Rijeka, 2024.

Sadržaj

1 Formalizam integrala po putevima	3
1.1 Eksperiment dvostrukog proreza	3
1.2 Formulacija integrala po putu	6
2 Iz kanonske QM do integrala po putevima	12
2.1 Propagator	12
2.2 Od Schrödingerovog formalizma do integrala po putevima	13
2.3 Propagator slobodne čestice	19
2.4 Od integrala po putevima do Schrödingerovog formalizma	25
2.4.1 Izvod pomoću kvantnih veličina	25
2.4.2 Izvod pomoću klasičnih veličina	28
3 Računanje i primjeri integrala po putu	36
3.1 Integrali po putevima kao determinante	36
3.1.1 Općenito o Gaussovim integralima	36
3.1.1.1 Integrali s realnim eksponentom	36
3.1.1.2 Integrali s imaginarnim eksponentom	38
3.1.2 Gaussovi integrali po putevima	40
3.2 Kvadratni lagranžijani i harmonički oscilator	43
3.3 Propagator za općenitiji lagranžijan	55
3.4 Veza integrala po putevima i statističke fizike	58
4 Rasprava i zaključak	61
A Baker–Campbell–Hausdorff formula	63
B Dokaz relacije (2.2.16)	67
C Dokaz relacije (2.2.23)	70

Sažetak

U radu istražujemo formalizam Feynmanovih integrala po putevima kao alternativni pristup kvantnoj mehanici (QM). Integral po putevima povezuje klasičnu i kvantnu teoriju kroz princip minimalne akcije. U uvodnom dijelu, pomoću eksperimenta dvostrukog proreza, prikazujemo osnovne kvantne principe kao npr. superpozicija, te uvodimo koncept kvantnih prijelaza kao sumu preko svih mogućih puteva. Nadalje, prikazujemo kako se formalizam integrala po putevima izvodi iz kanonske QM. Bavimo se tehnikama računanja integrala po putevima, detaljno analizirajući Gaussove integrale koji pomažu u izračunavanju propagatora. Dalje, fokusiramo se na konkretne primjere primjene integrala po putevima na fizikalne sisteme poput harmoničkog oscilatora, detaljno prikazujući izračune za propagatore općenitijih lagranžijana. Konačno, istražujemo vezu između integrala po putevima i statističke fizike, objašnjavajući kako se particijske funkcije mogu izračunati pomoću ovog formalizma.

Ključne riječi: Feynmanovi integrali po putevima, kvantna mehanika (QM), Gaussovci integrali, harmonički oscilator, statistička fizika

Abstract

In this thesis, we explore the formalism of Feynman's path integrals as an alternative approach to quantum mechanics (QM). The path integral connects classical and quantum theory through the principle of least action. In the introductory section, we illustrate fundamental quantum principles such as superposition using the double-slit experiment, and introduce the concept of quantum transitions as a sum over all possible paths. Furthermore, we demonstrate how the path integral formalism can be derived from canonical QM. We delve into techniques for computing path integrals, analyzing Gaussian integrals that aid in the calculation of propagators. We then focus on specific applications of path integrals to physical systems such as the harmonic oscillator, providing detailed calculations for propagators of more general Lagrangians. Finally, we investigate the connection between path integrals and statistical physics, explaining how partition functions can be computed using this formalism.

Keywords: Feynman's path integrals, quantum mechanics (QM), Gaussian integrals, harmonic oscillator, statistical physics

Uvod

Prema [1], postoje tri ¹ osnovne formulacije kvantne mehanike (QM):

- Matrična formulacija (W. Heisenberg, 1925.)
- Valna formulacija (E. Schrödinger, 1926.)
- Formulacija integrala po putevima (R. Feynman, 1942.-1948.)

Matrična (Heisenbergova) formulacija QM [3] kvantna stanja predstavlja kao vektore $|\psi\rangle$ koji "žive" u Hilbertovom prostoru [4]. Baza Hilbertovog prostora može biti diskretna, a kvantna stanja $|\psi\rangle$ možemo prikazati kao linearnu kombinaciju vektora baze $|n\rangle$ kao $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$, t.d. vrijedi $\sum_n |c_n|^2 = 1$. Nadalje, u takvoj formulaciji operatore gledamo kao beskonačne matrice. Općenito, operator \hat{A} , koji predstavlja fizikalnu veličinu, može biti zapisan kao matrica $\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} |i\rangle\langle j|$. Ključan koncept ovdje je Heisenbergova slika u kojoj su operatori vremenski ovisni, $\hat{A} = \hat{A}(t)$, a kvantna stanja $|\psi\rangle$ konstantna. Zbog toga možemo promatrati vremensku evoluciju operatora $\hat{A}(t)$ koja je opisana Heisenbergovom jednadžbom

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t},$$

gdje je $[\hat{H}, \hat{A}]$ komutator definiran kao $[\hat{H}, \hat{A}] \equiv \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}$, a H je hamiltonijan sistema.

Valna (Schrödingerova) formulacija QM [5] kvantna stanja opisuje valnim funkcijama $\psi(x, t)$. Valne funkcije predstavljaju amplitudu vjerojatnosti pronalaska čestice na položaju x u vremenu t , a njihov kvadrat $|\psi(x, t)|^2$ predstavlja gustoću vjerojatnosti pronalaska čestice u točki (x, t) . Za razliku od matričnog pristupa, ovdje su fizikalne veličine dane diferencijalnim operatorima koji djeluju na valnu funkciju. Na primjer, za impuls imamo $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ pa je $\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial\psi(x)}{\partial x}$. Suprotno Heisenbergovoj slici, u Schrödingerovoj slici valna funkcija ovisi o vremenu dok su operatori konstantni, a vremenska evolucija takve valne funkcije opisana je Schrödingerovom jednadžbom

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle.$$

Za vremensko nezavisni hamiltonijan, rješenje Schrödingerove jednadžbe dano je s

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} |\psi(0)\rangle,$$

gdje je $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$ unitaran operator vremenske evolucije.

¹Zapravo, prema [2], postoji devet formulacija kvantne mehanike.

E. Schrödinger je u trećem dijelu svoje serije radova [6] pokazao ekvivalentnost matrične i valne QM.

Feynmanova formulacija QM [7,8], poznata još i kao formulacija integrala po putevima (eng. *path integrals*) objašnjena je na konceptualno drugačiji način u odnosu na prve dvije formulacije. Takva formulacija omogućuje nam vrlo duboku poveznicu između klasične i kvantne teorije kroz princip minimalne akcije. Osnovna ideja je opisati prijelaz iz početnog položaja čestice (x_i, t_i) u konačan položaj čestice (x_f, t_f) koristeći sumiranje svih mogućih puteva koji povezuju ta dva položaja. U nastavku ćemo pokazati da svaki put doprinosi ukupnoj kvantnoj amplitudi s faznim faktorom $e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}$ pa ukupnu kvantnu amplitudu možemo pisati kao

$$\langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle = \int \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]},$$

gdje $\mathcal{D}[x(t)]$ predstavlja integral po svim mogućim putevima $x(t)$. Također, u idućem poglavlju pokazat ćemo kako dobiti, u limesu $\hbar \rightarrow 0$, iz Feynmanove formulacije klasičnu mehaniku (CM) te vidjeti da tada dominiraju oni putevi koji su susjedni klasičnom putu.

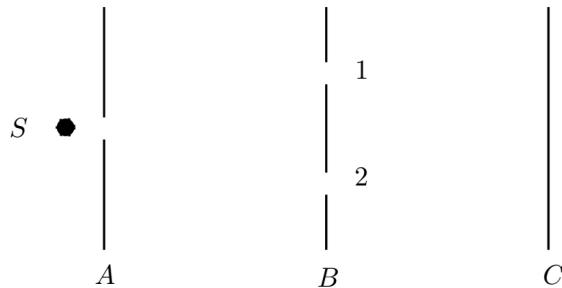
Poglavlje 1

Formalizam integrala po putevima

1.1. Eksperiment dvostrukog proreza

Prvo ćemo ukratko opisati eksperiment dvostrukog proreza [7,9] (eng. *double-slit*), a onda vidjeti kakve to veze ima s integralom po putu. Postavka eksperimenta je sljedeća (slika 1.1.1):

- Izvor elektrona. (*A*)
- Pregrada s dva paralelna proreza. (*B*)
- Ekran s detektorom. (*C*)



Slika 1.1.1. Eksperiment dvostrukog proreza. [10]

U klasičnoj valnoj teoriji, kada bismo postavili pregradu s dva otvora došlo bi do interferencije valova te bi se na ekranu stvorio uzorak svijetlih i tamnih pruga (ovisno radi li se o konstruktivnoj ili destruktivnoj interferenciji). Što ako ispaljujemo elektrone? Za slučaj kada imamo samo jedan otvor, dobili bismo isti rezultat kao i u klasičnom objašnjenju (na ekranu bismo vidjeli otisak elektrona koji odgovara veličini otvora). Ako razmišljamo na način da se elektron ponaša kao čestica, logično je za očekivati da ćemo dobiti isti rezultat i kod pregrade s dva otvora. Ali nećemo! Kada elektroni prođu kroz dva otvora, dobijemo isti uzorak kao i kod valova. Nakon toga je isprobano ispaljivanje elektrona po elektron, ali opet je došlo do interferencije elektrona sa samim sobom. Louis de Broglie se tada, u svojoj disertaciji [11], zapitao ponaša li se elektron kao val. QM takve rezultate objašnjava na način da je elektron opisan valnom funkcijom koja prolazi kroz oba otvora. Ono što želimo mjeriti jest tok (eng. *flux*) elektrona, kojeg ćemo označiti s F . Također, neka je položaj izvora elektrona *A*, položaj pregrade *B*, te položaj ekrana *C*. Neka su

otvori na pregradi 1 i 2. Ako je otvor 1 otvoren, a 2 zatvoren, tada mjerimo tok F_1 . Obratno, mjerimo F_2 , a za slučaj kada su oba otvora otvorena, mjerimo tok F . Očekivali bismo da mora vrijediti $F = F_1 + F_2$, ali zbog interferencije između dva vala koji prolaze kroz 1 i 2 moramo dodati i interferencijski doprinos, F_{int} , pa vrijedi

$$F = F_1 + F_2 + F_{int}. \quad (1.1.1)$$

Možemo pisati [7],

$$F = |\Phi_1 + \Phi_2|^2 = \underbrace{|\Phi_1|^2}_{F_1} + \underbrace{|\Phi_2|^2}_{F_2} + \underbrace{2\Re(\Phi_1^*\Phi_2)}_{F_{int}}, \quad (1.1.2)$$

gdje su Φ_1 i Φ_2 valne funkcije koje zbrajamo, a njihov kvadrat absolutne vrijednosti daje ukupni tok. Nadalje, F_{int} predstavlja razliku između CM i QM jer opisuje efekte koji se javljaju interferencijom valnih funkcija. Postavlja se pitanje što je elektron, odnosno kako interpretirati izraz (1.1.2)? Možemo sumirati da je eksperimentom utvrđeno sljedeće:

- Ako znamo kroz koji otvor elektron prolazi (detektor se postavi na otvor), tada se elektron ponaša kao čestica te nema interferencije što je u skladu s klasičnim ponašanjem.
- Ako ne znamo kroz koji otvor prolazi elektron tada se elektron ponaša kao val na način da interferira sa samim sobom te se na ekranu pojavi interferencijski uzorak što smatramo kvantnim ponašanjem.

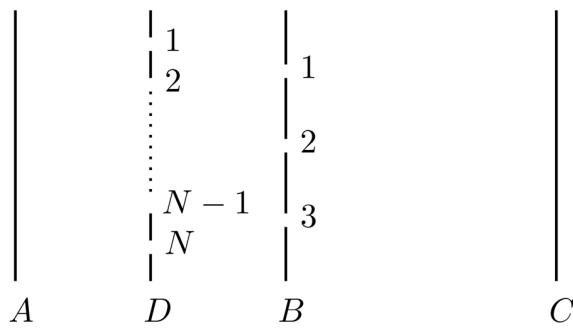
Iz ovog eksperimenta vidimo fundamentalnu razliku između CM i QM: kroz interferencijske uzorce pokazano je da se elektron može ponašati i kao val, što nas dovodi do valne prirode materije. Prema Kopenhaškoj interpretaciji QM [12, 13], valna funkcija Φ predstavlja amplitudu vjerojatnosti za različite ishode mjerena, a njen kvadrat $F \equiv |\Phi|^2$ predstavlja gustoću vjerojatnosti pronalska čestice na određenom mjestu. Bitan zaključak je da ono što zapravo zbrajamo nije gustoća vjerojatnosti F , nego amplituda vjerojatnosti Φ , što je fundamentalni koncept u QM. Sada ćemo, na temelju eksperimenta, izreći **tri osnovna principa QM**:

- a) Svakome događaju pridružimo amplitudu Φ , a vjerojatnost tog događaja je kvadrat amplitude $P = |\Phi|^2$.
- b) Ako se neki događaj klasično može dogoditi na nekoliko načina (npr. za broj otvora $i = 1, 2, \dots, N$), a da je svaki od tih načina karakteriziran amplitudom Φ_i , tada je ukupna amplituda događaja njihova suma $\Phi = \sum_{i=1}^N \Phi_i$.
- c) Ako se neki događaj događa na način koji se može dekomponirati u nekoliko individualnih koraka ($j = 1, 2, \dots, n$), pri čemu je svaki korak opisan amplitudom Φ_j , tada je ukupna amplituda događaja njihov produkt $\Phi = \prod_{j=1}^n \Phi_j$.

Sjetimo se, u Schrödingerovom pristupu, koji daje naglasak valnim osobinama čestica, amplitudu vjerojatnosti računali smo pomoću Schrödingerove jednadžbe. Ovdje ćemo analizirati drugačiju, ali potpuno ekvivalentnu, metodu za računanje amplitude vjerojatnosti, a to je metoda integrala po putevima. Pokušajmo ilustrirati tu metodu tako da se vratimo na eksperiment dvostrukog proreza. Za situaciju gdje imamo dva otvora, ukupna amplituda vjerojatnosti je zbroj amplitude vjerojatnosti da čestica ide kroz otvor 1 te amplitude vjerojatnosti da čestica ide kroz otvor 2: $\Phi = \Phi_1 + \Phi_2$. Ako dodamo treći otvor,

i dalje će vrijediti princip superpozicije $\Phi = \Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3$. Nadalje, uvedimo dodatni ekran tako da ga stavimo između A i B te neka se on nalazi na položaju D (slika 1.1.2). Ekran ima N otvora (rupa) čije ćemo položaje označiti sa $x_D^1, x_D^2, \dots, x_D^N$. Znači, sada promatramo situaciju u kojoj imamo:

- Ekran A kojeg gledamo kao izvor čestica.
- Ekran D koji ima N rupa na položajima x_D^i ($i = 1, 2, \dots, N$). Njega gledamo kao dodatan sloj kroz kojeg prolaze čestice kako bi došle do ekrana B .
- Ekran B koji ima tri rupe koje ćemo označiti $\alpha = 1, 2, 3$. Ako je čestica prošla kroz D tada može dodatno proći kroz jednu od tri rupa.
- Ekran s detektorom C koji, u konačnici, bilježi rezultate interferencije.



Slika 1.1.2. Eksperiment višestrukog proreza. [10]

Iz navedenog možemo zaključiti da je $\Phi = \Phi(x_D^i, \alpha)$, gdje sa (x_D^i, α) označavamo koordinate puta. Na primjer, ako čestica prolazi kroz rupu x_D^1 na ekranu D te zatim kroz rupu $\alpha = 2$, tada je amplituda vjerojatnosti za taj konkretan put $\Phi(x_D^1, \alpha = 2)$. Uzmimo još put $(x_D^2, \alpha = 3)$ sa amplitudom vjerojatnosti $\Phi(x_D^2, \alpha = 3)$. Koristeći načelo superpozicije, ukupna amplituda vjerojatnosti za ova dva puta je

$$\Phi = \Phi(x_D^1, \alpha = 2) + \Phi(x_D^2, \alpha = 3). \quad (1.1.3)$$

Općenito, za situaciju sa N rupa na D i tri rupe na B pišemo

$$\Phi = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1,2,3} \Phi(x_D^i, \alpha). \quad (1.1.4)$$

Sada možemo promotriti slučaj kada na ekranu D imamo beskonačno rupa, tj. $N \rightarrow \infty$. Tada možemo napraviti prijelaz

$$\sum_{i=1}^N \Phi(x_D^i) \rightarrow \int \Phi(x_D) dx_D, \quad (1.1.5)$$

gdje smo sa sume po svim rupama na D prešli na integral preko svih mogućih položaja x_D na D pa (1.1.4) postaje [7, 10],

$$\Phi = \sum_{\alpha=1,2,3} \int dx_D \Phi(x_D, \alpha). \quad (1.1.6)$$

Dodajmo ekranu D , koji se koristi kao fiktivni uređaj, M ekrana D_1, D_2, \dots, D_M . Sada amplitudu vjerojatnosti gledamo kao $\Phi = \Phi(x_{D_1}, x_{D_2}, \dots, x_{D_M}; \alpha)$ te moramo uzeti u obzir sve moguće puteve kroz sve fiktivne ekrane kojih ima M . Na primjer, za integral $\int dx_{D_1}$ gledamo sve moguće puteve čestice koja prolazi kroz rupe ekrana D_1 i tako sve do $\int dx_{D_M}$, pa (1.1.6) postaje [7, 10],

$$\Phi = \sum_{\alpha=1,2,3} \int dx_{D_1} \int dx_{D_2} \cdots \int dx_{D_M} \Phi(x_{D_1}, x_{D_2}, \dots, x_{D_M}; \alpha). \quad (1.1.7)$$

Konačno, gledamo situaciju sa beskonačno fiktivnih ekrana. U limesu kada $N \rightarrow \infty$ (beskonačno rupa) i $M \rightarrow \infty$ (beskonačno ekrana) možemo reći da čestica putuje kroz prazan prostor. Neka je (x_i, y_i) početni položaj čestice, a (x_f, y_f) konačni položaj čestice, gdje x predstavlja položaj rupe, a y položaj ekrana. Puteve od (x_i, y_i) do (x_f, y_f) označit ćemo funkcijom $x(y)$, gdje vrijedi $x(y_i) = x_i$ i $x(y_f) = x_f$. Znamo da položaj ovisi o vremenu pa ćemo, umjesto $x(y)$, koristiti $x(t)$ i $y(t)$ da bismo vidjeli gibanje čestice kroz prostor tijekom nekog vremena. Koristeći diskretizaciju vremena od t_i do t_f , put možemo gledati kao niz točaka $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$, gdje su $x_k = x(t_k)$ i $y_k = y(t_k)$. Općenito, vremenska točka t_k odgovara određenom položaju čestice $(x(t_k), y(t_k))$ za $k = 0, 1, \dots, N$ [14]. Kao što smo ranije rekli, svaki mogući put daje svoj doprinos ukupnoj amplitudi vjerojatnosti. To znači da Φ možemo gledati kao sumu preko svih mogućih puteva $\{x(t), y(t)\}$ koji čine skup svih mogućih funkcija $x(t)$ i $y(t)$ [15],

$$\Phi = \sum_{\substack{\text{svi putevi} \\ \{x(t), y(t)\}}} \Phi(\{x(t), y(t)\}). \quad (1.1.8)$$

Ono što dalje želimo jest dati smisao relaciji (1.1.8), odnosno vidjeti kako se sa njome računa?

1.2. Formulacija integrala po putu

Neka je $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ kvantna amplituda [8, 16] vjerojatnosti kojom želimo opisati gibanje iz točke $x_i(t_i)$ u točku $x_f(t_f)$ te neka je $\{\gamma\}$ skup svih mogućih puteva između točaka (x_i, t_i) i (x_f, t_f) tako da vrijedi $x(t_i) = x_i$, $x(t_f) = x_f$. Na primjer, ako gledamo gibanje čestice između x_i i x_f na način da čestica može putovati dvama različitim putevima γ_1 i γ_2 , tada su amplitude vjerojatnosti za te puteve $\Phi(\gamma_1)$ i $\Phi(\gamma_2)$, a ukupna amplituda K je

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \Phi(\gamma_1) + \Phi(\gamma_2). \quad (1.2.1)$$

Za sve moguće puteve dobivamo [10],

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sum_{\substack{\text{svi putevi} \\ \{\gamma\}}} \Phi(\{\gamma\}). \quad (1.2.2)$$

Postavlja se pitanje kako računamo kvantnu amplitudu? Paul Dirac u svome radu [17] dolazi na ideju da je amplituda vjerojatnosti povezana s klasičnom akcijom. Dakle, Dirac pogoda $\Phi[\gamma] = f\left(\frac{S[\gamma]}{\hbar}\right)$, gdje je f funkcija koja u limesu $\hbar \rightarrow 0$ vodi na klasičan put. Zbog

brojnih pogodnosti, probao je sa eksponencijalnom funkcijom

$$\Phi[\gamma] = e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma]}, \quad (1.2.3)$$

pa je ukupna amplituda vjerojatnosti

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sum_{\substack{\text{svi putevi} \\ \{\gamma\}}} e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma]}. \quad (1.2.4)$$

Pokušajmo opravdati odabir eksponencijalne funkcije.

1. Heuristički. Gledamo klasičnu situaciju, a ideja je sljedeća: gradijent akcije $\frac{\delta S}{\delta \gamma}$ je za većinu puteva puno veći od \hbar , $S \gg \hbar$, što znači da uzrokuje vrlo brze, "divlje", oscilacije u fazi $e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma]}$. Pogledajmo, u primjeru kada imamo dva susjedna puta γ_1 i γ_2 , zašto će doći do njihovog međusobnog poništavanja. Cilj je pokazati $e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_1]} + e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_2]} = 0$. Za neku malu razliku u akciji, ΔS , možemo pisati $S[\gamma_2] = S[\gamma_1] + \Delta S$ pa je suma faznih faktora za ta dva puta $e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_1]} + e^{\frac{i}{\hbar} (S[\gamma_1] + \Delta S)} = e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_1]} (1 + e^{\frac{i}{\hbar} \Delta S})$. Ako pogledamo član iz zagrade $1 + e^{\frac{i}{\hbar} \Delta S}$, odmah je vidljivo da za $\Delta S \rightarrow 0$ dolazi do poništavanja u fazi. Zaključujemo da se za velike akcije doprinosi susjednih puteva poništavaju kroz destruktivnu interferenciju. Kada se javlja konstruktivna interferencija? Javit će se ako gledamo razne puteve, ali one koji imaju slične akcije (i faze). Znamo da klasičan put γ_c ima stacionarnu akciju ($S[\gamma] \approx S[\gamma_c]$) tako da putevi koji se nalaze blizu klasičnom putu imaju približnu akciju akciji klasičnog puta. Možemo to formalno pokazati tako da akciju $S[\gamma]$ razvijemo u Taylorov red oko klasičnog puta γ_c ,

$$S[\gamma] = S[\gamma_c] + \left. \frac{\delta S}{\delta \gamma} \right|_{\gamma_c} (\gamma - \gamma_c) + \left. \frac{1}{2} \frac{\delta^2 S}{\delta \gamma^2} \right|_{\gamma_c} (\gamma - \gamma_c)^2 + \mathcal{O}((\gamma - \gamma_c)^3) \quad (1.2.5)$$

Zanemarujući doprinose trećeg i više reda te koristeći uvjet stacionarnosti $\left. \frac{\delta S}{\delta \gamma} \right|_{\gamma_c} = 0$, dobivamo aproksimaciju za akciju blizu klasičnog puta,

$$S[\gamma] \approx S[\gamma_c] + \left. \frac{1}{2} \frac{\delta^2 S}{\delta \gamma^2} \right|_{\gamma_c} (\gamma - \gamma_c)^2. \quad (1.2.6)$$

Pošto su akcije slične, zaključujemo da su i fazni faktori $e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma]}$ slični, odnosno kada ih sve sumiramo dobivamo konstruktivnu interferenciju. Konkretnije, ako promotrimo put koji je blizu klasičnom putu, njegova akcija je $S[\gamma] = S_c + \delta S$. Pitamo se kada će nam faktori biti isti (ili slični)? U slučaju kada je $\delta S \leq \hbar$ slijedi da je $e^{\frac{i}{\hbar} S} \approx e^{\frac{i}{\hbar} S_c}$ što za vrlo male varijacije ($e^{\frac{i}{\hbar} \delta S} \approx 1$) dovodi do konstruktivne interferencije.

Sumarno rečeno, za konstruktivnu interferenciju vrijedi $|S - S_c| \leq \hbar$ (slični fazni faktori/akcije te se doprinosi zbrajaju), a za destruktivnu interferenciju vrijedi $|S - S_c| > \hbar$ (velika razlika u faznim faktorima/akcijama te se njihovi doprinosi poništavaju). Nadalje, promatranjem faznog faktora u limesu $\hbar \rightarrow 0$,

$$e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma]} \rightarrow e^{\frac{i}{0} S[\gamma]}, \quad (1.2.7)$$

vidimo da sve faze imaju "divlje" oscilacije te se međusobno poništavaju osim za onaj put čija je akcija stacionarna. Drugim riječima, u tom slučaju svi se kvantni doprinosi ponište,

a jedino što ostaje je klasičan put i zato možemo reći da je $\hbar \rightarrow 0$ klasičan limes. Za još bolju ilustraciju ovoga možemo razmotriti sljedeći integral

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar} f(x)}. \quad (1.2.8)$$

Razvijanjem u red funkcije $f(x)$ oko stacionarne točke $x_s = 0$, zanemarujući doprinose $\mathcal{O}(x^3)$, slijedi $f(x) \approx f(0) + \frac{f''(0)}{2}x^2$ pa integral postaje

$$I \approx e^{if(0)/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i\frac{f''(0)}{2\hbar}x^2}. \quad (1.2.9)$$

Vidimo da kvadratni član $\frac{f''(0)}{2}x^2$ daje glavni doprinos varijaciji funkcije $f(x)$. Pogledajmo što se događa sa fazom u području gdje je $f''(0)x^2 \sim \hbar$. Tada je član u eksponentu $\frac{f''(0)}{2\hbar}x^2$ reda veličine $\frac{f''(0)}{2\hbar}(\sqrt{\hbar})^2 = \frac{f''(0)}{2\hbar}\hbar = \frac{f''(0)}{2}$. Pošto je $e^{i\frac{f''(0)}{2}}$ konstanta zaključujemo da se fazni faktor ne mijenja brzo iz čega slijedi da svi doprinosi konstruktivno interferiraju. Ako pak gledamo područje gdje je $x^2 \gg \hbar$, eksponent postaje velik pa svi doprinosi faza međusobno destruktivno interferiraju, odnosno ponište se.

2. Princip superpozicije. Promotrimo situaciju u kojoj imamo dva puta: γ_1 koji u nekom vremenskom intervalu $[t_i, t_{int}]$ ide od točke x_i do y te γ_2 koji u nekom vremenskom intervalu $[t_{int}, t_f]$ ide od y do x_f . Spoj tih puteva daje ukupan put γ_{12} pa je ukupna akcija

$$S[\gamma_{12}] = \underbrace{\int_{t_i}^{t_{int}} L(x(t), \dot{x}(t)) dt}_{S_1} + \underbrace{\int_{t_{int}}^{t_f} L(x(t), \dot{x}(t)) dt}_{S_2}, \quad (1.2.10)$$

tj.

$$S[\gamma_{12}] = S[\gamma_1] + S[\gamma_2], \quad (1.2.11)$$

iz čega vidimo da je akcija S aditivna veličina. Nadalje, općenito kvantnu amplitudu možemo pisati kao $\Phi[\gamma] = e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma]}$. Za ukupan put γ_{12} ona je

$$\Phi[\gamma_{12}] = e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_{12}]} = e^{\frac{i}{\hbar} (S[\gamma_1] + S[\gamma_2])}. \quad (1.2.12)$$

Koristeći svojstva eksponencijalne funkcije dobivamo

$$\Phi[\gamma_{12}] = \Phi[\gamma_1] \cdot \Phi[\gamma_2], \quad (1.2.13)$$

iz čega slijedi da je amplituda Φ faktorizabilna veličina. Želimo izračunati ukupnu kvantnu amplitudu vjerojatnosti za prelazak iz točke (x_i, t_i) u točku (x_f, t_f) koristeći točku koja se nalazi između njih, nazovimo ju (y, t_{int}) . Neka je amplituda prijelaza čestice iz (x_i, t_i) u (y, t_{int}) dana s $K(y, t_{int}; x_i, t_i)$, a amplituda prijelaza čestice iz (y, t_{int}) u (x_f, t_f) dana s $K(x_f, t_f; y, t_{int})$. Integracijom preko svih mogućih točaka y , koristeći aditivnost i fakto-

rizabilnost, dobivamo izraz za ukupnu amplitudu vjerojatnosti

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy K(x_f, t_f; y, t_{int}) K(y, t_{int}; x_i, t_i). \quad (1.2.14)$$

Pojedine amplitude napišemo kao

$$K(x_f, t_f; y, t_{int}) = \sum_{\gamma_2} e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_2]} \quad \text{i} \quad K(y, t_{int}; x_i, t_i) = \sum_{\gamma_1} e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_1]} \quad (1.2.15)$$

te ih uvrstimo u (1.2.14),

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \sum_{\gamma_2} e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_2(y)]} \cdot \sum_{\gamma_1} e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_1(y)]} \quad (1.2.16)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \sum_{\gamma_1} \sum_{\gamma_2} e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_1(y)]} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_2(y)]} \quad (1.2.17)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \sum_{\gamma_1, \gamma_2} e^{\frac{i}{\hbar} (S[\gamma_1(y)] + S[\gamma_2(y)])} \quad (1.2.18)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \sum_{\gamma_{12}} e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma_{12}(y)]}. \quad (1.2.19)$$

Zaključujemo da sumiranjem svih mogućih puteva γ_1 i γ_2 te integracijom po svim među točkama y možemo dobiti ukupnu kvantnu amplitudu vjerojatnosti. Vjerojatnost prijelaza čestice, P , računamo kao $P = |K|^2$.

Što ako umjesto (1.2.3) napravimo neki drugi odabir za Φ ? Kao izgledni kandidat nameće se odabir $\Phi = e^{-\frac{S[\gamma]}{\hbar}}$. Princip superpozicije i dalje će vrijediti, a dokaz se provodi kao i za odabir (1.2.3). Analizom integrala (1.2.9) pokazali smo da dominiraju oni putevi koji su sedlene točke akcije, tj. točke koje zadovoljavaju uvjete: $\frac{\delta S}{\delta \gamma} = 0$, $\frac{\delta^2 S}{\delta \gamma^2} > 0$ ili $\frac{\delta^2 S}{\delta \gamma^2} < 0$. Za odabir $\Phi = e^{-\frac{S[\gamma]}{\hbar}}$ to ne vrijedi jer se favorizira minimum akcije, tj. za manje akcije eksponencijalni faktor postaje veći. Prema tome, takav odabir nije dobar jer sedlaste točke neće biti favorizirane, odnosno bit će zanemarene. Pogledajmo još što bi bilo da odaberemo $\Phi = e^{(\frac{i}{\hbar} S[\gamma])^2}$. Jedan od tri osnovna principa QM, koja smo ranije naveli, jest princip superpozicije. Prema Diracovom prijedlogu (1.2.3) faze se zbrajaju $e^{\frac{i}{\hbar} (S_1[\gamma_1] + S_2[\gamma_2])} = e^{\frac{i}{\hbar} S_1[\gamma_1]} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S_2[\gamma_2]}$, ali za izbor $\Phi = e^{(\frac{i}{\hbar} S[\gamma])^2}$ to neće vrijediti jer bismo u eksponentu dobili

$$\left(\frac{iS_1[\gamma_1]}{\hbar} + \frac{iS_2[\gamma_2]}{\hbar} \right)^2 = \left(\frac{iS_1[\gamma_1]}{\hbar} \right)^2 + \left(\frac{iS_2[\gamma_2]}{\hbar} \right)^2 + 2 \frac{iS_1[\gamma_1]}{\hbar} \frac{iS_2[\gamma_2]}{\hbar}, \quad (1.2.20)$$

što narušava svojstvo aditivnosti pa zaključujemo da $\Phi = e^{(\frac{i}{\hbar} S[\gamma])^2}$ također nije dobar izbor.

Pogledajmo što se događa ako skaliramo akciju za neki faktor λ . U CM akcija $S(x, \dot{x})$ prelazi u $S_\lambda(x, \dot{x}) = \lambda S(x, \dot{x})$, ali to vodi na istu fiziku. Naime, Euler-Lagrangeove (E-L)

jednadžbe [18] su

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\partial(\lambda L)}{\partial \dot{x}} \right] - \frac{\partial(\lambda L)}{\partial x} = 0 \quad (1.2.21)$$

$$\lambda \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} \right] = 0. \quad (1.2.22)$$

Zaključujemo da vrijednost od S nije bitna (nije fizikalna) jer su ekstremi od S i S_λ isti. Ekstremi akcije su stacionarne točke koje odgovaraju klasičnim putevima γ_c iz čega slijedi da i oni moraju ostati isti. U QM postavlja se prirodna granica na vrijednost akcije S . Za $S \gg \hbar$ fazni faktor $e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma]}$ uzrokuje destruktivnu interferenciju između različitih puteva što znači da se većina tih doprinosa poništi. Također, kao što smo već objasnili, za klasične puteve, za koje mora vrijediti $\frac{\delta S}{\delta \gamma} = 0$, faktor $e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma]}$ sporo oscilira, a to znači da za takve puteve doprinosi interferiraju konstruktivno. Zaključno, za $S \gg \hbar$, najveći doprinos kvantnoj amplitudi vjerojatnosti K daju klasični putevi ($S \gg \hbar \rightarrow \text{CM}$).

Kada je $S \sim \hbar$ (ili manji), faktor $e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma]}$ ne oscilira brzo ($S[\gamma]/\hbar \sim 1$) što znači da svi doprinosi puteva imaju značajan doprinos konačnoj amplitudi (nema destruktivne interferencije). Iz ovoga možemo zaključiti da čak i oni putevi koji su daleko od klasičnog puta daju svoj doprinos ukupnoj amplitudi $K \sim \sum e^{\frac{i}{\hbar} S[\gamma]}$ ($S \sim \hbar$ (ili manji) $\rightarrow \text{QM}$).

Pogledajmo zašto je ipak klasičan put posebniji od drugih. Cilj je pokazati da je najvažniji doprinos integrala po putevima upravo onaj od klasičnog puta. Uzmimo dva susjedna puta $x(t)$ i $x'(t) = x(t) + \eta(t)$, gdje je $\eta(t) \ll 1$. Razvoj u red od $S[x'(t)]$ daje

$$S[x'(t)] = S[x(t) + \eta(t)] = S[x(t)] + \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{\delta S}{\delta x(t)} \eta(t) + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (1.2.23)$$

Fazni faktori (doprinosi integralu po putu) su

$$x(t) \rightarrow \exp \left(\frac{iS[x(t)]}{\hbar} \right), \quad (1.2.24)$$

$$x'(t) \rightarrow \exp \left(\frac{iS[x'(t)]}{\hbar} \right) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S[x(t)] + \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{\delta S}{\delta x(t)} \eta(t) + \mathcal{O}(\eta^2) \right) \right] \quad (1.2.25)$$

pa je njihov kombinirani doprinos

$$\begin{aligned} A &= \exp \left(\frac{iS[x(t)]}{\hbar} \right) + \exp \left(\frac{iS[x(t)]}{\hbar} \right) \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S[x(t)] + \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{\delta S}{\delta x(t)} \eta(t) + \mathcal{O}(\eta^2) \right) \right] \\ &= \exp \left(\frac{iS[x(t)]}{\hbar} \right) \left\{ 1 + \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S[x(t)] + \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{\delta S}{\delta x(t)} \eta(t) + \mathcal{O}(\eta^2) \right) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Razlika u fazi ova dva doprinosa je

$$\Delta\phi = \frac{S[x'(t)] - S[x(t)]}{\hbar} = \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t)} \eta(t) + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (1.2.26)$$

Ako je $x(t) = x_c(t)$, tada je $\frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t)} \Big|_{x_c(t)} = 0$ te nestaje prvi član iz (1.2.26). Dobivamo da je razlika u fazi vrlo mala, tj. reda veličine $\mathcal{O}(\eta^2)$ što čini klasičan put dominantnim doprinosom u formalizmu integrala po putevima.

Poglavlje 2

Iz kanonske QM do integrala po putevima

2.1. Propagator

Propagator K je matrični element operatora evolucije $\hat{U}(t_f, t_i)$ u koordinatnoj reprezentaciji [19]

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) \equiv \left\langle x_f \left| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i)} \right| x_i \right\rangle, \quad (2.1.1)$$

gdje je \hat{H} hamiltonijan sistema, a $\hat{U}(t_f, t_i)$ je operator evolucije koji opisuje kako se kvantno stanje razvija tijekom vremena. Za vremenski neovisan hamiltonijan, operator vremenske evolucije dan je s

$$\hat{U}(t_f, t_i) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i)}. \quad (2.1.2)$$

Propagator K možemo interpretirati kao amplitudu vjerojatnosti da će čestica koja je na početku bila lokalizirana na položaju (x_i, t_i) biti nađena na položaju (x_f, t_f) . To možemo zapisati kao

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \left\langle x_f, t_f \left| x_i, t_i \right. \right\rangle, \quad (2.1.3)$$

gdje su $|x_i, t_i\rangle$ i $|x_f, t_f\rangle$ vektori stanja u Heisenbergovoj reprezentaciji [3].

U Heisenbergovoj reprezentaciji, vremenski ovisni vektori stanja definirani su kao

$$|x_i, t_i\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t_i} |x_i\rangle \quad \text{i} \quad |x_f, t_f\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t_f} |x_f\rangle. \quad (2.1.4)$$

Uvrštavanjem relacije kompletnosti

$$\mathbf{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x, t\rangle \langle x, t| \quad (2.1.5)$$

u izraz (2.1.3), dobivamo

$$\left\langle x_f, t_f \middle| x_i, t_i \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left\langle x_f, t_f \middle| x, t \right\rangle \left\langle x, t \middle| x_i, t_i \right\rangle, \quad (2.1.6)$$

ili

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx K(x_f, t_f; x, t) K(x, t; x_i, t_i), \quad (2.1.7)$$

gdje je $t \in [t_i, t_f]$. Zapis (2.1.7) koristimo kako bismo dodatno naglasili integraciju po svim među položajima x u trenutku t . Intuitivno, (2.1.7) vodi do formalizma po putevima, gdje propagator možemo interpretirati kao sumu po svim mogućim putevima od (x_i, t_i) do (x_f, t_f) .

Glavni izazov u tom formalizmu jest eksplisitno pokazati čemu je jednak propagator K iz (2.1.3), čime ćemo se baviti u nastavku.

2.2. Od Schrödingerovog formalizma do integrala po putevima

Richard P. Feynman prvi put je došao na ideju o integralima po putevima u svojoj disertaciji 1942. godine [20]. Detaljno je izložio tu ideju 1948. godine u svome radu "Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics" [8, 21].

Shvatio je da možemo podijeliti vrijeme na N jednakih infinitezimalnih intervala ϵ i gledati amplitudu za svaki infinitezimalni korak. Takvu situaciju promatramo na intervalu $[t_i, t_f]$, gdje su t_i i t_f početno i konačno vrijeme u kojemu se čestica nalazi, respektivno. Važno je naglasiti da je Feynman prepostavio da se čestica ne može vraćati natrag (npr. doći iz vremenskog trenutka t_2 u t_1).

Koristimo

$$\epsilon = t_{k+1} - t_k = \frac{t_f - t_i}{N}, \quad k = 0, \dots, N-1, \quad (2.2.1)$$

$$t_f \equiv t_N, \quad t_i \equiv t_0, \quad (2.2.2)$$

$$x_f \equiv x_N, \quad x_i \equiv x_0. \quad (2.2.3)$$

Nadalje, za svaki pomak ϵ ubacujemo relaciju kompletnosti u (2.1.3)

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x|, \quad (2.2.4)$$

što znači da imamo $(N-1)$ relacija kompletnosti pa pišemo

$$\left\langle x_f, t_f \middle| x_i, t_i \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{N-1} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \left\langle x_N, t_N \middle| x_{N-1}, t_{N-1} \right\rangle \cdots \left\langle x_1, t_1 \middle| x_0, t_0 \right\rangle \quad (2.2.5)$$

Svaki doprinos unutar integrala iz gornjeg izraza predstavlja propagator između susjednih položaja čestice [22]: $\langle x_{k+1}, t_{k+1} | x_k, t_k \rangle$. Izraz (2.2.5) možemo zapisati kompaktnije kao

$$\left\langle x_f, t_f | x_i, t_i \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right] \cdot \left[\prod_{k=0}^{N-1} \left\langle x_{k+1}, t_{k+1} | x_k, t_k \right\rangle \right]. \quad (2.2.6)$$

Da bismo pojednostavnili matematiku, razmotrimo situaciju kada $N \rightarrow \infty$. Možemo pisati $e^x = \underbrace{e^{\frac{x}{N}} \cdots e^{\frac{x}{N}}}_{N\text{-puta}} = \left(e^{\frac{x}{N}} \right)^N$. Za $\frac{x}{N} \ll 1$, koristeći Taylorov razvoj, slijedi

$$e^{\frac{x}{N}} = 1 + \frac{x}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right), \quad (2.2.7)$$

ili, kada eksponenciramo na N -tu,

$$e^x = \left(1 + \frac{x}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \right)^N. \quad (2.2.8)$$

L. Euler [23] prvi je definirao eksponencijalnu funkciju kao

$$e^x = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{N} \right)^N, \quad (2.2.9)$$

što nas usporedbom sa (2.2.8) navodi da možemo zanemariti doprinose $\mathcal{O}(1/N^2)$. U našem slučaju, x su operatori. Pretpostavimo da je hamiltonijan standardnog oblika

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (2.2.10)$$

Za neka dva operatora, \hat{A} i \hat{B} , općenito vrijedi $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} \neq e^{\hat{A}+\hat{B}}$ osim ako međusobno komutiraju ($[\hat{A}, \hat{B}] = 0$). U QM, operatori \hat{x} i \hat{p} međusobno ne komutiraju (određeni su relacijom $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$). Zbog toga koristimo Baker–Campbell–Hausdorff (BCH) formulu [24] (za dokaz vidjeti dodatak A)

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]+\frac{1}{12}([\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+[\hat{B},[\hat{B},\hat{A}]])+\cdots} \quad (2.2.11)$$

Primijenjeno na naš slučaj, operatori su $\hat{A} = -\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{T}$ i $\hat{B} = -\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{V}$, iz čega slijedi

$$e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}(\hat{T}+\hat{V})} = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{T}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{V}} + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (2.2.12)$$

Sljedeće što trebamo jest valjanost Trotterove formule [25]

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = \left(e^{\frac{\hat{A}}{N}+\frac{\hat{B}}{N}} \right)^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{\hat{A}}{N}} \cdot e^{\frac{\hat{B}}{N}} \right)^N, \quad (2.2.13)$$

gdje su $\hat{A} = \hat{T}$ i $\hat{B} = \hat{V}$. Za ograničene operatore dokaz je puno jednostavniji (koristi se Taylorov red za eksponencijalnu funkciju) dok za neograničene operatore dokaz zahtijeva sofisticiraniji pristup. Temelji se na poznavanju funkcionalne analize (vidjeti npr. [4, 26]). Uz navedene aproksimacije, vraćamo se na izraz (2.2.6) kako bismo odredili propagator

$\langle x_{k+1}, t_{k+1} | x_k, t_k \rangle$ [27]. Koristimo definiciju $\epsilon = t_{k+1} - t_k$, jednadžbe svojstvenih vrijednosti za operator i impuls

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle, \quad (2.2.14)$$

$$\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle, \quad (2.2.15)$$

relaciju za svojstvena stanja impulsa u koordinatnoj reprezentaciji (za dokaz vidjeti dodatak B)

$$\langle x | p_k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_k x} \quad (2.2.16)$$

te uvrstimo relaciju kompletnosti za impuls

$$\left\langle x_{k+1}, t_{k+1} | x_k, t_k \right\rangle = \quad (2.2.17)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dp_k \left\langle x_{k+1} \left| e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{p_k^2}{2m}} \right| p_k \right\rangle \left\langle p_k \left| e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(\hat{x}_k)} \right| x_k \right\rangle \quad (2.2.18)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dp_k e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{p_k^2}{2m}} \cdot e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(x_k)} \left\langle x_{k+1} \left| p_k \right\rangle \right\langle p_k \left| x_k \right\rangle \quad (2.2.19)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_k e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon H(p_k, x_k)} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p_k (x_{k+1} - x_k)} \quad (2.2.20)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_k \exp \left[-\frac{i\epsilon}{2m\hbar} p_k^2 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x_k) + \frac{i}{\hbar} p_k (x_{k+1} - x_k) \right] \quad (2.2.21)$$

$$= \frac{\exp \left[-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(x_k) \right]}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_k \exp \left[-\frac{i\epsilon}{2m\hbar} p_k^2 + \frac{i(x_{k+1} - x_k)}{\hbar} p_k \right]. \quad (2.2.22)$$

Integral iz (2.2.22) ima formu Gaussovog integrala (za dokaz vidjeti dodatak C)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2 + bx + c} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a} + c}, \quad \Re(a) > 0. \quad (2.2.23)$$

Nadalje, [27], identificiramo $a = \frac{i\epsilon}{2m\hbar}$, $b = \frac{i(x_{k+1} - x_k)}{\hbar}$ i $c = 0$ pa je

$$\left\langle x_{k+1}, t_{k+1} | x_k, t_k \right\rangle = \frac{\exp \left[-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(x_k) \right]}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\pi}{i\epsilon/2m\hbar}} \exp \left[-\frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{4\hbar^2 i\epsilon/2m\hbar} \right] \quad (2.2.24)$$

$$= \sqrt{\frac{m}{i\epsilon 2\pi\hbar}} \exp \left[-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(x_k) \right] \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{\epsilon} \right] \quad (2.2.25)$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \left[\frac{m}{2} \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{\epsilon^2} - V(x_k) \right] \right\}. \quad (2.2.26)$$

Kako bismo izračunali naš konačni propagator, vraćamo se na izraz (2.2.6) u koji uvršta-

vamo (2.2.26),

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \right] \left[\prod_{k=0}^{N-1} K(x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k) \right] \quad (2.2.27)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \right] \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \quad (2.2.28)$$

$$\cdot \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\epsilon} \right)^2 - V(x_k) \right] \right\} \quad (2.2.29)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \right] \exp \left[\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} L(x_k, \dot{x}_k) \right]. \quad (2.2.30)$$

Još jednom ćemo dobiveno rješenje za propagator napisati kao

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \quad (2.2.31)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \right] \left[\prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp \left(\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left(p_k \frac{x_{k+1} - x_k}{\epsilon} - H(p_k, x_k) \right) \right) \right] \quad (2.2.32)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \right] \exp \left[\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} L(x_k, \dot{x}_k) \right]. \quad (2.2.33)$$

Izraz (2.2.32) predstavlja prikaz integrala po putevima u faznom prostoru, a izraz (2.2.33) predstavlja prikaz integrala po putevima u koordinatnom prostoru.

- Produkt $\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k$ znači da integriramo po svim položajima, x_k , koji se nalaze između početnog položaja x_i te konačnog položaja x_f .
- Produkt $\prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_k}{2\pi\hbar}$ znači da integriramo po svim impulsima p_k između početnog i konačnog položaja. Valja primijetiti da je u izrazu (2.2.32) uvijek jedan integral više po impulsu nego po položaju, a razlog tome je što smo početni i krajnji položaj čestice fiksirali pa, prema tome, preko tih položaja ne vršimo integraciju.

U limesu $N \rightarrow \infty$ ($\epsilon \rightarrow 0$) takvi x_k definiraju kontinuiranu krivulju (kontinuiranom točkom). Krivulja nije nigdje diferencijabilna jer su uzastopne točke spojene pravcima. Zato točke x_k možemo interpretirati kao točke koje definiraju krivulju $x(t)$ sa zadanim rubnim uvjetima

$$x(t_i) = x_i \quad \text{i} \quad x(t_f) = x_f, \quad (2.2.34)$$

ili u formalnijem zapisu,

$$x_k = x(t_i + k\epsilon). \quad (2.2.35)$$

Analogno, u prostoru impulsa točke p_k definiraju krivulju $p(t)$ s

$$p(t_i) = p_0 \quad \text{i} \quad p(t_f) = p_f, \quad (2.2.36)$$

$$p_k = p(t_i + k\epsilon). \quad (2.2.37)$$

Uz takvu interpretaciju eksponent integranda iz (2.2.33) pišemo, uz $p_k \dot{x}_k - H(p_k, x_k) = L(p_k, x_k)$, kao

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \epsilon \sum_{k=0}^{N-1} \left[p_k \frac{x_{k+1} - x_k}{\epsilon} - H(p_k, x_k) \right] = \int_{t_i}^{t_f} dt [p(t) \dot{x}(t) - H(p(t), x(t))] \quad (2.2.38)$$

i

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \epsilon \sum_{k=0}^{N-1} L(x_k, \dot{x}_k) = \int_{t_i}^{t_f} dt L(x(t), \dot{x}(t)) = S[x(t), t_f, t_i]. \quad (2.2.39)$$

Sada možemo definirati integraciju po putevima (mjeru integracije) kao

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \right] = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)], \quad (2.2.40)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \right] = \int \mathcal{D}\left[\frac{p(t)}{2\pi\hbar}\right]. \quad (2.2.41)$$

Granice integracije za $p(t)$ nismo eksplisitno napisali jer, za razliku od integrala po položajima, u prostoru impulsa nemamo nikakva ograničenja na početne ili konačne vrijednosti. Također, možemo definirati normalizacijsku konstantu

$$\mathcal{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}}. \quad (2.2.42)$$

Konačno, možemo napisati

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] \int \mathcal{D}\left[\frac{p(t)}{2\pi\hbar}\right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt [p(t) \dot{x}(t) - H(p(t), x(t))]} \quad (2.2.43)$$

$$= \mathcal{N} \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}. \quad (2.2.44)$$

Izvod koji vodi na (2.2.44) ima određena ograničenja i svojstva koja valja prokomentirati.

- Izraz (2.2.43) vrijedi za općeniti hamiltonijan oblika

$$H(p, x) = T(p) + V(x), \quad (2.2.45)$$

ali također i za vremenski ovisne hamiltonijane. Razlog tome je što će forma integrala iz (2.2.43) ostati ista. Ako je $H = H(p, x, t)$, tada će eksponencijalni faktor biti oblika $[p(t) \dot{x}(t) - H(p(t), x(t), t)]$, ali integracija po vremenu $\int_{t_i}^{t_f} dt$ se izvodi na isti način kao i za vremenski neovisan hamiltonijan tako da će forma integrala po putu ostati ista uz dodavanje dodatnog parametra.

- Za prijelaz iz (2.2.43) u (2.2.44) koristimo već dokazan Gaussov integral (pošto $T = \frac{p^2}{2m}$ ima kvadratni oblik onda to nije problem). Nakon integracije, eksponencijalni faktor iz (2.2.43) postaje

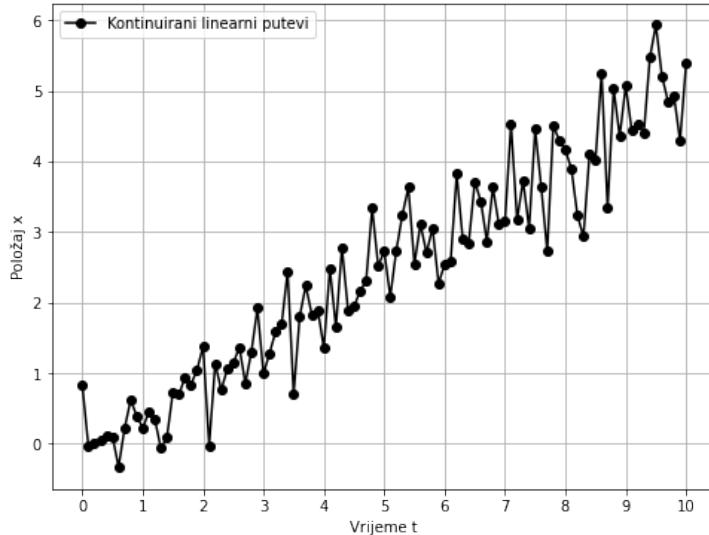
$$e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x(t)) \right]} = e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}, \quad (2.2.46)$$

čime dolazimo do izraza (2.2.44).

- Kao što smo već raniye objasnili, put čestice definiran je točkama x_k , gdje je $k = 0, 1, 2, \dots, N$. Općenito, za k -ti interval možemo, koristeći linearu interpolaciju, pisati

$$x(t) = x_k + \frac{t - t_k}{\epsilon} (x_{k+1} - x_k), \quad t \in [t_k, t_{k+1}]. \quad (2.2.47)$$

Pošto su sve točke x_k spojene pravcima, putevi su kontinuirani (slika 2.2.1), tj. $\forall t \in [t_i, t_f]$ postoji točno definirana vrijednost $x(t)$.



Slika 2.2.1. Prikaz kontinuiranih (neprekidnih) linearnih puteva $x(t)$ na proizvoljno danom vremenskom intervalu $t \in [0, 10]$.

Nakon što smo ustanovili da su putevi $x(t)$ kontinuirani (neprekidni), postavlja se pitanje jesu li diferencijabilni? Diferencijabilnost zahtijeva da izraz $\frac{x_{k+1} - x_k}{\epsilon}$ bude konačan za $\epsilon \rightarrow 0$. U formalizmu integrala po putevima, točke x_k i x_{k+1} gledamo kao međusobno nezavisne točke. Prema tome, nema razloga da razlika $x_{k+1} - x_k \rightarrow 0$ ako $\epsilon \rightarrow 0$ što vidimo i na slici 2.2.1. (npr. ako pogledamo dvije točke na intervalu $t \in [3, 4]$, vidimo da za $\epsilon \rightarrow 0$ oscilacije između x_k i x_{k+1} "divljaju", odnosno mogu biti velike).

Konačno, zaključujemo da su putevi $x(t)$ kontinuirani, ali ne i diferencijabilni.

- Normalizacijsku konstantu (2.2.42) možemo napisati kao

$$\mathcal{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{mN}{2\pi\hbar i (t_f - t_i)} \right]^{\frac{N}{2}}. \quad (2.2.48)$$

Iz takvog zapisa još je jasnije da ona teži ka beskonačno! Međutim, fizikalne veličine dane su preko omjera tako da nema praktičnih posljedica. Ako dio u zagradi iz (2.2.42) zapišemo na način

$$\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{N-1}{2}}, \quad (2.2.49)$$

slijedi

$$\begin{aligned} K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} dx_k \right] \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}. \end{aligned} \quad (2.2.50)$$

Takav zapis omogućuje nam definiranje nove mjere integracije kao

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} dx_k \right] = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \tilde{\mathcal{D}}[x(t)], \quad (2.2.51)$$

iz čega slijedi

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f - t_i)}} \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \tilde{\mathcal{D}}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}$$

(2.2.52)

Pojednostavnili smo izraz za propagator K tako što smo dio od \mathcal{N} "apsorbirali" u definiciju nove mjere integracije te ustanovili da jedini dio koji je bitan za normalizaciju integrala po putu jest $\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f - t_i)}}$. Primjećujemo da integrali po putevima predstavljaju formulaciju QM pomoću klasičnih veličina (primjerice akcije) te da nemamo operatore kao npr. u valnoj formulaciji QM.

U idućem primjeru ćemo izračunati propagator K za slobodnu česticu.

2.3. Propagator slobodne čestice

Na temelju ranije dobivenog izraza

$$\begin{aligned} K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \right] \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \\ &\cdot \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\epsilon} \right)^2 - V(x_k) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

izračunajmo propagator za slobodnu česticu.

Za slobodnu česticu potencijal je nula pa, uz korištenje $i = \frac{i^2}{i}$, pišemo

$$\begin{aligned}
K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots dx_{N-1} \exp \left[\frac{i^2}{i} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{2\hbar\epsilon} \right] \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots dx_{N-1} \\
&\quad \cdot \exp \left[- \sum_{k=0}^{N-1} \left(\sqrt{\frac{m}{2\hbar i\epsilon}} x_{k+1} - \sqrt{\frac{m}{2\hbar i\epsilon}} x_k \right)^2 \right]. \tag{2.3.2}
\end{aligned}$$

Nadalje, napravimo supstituciju $\xi_k = \sqrt{\frac{m}{2\hbar i\epsilon}} x_k \Rightarrow d\xi_k = \sqrt{\frac{m}{2\hbar i\epsilon}} dx_k \Rightarrow dx_k = \sqrt{\frac{2\hbar i\epsilon}{m}} \xi_k$, pa (2.3.2) postaje

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \cdots d\xi_{N-1} \tag{2.3.3}$$

$$\underbrace{\cdot \left[\frac{2\hbar i\epsilon}{m} \right]^{1/2} \cdots \left[\frac{2\hbar i\epsilon}{m} \right]^{1/2}}_{N-1 \text{ puta}} \exp \left[- \sum_{k=0}^{N-1} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right] \tag{2.3.4}$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \cdot \left(\frac{2\hbar i\epsilon}{m} \right)^{\frac{N-1}{2}} \tag{2.3.5}$$

$$\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \cdots d\xi_{N-1} \exp \left[- \sum_{k=0}^{N-1} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right]. \tag{2.3.6}$$

Članove iz (2.3.5) možemo zapisati kao

$$\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \cdot \left(\frac{2\hbar i\epsilon}{m} \right)^{\frac{N-1}{2}} = \pi^{-\frac{N}{2}} \underbrace{\left(\frac{m}{2\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \cdot \left(\frac{m}{2\hbar i\epsilon} \right)^{-\frac{N}{2}}}_{1} \cdot \left(\frac{m}{2i\hbar\epsilon} \right)^{1/2} \tag{2.3.7}$$

$$= \pi^{-\frac{N-1}{2}} \cdot \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}}, \tag{2.3.8}$$

pa dobivamo

$$\begin{aligned}
K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \pi^{-\frac{N-1}{2}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \cdots d\xi_{N-1} \exp \left[- \sum_{k=0}^{N-1} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right]. \tag{2.3.9}
\end{aligned}$$

Krenimo redom, želimo izvršiti integraciju preko ξ_1 . Koristeći svojstva eksponencijalne

funkcije, integral iz (2.3.9) možemo zapisati kao

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \cdots d\xi_{N-1} \exp \left[- \sum_{k=0}^{N-1} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right] = \\
& = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left[- \sum_{k=0}^1 (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right] \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \cdots d\xi_{N-1} \exp \left[- \sum_{k=2}^{N-1} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right] \\
& = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left[(\xi_1 - \xi_0)^2 + (\xi_2 - \xi_1)^2 \right] \right\} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \cdots d\xi_{N-1} \exp \left[- \sum_{k=2}^{N-1} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right],
\end{aligned}$$

što uvrstimo u (2.3.9)

$$\begin{aligned}
K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \pi^{-\frac{N-1}{2}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \cdots d\xi_{N-1} \exp \left[- \sum_{k=2}^{N-1} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right] \\
&\quad \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left[(\xi_1 - \xi_0)^2 + (\xi_2 - \xi_1)^2 \right] \right\}. \tag{2.3.10}
\end{aligned}$$

Uvedimo sljedeću pokratu za traženi integral

$$I_1 \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left[(\xi_1 - \xi_0)^2 + (\xi_2 - \xi_1)^2 \right] \right\} \tag{2.3.11}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left(\xi_1^2 - 2\xi_0\xi_1 + \xi_0^2 + \xi_2^2 - 2\xi_1\xi_2 + \xi_1^2 \right) \right\} \tag{2.3.12}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left[2\xi_1^2 - 2\xi_1(\xi_0 + \xi_2) + \xi_0^2 + \xi_2^2 \right] \right\} \tag{2.3.13}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left[2 \left(\xi_1^2 - \xi_1(\xi_0 + \xi_2) + \frac{1}{2}\xi_0^2 + \frac{1}{2}\xi_2^2 \right) \right] \right\}. \tag{2.3.14}$$

S ciljem izvlačenja konstante ispred integrala dodajemo članove $+\frac{1}{4}(\xi_0 + \xi_2)^2 - \frac{1}{4}(\xi_0 + \xi_2)^2$ u (2.3.14)

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left[2 \left(\xi_1^2 - 2\xi_1 \cdot \frac{1}{2}(\xi_0 + \xi_2) + \frac{1}{4}(\xi_0 + \xi_2)^2 - \frac{1}{4}(\xi_0 + \xi_2)^2 \right) + \xi_0^2 + \xi_2^2 \right] \right\} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left[2 \left(\xi_1 - \frac{1}{2}(\xi_0 + \xi_2) \right)^2 - \frac{1}{2}(\xi_0 + \xi_2)^2 + \xi_0^2 + \xi_2^2 \right] \right\} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left[2 \left(\xi_1 - \frac{\xi_0 + \xi_2}{2} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\xi_0^2 + 2\xi_0\xi_2 + \xi_2^2 \right) + \xi_0^2 + \xi_2^2 \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left[2 \left(\xi_1 - \frac{\xi_0 + \xi_2}{2} \right)^2 - \frac{1}{2} \xi_0^2 - \xi_0 \xi_2 - \frac{1}{2} \xi_2^2 + \xi_0^2 + \xi_2^2 \right] \right\} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left[2 \left(\xi_1 - \frac{\xi_0 + \xi_2}{2} \right)^2 + \frac{1}{2} \xi_0^2 - \xi_0 \xi_2 + \frac{1}{2} \xi_2^2 \right] \right\} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left\{ - \left[2 \left(\xi_1 - \frac{\xi_0 + \xi_2}{2} \right)^2 + \frac{1}{2} (\xi_2 - \xi_0)^2 \right] \right\} \\
&= \exp \left[-\frac{1}{2} (\xi_2 - \xi_0)^2 \right] \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1 \exp \left[-2 \left(\xi_1 - \frac{\xi_0 + \xi_2}{2} \right)^2 \right].
\end{aligned}$$

Korištenjem supstitucije $u_1 \equiv \xi_1 - \frac{\xi_0 + \xi_2}{2} \Rightarrow du_1 = d\xi_1$ i rezultata $\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$, dobivamo rješenje integrala (2.3.11)

$$I_1 = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\xi_2 - \xi_0)^2 \right]. \quad (2.3.15)$$

Uvrštavanjem (2.3.15) u (2.3.10), dobivamo

$$\begin{aligned}
K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \pi^{-\frac{N-1}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \\
&\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \cdots d\xi_{N-1} \exp \left[-\frac{1}{2} (\xi_2 - \xi_0)^2 - \sum_{k=2}^{N-1} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right]. \quad (2.3.16)
\end{aligned}$$

Nastavljamo postupak dalje tako da integriramo preko ξ_2 . Izraz (2.3.16) zapišemo kao

$$\begin{aligned}
K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \pi^{-\frac{N-1}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_3 \cdots d\xi_{N-1} \exp \left[-\sum_{k=3}^{N-1} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right] \\
&\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \exp \left\{ - \left[\frac{1}{2} (\xi_2 - \xi_0)^2 + (\xi_3 - \xi_2)^2 \right] \right\}. \quad (2.3.17)
\end{aligned}$$

Rješavamo integral po ξ_2 . Uvedimo pokratku

$$I_2 \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \exp \left\{ - \left[\frac{1}{2} (\xi_2 - \xi_0)^2 + (\xi_3 - \xi_2)^2 \right] \right\}. \quad (2.3.18)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \exp \left\{ - \left[\frac{3}{2} \xi_2^2 - \xi_2 (\xi_0 + 2\xi_3) + \frac{1}{2} \xi_0^2 + \xi_3^2 \right] \right\} \quad (2.3.19)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \exp \left\{ - \left[\frac{3}{2} \left(\xi_2^2 - 2\xi_2 \cdot \frac{1}{3} (\xi_0 + 2\xi_3) \right) + \frac{1}{2} \xi_0^2 + \xi_3^2 \right] \right\}. \quad (2.3.20)$$

S ciljem izvlačenja konstante ispred integrala dodajemo članove $+\frac{1}{9} (\xi_0 + 2\xi_3)^2 - \frac{1}{9} (\xi_0 + 2\xi_3)^2$

u (2.3.20)

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \exp \left\{ - \left[\frac{3}{2} \left(\xi_2^2 - 2\xi_2 \cdot \frac{1}{3} (\xi_0 + 2\xi_3) + \frac{1}{9} (\xi_0 + 2\xi_3)^2 - \frac{1}{9} (\xi_0 + 2\xi_3) \right) + \frac{1}{2} \xi_0^2 + \xi_3^2 \right] \right\} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \exp \left\{ - \left[\frac{3}{2} \left(\xi_2 - \frac{\xi_0 + 2\xi_3}{3} \right)^2 - \frac{1}{6} (\xi_0 + 2\xi_3)^2 + \frac{1}{2} \xi_0^2 + \xi_3^2 \right] \right\} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \exp \left\{ - \left[\frac{3}{2} \left(\xi_2 - \frac{\xi_0 + 2\xi_3}{3} \right)^2 - \frac{1}{6} \xi_0^2 - \frac{2}{3} \xi_0 \xi_3 - \frac{2}{3} \xi_3^2 + \frac{1}{2} \xi_0^2 + \xi_3^2 \right] \right\} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \exp \left\{ - \left[\frac{3}{2} \left(\xi_2 - \frac{\xi_0 + 2\xi_3}{3} \right)^2 + \frac{1}{3} \xi_0^2 - \frac{2}{3} \xi_0 \xi_3 + \frac{1}{3} \xi_3^2 \right] \right\} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2 \exp \left\{ - \left[\frac{3}{2} \left(\xi_2 - \frac{\xi_0 + 2\xi_3}{3} \right)^2 + \frac{1}{3} (\xi_3 - \xi_0)^2 \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Korištenjem supstitucije $u_2 \equiv \xi_2 - \frac{\xi_0 + 2\xi_3}{3} \Rightarrow du_2 = d\xi_2$ i rezultata $\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$, dobivamo rješenje integrala (2.3.18)

$$I_2 = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \exp \left[-\frac{1}{3} (\xi_3 - \xi_0)^2 \right]. \quad (2.3.21)$$

Uvrštavanjem (2.3.21) u (2.3.17), uz $\sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{2\pi}{3}} = \sqrt{\frac{\pi^2}{3}}$, slijedi

$$\begin{aligned}
K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \pi^{-\frac{N-1}{2}} \sqrt{\frac{\pi^2}{3}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \\
&\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_3 \cdots d\xi_{N-1} \exp \left[-\frac{1}{3} (\xi_3 - \xi_0)^2 - \sum_{k=3}^{N-1} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right].
\end{aligned} \quad (2.3.22)$$

Možemo ponoviti isti postupak i za ξ_3 te dobiti

$$\begin{aligned}
K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \pi^{-\frac{N-1}{2}} \sqrt{\frac{\pi^3}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \\
&\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_4 \cdots d\xi_{N-1} \exp \left[-\frac{1}{4} (\xi_4 - \xi_0)^2 - \sum_{k=4}^{N-1} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 \right].
\end{aligned} \quad (2.3.23)$$

Nakon ponavljanja postupka, izdvojimo još rezultat za ξ_{N-2} ,

$$\begin{aligned}
K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \pi^{-\frac{N-1}{2}} \sqrt{\frac{\pi^{N-2}}{N-1}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \\
&\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_{N-1} \exp \left[-\frac{1}{N-1} (\xi_{N-1} - \xi_0)^2 - (\xi_N - \xi_{N-1})^2 \right].
\end{aligned} \quad (2.3.24)$$

Rješenje zadnjeg, $(N - 1)$ -integrala iz (2.3.24) je

$$I_{N-1} = \sqrt{\frac{(N-1)\pi}{N}} \exp\left[-\frac{1}{N}(\xi_N - \xi_0)^2\right]. \quad (2.3.25)$$

Pojednostavnimo sljedeće korijene

$$\sqrt{\frac{\pi^{N-2}}{N-1}} \cdot \sqrt{\frac{(N-1)\pi}{N}} = \sqrt{\frac{\pi^{N-2}}{(N-1)}} \cdot \frac{(N-1)\pi}{N} = \pi^{\frac{N-1}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad (2.3.26)$$

pa (2.3.24) postaje

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon N}} \exp\left[-\frac{1}{N}(\xi_N - \xi_0)^2\right]. \quad (2.3.27)$$

Vraćanjem natrag u supstituciju $\xi_k = \sqrt{\frac{m}{2\hbar i\epsilon}}x_k$, dobivamo

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon N}} \exp\left[-\frac{1}{N}\left(\sqrt{\frac{m}{2\hbar i\epsilon}}x_N - \sqrt{\frac{m}{2\hbar i\epsilon}}x_0\right)^2\right] \quad (2.3.28)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon N}} \exp\left[-\frac{1}{N} \frac{m}{2\pi i\epsilon} (x_N - x_0)^2\right] \quad (2.3.29)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon N}} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar i\epsilon N} (x_N - x_0)^2\right]. \quad (2.3.30)$$

Proglasili smo $x_N = x_f$, $x_0 = x_i$, $\epsilon = \frac{t_f - t_i}{N} \Rightarrow \epsilon N = t_f - t_i$ što uvrštavanjem u (2.3.30) daje konačan izraz za **propagator slobodne čestice**,

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t_f - t_i)}} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar i(t_f - t_i)} (x_f - x_i)^2\right]. \quad (2.3.31)$$

U nastavku ćemo vidjeti kako iz integrala po putevima doći do Schrödingerovog formalizma koristeći valne funkcije [9], a zatim koristeći varijacijski račun [28].

2.4. Od integrala po putevima do Schrödingerovog formalizma

2.4.1. Izvod pomoću kvantnih veličina

Sljedeći izvod baziran je na [9]. Valnu funkciju, koja ovisi o položaju x i vremenu t , možemo zapisati kao

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle. \quad (2.4.1)$$

Ako se stanje $|\psi(t)\rangle$ promjeni u neko drugo stanje $|\psi(t + \epsilon)\rangle$ tada, koristeći operator vremenske evolucije, pišemo $|\psi(t + \epsilon)\rangle = e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{H}}|\psi(t)\rangle$ pa (2.4.1) postaje

$$\psi(x, t + \epsilon) = \left\langle x \left| e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{H}} \right| \psi(t) \right\rangle, \quad (2.4.2)$$

gdje je $\epsilon \ll 1$. Uvrštavanjem jediničnog operatora, $I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 |x_0\rangle \langle x_0|$, dobivamo

$$\psi(x, t + \epsilon) = \left\langle x \left| e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{H}} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |x_0\rangle \langle x_0| dx_0 \right) \right| \psi(t) \right\rangle \quad (2.4.3)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \left\langle x \left| e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{H}} \right| x_0 \right\rangle \left\langle x_0 \right| \psi(t) \right\rangle \quad (2.4.4)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \left\langle x \left| e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{H}} \right| x_0 \right\rangle \psi(x_0, t). \quad (2.4.5)$$

Vjerojatnost prijelaza $(x_0, t) \rightarrow (x, t + \epsilon)$, tj. propagator se definira kao

$$K(x, t + \epsilon; x_0, t) = \left\langle x \left| e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{H}} \right| x_0 \right\rangle, \quad (2.4.6)$$

pa je

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 K(x, t + \epsilon; x_0, t) \psi(x_0, t). \quad (2.4.7)$$

Propagator također možemo pisati (što smo eksplicitno dokazali u prethodnom poglavlju) kao

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \right] \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \cdot \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\epsilon} \right)^2 - V(x_k) \right] \right\}. \quad (2.4.8)$$

U našem slučaju, gdje gledamo infinitezimalnu vremensku evoluciju $(x, t + \epsilon; x_0, t)$, kinetički dio je $\frac{m}{2} \left(\frac{x-x_0}{\epsilon} \right)^2$, a normalizacijski faktor je $\left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{1/2}$. Potencijalni dio $-\epsilon V(x_k)$, za mali ϵ , možemo aproksimirati kao srednju vrijednost između točaka x i x_0 jer su međusobno vrlo blizu. Formalno, potencijal $V(x_k)$ možemo razviti u Taylorov red oko (srednje)

točke $\frac{x+x_0}{2}$ [29] kao

$$V(x_k) = V\left(\frac{x+x_0}{2}\right) + V'\left(\frac{x+x_0}{2}\right)\delta x + \frac{1}{2}V''\left(\frac{x+x_0}{2}\right)(\delta x)^2 + \mathcal{O}((\delta x)^3), \quad (2.4.9)$$

gdje je $\delta x = \frac{x-x_0}{2}$. Možemo aproksimirati $V(x_k) \approx V\left(\frac{x+x_0}{2}\right)$ te izraz (2.4.8) zapisati kao [30]

$$K(x, t + \epsilon; x_0, t) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m(x-x_0)^2}{2\epsilon} - \epsilon V\left(\frac{x+x_0}{2}\right)\right]\right\}, \quad (2.4.10)$$

što uvrštavanjem u (2.4.7) daje

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \epsilon) &= \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \exp\left[\frac{im(x-x_0)^2}{2\epsilon\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\epsilon}{\hbar}V\left(\frac{x+x_0}{2}\right)\right] \psi(x_0, t). \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

Pojednostavljimo (2.4.11) uz supsticiju $\eta \equiv x_0 - x \Rightarrow d\eta = dx_0$. Također, $(x-x_0)^2 = (x_0-x)^2 = \eta^2$, $\frac{x+x_0}{2} = \frac{x+x+\eta}{2} = x + \frac{\eta}{2}$,

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \epsilon) &= \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right] \exp\left[-\frac{i\epsilon}{\hbar}V\left(x + \frac{\eta}{2}\right)\right] \psi(x + \eta, t). \end{aligned} \quad (2.4.12)$$

Kako je $\eta \ll 1$ i $\epsilon \ll 1$ mogli smo pisati $x \pm \frac{\eta}{2}$ i $x \pm \eta$ (odabrali smo +). Nadalje, Taylorov red za $\psi(x + \eta, t)$ oko $\eta = 0$ daje

$$\psi(x + \eta, t) = \psi(x, t) + \eta \frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\eta^3). \quad (2.4.13)$$

Koristeći $V\left(x + \frac{\eta}{2}\right) \approx V(x)$, napravimo razvoj eksponencijalne funkcije iz (2.4.12) oko $\epsilon = 0$,

$$\exp\left[-\frac{i\epsilon}{\hbar}V\left(x + \frac{\eta}{2}\right)\right] = 1 + \left(-\frac{i\epsilon}{\hbar}V\left(x + \frac{\eta}{2}\right)\right) + \mathcal{O}\left[\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar}V\left(x + \frac{\eta}{2}\right)\right)^2\right] \quad (2.4.14)$$

$$\cong 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}V\left(x + \frac{\eta}{2}\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (2.4.15)$$

$$\cong 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}V(x). \quad (2.4.16)$$

Uvrstimo (2.4.13) i (2.4.16) u (2.4.12)

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \epsilon) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}V(x)\right) \\ &\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right) \left[\psi(x, t) + \eta \frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) \right) \\
&\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \left[\psi(x, t) \exp \left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right) + \eta \frac{\partial\psi}{\partial x} \exp \left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right) + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \exp \left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right) \right]. \tag{2.4.17}
\end{aligned}$$

Preostaje riješiti tri sljedeća Gaussova integrala [31, 32] iz (2.4.17)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp \left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp \left(-\frac{m\eta^2}{2i\hbar\epsilon} \right), \tag{2.4.18}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta \exp \left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta \exp \left(-\frac{m\eta^2}{2i\hbar\epsilon} \right), \tag{2.4.19}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta^2 \exp \left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta^2 \exp \left(-\frac{m\eta^2}{2i\hbar\epsilon} \right). \tag{2.4.20}$$

Uvedimo pokratu $a \equiv \frac{m}{2i\hbar\epsilon}$ te krenimo redom sa rješavanjem. Integral (2.4.18) postaje

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp \left(-\frac{m\eta^2}{2i\hbar\epsilon} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp(-a\eta^2) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar i\epsilon}{m}}, \tag{2.4.21}$$

gdje smo iskoristili rezultat $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$.

Integral (2.4.19) sadrži umnožak neparne, η , i parne, $\exp(-a\eta^2)$, funkcije, a produkt neparne i parne funkcije je neparna funkcija. Pošto integriramo od $-\infty$ do $+\infty$ taj integral će biti nula,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta \exp(-a\eta^2) = 0. \tag{2.4.22}$$

Riješimo preostali integral (2.4.20),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta^2 \exp \left(-\frac{m\eta^2}{2i\hbar\epsilon} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta^2 \exp(-a\eta^2) = - \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \frac{\partial}{\partial a} \exp(-a\eta^2) \tag{2.4.23}$$

$$= - \frac{\partial}{\partial a} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp(-a\eta^2) \stackrel{(2.4.21)}{=} - \frac{\partial}{\partial a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{2.4.24}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{a^{3/2}} = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} = \frac{i\hbar\epsilon}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar i\epsilon}{m}}. \tag{2.4.25}$$

Uvrstimo (2.4.21), (2.4.22) i (2.4.25) u (2.4.17)

$$\begin{aligned}\psi(x, t + \epsilon) &= \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) \right) \cdot \left[\psi(x, t) \sqrt{\frac{2\pi\hbar i\epsilon}{m}} + 0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{i\hbar\epsilon}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar i\epsilon}{m}} \right].\end{aligned}\quad (2.4.26)$$

Zanemarivši doprinose $\mathcal{O}(\epsilon^2)$, dobivamo

$$\psi(x, t + \epsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{1/2} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{-1/2} \left[\psi(x, t) + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) \psi(x, t) \right], \quad (2.4.27)$$

iz čega slijedi

$$\psi(x, t + \epsilon) = \left[\psi(x, t) + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) \psi(x, t) \right]. \quad (2.4.28)$$

Ako (2.4.28) napišemo na način

$$\frac{\psi(x, t + \epsilon) - \psi(x, t)}{\epsilon} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V(x) \psi(x, t), \quad (2.4.29)$$

tada prepoznajemo definiciju parcijalne derivacije po vremenu [33]

$$\frac{\psi(x, t + \epsilon) - \psi(x, t)}{\epsilon} \equiv \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t). \quad (2.4.30)$$

Dodatno, ako pomnožimo (2.4.29) sa faktorom $i\hbar$ dobivamo Schrödingerovu jednadžbu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t).$$

(2.4.31)

U nastavku ćemo vidjeti još jedan izvod Schrödingerove jednadžbe, ali ovaj put koristeći varijacijski račun.

2.4.2. Izvod pomoću klasičnih veličina

Integral po putu zadani je pomoću klasičnih funkcija i funkcionala [28]. Pogledajmo kako iz klasičnih manipulacija integrala po putu slijede ne trivijalni QM identiteti te, u konačnici, Schrödingerova jednadžba. Neka je $\mathcal{D}[x(t)]$ mjera integracije koju eksplicitno možemo napisati kao

$$\mathcal{D}[x(t)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^N \frac{dx(t_k)}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon}}. \quad (2.4.32)$$

Pogledajmo kako se ona transformira pod translacijom $x(t) \rightarrow x(t) + y(t)$, gdje za $y(t)$ vrijede rubni uvjeti $y(t_i) = y(t_f) = 0$. Iz (2.4.32) slijedi $d(x(t_k) + y(t_k)) = dx(t_k)$, iz čega je $\mathcal{D}[x(t) + y(t)] = \mathcal{D}[x(t)]$. Mjera integracije invarijantna je na ukupni pomak (translaciju). To smo mogli napraviti jer y gledamo kao "fiksnu funkciju". Integral po putu

definiramo kao

$$\boxed{\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]},} \quad (2.4.33)$$

što možemo pisati, koristeći invarijantnost mjere pod translacijama, kao

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)+y(t)]}. \quad (2.4.34)$$

Ako napravimo pretpostavku $y(t) = \delta x(t)$ tada gledamo translaciju $x(t) \rightarrow x(t) + \delta x(t)$ pa je akcija

$$S[x(t) + \delta x(t)] = S[x(t)] + \underbrace{\int_{t_i}^{t_f} dt \frac{\delta S}{\delta x(t)} \delta x(t)}_{\delta S[x]} + \mathcal{O}((\delta x)^2) \quad (2.4.35)$$

$$= S[x(t)] + \delta S[x] + \mathcal{O}((\delta x)^2). \quad (2.4.36)$$

Zanemarivši $\mathcal{O}((\delta x)^2)$, izraz (2.4.34) postaje

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} (S[x(t)] + \delta S[x])}. \quad (2.4.37)$$

Za $\delta S[x] \ll 1$ zadržat ćemo samo linearne doprinose u $e^{\frac{i}{\hbar} \delta S[x]} \approx 1 + \frac{i \delta S[x]}{\hbar}$ pa je

$$e^{\frac{i}{\hbar} (S[x(t)] + \delta S[x])} \approx e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \left(1 + \frac{i \delta S[x]}{\hbar} \right), \quad (2.4.38)$$

što uvrstimo u (2.4.37)

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \left(1 + \frac{i \delta S[x]}{\hbar} \right) \quad (2.4.39)$$

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \left(1 + \frac{i \delta S[x]}{\hbar} \right) - \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = 0 \quad (2.4.40)$$

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] \left(e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \left(1 + \frac{i \delta S[x]}{\hbar} \right) - e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \right) = 0 \quad (2.4.41)$$

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \left(\frac{i \delta S[x]}{\hbar} \right) = 0. \quad (2.4.42)$$

Ako stavimo faktor $\frac{i}{\hbar} \neq 0$ ispred integrala (2.4.42), slijedi

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \delta S[x] = 0 \quad (2.4.43)$$

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] \delta S[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = 0. \quad (2.4.44)$$

Koristeći činjenicu da je $\delta S[x(t)] = \frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t)} \delta x(t)$, izraz (2.4.44) postaje

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] \frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t)} \delta x(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = 0, \quad (2.4.45)$$

a budući da $\delta x(t)$ ne mora biti nula, slijedi

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] \frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t)} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = 0. \quad (2.4.46)$$

Nadalje, koristeći lančano pravilo za funkcionalnu derivaciju, slijedi

$$\frac{\delta}{\delta x(t)} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \cdot \frac{\delta}{\delta x(t)} \left(\frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right) = e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \cdot \frac{i}{\hbar} \frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t)} \quad (2.4.47)$$

$$= \left(\frac{i}{\hbar} \frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t)} \right) e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}, \quad (2.4.48)$$

što možemo zapisati kao

$$\frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t)} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta x(t)} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}. \quad (2.4.49)$$

Uvrštavanjem (2.4.49) u (2.4.46) te izbacivanje faktora $\frac{\hbar}{i}$ ispred integrala, dobivamo

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] \frac{\delta}{\delta x(t)} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = 0. \quad (2.4.50)$$

Pokazali smo da integral totalne derivacije preko cijelog prostora (funkcionalnih) puteva ne daje nikakav doprinos (rubni doprinosi se ponište). Općenito, to možemo napisati kao

$\text{Integral po putu totalne derivacije} = 0.$

(2.4.51)

Nadalje, budući da varijacije djelovanja, uz $\delta x(t)$, daju E-L jednadžbe,

$$\delta S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \delta x(t), \quad (2.4.52)$$

i budući da (2.4.50) vrijedi $\forall \delta x(t)$, možemo pisati

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] \left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = 0. \quad (2.4.53)$$

Izraz (2.4.53) pokazuje da, nakon što uzmemo u obzir sve moguće puteve čestice, kvantni doprinosi (kvantne fluktuacije) ukupnoj amplitudi vjerojatnosti ne narušavaju klasične zakone gibanja, odnosno integral preko svih mogućih puteva zadovoljava E-L jednadžbe. Pogledajmo kakve veze (2.4.53) ima veze s [Ehrenfestovim teoremom](#) [34], koji kaže da

očekivane vrijednosti položaja i impulsa slijede klasične jednadžbe gibanja i to kroz

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}, \quad (2.4.54)$$

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\left\langle\frac{\partial V(\hat{x})}{\partial\hat{x}}\right\rangle. \quad (2.4.55)$$

Cilj je, koristeći integrale po putevima, pokazati kako izraz (2.4.53) dovodi do rezultata (2.4.54, 2.4.55). Općenito (vidjeti npr. [19, 35]) za neki operator \hat{A} vrijedi da je njegova očekivana vrijednost

$$\langle\hat{A}\rangle = \frac{\int \mathcal{D}[x(t)] A e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}}{\int \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}}. \quad (2.4.56)$$

Ono što nas zanima su očekivane vrijednosti položaja i impulsa. Za položaj imamo

$$\langle x(t)\rangle = \frac{\int \mathcal{D}[x(t)] x(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}}{\int \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}}, \quad (2.4.57)$$

što kada deriviramo po vremenu daje

$$\frac{d}{dt}\langle x(t)\rangle = \frac{d}{dt}\left(\frac{\int \mathcal{D}[x(t)] x(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}}{\int \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}}\right). \quad (2.4.58)$$

Nakon što u (2.4.58) primijenimo lančano pravilo za derivaciju kvocijenta, dobivamo

$$\frac{d}{dt}\langle x(t)\rangle = \langle\dot{x}(t)\rangle + \text{dodatni članovi}, \quad (2.4.59)$$

gdje je

$$\langle\dot{x}(t)\rangle = \frac{\int \mathcal{D}[x(t)] \dot{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[(t)]}}{\int \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar}S[(t)]}}. \quad (2.4.60)$$

Slično za impuls,

$$\langle p(t)\rangle = \frac{\int \mathcal{D}[x(t)] p(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}}{\int \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}}. \quad (2.4.61)$$

Ako iskoristimo $p(t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$, tada (2.4.61) postaje

$$\langle p(t)\rangle = \frac{\int \mathcal{D}[x(t)] m\dot{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}}{\int \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}}, \quad (2.4.62)$$

što kada usporedimo sa (2.4.60) daje

$$\frac{d}{dt}\langle x(t)\rangle = \left\langle \frac{p(t)}{m} \right\rangle, \quad (2.4.63)$$

čime smo pokazali (2.4.54). Očekivanu vrijednost impulsa $\frac{d}{dt}\langle p(t)\rangle = \frac{d}{dt}\left\langle\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right\rangle$ dobijemo iz E-L jednadžbi [36]

$$\frac{d}{dt}\left\langle\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right\rangle = \left\langle\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\right\rangle = \left\langle\frac{\partial L}{\partial x}\right\rangle, \quad (2.4.64)$$

iz čega slijedi

$$\frac{d}{dt} \left\langle \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right\rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle, \quad (2.4.65)$$

čime smo pokazali (2.4.55). Pokazali smo, koristeći integral po putu, da očekivane veličine u QM prate klasične jednadžbe gibanja. Općenito, možemo reći da jednadžba (2.4.53) predstavlja Ehrenfestov teorem kroz formalizam integrala po putu.

Razmotrimo sada varijaciju puta $\delta x(t)$ definiranu tako da fiksira početnu točku, ali ne i krajnju točku, tj. $\delta x(t_i) = 0$ (fiksna točka) i $\delta x(t_f) \neq 0$ (slobodna točka). Nadalje, računamo varijaciju akcije $\delta S[x(t)]$ definiranu kao $\delta S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \delta L dt$, gdje je $\delta L = \frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x}$ pa pišemo

$$\delta S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \right) dt. \quad (2.4.66)$$

Parcijalna integracija drugog člana iz (2.4.66), uz $u(t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ i $v(t) = \delta x(t)$, daje

$$\int_{t_i}^{t_f} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \frac{d}{dt} \delta x dt = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \Big|_{t_i}^{t_f} - \int_{t_i}^{t_f} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \delta x dt, \quad (2.4.67)$$

što uvrstimo u (2.4.66)

$$\delta S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \frac{\partial L}{\partial x} \delta x dt + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \Big|_{t_i}^{t_f} - \int_{t_i}^{t_f} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \delta x dt \quad (2.4.68)$$

$$= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \Big|_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \right] \delta x dt \quad (2.4.69)$$

$$= \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(t_f) \delta x(t_f)}_{p(t_f) \equiv p_f} + \underbrace{\int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \right] \delta x dt}_{=0 \text{ za } x=x_c} \quad (2.4.70)$$

$$= p_f \delta x_f. \quad (2.4.71)$$

Varijaciju akcije možemo pisati kao

$$\delta S[x(t)] = \frac{\partial S}{\partial x_f} \delta x_f, \quad (2.4.72)$$

što uspoređivanjem s (2.4.71) daje

$$p_f = \frac{\partial S[x_c]}{\partial x_f}. \quad (2.4.73)$$

Rezultat kaže da kanonski impuls, u nekom konačnom vremenu t_f , ovisi o promjeni akcije po konačnom položaju x_f i to za onaj put koji minimizira akciju, a to je klasični put.

Jednadžba (2.4.73) naziva se Hamilton-Jacobijeva jednadžba [37, 38].

Nadalje, pogledajmo kako se propagator mijenja u odnosu na konačan položaj x_f ,

$$\frac{\partial}{\partial x_f} \left\langle x_f, t_f \mid x_i, t_i \right\rangle. \quad (2.4.74)$$

Koristeći definiciju integrala po putu,

$$\frac{\partial}{\partial x_f} \left\langle x_f, t_f \mid x_i, t_i \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x_f} \left(\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \right), \quad (2.4.75)$$

možemo pisati

$$\frac{\partial}{\partial x_f} \left(\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \right) = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] \frac{\partial}{\partial x_f} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \quad (2.4.76)$$

$$= \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \cdot \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S[x(t)]}{\partial x_f} \quad (2.4.77)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] p_f e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}, \quad (2.4.78)$$

gdje smo koristili

$$\frac{\partial}{\partial x_f} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \cdot \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S[x(t)]}{\partial x_f}, \quad (2.4.79)$$

te Hamilton-Jacobijevu jednadžbu $\frac{\partial S[x(t)]}{\partial x_f} = p_f$. Koristeći činjenicu da je p_f zapravo broj, izraz (2.4.75) postaje

$$\frac{\partial}{\partial x_f} \left\langle x_f, t_f \mid x_i, t_i \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] p_f e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \quad (2.4.80)$$

$$= \frac{i}{\hbar} p_f \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \quad (2.4.81)$$

$$= \frac{i}{\hbar} p_f \left\langle x_f, t_f \mid x_i, t_i \right\rangle, \quad (2.4.82)$$

što možemo zapisati kao

$$p_f \left\langle x_f, t_f \mid x_i, t_i \right\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_f} \left\langle x_f, t_f \mid x_i, t_i \right\rangle, \quad (2.4.83)$$

iz čega slijedi

$$\hat{p}_f = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_f}. \quad (2.4.84)$$

Izraz (2.4.84) predstavlja QM zapis operatora impulsa u koordinatnoj reprezentaciji.

Pogledajmo varijaciju od konačnog vremena t_f . Akciju

$$S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} L(x(t), \dot{x}(t), t) dt \quad (2.4.85)$$

diferenciramo po vremenu t_f

$$\frac{d}{dt_f} S[x(t)] = L(x(t), \dot{x}(t), t)|_{t=t_f} \quad (2.4.86)$$

$$= L(x_f, \dot{x}_f, t_f) \quad (2.4.87)$$

$$= \frac{\partial S}{\partial t_f} + \frac{\partial S}{\partial x_f} \frac{dx_f}{dt_f} + \frac{\partial S}{\partial \dot{x}_f} \frac{d\dot{x}_f}{dt_f} \quad (2.4.88)$$

$$\stackrel{x=x_c}{=} \underbrace{\frac{\partial S}{\partial t_f}}_{p_f} + \underbrace{\frac{\partial S}{\partial x_f}}_{p_f} \dot{x}_f \quad (2.4.89)$$

$$= \frac{\partial S}{\partial t_f} + p_f \dot{x}_f, \quad (2.4.90)$$

tj.

$$\frac{d}{dt_f} S[x_c(t)] = \frac{\partial S[x_c(t)]}{\partial t_f} + p_f \dot{x}_f. \quad (2.4.91)$$

Koristeći (2.4.87) možemo pisati

$$L(x_f, \dot{x}_f) = \frac{\partial S[x_c(t)]}{\partial t_f} + p_f \dot{x}_f, \quad (2.4.92)$$

tj. ako ga preuredimo

$$\frac{\partial S[x_c]}{\partial t_f} = L(x_f, \dot{x}_f) - p_f \dot{x}_f = -H(x_f, p_f), \quad (2.4.93)$$

gdje podrazumijevamo $x_c = x_c(t)$. Ranije smo pokazali da vrijedi $\hat{p}_f = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_f}$ iz čega zaključujemo da hamiltonijan u QM postaje operator,

$$\hat{H}(\hat{x}_f, \hat{p}_f) = \hat{H}\left(x_f, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_f}\right). \quad (2.4.94)$$

Sada koristimo definiciju propagatora u formalizmu integrala po putevima te gledamo njegovu vremensku derivaciju

$$\frac{\partial}{\partial t_f} K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \frac{\partial}{\partial t_f} \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}. \quad (2.4.95)$$

Računamo vremensku derivaciju eksponenta iz (2.4.95)

$$\frac{\partial}{\partial t_f} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \cdot \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S[x(t)]}{\partial t_f} \quad (2.4.96)$$

$$\stackrel{(2.4.93)}{=} e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]} \cdot \frac{i}{\hbar} \left(-H(x_f, p_f) \right) \quad (2.4.97)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} H(x_f, p_f) e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}, \quad (2.4.98)$$

te ju uvrstimo u (2.4.95)

$$\frac{\partial}{\partial t_f} K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] \left(-\frac{i}{\hbar} H(x_f, p_f) e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]} \right) \quad (2.4.99)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} H(x_f, p_f) K(x_f, t_f; x_i, t_i). \quad (2.4.100)$$

Dodatno, ako pomnožimo obje strane gornjeg izraza sa $-i\hbar$ dobivamo formu Schrödingrove jednadžbe

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_f} K(x_f, t_f; x_i, t_i) = H(x_f, p_f) K(x_f, t_f; x_i, t_i), \quad (2.4.101)$$

tj.

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_f} - \hat{H}\left(x_f, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_f}\right) \right] K(x_f, t_f; x_i, t_i) = 0. \quad (2.4.102)$$

Prema (2.4.102), možemo reći da propagator K računa valnu funkciju!

U nastavku ćemo poopćiti Gaussove integrale te ih, nakon toga, koristiti u rješavanju onih integrala po putevima koji se mogu riješiti analitički.

Poglavlje 3

Računanje i primjeri integrala po putu

3.1. Integrali po putevima kao determinante

Sjetimo se da je kvantna amplituda vjerojatnosti

$$K \sim \int \mathcal{D}[x] e^{iS[x]} \sim \int \mathcal{D}[x_i] dx_i e^{-\sum_{i,j=1}^N \lambda_{ij} x_i x_j}, \quad (3.1.1)$$

što upućuje na to da trebamo razmatrati Gaussove integrale [31, 32].

3.1.1. Općenito o Gaussovim integralima

3.1.1.1. Integrali s realnim eksponentom

Već smo ranije pokazali da za jednodimenzionalne Gaussove integrale vrijedi

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}, \quad (3.1.2)$$

gdje je $\lambda > 0$. Višedimenzionalni Gaussov integral ima oblik

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^N dx_i e^{-\sum_{i,j=1}^N \lambda_{ij} x_i x_j}, \quad (3.1.3)$$

gdje je λ_{ij} element simetrične pozitivno-definitne matrice \mathbf{A} , tj. mora vrijediti $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ i kvadratna forma $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ za neki vektor \mathbf{x} koji ne smije biti nul-vektor. Pošto je \mathbf{A} simetrična matrica, možemo ju transformirati u dijagonalni oblik pomoću ortogonalne matrice \mathbf{O} ($\mathbf{O}^T \mathbf{O} = \mathbf{O} \mathbf{O}^T = \mathbf{I}$),

$$\mathbf{A} = \mathbf{O}^T \boldsymbol{\lambda} \mathbf{O}, \quad (3.1.4)$$

gdje je $\boldsymbol{\lambda}$ dijagonalna matrica koja na svojoj dijagonali sadrži vlastite vrijednosti od \mathbf{A} , tj. $\boldsymbol{\lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$. Koristeći ortogonalnu matricu, možemo definirati novu varijablu

\tilde{x} kao

$$x_i = \sum_{k=1}^N O_{ik} \tilde{x}_k, \quad (3.1.5)$$

$$x_j = \sum_{l=1}^N O_{jl} \tilde{x}_l \quad (3.1.6)$$

ili u matričnom zapisu kao $\mathbf{x} = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{x}}$. Općenito, kada radimo transformacije u višedimenzionalnim integralima, možemo gledati promjenu volumnih elemenata $dx_1 dx_2 \dots dx_N \rightarrow |\det J| d\tilde{x}_1 d\tilde{x}_2 \dots d\tilde{x}_N$, gdje je J Jakobijan transformacije. Pošto je matrica koju transformiramo ortogonalna ($\det J = \det \mathbf{O} = 1$), tada se volumni element ne mijenja, tj.

$$\prod_{i=1}^N dx_i = \prod_{i=1}^N d\tilde{x}_i. \text{ Koristeći (3.1.5) i (3.1.6), eksponent iz (3.1.3) pišemo kao}$$

$$\sum_{i,j=1}^N \lambda_{ij} x_i x_j = \sum_{i,j=1}^N \lambda_{ij} \left(\sum_{k=1}^N O_{ik} \tilde{x}_k \right) \left(\sum_{l=1}^N O_{jl} \tilde{x}_l \right) \quad (3.1.7)$$

$$= \sum_{k,l=1}^N \tilde{x}_k \tilde{x}_l \left(\sum_{i,j=1}^N \lambda_{ij} O_{ik} O_{jl} \right), \quad (3.1.8)$$

gdje član iz gornje zagrade, koristeći dijagonalizaciju $A_{ij} = (\mathbf{O} \boldsymbol{\lambda} \mathbf{O}^T)_{ij}$, pišemo kao

$$\sum_{i,j=1}^N \lambda_{ij} O_{ik} O_{jl} = \sum_{i,j=1}^N (\mathbf{O} \boldsymbol{\lambda} \mathbf{O}^T)_{ij} O_{ik} O_{jl} = \sum_{i,j=1}^N \left(\sum_{m=1}^N O_{im} \lambda_m O_{jm} \right) O_{ik} O_{jl}. \quad (3.1.9)$$

Zbog ortogonalnosti, vrijedi $\sum_{i=1}^N O_{im} O_{ik} = \delta_{mk}$, $\sum_{j=1}^N O_{jm} O_{jl} = \delta_{ml}$ pa je (3.1.9)

$$\sum_{i,j=1}^N \lambda_{ij} O_{ik} O_{jl} = \sum_{m=1}^N \lambda_m \underbrace{\left(\sum_{i=1}^N O_{im} O_{ik} \right)}_{\delta_{mk}} \underbrace{\left(\sum_{j=1}^N O_{jm} O_{jl} \right)}_{\delta_{ml}} \quad (3.1.10)$$

$$= \sum_{m=1}^N \lambda_m \delta_{mk} \delta_{ml} \stackrel{k=l}{=} \lambda_k \delta_{kl}, \quad (3.1.11)$$

što uvrstimo u (3.1.8)

$$\sum_{i,j=1}^N \lambda_{ij} x_i x_j = \sum_{k=1}^N \lambda_k \tilde{x}_k^2. \quad (3.1.12)$$

Integral (3.1.3) sada je

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^N d\tilde{x}_i e^{-\sum_{i=1}^N \lambda_i \tilde{x}_i^2}. \quad (3.1.13)$$

Zbog toga što više nemamo mješovite doprinose $\tilde{x}_i \tilde{x}_j$ (za $i \neq j$), nego eksponent sadrži samo sumu kvadrata od \tilde{x}_i , integral (3.1.13) možemo rastaviti na produkt jednodimensi-

onalnih integrala

$$I = \prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{x}_i e^{-\lambda_i \tilde{x}_i^2} = \prod_{i=1}^N \sqrt{\frac{\pi}{\lambda_i}} = \sqrt{\frac{\pi^N}{\prod_{i=1}^N \lambda_i}}. \quad (3.1.14)$$

Koristeći $\prod_{i=1}^N \lambda_i = \det(\mathbf{\Lambda}) = \det(\mathbf{A})$, dobivamo

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^N dx_i e^{-\sum_{i,j=1}^N \lambda_{ij} x_i x_j} = \frac{\pi^{N/2}}{\sqrt{\det \mathbf{A}}}, \quad (3.1.15)$$

ili u matričnom obliku

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 dx_2 \dots dx_N e^{-\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}} = \frac{\pi^{N/2}}{\sqrt{\det \mathbf{A}}}. \quad (3.1.16)$$

3.1.1.2. Integrali s imaginarnim eksponentom

Pogledajmo sljedeći integral u jednoj dimenziji

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda x^2} dx. \quad (3.1.17)$$

Očito je da ne možemo integrirati duž realne osi jer tada $e^{i\lambda x^2}$ može divergirati. Da bismo osigurali konvergenciju integrala (3.1.17), napraviti ćemo deformaciju konture u kompleksnoj ravnini, tj. preusmjeriti ćemo put integracije tamo gdje će integral konvergirati. Cilj je dobiti oblik funkcije koja eksponencijalno pada. Zbog simetrije, vrlo čest odabir u kompleksnoj analizi su konture pod kutevima $\pm\pi/4$.

- $\lambda > 0$: za neki realan parametar $t \in (-\infty, +\infty)$ radimo integraciju duž konture $x = te^{i\pi/4}$ pa je $dx = e^{i\pi/4} dt$. Eksponent iz (3.1.17) tada se mijenja kao

$$e^{i\lambda x^2} = e^{i\lambda (te^{i\pi/4})^2} = e^{i\lambda t^2} e^{i\pi/2} = e^{i\lambda t^2 i} = e^{-\lambda t^2}, \quad (3.1.18)$$

što nam osigurava konvergenciju. Uvrštavanjem $dx = e^{i\pi/4} dt$ te (3.1.18) u (3.1.17), integral postaje

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda t^2} e^{i\pi/4} dt = e^{i\pi/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda t^2} dt = e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}. \quad (3.1.19)$$

- $\lambda < 0$: za ovaj odabir radimo integraciju duž konture $x = te^{-i\pi/4}$ te postupkom kao i za $\lambda > 0$ dolazimo do

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\lambda t^2} e^{-i\pi/4} dt = e^{-i\pi/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\lambda t^2} dt = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{\pi}{-\lambda}} = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{\pi}{|\lambda|}}. \quad (3.1.20)$$

Uz definiranje funkcije

$$\operatorname{sgn}(\lambda) = \begin{cases} 1 & \text{ako je } \lambda > 0, \\ 0 & \text{ako je } \lambda = 0, \\ -1 & \text{ako je } \lambda < 0, \end{cases} \quad (3.1.21)$$

rješenje integrala (3.1.17) možemo pisati kao

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda x^2} dx = e^{i\operatorname{sgn}(\lambda)\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{\pi}{|\lambda|}}.$$

(3.1.22)

Sada pogledajmo integral s više varijabli, recimo N ,

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^N dx_i e^{i \sum_{j,k=1}^N \lambda_{jk} x_j x_k}. \quad (3.1.23)$$

Slično kao i za integrale s realnim eksponentom, dijagonaliziramo matricu \mathbf{A} (možemo jer je simetrična), što će nam omogućiti lakše rješavanje integrala. Nakon dijagonalizacije, dobije se sljedeći prijelaz kvadratne forme

$$\sum_{j,k=1}^N \lambda_{jk} x_j x_k \rightarrow \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i^2, \quad (3.1.24)$$

gdje su λ_i svojstvene vrijednosti matrice \mathbf{A} , a y_i su linearno nezavisne vrijednosti. Zbog toga, koristeći rezultat iz (3.1.22), integral (3.1.23) možemo napisati kao produkt N -jednodimenzionalnih integrala $\int_{-\infty}^{+\infty} dy_i e^{i\lambda_i y_i^2}$

$$I = \prod_{i=1}^N \left(e^{i\operatorname{sgn}(\lambda_i)\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{\pi}{|\lambda_i|}} \right) = e^{i \sum_{i=1}^N \operatorname{sgn}(\lambda_i)\frac{\pi}{4}} \cdot \prod_{i=1}^N \sqrt{\frac{\pi}{|\lambda_i|}} \quad (3.1.25)$$

$$= e^{i(n_+ - n_-)\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{\pi^N}{\prod_{i=1}^N |\lambda_i|}} = e^{i(n_+ - n_-)\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{\pi^N}{|\det(\mathbf{A})|}}. \quad (3.1.26)$$

Sumu od $\operatorname{sgn}(\lambda_i)$ definirali smo kao $\sum_{i=1}^N \operatorname{sgn}(\lambda_i) = n_+ - n_-$, gdje n_+ predstavlja broj pozitivnih, a n_- broj negativnih svojstvenih vrijednosti matrice \mathbf{A} . Konačno dobivamo

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^N dx_i e^{i \sum_{j,k=1}^N \lambda_{jk} x_j x_k} = e^{i(n_+ - n_-)\frac{\pi}{4}} \frac{\pi^{N/2}}{\sqrt{|\det(\mathbf{A})|}}, \quad (3.1.27)$$

ili u matričnom obliku

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 dx_2 \dots dx_N e^{i\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}} = e^{i(n_+ - n_-)\frac{\pi}{4}} \frac{\pi^{N/2}}{\sqrt{|\det(\mathbf{A})|}}. \quad (3.1.28)$$

U ovome potpoglavlju vidjeli smo što su Gaussovi integrali. Pogledajmo gdje se oni nalaze u formalizmu integrala po putevima.

3.1.2. Gaussovi integrali po putevima

Ranije smo definirali integral po putu kao

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}, \quad (3.1.29)$$

gdje je $S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt L(x(t), \dot{x}(t))$. Također, (3.1.29) zadovoljava rubne uvjete $x(t_i) = x_i$ i $x(t_f) = x_f$. Radi jednostavnijeg rješavanja integrala (3.1.29), ukupan put $x(t)$ razdvojiti ćemo na klasičan put $x_c(t)$ te ostale puteve, tj. kvantne fluktuacije oko njega, $y(t)$,

$$x(t) = x_c(t) + y(t). \quad (3.1.30)$$

Klasičan put ima rubne uvjete kao i $x(t)$ pa su rubni uvjeti za $y(t)$

$$y(t_i) = x(t_i) - x_c(t_i) = x_i - x_c(t_i) = 0, \quad (3.1.31)$$

$$y(t_f) = x(t_f) - x_c(t_f) = x_f - x_c(t_f) = 0. \quad (3.1.32)$$

Ono što smo napravili jest linearna transformacija $x(t) \rightarrow y(t)$. Koristeći činjenicu da x_c ne fluktuiraju, Jakobijan takve transformacije ostaje isti [39]

$$J = \left| \frac{\partial x(t)}{\partial y(t)} \right| = \frac{\partial (x_c(t) + y(t))}{\partial y(t)} = \frac{\partial y(t)}{\partial y(t)} = 1, \quad (3.1.33)$$

što znači da volumni element u prostoru puteva ostaje isti [15], tj.

$$\mathcal{D}[x(t)] = \mathcal{D}[y(t)]. \quad (3.1.34)$$

Nadalje, lagranžijan možemo pisati kao $L = L(x_c, \dot{x}_c)$, tj. ako uključimo fluktuacije u obzir, $L = L(x_c + y, \dot{x}_c + \dot{y})$. Za male fluktuacije, koristeći Taylorov red, L možemo pisati kao

$$L(x_c + y, \dot{x}_c + \dot{y}) = L(x_c, \dot{x}_c) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[y \frac{\partial}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial}{\partial \dot{x}} \right]^n L(x_c, \dot{x}_c) \quad (3.1.35)$$

$$= L(x_c, \dot{x}_c) + \left(y \frac{\partial L}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \quad (3.1.36)$$

$$+ \frac{1}{2} \left(y^2 \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} + 2y\dot{y} \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} + \dot{y}^2 \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \right) + \mathcal{O}(y^3, \dot{y}^3). \quad (3.1.37)$$

Proširena akcija će imati oblik

$$S [x_c(t) + y(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt L (x_c + y, \dot{x}_c + \dot{y}), \quad (3.1.38)$$

pa kada uvrstimo prošireni lagranžijan, slijedi

$$S [x_c(t) + y(t)] = \quad (3.1.39)$$

$$= \int_{t_i}^{t_f} dt \left[L(x_c, \dot{x}_c) + y \frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x=x_c} + \dot{y} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x=x_c} \right] \quad (3.1.40)$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[y^2 \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \Big|_{x=x_c} + 2y\dot{y} \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \Big|_{x=x_c} + \dot{y}^2 \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \Big|_{x=x_c} \right] + \mathcal{O}(y^3, \dot{y}^3) \quad (3.1.41)$$

$$= S [x_c(t)] \quad (3.1.42)$$

$$\underbrace{+ \int_{t_i}^{t_f} dt \left[y \frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x=x_c} + \dot{y} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x=x_c} \right]}_{\text{linearni doprinosi}} \quad (3.1.43)$$

$$\underbrace{+ \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[y^2 \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \Big|_{x=x_c} + 2y\dot{y} \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \Big|_{x=x_c} + \dot{y}^2 \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \Big|_{x=x_c} \right]}_{\text{kvadratni doprinosi}} + \mathcal{O}(y^3, \dot{y}^3). \quad (3.1.44)$$

Linearne doprinose, (3.1.43), možemo pisati kao

$$\int_{t_i}^{t_f} dt \left[y \frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x=x_c} + \dot{y} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x=x_c} \right] = \quad (3.1.45)$$

$$= \int_{t_i}^{t_f} dt y \frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x=x_c} + \int_{t_i}^{t_f} dt \dot{y} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x=x_c} \quad (3.1.46)$$

$$= \int_{t_i}^{t_f} dt y \frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x=x_c} + \underbrace{y \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x=x_c} \Big|_{t_i}^{t_f}}_{=0} - \int_{t_i}^{t_f} dt y \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x=x_c} \quad (3.1.47)$$

$$= \int_{t_i}^{t_f} dt y \underbrace{\left[\frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x=x_c} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x=x_c} \right]}_{=0 \text{ (E-L jednadžbe)}} = 0. \quad (3.1.48)$$

Zaključujemo da se sve skriva u drugoj derivaciji! Sada možemo napisati izraz za propagator kao

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = e^{\frac{i}{\hbar} S[x_c(t)]} \int \mathcal{D}[y(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} y^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} y \dot{y} + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{y}^2 \right] + \mathcal{O}(y^3, \dot{y}^3)} . \quad (3.1.49)$$

Eksponencijalni član iz (3.1.49) možemo pisati kao

$$\frac{\delta^2 S}{\delta x^2} y^2 = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} y^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} y \dot{y} + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{y}^2 \right], \quad (3.1.50)$$

što nam daje

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}[y(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \left[S[x_c(t)] + \frac{1}{2} \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} y^2 + \mathcal{O}(y^3) \right]} . \quad (3.1.51)$$

Zbog pojednostavljenja integrala (želimo izlučiti \hbar) iz (3.1.51), radimo zamjenu $y = \sqrt{\hbar} \tilde{y}$ pa ostali članovi postaju $y^2 = \hbar \tilde{y}^2$, $y \dot{y} = \hbar \tilde{y} \dot{\tilde{y}}$, $\dot{y}^2 = \hbar \dot{\tilde{y}}^2$. Radi takve zamjene također se mijenja i integralna mjera kao $\mathcal{D}[y(t)] = \mathcal{N} \mathcal{D}[\tilde{y}(t)]$, gdje je \mathcal{N} normalizacijska konstanta čija je uloga da kompenzira našu promjenu. Uslijed takve promjene, član u eksponentu iz (3.1.49) možemo pisati kao

$$\frac{i}{\hbar} \underbrace{\left[S[x_c(t)] + \frac{1}{2} \hbar \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\tilde{y}^2 \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} + 2 \tilde{y} \dot{\tilde{y}} \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} + \dot{\tilde{y}}^2 \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \right) + \mathcal{O}(\hbar^{3/2} \tilde{y}^3) \right]}_{= \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \tilde{y}^2}, \quad (3.1.52)$$

pa konačan izraz za propagator postaje

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \mathcal{N} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S[x_c(t)]} \cdot \int \mathcal{D}[\tilde{y}(t)] e^{\frac{i}{2} \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \tilde{y}^2 + \mathcal{O}(\hbar^{3/2} \tilde{y}^3)} . \quad (3.1.53)$$

Komentari.

- Pokazali smo da kvantni propagator ima 2 doprinosa! Klasični doprinos $e^{\frac{i}{\hbar} S[x_c(t)]}$ i kvantni doprinos koji uključuje funkcionalnu integraciju $\mathcal{D}[\tilde{y}(t)]$ po svim kvantnim fluktuacijama $\tilde{y}(t)$. Takve fluktuacije odgovorne su za kvantne korekcije klasične putanje te daju potpun opis kvantnog sistema.
- Kvadratni član u eksponentu $\frac{i}{2} \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \tilde{y}^2$ omogućuje nam korištenje Gaussove aproksimacije pri rješavanju funkcionalnih integrala, a prednost je ta što su takvi integrali analitički rješivi. Koristeći dokazana svojstva Gaussovih integrala, dobili bismo da je rješenja integrala iz (3.1.53) oblika $\sim \left(\det \left(-i \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \right) \right)^{-1/2}$.
- Prilikom zamjene varijabli, vrlo je bitno voditi računa da se integralna mjera mijenja prema Jakobijanu

$$\mathcal{D}[y(t)] = \prod_t dy(t) = \prod_t \sqrt{\hbar} d\tilde{y}(t) = (\sqrt{\hbar})^\infty \mathcal{D}[\tilde{y}(t)]. \quad (3.1.54)$$

U formalizmu integrala po putevima, "živimo" u beskonačno-dimenzionalnom prostoru (broj vremenskih točaka je ∞), tako da faktor $(\sqrt{\hbar})^\infty$ postaje konstanta koju smo formalno napisali kao $\mathcal{N} = (\sqrt{\hbar})^\infty$. Takav odabir osigurava pravilnu transformaciju integralne mjere.

U nastavku ćemo analizirati neke konkretne primjere u kojima ćemo koristiti stečeno znanje iz prethodnih poglavlja.

3.2. Kvadratni lagranžijani i harmonički oscilator

Kvadratne lagranžijane [7, 40] definiramo kao

$$\frac{\delta^n S}{\delta x^n} = 0, \quad \text{za } n > 2. \quad (3.2.1)$$

U tom slučaju, propagator će biti oblika

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = e^{\frac{i}{\hbar} S[x_c(t)]} \int \mathcal{D}[y(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} y^2} \quad (3.2.2)$$

$$= \text{const} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S[x_c(t)]} \cdot \left(\det \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.2.3)$$

Općenito, kvadratni lagranžian možemo pisati kao

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + b(t) x \dot{x} + \frac{1}{2} c(t) x^2 - e(t) x. \quad (3.2.4)$$

Gornji izraz uključuje lagranžijane za:

- Slobodnu česticu za $b(t), c(t), e(t) = 0$.
- Harmonički oscilator za $b(t) = e(t) = 0$ i $c(t) = m\omega^2$ (za obični, a inače $\omega = \omega(t)$).
- Česticu u vanjskom polju za $b(t) = c(t) = 0$, a $e(t)$ može npr. predstavljati promjenjivo električno polje.
- Tjerani harmonički oscilator za $b(t) = 0$.

Lagranžian klasičnog harmoničkog oscilatora dan je s

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (3.2.5)$$

Iz E-L jednadžbe,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \quad (3.2.6)$$

dobivamo klasičnu jednadžbu gibanja. Potrebne parcijalne derivacije su: $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m \dot{x}$ i $\frac{\partial L}{\partial x} = -m\omega^2 x$, što kada uvrstimo u E-L jednadžbu daje standardni oblik jednadžbe gibanja

$$\ddot{x}_c + \omega^2 x_c = 0. \quad (3.2.7)$$

Neka su početni uvjeti klasičnog puta $x_c(t)$ dani s

$$x_c(t_i) = x_i \quad \text{i} \quad x_c(t_f) = x_f, \quad (3.2.8)$$

Opće rješenje diferencijalne jednadžbe (3.2.7) glasi

$$x_c(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t). \quad (3.2.9)$$

Za početne uvjete pišemo

$$x_i = A \cos(\omega t_i) + B \sin(\omega t_i), \quad (3.2.10)$$

$$x_f = A \cos(\omega t_f) + B \sin(\omega t_f). \quad (3.2.11)$$

Iz (3.2.10) izrazimo $A = \frac{x_i - B \sin(\omega t_i)}{\cos(\omega t_i)}$ te uvrstimo u (3.2.11) i pomnožimo sve sa $\cos(\omega t_i)$ pa je

$$x_f \cos(\omega t_i) = x_i \cos(\omega t_f) \underbrace{- B \sin(\omega t_i) \cos(\omega t_f) + B \sin(\omega t_f) \cos(\omega t_i)}_{B \sin(\omega(t_f - t_i))} \quad (3.2.12)$$

$$x_f \cos(\omega t_i) - x_i \cos(\omega t_f) = B \sin(\omega(t_f - t_i)), \quad (3.2.13)$$

iz čega izrazimo $B = \frac{x_f \cos(\omega t_i) - x_i \cos(\omega t_f)}{\sin(\omega(t_f - t_i))}$ te uvrstimo u A

$$A = \frac{x_i - \left(\frac{x_f \cos(\omega t_i) - x_i \cos(\omega t_f)}{\sin(\omega(t_f - t_i))} \right) \sin(\omega t_i)}{\cos(\omega t_i)} \quad (3.2.14)$$

$$= \frac{x_i \sin(\omega(t_f - t_i)) - (x_f \cos(\omega t_i) - x_i \cos(\omega t_f)) \sin(\omega t_i)}{\cos(\omega t_i) \sin(\omega(t_f - t_i))} \quad (3.2.15)$$

$$= \frac{x_i \sin(\omega(t_f - t_i)) - x_f \cos(\omega t_i) \sin(\omega t_i) + x_i \cos(\omega t_f) \sin(\omega t_i)}{\cos(\omega t_i) \sin(\omega(t_f - t_i))} \quad (3.2.16)$$

$$= \frac{x_i \left(\sin(\omega(t_f - t_i)) + \cos(\omega t_f) \sin(\omega t_i) \right) - x_f \cos(\omega t_i) \sin(\omega t_i)}{\cos(\omega t_i) \sin(\omega(t_f - t_i))} \quad (3.2.17)$$

$$= \frac{x_i \sin(\omega t_f) - x_f \sin(\omega t_i)}{\sin(\omega(t_f - t_i))}. \quad (3.2.18)$$

Pri prijelazu iz (3.2.17) u (3.2.18) koristili smo identitet $\sin(\omega(t_f - t_i)) + \cos(\omega t_f) \sin(\omega t_i) = \sin(\omega t_f)$. Uvrštavajući A i B u opće rješenje, dobivamo

$$x_c(t) = x_i \frac{\sin \omega(t_f - t)}{\sin \omega(t_f - t_i)} + x_f \frac{\sin \omega(t - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)}. \quad (3.2.19)$$

Nadalje, izračunajmo derivaciju $x_c(t)$

$$\dot{x}_c(t) = \frac{d}{dt} \left(x_i \frac{\sin \omega(t_f - t)}{\sin \omega(t_f - t_i)} + x_f \frac{\sin \omega(t - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)} \right) \quad (3.2.20)$$

$$= x_i \frac{d}{dt} \left(\frac{\sin \omega(t_f - t)}{\sin \omega(t_f - t_i)} \right) + x_f \frac{d}{dt} \left(\frac{\sin \omega(t - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)} \right) \quad (3.2.21)$$

$$= x_i \frac{-\omega \cos \omega(t_f - t)}{\sin \omega(t_f - t_i)} + x_f \frac{\omega \cos \omega(t - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)} \quad (3.2.22)$$

$$= \omega \left(x_f \frac{\cos \omega(t - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)} - x_i \frac{\cos \omega(t_f - t)}{\sin \omega(t_f - t_i)} \right), \quad (3.2.23)$$

pa klasičnu akciju pišemo kao

$$S_c = \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x_f \frac{\cos \omega(t - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)} - x_i \frac{\cos \omega(t_f - t)}{\sin \omega(t_f - t_i)} \right)^2 \quad (3.2.24)$$

$$- \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x_i \frac{\sin \omega(t_f - t)}{\sin \omega(t_f - t_i)} + x_f \frac{\sin \omega(t - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)} \right)^2 \quad (3.2.25)$$

$$= \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x_f^2 \frac{\cos^2 \omega(t - t_i)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} - 2x_f x_i \frac{\cos \omega(t - t_i) \cos \omega(t_f - t)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} + x_i^2 \frac{\cos^2 \omega(t_f - t)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} \right) \quad (3.2.26)$$

$$- \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x_i^2 \frac{\sin^2 \omega(t_f - t)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} + 2x_i x_f \frac{\sin \omega(t_f - t) \sin \omega(t - t_i)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} + x_f^2 \frac{\sin^2 \omega(t - t_i)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} \right) \quad (3.2.27)$$

$$= \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x_f^2 \frac{\cos^2 \omega(t - t_i)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} - x_f^2 \frac{\sin^2 \omega(t - t_i)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} \right) \quad (3.2.28)$$

$$+ \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x_i^2 \frac{\cos^2 \omega(t_f - t)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} - x_i^2 \frac{\sin^2 \omega(t_f - t)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} \right) \quad (3.2.29)$$

$$-\int_{t_i}^{t_f} dt m \omega^2 \left(x_f x_i \frac{\cos \omega(t - t_i) \cos \omega(t_f - t)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} + x_f x_i \frac{\sin \omega(t_f - t) \sin \omega(t - t_i)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} \right). \quad (3.2.30)$$

Rješavamo svaki od gornjih integrala zasebno, počevši od integrala (3.2.28)

$$\int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \omega^2 x_f^2 \left(\frac{\cos^2 \omega(t - t_i)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} - \frac{\sin^2 \omega(t - t_i)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} \right) = \quad (3.2.31)$$

$$= \left\{ \cos^2 x - \sin^2 x = \cos(2x) \right\} = \frac{1}{2} m \omega^2 x_f^2 \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{\cos(2\omega(t - t_i))}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} \quad (3.2.32)$$

$$= \frac{1}{2} m \omega^2 x_f^2 \frac{1}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} \int_{t_i}^{t_f} dt \cos(2\omega(t_f - t)) \quad (3.2.33)$$

$$= \left\{ \int \cos(2\omega t) dt = \frac{1}{2\omega} \sin(2\omega t) \right\} = \frac{1}{2} m \omega^2 x_f^2 \cdot \frac{1}{2\omega} \cdot \frac{\sin(2\omega(t_f - t_i))}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)}. \quad (3.2.34)$$

Rješenje integrala (3.2.29) je, uz zamjenu $x_f \rightarrow x_i$, identično rješenju od (3.2.28)

$$\int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 \left(\frac{\cos^2 \omega(t_f - t)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} - \frac{\sin^2 \omega(t_f - t)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} \right) = \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 \cdot \frac{1}{2\omega} \cdot \frac{\sin(2\omega(t_f - t_i))}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)}. \quad (3.2.35)$$

Rješenje zadnjeg integrala, (3.2.30), glasi

$$\int_{t_i}^{t_f} dt m \omega^2 x_f x_i \left(\frac{\cos \omega(t - t_i) \cos \omega(t_f - t)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} + \frac{\sin \omega(t_f - t) \sin \omega(t - t_i)}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} \right) \quad (3.2.36)$$

$$= \{ \cos(A) \cos(B) + \sin(A) \sin(B) = \cos(A - B) \} \quad (3.2.37)$$

$$= \int_{t_i}^{t_f} dt m \omega^2 x_f x_i \frac{\cos(\omega(t - t_i) + \omega(t_f - t))}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} \quad (3.2.38)$$

$$= \left\{ \cos(\omega(t - t_i) + \omega(t_f - t)) = \cos(\omega(t_f - t_i)) \right\} \quad (3.2.39)$$

$$= m \omega^2 x_f x_i \frac{\cos(\omega(t_f - t_i))}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} (t_f - t_i). \quad (3.2.40)$$

Uvrstimo dobivene rezultate u klasičnu akciju

$$S_c = \frac{1}{4} m \omega^2 x_f^2 \frac{\sin(2\omega(t_f - t_i))}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} + \frac{1}{4} m \omega^2 x_i^2 \frac{\sin(2\omega(t_f - t_i))}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} - m \omega^2 x_f x_i \frac{\cos(\omega(t_f - t_i))}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} (t_f - t_i)$$

$$\begin{aligned}
&= \left\{ \sin(2\omega(t_f - t_i)) = 2 \sin(\omega(t_f - t_i)) \cos(\omega(t_f - t_i)) \right\} \\
&= \frac{1}{2} m \omega^2 x_f^2 \frac{\cos(\omega(t_f - t_i))}{\sin(\omega(t_f - t_i))} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 \frac{\cos(\omega(t_f - t_i))}{\sin(\omega(t_f - t_i))} - m \omega^2 x_f x_i \frac{\cos(\omega(t_f - t_i))}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} (t_f - t_i) \\
&= \frac{\cos(\omega(t_f - t_i))}{\sin(\omega(t_f - t_i))} \left(\frac{1}{2} m \omega^2 x_f^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 \right) - m \omega^2 x_f x_i \frac{\cos(\omega(t_f - t_i))}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} (t_f - t_i) \\
&= \left\{ \frac{\cos(\omega(t_f - t_i))}{\sin^2 \omega(t_f - t_i)} = \frac{\cos(\omega(t_f - t_i))}{\sin(\omega(t_f - t_i)) \cdot \sin(\omega(t_f - t_i))} = \frac{\operatorname{ctg}(\omega(t_f - t_i))}{\sin(\omega(t_f - t_i))} \right\} \\
&= \operatorname{ctg}(\omega(t_f - t_i)) \left(\frac{1}{2} m \omega^2 x_f^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 \right) - m \omega^2 x_f x_i \frac{\operatorname{ctg}(\omega(t_f - t_i))}{\sin(\omega(t_f - t_i))} (t_f - t_i) \\
&= \frac{m \omega \operatorname{ctg}(\omega(t_f - t_i))}{\sin(\omega(t_f - t_i))} \left(\frac{1}{2} (x_f^2 + x_i^2) \sin(\omega(t_f - t_i)) - x_f x_i \omega(t_f - t_i) \right) \\
&= \frac{1}{2} m \omega \cdot \frac{(x_i^2 + x_f^2) \cos \omega(t_f - t_i) - 2 x_i x_f}{\sin \omega(t_f - t_i)}.
\end{aligned}$$

Sada ćemo prijeći na kvantni slučaj [35], tako što ćemo promatrani put $x(t)$ napisati kao zbroj klasičnog puta $x_c(t)$ te fluktacije oko njega $y(t)$

$$x(t) = x_c(t) + y(t), \quad (3.2.41)$$

$$\dot{x}(t) = \dot{x}_c(t) + \dot{y}(t), \quad (3.2.42)$$

gdje vrijedi $y(t_i) = 0$ i $y(t_f) = 0$. Lagranžijan glasi

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \frac{1}{2} m (\dot{x}_c(t) + \dot{y}(t))^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 (x_c(t) + y(t))^2 \quad (3.2.43)$$

$$= \frac{1}{2} m (\dot{x}_c^2 + 2 \dot{x}_c \dot{y} + \dot{y}^2) - \frac{1}{2} m \omega^2 (x_c^2 + 2 x_c y + y^2) \quad (3.2.44)$$

$$= \left(\frac{1}{2} m \dot{x}_c^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x_c^2 \right) + \left(\frac{1}{2} m \dot{y}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \right) + m (\dot{x}_c \dot{y} - \omega^2 x_c y), \quad (3.2.45)$$

iz čega je akcija

$$S[x(t)] = \underbrace{\int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{1}{2} m \dot{x}_c^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x_c^2 \right) dt}_{S[x_c(t)]} + \underbrace{\int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{1}{2} m \dot{y}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \right) dt}_{S[y(t)]} \quad (3.2.46)$$

$$+ \underbrace{\int_{t_i}^{t_f} m (\dot{x}_c \dot{y} - \omega^2 x_c y) dt}_{=0} \quad (3.2.47)$$

$$S[x(t)] = S[x_c(t)] + S[y(t)]. \quad (3.2.48)$$

Koristeći dekompoziciju puta $x(t) = x_c(t) + y(t)$, gdje je $x_c(t)$ klasično rješenje koje zadovoljava početne uvjete $x_c(t_i) = x_i$ i $x_c(t_f) = x_f$, i fluktuacije $y(t)$ koje zadovoljavaju $y(t_i) = 0$ i $y(t_f) = 0$, možemo napisati izraz za propagator K kao

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = \int \mathcal{D}[y(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \left(S_c + \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{1}{2} m \dot{y}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \right) dt \right)} \quad (3.2.49)$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar} S_c} \int \mathcal{D}[y(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{1}{2} m \dot{y}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \right) dt} \quad (3.2.50)$$

$$= e^{i \frac{S_c}{\hbar}} \int \mathcal{D}[y] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{m}{2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt}. \quad (3.2.51)$$

Uočavamo da je integral iz (3.2.51), koji uključuje samo $y(t)$, zapravo propagator K za $y(t)$ koji ide od $y(t_i) = 0$ do $y(t_f) = 0$. Nazovimo taj integral F ,

$$F(t_f - t_i) = \int \mathcal{D}[y] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{m}{2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt}, \quad (3.2.52)$$

pa pišemo

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = e^{\frac{i S_c}{\hbar}} F(t_f - t_i). \quad (3.2.53)$$

Razlog zašto se $y(t)$ može razdvojiti je zato što su fluktuacije $y(t)$ zadane da počinju i završavaju u nuli. Zbog toga integral preko $y(t)$ ne ovisi o početnim i krajnjim vrijednostima x_i i x_f , već samo o vremenskom intervalu $t_f - t_i$. Dakle, $F(t_f - t_i)$ nije ništa drugo nego propagator iz $x_i = 0$ u $x_f = 0$, tj.

$$F(t_f - t_i) = K(0, t_f; 0, t_i), \quad (3.2.54)$$

pa konačan izraz za propagator glasi

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \underbrace{e^{i \frac{S_c(x_f, x_i, t_f - t_i)}{\hbar}}}_{\text{doprinos klasičnog puta}} \cdot \underbrace{K(0, t_f; 0, t_i)}_{\text{kvantne fluktuacije}}. \quad (3.2.55)$$

Postoji više načina za računanje $F(t_f - t_i)$. Za detalje vidjeti, na primjer, [7, 41].

1. Koristimo svojstvo kompozicije amplitude prijelaza

Svojstvo kaže da se propagator može razdvojiti u dva dijela

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int dx K(x_f, t_f; x, t) K(x, t; x_i, t_i), \quad (3.2.56)$$

što uvrstimo u $F(t_f - t_i) = K(0, t_f; 0, t_i)$ pa je

$$F(t_f - t_i) = \int dx \left(e^{\frac{i}{\hbar} S_c(0, x, t_f - t)} F(t_f - t) \right) \left(e^{\frac{i}{\hbar} S_c(x, 0, t - t_i)} F(t - t_i) \right). \quad (3.2.57)$$

Nadalje, koristimo ranije dokazan izraz za klasičnu akciju harmoničkog oscilatora

$$S_c(x_f, x_i, T) = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} \left[(x_i^2 + x_f^2) \cos \omega T - 2x_i x_f \right], \quad (3.2.58)$$

gdje je $T = t_f - t_i$. Dodatno, uvedimo oznake $T_1 = t_f - t$ i $T_2 = t - t_i$ pa (3.2.57) glasi

$$F(T) = \int dx F(T_1) F(T_2) e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m\omega}{2 \sin \omega T_1} (x^2 \cos \omega T_1) + \frac{m\omega}{2 \sin \omega T_2} (x^2 \cos \omega T_2) \right)} \quad (3.2.59)$$

$$= \int dx F(T_1) F(T_2) e^{\frac{im\omega x^2}{2\hbar} \left(\frac{\cos \omega T_1}{\sin \omega T_1} + \frac{\cos \omega T_2}{\sin \omega T_2} \right)} \quad (3.2.60)$$

$$= F(T_1) F(T_2) \int dx e^{\frac{im\omega}{2\hbar} (\operatorname{ctg} \omega T_1 + \operatorname{ctg} \omega T_2) \cdot x^2} \quad (3.2.61)$$

$$= \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{i\pi}{\lambda}} \quad \text{za} \quad \lambda = \frac{m\omega}{2\hbar} (\operatorname{ctg} \omega T_1 + \operatorname{ctg} \omega T_2) \right\} \quad (3.2.62)$$

$$= F(T_1) F(T_2) \sqrt{\frac{i\pi}{\frac{m\omega}{2\hbar} (\operatorname{ctg} \omega T_1 + \operatorname{ctg} \omega T_2)}} \quad (3.2.63)$$

$$= F(T_1) F(T_2) \sqrt{\frac{2i\pi\hbar}{m\omega (\operatorname{ctg} \omega T_1 + \operatorname{ctg} \omega T_2)}} \quad (3.2.64)$$

$$= \left\{ \operatorname{ctg}(\omega T_1) + \operatorname{ctg}(\omega T_2) = \frac{\cos(\omega T_1) \sin(\omega T_2) + \cos(\omega T_2) \sin(\omega T_1)}{\sin(\omega T_1) \sin(\omega T_2)} \right\} \quad (3.2.65)$$

$$= \left\{ \operatorname{ctg}(\omega T_1) + \operatorname{ctg}(\omega T_2) = \frac{\sin(\omega T)}{\sin(\omega T_1) \sin(\omega T_2)} \quad \text{za} \quad T = T_1 + T_2 \right\} \quad (3.2.66)$$

$$= F(T_1) F(T_2) \sqrt{\frac{2i\pi\hbar \sin(\omega T_1) \sin(\omega T_2)}{m\omega \sin(\omega T)}}, \quad (3.2.67)$$

odnosno

$$\frac{F(T)}{F(T_1) F(T_2)} = \sqrt{\frac{2i\pi\hbar}{m\omega}} \left[\frac{\sin(\omega T_1) \sin(\omega T_2)}{\sin(\omega T)} \right]^{1/2}. \quad (3.2.68)$$

Na temelju gornjeg izraza, možemo prepostaviti da $F(T)$ ima oblik

$$F(T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} e^{aT}, \quad (3.2.69)$$

što ćemo sada dokazati direktnim uvrštavanjem. Sukladno pretpostavci, neka su

$$F(T_1) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T_1)}} e^{aT_1} \quad \text{i} \quad F(T_2) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T_2)}} e^{aT_2}, \quad (3.2.70)$$

pa je

$$\begin{aligned} \frac{F(T)}{F(T_1)F(T_2)} &= \frac{\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} e^{aT}}{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T_1)}} e^{aT_1}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T_2)}} e^{aT_2}\right)} = \frac{\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} e^{aT}}{\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T_1)}} \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T_2)}} e^{a(T_1+T_2)}} \\ &= \frac{\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}}}{\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T_1)}} \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T_2)}}} e^{aT} e^{-a(T_1+T_2)} = \left\{ e^{aT} e^{-a(T_1+T_2)} = e^{aT} e^{-aT} = 1 \right\} \\ &= \frac{\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}}}{\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T_1)}} \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T_2)}}} = \frac{\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}}}{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sin(\omega T_1) \sin(\omega T_2)}}} = \frac{\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}}}{\frac{\sqrt{\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar}\right)^2}}{\sqrt{\sin(\omega T_1) \sin(\omega T_2)}}} \\ &= \sqrt{\frac{2i\pi\hbar \sin(\omega T_1) \sin(\omega T_2)}{m\omega \sin(\omega T)}}. \end{aligned}$$

Ovime smo dokazali (3.2.68). Sada možemo napisati općeniti oblik za $F(T)$ kao

$$F(T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} e^{aT}, \quad (3.2.71)$$

gdje je a proizvoljna konstanta. Za $a = 0$, slijedi da je $F(T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}}$ iz čega možemo zapisati konačan izraz za propagator harmoničkog oscilatora [7] kao

$$\begin{aligned} K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \\ &\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} \left[(x_i^2 + x_f^2) \cos(\omega T) - 2x_i x_f \right]\right). \end{aligned} \quad (3.2.72)$$

Ovaj oblik je fizikalno konzistentan, odgovara slučaju slobodne čestice u limesu $\omega \rightarrow 0$. Tada je $\lim_{\omega \rightarrow 0} \sin(\omega T) = \omega T$ pa izraz za propagator slobodne čestice glasi

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar(t_f - t_i)}} \exp\left[\frac{im(x_f - x_i)^2}{2\hbar(t_f - t_i)}\right]. \quad (3.2.73)$$

2. Metoda determinante

Pokazali smo da za $F(T)$ vrijedi

$$F(T) = \int \mathcal{D}[y] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{m}{2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt}, \quad (3.2.74)$$

gdje su rubni uvjeti dani s $y(t_i) = y(t_f) = 0$. Kvadratni član u eksponentu funkcionalnog integrala (3.2.74) pišemo kao

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{m}{2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt &= \left\{ \int_{t_i}^{t_f} \dot{y}^2 dt = \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{dy}{dt} \right)^2 dt = \underbrace{y \frac{dy}{dt} \Big|_{t_i}^{t_f}}_0 - \int_{t_i}^{t_f} y \frac{d^2 y}{dt^2} dt \right\} \\ &= \frac{i}{2} \int_{t_i}^{t_f} y \left(-\frac{m}{\hbar} \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) \right) y dt = \frac{i}{2} \int_{t_i}^{t_f} y \hat{O} y dt, \end{aligned}$$

gdje je $\hat{O} \equiv -\frac{m}{\hbar} \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right)$ [35, 41] diferencijalni operator. U prošlom poglavlju dokazali smo da je rezultat Gaussovog integrala za kvadratnu formu proporcionalan s

$$\int \mathcal{D}[y] e^{\frac{i}{2} \int_{t_i}^{t_f} y \hat{O} y dt} \sim (\det \hat{O})^{-1/2}, \quad (3.2.75)$$

tj. funkcionalni integral (3.2.74) postaje

$$F(T) \sim (\det \hat{O})^{-1/2}. \quad (3.2.76)$$

Kako bismo eksplisitno izračunali $\det \hat{O}$, razvit ćemo $y(t)$ u Fourierov red [42, 43]

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n y_n(t), \quad (3.2.77)$$

gdje su $y_n(t)$ svojstvene, ortonormirane funkcije operatora \hat{O} , a a_n koeficijenti Fourierovog razvoja. Prepostavimo da su svojstvene funkcije oblika

$$y_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right), \quad (3.2.78)$$

gdje je $T = t_f - t_i$. Funkcija $y(t)$ zadovoljava rubne uvjete $y(t_i) = 0$ i $y(t_f) = 0$. Svojstvene funkcije $y_n(t)$ moraju zadovoljiti svojstvenu jednadžbu operatora \hat{O} ,

$$\hat{O} y_n(t) = \lambda_n y_n(t). \quad (3.2.79)$$

Uvrštavajući definirane \hat{O} i $y_n(t)$, slijedi

$$-\frac{m}{\hbar} \left(\frac{\partial^2 y_n(t)}{\partial t^2} + \omega^2 y_n(t) \right) = \lambda_n y_n(t), \quad (3.2.80)$$

$$-\frac{m}{\hbar} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right) + \omega^2 \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right) \right) = \lambda_n \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right), \quad (3.2.81)$$

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial t^2} \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right) = - \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right) \right\}, \quad (3.2.82)$$

$$-\frac{m}{\hbar} \left(- \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right) + \omega^2 \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right) \right) = \lambda_n \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right), \quad (3.2.83)$$

$$-\frac{m}{\hbar} \left(- \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 + \omega^2 \right) = \lambda_n, \quad (3.2.84)$$

$$\lambda_n = \frac{m}{\hbar} \left[\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right]. \quad (3.2.85)$$

Da bi svojstvena vrijednost bila negativna, mora vrijediti $\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 < 0$, tj. $n < \frac{T\omega}{\pi}$. Vrijednost n mora biti cijeli broj. Stoga, broj negativnih svojstvenih vrijednosti n_- je najveći cijeli broj manji od ili jednak izrazu $\frac{T\omega}{\pi}$, što možemo zapisati i kao $n_- = \lfloor \frac{T\omega}{\pi} \rfloor$, gdje $\lfloor \cdot \rfloor$ predstavlja donju cijelu vrijednost, tj. najveći cijeli broj manji ili jednak izrazu unutar zagrade. Npr. ako je $\frac{T\omega}{\pi} = 3.7$, tada je broj negativnih svojstvenih vrijednosti $n_- = \lfloor 3.7 \rfloor = 3$, što znači da će svojstvene vrijednosti λ_n biti negativne za $n = 1, 2, 3$. Za razliku od n_- , koji je konačan broj, broj pozitivnih svojstvenih vrijednosti n_+ je beskonačan zbog $n > \lfloor \frac{T\omega}{\pi} \rfloor$, tj. $n_+ = \infty$. Svojstvene funkcije $y_n(t)$ čine bazu Hilbertovog prostora $L^2 \left([t_i, t_f] \right)$. To znači da svaka kvadratno integrabilna funkcija $y(t)$ s rubnim uvjetima $y(t_i) = y(t_f) = 0$ može biti izražena kao linearna kombinacija svojstvenih funkcija $y_n(t)$, $y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n y_n(t)$. Zbog ortonormiranosti svojstvenih funkcija $y_n(t)$, Fourierovi koeficijenti a_n čine diskretan skup varijabli integracije. To znači da možemo integral preko svih mogućih puteva $y(t)$ izraziti kao produkt integrala po koeficijentima a_n , tj.

$$\mathcal{D}[y(t)] = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{da_n}{\sqrt{2\pi i}} \cdot \widetilde{N}. \quad (3.2.86)$$

Prodot $\prod_{n=1}^{\infty} \frac{da_n}{\sqrt{2\pi i}}$ označava beskonačno mnogo integrala po svakom koeficijentu a_n , a svaki od tih integrala skaliran je faktorom $\frac{1}{\sqrt{2\pi i}}$ kako bi se normalizirala mjera u Fourierovom prostoru. Jakobijan \widetilde{N} predstavlja promjenu mjere iz prostora funkcija $y(t)$ u prostor Fourierovih koeficijenata a_n . Nadalje, integral iz eksponenta (3.2.75) možemo pisati kao

$$\int_{t_i}^{t_f} dt y(t) \hat{O} y(t) = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\sum_{n=1}^{\infty} a_n y_n(t) \right) \left(\sum_{m=1}^{\infty} a_m \lambda_m y_m(t) \right) \quad (3.2.87)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} a_n a_m \lambda_m \underbrace{\int_{t_i}^{t_f} dt y_n(t) y_m(t)}_{\delta_{nm}} \quad (3.2.88)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 \lambda_n. \quad (3.2.89)$$

Uvrštavanjem (3.2.86) i (3.2.89) u (3.2.74), dobivamo

$$F(T) = \tilde{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{da_n}{\sqrt{2\pi i}} e^{\frac{i}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n^2} \quad (3.2.90)$$

$$= \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{da_n}{\sqrt{2\pi i}} e^{\frac{i}{2} \lambda_n a_n^2} \stackrel{\text{Gauss.}}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi i}} \sqrt{\frac{2\pi i}{\lambda_n}} = (\lambda_n)^{-1/2} \right\} \quad (3.2.91)$$

$$= \tilde{N} \left| \prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n \right|^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.2.92)$$

Problem je taj što produkt iz (3.2.92) može divergirati za $\lambda_n > 0$ kada $n \rightarrow \infty$. Da bismo osigurali konvergenciju beskonačnog produkta, koristimo regularizaciju, tako što ćemo izraz (3.2.92) pomnožiti s faktorom $\frac{e^{i(n_+ - n_-)\frac{\pi}{4}}}{e^{i(n_+ + n_-)\frac{\pi}{4}}}$ pa pišemo

$$F(T) = \tilde{N} \left| \prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n \right|^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{e^{i(n_+ - n_-)\frac{\pi}{4}}}{e^{i(n_+ + n_-)\frac{\pi}{4}}} \quad (3.2.93)$$

$$F(T) = \tilde{N} \left| \prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n \right|^{-\frac{1}{2}} \cdot e^{-in - \frac{\pi}{2}}. \quad (3.2.94)$$

Za kvadratni operator \hat{O} , determinanta operatora može se izraziti kao produkt njegovih svojstvenih vrijednosti. Ako \hat{O} ima svojstvene vrijednosti λ_n , tada je determinanta

$$|\det \hat{O}| = \prod_{n=1}^{\infty} |\lambda_n|. \quad (3.2.95)$$

Stoga, za $\omega \neq 0$ imamo

$$|\det \hat{O}_{\omega}| = \prod_{n=1}^{\infty} |\lambda_n(\omega)|,$$

a za $\omega = 0$,

$$|\det \hat{O}_0| = \prod_{n=1}^{\infty} |\lambda_n(0)|. \quad (3.2.96)$$

U ovom kontekstu, ω predstavlja frekvenciju harmoničkog oscilatora. Kada je $\omega = 0$, sistem se ponaša kao slobodna čestica, a kada je $\omega \neq 0$, sistem je harmonički oscilator. Očito je da \tilde{N} ne ovisi o ω pa možemo pisati

$$F_{\omega}(T) = \tilde{N} \left(|\det \hat{O}_{\omega}| \right)^{-1/2} e^{-in - \pi/2} \quad \text{i} \quad F_0(T) = \tilde{N} \left(|\det \hat{O}_0| \right)^{-1/2}. \quad (3.2.97)$$

Pogledajmo njihov omjer

$$\frac{F_{\omega}(T)}{F_0(T)} = \frac{\tilde{N} \left(|\det \hat{O}_{\omega}| \right)^{-1/2} e^{-in - \pi/2}}{\tilde{N} \left(|\det \hat{O}_0| \right)^{-1/2}} = \left(\frac{|\det \hat{O}_0|}{|\det \hat{O}_{\omega}|} \right)^{1/2} e^{-in - \pi/2} \quad (3.2.98)$$

$$\frac{F_\omega(T)}{F_0(T)} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(\frac{|\lambda_n(0)|}{|\lambda_n(\omega)|} \right)^{1/2} e^{-in-\pi/2}. \quad (3.2.99)$$

Prema (3.2.85), svojstvene vrijednosti operatora \hat{O}_ω su $\lambda_n(\omega) = \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2$, a za $\omega = 0$ to su $\lambda_n(0) = \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2$. Omjer daje

$$\frac{\lambda_n(0)}{\lambda_n(\omega)} = \frac{\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2}{\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2} = \frac{1}{1 - \frac{\omega^2 T^2}{(n\pi)^2}} = \frac{1}{1 - \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2}, \quad (3.2.100)$$

gdje smo uveli oznaku $a = \omega T$. Ali mi imamo beskonačan produkt takvih omjera, tj.

$$\prod_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n(0)}{\lambda_n(\omega)} = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{1 - \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2}. \quad (3.2.101)$$

Iskoristimo Eulerovu formulu [44]

$$\sin x = x \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{n^2 \pi^2}\right), \quad (3.2.102)$$

pa, uz $x = a$, pišemo

$$\prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{a^2}{n^2 \pi^2}\right) = \frac{\sin a}{a}, \quad (3.2.103)$$

$$\prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{1 - \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2} = \frac{a}{\sin a}. \quad (3.2.104)$$

Vratimo supstituciju $a = \omega T$ pa je

$$\prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{1 - \left(\frac{\omega T}{n\pi}\right)^2} = \frac{\omega T}{\sin(\omega T)}, \quad (3.2.105)$$

tj.

$$\prod_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n(0)}{\lambda_n(\omega)} = \frac{\omega T}{\sin(\omega T)}, \quad (3.2.106)$$

što uvršteno u (3.2.99) daje

$$F_\omega(T) = F_0(T) \cdot \sqrt{\frac{\omega T}{|\sin(\omega T)|}} e^{-in-\frac{\pi}{2}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar |\sin(\omega T)|}} e^{-in-\frac{\pi}{2}}. \quad (3.2.107)$$

Korištenjem $K(x_f, t_f; x_i, t_i) = e^{i \frac{S_c}{\hbar}} \cdot F_\omega(t_f - t_i)$ za $T = t_f - t_i$ te korištenjem pretpostavke $\omega T < \pi$, dobivamo konačan izraz za propagator [35, 41]

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} e^{i \frac{m\omega}{2\hbar} \left[(x_i^2 + x_f^2) \operatorname{ctg}(\omega T) - \frac{2x_i x_f}{\sin(\omega T)} \right]}. \quad (3.2.108)$$

3.3. Propagator za općenitiji lagranžijan

Razmotrimo općenitiji lagranžijan [7, 35]

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \left(a + bx + cx^2 + d\dot{x} + ex\dot{x} \right), \quad (3.3.1)$$

gdje su a, b, c, d, e vremenski neovisne konstante.

Za početak, izvedimo klasičnu jednadžbu gibanja za (3.3.1). Iz E-L jednadžbe,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x}, \quad (3.3.2)$$

izračunamo potrebne derivacije: $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} - d - ex$, $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = m\ddot{x}$, $\frac{\partial L}{\partial x} = -b - 2cx$ pa je klasična jednadžba gibanja

$$m\ddot{x}_c = -b - 2cx_c. \quad (3.3.3)$$

U svrhu rješavanja jednadžbe (3.3.3), uvodimo supstituciju $\xi(t) = x_c(t) + \frac{b}{2c}$ te koristimo rubne uvjete $x_c(t_i) = x_i$ i $x_c(t_f) = x_f$, što kada uvrstimo u (3.3.3) daje

$$m\ddot{\xi}(t) = -2c\xi(t), \quad (3.3.4)$$

$$\ddot{\xi}(t) + \omega^2 \xi(t) = 0. \quad (3.3.5)$$

Iz jednadžbe (3.3.5) uočavamo da $\xi(t)$ zadovoljava jednadžbu harmoničkog oscilatora frekvencije $\omega^2 = \frac{2c}{m}$ s rubnim uvjetima

$$\xi(t_i) = \xi_i = x_i + \frac{b}{2c} \quad \text{i} \quad \xi(t_f) = \xi_f = x_f + \frac{b}{2c}. \quad (3.3.6)$$

Opće rješenje jednadžbe (3.3.5) dano je s

$$\xi(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t), \quad (3.3.7)$$

gdje je $\omega = \sqrt{\frac{2c}{m}}$, a A i B neodređene konstante. Koristeći rubne uvjete, dobivamo jednadžbe

$$\xi_i = A \sin(\omega t_i) + B \cos(\omega t_i), \quad (3.3.8)$$

$$\xi_f = A \sin(\omega t_f) + B \cos(\omega t_f), \quad (3.3.9)$$

iz kojih dobivamo A i B pa rješenje jednadžbe (3.3.5) glasi

$$\xi(t) = \xi_i \frac{\sin(\omega(t_f - t))}{\sin(\omega(t_f - t_i))} + \xi_f \frac{\sin(\omega(t - t_i))}{\sin(\omega(t_f - t_i))}, \quad (3.3.10)$$

odnosno, vraćanjem $\xi(t) = x_c(t) + \frac{b}{2c}$ dobivamo

$$x_c(t) = \left(x_i + \frac{b}{2c} \right) \frac{\sin \omega(t_f - t)}{\sin \omega(t_f - t_i)} + \left(x_f + \frac{b}{2c} \right) \frac{\sin \omega(t - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)} - \frac{b}{2c}. \quad (3.3.11)$$

U QM, centralni objekt je propagator koji se, u formulaciji integrala po putevima, dobiva kao

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}. \quad (3.3.12)$$

Dakle, propagator se dobije sumacijom po svim putevima $x(t)$, t.d. vrijede početni uvjeti $x(t_i) = x_i$ i $x(t_f) = x_f$. Neka su fluktuacijski putevi oko $x_c(t)$ dani s

$$y(t) = x(t) - x_c(t), \quad (3.3.13)$$

iz čega slijedi $y(t_i) = y(t_f) = 0$. Funkcija $y(t)$ opisuje odstupanje od klasičnog puta $x_c(t)$, tj. kvantne fluktuacije. Cilj je izračunati propagator iz izraza (3.3.12). Već smo ranije dokazali da vrijedi $\mathcal{D}[x(t)] = \mathcal{D}[x_c(t) + y(t)] = \mathcal{D}[y(t)]$. Da bismo izračunali akciju $S[x(t)]$, napišimo prvo lagranžian kao

$$L(x(t), \dot{x}(t)) = L(x_c(t) + y(t), \dot{x}_c(t) + \dot{y}(t)) \quad (3.3.14)$$

$$\stackrel{(3.3.1)}{=} \frac{1}{2} m \dot{x}_c^2 - [a + bx_c + cx_c^2 + d\dot{x}_c + ex_c \dot{x}_c] \quad (3.3.15)$$

$$+ \frac{1}{2} m \dot{y}^2 - [by + cy^2 + d\dot{y} + ey\dot{y}] \quad (3.3.16)$$

$$+ m \dot{x}_c \dot{y} - [2cx_c y + e(\dot{x}_c y + x_c \dot{y})], \quad (3.3.17)$$

pa je akcija dana s

$$S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ L(x_c, \dot{x}_c) + \frac{1}{2} m \dot{y}^2 - [by + cy^2 + d\dot{y} + ey\dot{y}] \right. \quad (3.3.18)$$

$$\left. + m \dot{x}_c \dot{y} - \left[2cx_c y + e \frac{d}{dt} (x_c y) \right] \right\}. \quad (3.3.19)$$

Promotrimo pojedine članove u gore napisanoj akciji. Koristeći $y(t_i) = y(t_f) = 0$, slijedi

$$\int_{t_i}^{t_f} dt \frac{d}{dt} (x_c y) = x_c y|_{t_i}^{t_f} = 0, \quad (3.3.20)$$

$$\int_{t_i}^{t_f} dt \dot{x}_c \dot{y} = \{u = \dot{x}_c, dv = \dot{y} dt\} = \underbrace{[\dot{x}_c y]_{t_i}^{t_f}}_0 - \int_{t_i}^{t_f} dt y \ddot{x}_c \quad (3.3.21)$$

$$= - \int_{t_i}^{t_f} dt y \ddot{x}_c \stackrel{(3.3.3)}{=} - \frac{1}{m} \int_{t_i}^{t_f} dt (-by - 2cx_c y). \quad (3.3.22)$$

Akcija postaje

$$S[x(t)] = S[x_c(t)] + \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \frac{1}{2} m \dot{y}^2 - by - cy^2 - d\dot{y} - ey\dot{y} - (-by - 2cx_c y) - 2cx_c y \right\}$$

$$= S[x_c(t)] + \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \frac{1}{2} my^2 - cy^2 - d\dot{y} - ey\dot{y} \right\}.$$

Zadnji član gornjeg integrala postaje

$$\int_{t_i}^{t_f} dt y\dot{y} = \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{dy}{dt} y = \int_{y(t_i)}^{y(t_f)} dy y = 0, \quad (3.3.23)$$

pa konačno akcija poprima sljedeći oblik

$$S[x(t)] = S[x_c(t)] + \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \frac{1}{2} my^2 - cy^2 \right\}. \quad (3.3.24)$$

Zadnji član iz (3.3.24), uz

$$\begin{aligned} t &\rightarrow t - t_i, \\ dt &\rightarrow dt, \\ t_f - t_i &\equiv T, \end{aligned} \quad (3.3.25)$$

postaje

$$\frac{m}{2} \int_0^T dt \left\{ \dot{y}^2 - \frac{2c}{m} y^2 \right\}, \quad \omega^2 = \frac{2c}{m}. \quad (3.3.26)$$

Uz uvođenje

$$L_\omega(y, \dot{y}) \equiv \frac{m}{2} \left\{ \dot{y}^2 - \omega^2 y^2 \right\}, \quad (3.3.27)$$

izraz za akciju pišemo kao

$$S[x(t)] = S[x_c(t)] + \int_0^T dt L_\omega(y, \dot{y}), \quad (3.3.28)$$

gdje je $S[x_c(t)]$ pokrata za $S_c[x_f, x_i; t_f, t_i]$. Uvrstimo (3.3.28) u (3.3.12) pa izraz za propagator postaje

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{y(t_i)=0}^{y(t_f)=0} \mathcal{D}[y(t)] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[x_c(t)] + \frac{i}{\hbar} \int_0^T dt L_\omega(y, \dot{y}) \right] \quad (3.3.29)$$

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = e^{\frac{i}{\hbar} S[x_c(t)]} \int_{y(t_i)=0}^{y(t_f)=0} \mathcal{D}[y(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt L_\omega(y, \dot{y})} \quad (3.3.30)$$

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = e^{\frac{i}{\hbar} S[x_c(t)]} F_\omega(t_f, t_i), \quad (3.3.31)$$

gdje je

$$F_\omega(t_f, t_i) = \int_{y(t_i)=0}^{y(t_f)=0} \mathcal{D}[y(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt L_\omega(y, \dot{y})}. \quad (3.3.32)$$

Bitno je uočiti da $F_\omega(t_f, t_i)$ opisuje amplitudu vjerojatnosti da čestice krene iz točke $y(t_i) = 0$ i vrati se u nju $y(t_f) = 0$ nakon vremena T , što možemo zapisati i kao

$$F_\omega(t_f, t_i) = K_\omega(0, t_f; 0, t_i). \quad (3.3.33)$$

3.4. Veza integrala po putevima i statističke fizike

Ovo poglavlje bazirano je na [1, 7].

Particijska funkcija Z u statističkoj fizici opisuje kako je energija raspodijeljena među različitim stanjima sistema na određenoj temperaturi. Definira se kao suma eksponencijalnih faktora energija svih mogućih stanja, tj.

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}, \quad (3.4.1)$$

gdje je $\beta = \frac{1}{k_B T}$, a E_n energija n -tog kvantnog stanja. Koristeći relaciju kompletnosti, $\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \mathbf{I}$, možemo partijsku funkciju Z izraziti kao sumu očekivanja operatora $e^{-\beta H}$ u svojstvenim stanjima n ,

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \left\langle n \left| e^{-\beta H} \right| n \right\rangle. \quad (3.4.2)$$

Dodatno, koristeći relaciju potpunosti za stanja položaja $\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x| = \mathbf{I}$, partijsku funkciju možemo izraziti kao integral preko svih mogućih položaja x ,

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sum_{n=0}^{\infty} \left\langle n \left| x \right\rangle \left\langle x \left| e^{-\beta H} \right| n \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sum_{n=0}^{\infty} \left\langle x \left| e^{-\beta H} \right| n \right\rangle \left\langle n \left| x \right\rangle \quad (3.4.3)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \left\langle x \left| e^{-\beta H} \right| x' \right\rangle}_{\equiv K(x, x', \beta)} \left\langle x' \left| n \right\rangle \left\langle n \left| x \right\rangle \right. \quad (3.4.4)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx' K(x, x', \beta) \delta(x - x') = \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} f(x') \delta(x - x') dx' = f(x) \right\} \quad (3.4.5)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx K(x, x, \beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left\langle x \left| e^{-\beta H} \right| x \right\rangle. \quad (3.4.6)$$

U QM, vremenski evolucijski operator je dan s $e^{-iHt/\hbar}$. U statističkoj fizici, zanimaju nas termodinamička svojstva sistema, koja se opisuju partijskom funkcijom (3.4.1). Da bismo dobili željeni operator, koristimo Wickovu rotaciju koja uključuje zamjenu realnog vremena t s imaginarno vremenskim parametrom τ , tj. $t \rightarrow -i\tau$. Sada operator postaje $e^{-iHt/\hbar} \rightarrow e^{-H\tau/\hbar} = e^{-\beta H}$, gdje je $\tau = \hbar\beta$. Operator $e^{-\beta H}$ možemo interpretirati kao evoluciju sistema kroz imaginarno vremenski interval $\hbar\beta$. Koristeći integral po putu, možemo

izraziti očekivanu vrijednost $\langle x | e^{-\beta H} | x \rangle$ kao integral preko svih mogućih puteva $x(\tau)$ koji počinju i završavaju u x ,

$$\langle x | e^{-\beta H} | x \rangle = \int \mathcal{D}[x(\tau)] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau L_E(x, \dot{x}) \right], \quad (3.4.7)$$

gdje je L_E Euclidov lagranžijan sistem. Lagranžijan u realnom vremenu je $L = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x)$. Nakon Wickove rotacije, $t \rightarrow -i\tau$, lagranžijan postaje $L_E = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x)$ pa partijsku funkciju pišemo kao

$$Z = \int_{x(0)=x(\hbar\beta)}^{x(\tau)=x(\hbar\beta)} \mathcal{D}[x(\tau)] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x) \right) \right]. \quad (3.4.8)$$

Razmotrimo situaciju na primjeru harmoničkog oscilatora. U prethodnom poglavlju pokazali smo da vrijedi

$$\langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega(t_f - t_i)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \frac{(x_i^2 + x_f^2) \cos \omega(t_f - t_i) - 2x_i x_f}{\sin \omega(t_f - t_i)} \right].$$

Za partijsku funkciju uzimamo $x_f = x_i = x$ i $t_f - t_i = -i\hbar\beta$ pa je

$$\begin{aligned} \sin(\omega(t_f - t_i)) &= \sin(-i\hbar\beta\omega) = -i \sinh(\hbar\beta\omega), \\ \cos(\omega(t_f - t_i)) &= \cos(-i\hbar\beta\omega) = \cosh(\hbar\beta\omega), \end{aligned} \quad (3.4.9)$$

gdje smo koristili identitete za hiperbolične funkcije $\sin(-i\theta) = -i \sinh(\theta)$ i $\cos(-i\theta) = \cosh(\theta)$. Konačno, propagator postaje

$$\langle x | e^{-\beta H} | x \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar(-i \sinh(\hbar\beta\omega))}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \frac{2x^2 \cosh(\hbar\beta\omega) - 2x^2}{-i \sinh(\hbar\beta\omega)} \right] \quad (3.4.10)$$

$$\langle x | e^{-\beta H} | x \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \hbar \sinh(\hbar\beta\omega)}} \exp \left[-\frac{m\omega x^2}{\hbar} \frac{\cosh(\hbar\beta\omega) - 1}{\sinh(\hbar\beta\omega)} \right]. \quad (3.4.11)$$

Da bismo dobili partijsku funkciju Z , moramo integrirati izraz (3.4.11) po svim mogućim položajima x ,

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \hbar \sinh(\hbar\beta\omega)}} \exp \left[-\frac{m\omega x^2}{\hbar} \frac{\cosh(\hbar\beta\omega) - 1}{\sinh(\hbar\beta\omega)} \right]. \quad (3.4.12)$$

Postavimo $a = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{\cosh(\hbar\beta\omega) - 1}{\sinh(\hbar\beta\omega)}$ te iskoristimo $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ pa (3.4.12) postaje

$$Z = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\hbar\beta\omega)}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\frac{m\omega}{\hbar} \frac{\cosh(\hbar\beta\omega)-1}{\sinh(\hbar\beta\omega)}}} \quad (3.4.13)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\hbar\beta\omega)}} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega} \frac{\sinh(\hbar\beta\omega)}{\cosh(\hbar\beta\omega) - 1}} \quad (3.4.14)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega\pi\hbar\sinh(\hbar\beta\omega)}{2\pi\hbar\sinh(\hbar\beta\omega)m\omega(\cosh(\hbar\beta\omega) - 1)}} = \sqrt{\frac{1}{2(\cosh(\hbar\beta\omega) - 1)}} \quad (3.4.15)$$

$$= \left\{ \cosh(\hbar\beta\omega) - 1 = 2\sinh^2(\hbar\beta\omega/2) \right\} = \sqrt{\frac{1}{2 \cdot 2\sinh^2(\hbar\beta\omega/2)}} \quad (3.4.16)$$

$$= \frac{1}{2\sinh(\hbar\beta\omega/2)} = \left\{ \sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \right\} = \frac{1}{e^{\hbar\beta\omega/2} - e^{-\hbar\beta\omega/2}} \quad (3.4.17)$$

$$= \frac{1}{e^{\hbar\beta\omega/2}(1 - e^{-\hbar\beta\omega})} = \frac{e^{-\hbar\beta\omega/2}}{1 - e^{-\hbar\beta\omega}} \quad (3.4.18)$$

$$= \left\{ \frac{1}{1 - e^{-\hbar\beta\omega}} = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\hbar\beta\omega})^n, \quad x = e^{-\hbar\beta\omega} \right\} = e^{-\hbar\beta\omega/2} \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\hbar\beta\omega})^n \quad (3.4.19)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\hbar\beta\omega/2} e^{-n\hbar\beta\omega} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\hbar\beta\omega(n+\frac{1}{2})}. \quad (3.4.20)$$

Energetski nivoi harmoničkog oscilatora su kvantizirani i dani su izrazom $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, gdje je energija osnovnog stanja $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

Poglavlje 4

Rasprava i zaključak

U ovom radu istražili smo formalizam Feynmanovih integrala po putevima kao alternativni pristup QM. Integral po putevima povezuje klasičnu i kvantnu teoriju kroz princip minimalne akcije, pružajući duboko razumijevanje kvantnih fenomena. Eksperiment dvostrukog proreza, koji smo analizirali na početku, jasno demonstrira osnovne kvantne principe poput superpozicije i interferencije, što nas uvodi u kvantnu prirodu materije. Ovaj eksperiment ilustrira fundamentalne razlike između CM i QM, potvrđujući valnu prirodu čestica i osnovne principe Kopenhaške interpretacije kvantne mehanike.

Prikazali smo kako se formalizam integrala po putevima izvodi iz kanonske QM. Posebno smo se bavili tehnikama računanja integrala po putevima koristeći Gaussove integrale, koji su ključni za izračunavanje propagatora. Gaussovi integrali omogućuju pojednostavljenje složenih kvantnih problema, a njihova primjena u formalizmu integrala po putevima pruža analitičke rezultate za različite kvantne sustave. Međutim, valja naglasiti važna ograničenja i pretpostavke koje smo imali tijekom izvođenja formalizma integrala po putevima. Jedno od ključnih ograničenja je pretpostavka da broj diskretnih koraka N ide u beskonačnost ($N \rightarrow \infty$). Ova pretpostavka omogućuje da se integral po putevima računa kao granica sume po sve finijim podjelama vremena, što znači da se vrijeme diskretizira na beskonačno mali interval. Ovo ograničenje nosi nekoliko važne implikacije kao npr. pretpostavka da $N \rightarrow \infty$, što osigurava da se putevi čestice mogu smatrati kontinuiranim krivuljama a to je ključno za primjenu integrala po putevima. Često je broj koraka konačan, što može dovesti do netočnih aproksimacija. Također, iako su putevi kontinuirani, oni nisu diferencijabilni, što znači da ne možemo uвijek koristiti klasične metode diferencijacije za analizu puteva. To zahtijeva specijalne matematičke alate za rješavanje problema u formalizmu integrala po putevima, kao npr. teoriju mjere i funkcionalnu analizu.

Analizirali smo Gaussove integrale, koji su od suštinskog značaja za razumijevanje integrala po putevima. Gaussovi integrali omogućuju pojednostavljenje složenih kvantnih problema, posebno kod izračunavanja propagatora. Zatim smo detaljno obradili primjer harmoničkog oscilatora, koji je klasičan model u kvantnoj mehanici. Pokazali smo kako se propagator za harmonički oscilator može izračunati koristeći integral po putevima, pružajući intuitivno razumijevanje kvantnih stanja oscilatora. Također smo istražili vezu između integrala po putevima i statističke fizike. Pokazali smo kako se particijske funkcije mogu izračunati pomoću ovog formalizma, što dodatno potvrđuje važnost integrala po putevima u širem kontekstu fizike.

Integral po putevima je postao ključan alat u kvantnoj teoriji polja (QFT), omogućujući analizu i rješavanje složenih problema u fizici čestica i drugih područja. Integral po putevima nudi elegantan način kvantizacije polja, prelazeći od klasičnih polja do kvantnih. Ova metoda omogućuje formiranje funkcionalnih integrala koji opisuju vjerojatnosti različitih kvantnih stanja polja [7]. Također, formalizam pruža osnovu za konstrukciju Feynmanovih dijagrama, koji vizualno predstavljaju interakcije čestica. Ovi dijagrami su ključni za proračune u QFT, omogućujući precizno računanje amplituda raspršenja [7]. Kroz integral po putevima, renormalizacija postaje transparentnija, omogućujući uklanjanje infinitezimalnih i divergirajućih veličina iz teorijskih proračuna. Ovaj proces je ključan za dobivanje fizički smislenih rezultata u QFT [45]. Spomenimo još da je integral po putevima esencijalan za proračune u QED i QCD, dvije najuspješnije teorije unutar QFT, kao i to da ima primjenu i kod formuliranja kvante gravitacije [46, 47].

Dodatak A

Baker–Campbell–Hausdorff formula

Cilj je dokazati da za neka dva operatora, A i B , vrijedi

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]+\frac{1}{12}[B,[B,A]]+\dots}. \quad (\text{A.0.1})$$

Prvo ćemo dokazati da vrijedi

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \dots + \overbrace{\frac{1}{n!} [A, [A, \dots [A, B] ..]]}^{\text{n A-ova}} + \dots \quad (\text{A.0.2})$$

Definirajmo sljedeću funkciju operatora

$$F(x) = e^{xA} B e^{-xA} \quad (\text{A.0.3})$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} F_n x^n. \quad (\text{A.0.4})$$

Vidimo da za $x = 1$ izraz (A.0.2) odgovara $F(1)$. Nadalje, koristeći (A.0.3), pogledajmo derivaciju

$$\frac{dF}{dx} = A e^{xA} B e^{-xA} + e^{xA} B (-A) e^{-xA} \quad (\text{A.0.5})$$

$$= e^{xA} [A, B] e^{-xA} \quad (\text{A.0.6})$$

$$= [A, e^{xA} B e^{-xA}] \quad (\text{A.0.7})$$

$$= [A, F(x)]. \quad (\text{A.0.8})$$

Napravimo isto, ali sada koristimo (A.0.4) i (A.0.8)

$$\frac{dF}{dx} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} F_n x^{n-1} \quad (\text{A.0.9})$$

$$= [A, F(x)] \quad (\text{A.0.10})$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [A, F_n] x^n. \quad (\text{A.0.11})$$

Sljedeći korak je taj da napravimo zamjenu $n \rightarrow m - 1$ pa je

$$\frac{dF}{dx} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(m-1)!} [A, F_{m-1}] x^{m-1}, \quad (\text{A.0.12})$$

što kada usporedimo sa (A.0.11) daje

$$F_n = [A, F_{n-1}]. \quad (\text{A.0.13})$$

Napišimo prvih nekoliko članova rekurzije

$$F_0 = B, \quad (\text{A.0.14})$$

$$F_1 = [A, F_0] = [A, B], \quad (\text{A.0.15})$$

$$F_2 = [A, F_1] = [A, [A, B]] \dots \quad (\text{A.0.16})$$

Uočavamo da su napisani članovi upravo oni iz (A.0.2). Uvrstimo ih u definirani Taylorov red

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} F_n x^n = B + [A, B]x + \frac{1}{2}[A, [A, B]]x^2 \dots \quad (\text{A.0.17})$$

Uspoređujući izraze (A.0.3) i (A.0.17), za $x = 1$ možemo pisati

$$F(1) = e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2}[A, [A, B]] \dots \quad (\text{A.0.18})$$

Ako stavimo $x = -1$ te iskoristimo $[A, B] = -[B, A]$, slijedi

$$e^{-A} B e^A = B + [B, A] + \frac{1}{2}[[B, A], A] + \dots \quad (\text{A.0.19})$$

Sljedeće što nas zanima je odrediti $\frac{d}{dx} e^{A(x)}$, gdje je A operator koji je funkcija od x . Koristeći razvoj u red, uz $A' = dA/dx$, slijedi

$$\frac{d}{dx} [e^{A(x)}] = \frac{d}{dx} \left(1 + A + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \dots \right) \quad (\text{A.0.20})$$

$$= A' + \frac{A'A + AA'}{2} + \frac{A'AA + AA'A + AAA'}{3!} + \dots \quad (\text{A.0.21})$$

Koristili smo lančano pravilo jer A i A' ne moraju nužno međusobno komutirati. (A.0.21) možemo pisati kao

$$A' + \frac{A'A + AA'}{2} + \frac{A'AA + AA'A + AAA'}{3!} + \dots = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(m+n+1)!} A^m A' A^n, \quad (\text{A.0.22})$$

odnosno

$$\sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(m+n+1)!} A^m A' A^n = \frac{d}{dx} e^{A(x)}. \quad (\text{A.0.23})$$

Nadalje, pogledajmo sljedeći integral

$$\int_0^1 dy e^{(1-y)A(x)} \frac{d}{dx} A(x) e^{yA(x)}. \quad (\text{A.0.24})$$

Koristeći Taylorov razvoj, za dva eksponencijalna doprinosa, (A.0.24) postaje

$$\int_0^1 dy e^{(1-y)A} \frac{dA}{dx} e^{yA} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \int_0^1 dy \frac{(1-y)^n A^n}{n!} A' y^m A^m \quad (\text{A.0.25})$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{A^n A' A^m}{n! m!} \int_0^1 dy (1-y)^n y^m. \quad (\text{A.0.26})$$

Riješimo integral iz (A.0.26)

$$\int_0^1 dy (1-y)^n y^m = -\frac{1}{m+1} \int_0^1 dy^{m+1} (1-y)^n \quad (\text{A.0.27})$$

$$= \frac{1}{m+1} \int_0^1 d(1-y)^n y^{m+1} \quad (\text{A.0.28})$$

$$= \frac{n}{m+1} \int_0^1 dy (1-y)^{n-1} y^{m+1}. \quad (\text{A.0.29})$$

Ponavljamajući postupak, slijedi

$$\int_0^1 dy (1-y)^n y^m = \frac{n}{m+1} \frac{n-1}{m+2} \cdots \frac{1}{m+n} \int_0^1 dy y^{m+n} \quad (\text{A.0.30})$$

$$= \frac{n}{m+1} \frac{n-1}{m+2} \cdots \frac{1}{m+n} \frac{1}{m+n+1} \quad (\text{A.0.31})$$

$$= \frac{n! m!}{(m+n+1)!}. \quad (\text{A.0.32})$$

Uvrštavanjem (A.0.32) u (A.0.26) te usporedbom sa (A.0.23) dobije se

$$\frac{d}{dx} e^{A(x)} = \int_0^1 dy e^{(1-y)A} \frac{dA}{dx} e^{yA}. \quad (\text{A.0.33})$$

Konačno, množeći s lijeva (A.0.33) sa e^{-A} slijedi

$$e^{-A} \frac{d}{dx} e^A = \int_0^1 dy e^{-yA} \frac{dA}{dx} e^{yA} \quad (\text{A.0.34})$$

$$= \int_0^1 dy e^{-yA} A' e^{yA} \quad (\text{A.0.35})$$

$$\stackrel{(A.0.19)}{=} A' + \frac{1}{2} [A', A] + \frac{1}{3!} [[A', A], A] + \dots \quad (\text{A.0.36})$$

Sada definiramo novu funkciju operatora

$$\tilde{F}(x) = e^{xA} e^{xB} = e^{G(x)}, \quad (\text{A.0.37})$$

$$G(x) = \sum_{n=1}^{\infty} G_n x^n, \quad (\text{A.0.38})$$

čiji je inverz $e^{-G} = e^{-xB} e^{-xA}$. Razmotrimo

$$e^{-G} \frac{d}{dx} e^G = e^{-xB} e^{-xA} \frac{d}{dx} e^{xA} e^{xB} \quad (\text{A.0.39})$$

$$= e^{-xB} e^{-xA} (e^{xA} A e^{xB} + e^{xA} B e^{xB}) \quad (\text{A.0.40})$$

$$= e^{-xB} A e^{xB} + e^{-xA} B e^{xB} \quad (\text{A.0.41})$$

$$= B + e^{-xB} A e^{xB} \quad (\text{A.0.42})$$

$$\stackrel{(A.0.19)}{=} B + A + x[A, B] + \frac{x^2}{2}[B, [B, A]] + \dots \quad (\text{A.0.43})$$

Iz (A.0.38) slijedi

$$G(x) = xG_1 + x^2G_2 + x^3G_3 + \dots \quad (\text{A.0.44})$$

$$G'(x) = G_1 + 2xG_2 + 3x^2G_3 + \dots, \quad (\text{A.0.45})$$

pa možemo pisati

$$e^{-G} \frac{d}{dx} e^G = G' + \frac{1}{2} [G', G] + \frac{1}{3!} [[G', G], G] + \dots \quad (\text{A.0.46})$$

$$= G_1 + 2xG_2 + x^2 \left(3G_3 - \frac{1}{2} [G_1, G_2] \right) + \mathcal{O}(x^3). \quad (\text{A.0.47})$$

Komutator je

$$[G', G] = [G_1 + 2xG_2 + 3x^2G_3 + \dots, xG_1 + x^2G_2 + x^3G_3 + \dots] \quad (\text{A.0.48})$$

$$= x^2 [G_1, G_2] + 2x^2 [G_2, G_1] + \mathcal{O}(x^3) \quad (\text{A.0.49})$$

$$= -x^2 [G_1, G_2] + \mathcal{O}(x^3). \quad (\text{A.0.50})$$

Usporedbom izraza (A.0.43) i (A.0.47), uz odbacivanje $\mathcal{O}(x^3)$, dobije se

$$G_1 = A + B, \quad (\text{A.0.51})$$

$$G_2 = \frac{1}{2} [A, B], \quad (\text{A.0.52})$$

$$G_3 = \frac{1}{12} ([A, [A, B]] + [B, [B, A]]), \quad (\text{A.0.53})$$

iz čega direktno slijedi traženi izraz (A.0.1).

Dodatak B

Dokaz relacije (2.2.16)

Vrijedi (vidjeti npr. [9])

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \quad \text{i} \quad \hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}. \quad (\text{B.0.1})$$

Očekivane vrijednosti operatora položaja (\hat{x}) i impulsa (\hat{p}) računamo prema

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x \psi dx, \quad (\text{B.0.2})$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) dx. \quad (\text{B.0.3})$$

Nadalje, računamo komutacijsku relaciju

$$[\hat{x}, \hat{p}]\psi(x) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx} - (-i\hbar) \frac{d(x\psi)}{dx} \quad (\text{B.0.4})$$

$$= -i\hbar x \frac{d\psi}{dx} + i\hbar \left(\psi(x) + x \frac{d\psi}{dx} \right) \quad (\text{B.0.5})$$

$$= i\hbar\psi(x), \quad (\text{B.0.6})$$

iz čega slijedi $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Neka je $|p\rangle$ stanje koje opisuje česticu sa impulsom p (svojstveno stanje impulsa). Jednadžba svojstvenih vrijednosti glasi

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad (\text{B.0.7})$$

gdje je p svojstvena vrijednost (broj). Želimo (B.0.7) napisati u koordinatnoj reprezentaciji pa pišemo

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = \underbrace{\langle x|p|p\rangle}_{=p\langle x|p\rangle} = p\langle x|p\rangle. \quad (\text{B.0.8})$$

Iz

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = \hat{p}(x)\langle x|p\rangle \quad (\text{B.0.9})$$

i (B.0.8) slijedi

$$\hat{p}(x)\langle x|p\rangle = p\langle x|p\rangle. \quad (\text{B.0.10})$$

Uvođenjem pokrate $\langle x | p \rangle \equiv e(x)$ te korištenjem $\hat{p}(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} e(x)$, pišemo

$$-i\hbar \frac{d}{dx} e(x) = p e(x), \quad (\text{B.0.11})$$

$$\ln(e(x)) = \frac{ipx}{\hbar} + C, \quad (\text{B.0.12})$$

$$e(x) = e^C \cdot e^{\frac{i}{\hbar} px}, \quad (\text{B.0.13})$$

$$e(x) = A e^{\frac{i}{\hbar} px}, \quad (\text{B.0.14})$$

$$\langle x | p \rangle = A e^{\frac{i}{\hbar} px}, \quad (\text{B.0.15})$$

gdje je A normalizacijska konstanta koju moramo odrediti. Za svojstvena stanja impulsa vrijedi svojstvo ortogonalnosti

$$\langle p' | p \rangle = \delta(p' - p). \quad (\text{B.0.16})$$

Uvrštavanjem relacije kompletnosti $\mathbf{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x|$ u (B.0.16), slijedi

$$\delta(p' - p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle p' | x \rangle \langle x | p \rangle \quad (\text{B.0.17})$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | p' \rangle^* \langle x | p \rangle. \quad (\text{B.0.18})$$

Uvođenjem dodatne pokrate $e'(x) \equiv \langle x | p' \rangle$ slijedi

$$\delta(p' - p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e'^*(x) e(x) \quad (\text{B.0.19})$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx A^* e^{-\frac{i}{\hbar} px} A e^{\frac{i}{\hbar} px} \quad (\text{B.0.20})$$

$$= |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar} (p - p') x}. \quad (\text{B.0.21})$$

Nadalje, koristimo integralnu reprezentaciju δ funkcije

$$\delta(v) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{iuv}, \quad v \in \mathbb{R}. \quad (\text{B.0.22})$$

Iz (B.0.21) i (B.0.22), uz $v \equiv p' - p$, slijedi

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{iu(p' - p)} = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar} (p - p') x}. \quad (\text{B.0.23})$$

Primijećujemo da nam smeta dio $\frac{x}{\hbar}$ jer želimo da integrali budu iste forme. Uvedimo pokratu $y \equiv \frac{x}{\hbar}$. Za x znamo da može poprimiti bilo koje vrijednosti: $x \in \langle -\infty, \infty \rangle \Rightarrow y \in \langle -\infty, \infty \rangle$. Koristeći činjenicu da su y i u slijepe varijable možemo lako proglašiti $y = u$ te iz (B.0.23) dobiti

$$|A|^2 \hbar = \frac{1}{2\pi} \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (\text{B.0.24})$$

pa je

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \quad (\text{B.0.25})$$

i time je relacija dokazana.

Dodatak C

Dokaz relacije (2.2.23)

Za početak, možemo pisati

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2+bx+c} dx = e^c \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2+bx} dx. \quad (\text{C.0.1})$$

Dopunimo kvadrat

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2+bx+c} dx = e^c \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a\left(x^2 - \frac{b}{a}x + \frac{b^2}{4a^2}\right) + \frac{b^2}{4a}} dx \quad (\text{C.0.2})$$

$$= e^c \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a\left(x^2 - \frac{b}{a}x + \frac{b^2}{4a^2}\right)} \cdot e^{\frac{b^2}{4a}} dx \quad (\text{C.0.3})$$

$$= e^{\frac{b^2}{4a} + c} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a(x - \frac{b}{2a})^2} dx. \quad (\text{C.0.4})$$

Da bismo riješili integral

$$I \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a(x - \frac{b}{2a})^2} dx, \quad (\text{C.0.5})$$

radimo supstituciju $x - \frac{b}{2a} \equiv u$, množimo integral sa samim sobom te uvodimo polarne koordinate $u = r \cos \varphi, v = r \sin \varphi$ i dobijemo

$$I^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a(u^2+v^2)} dx dy = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty r e^{-ar^2} dr d\theta \quad (\text{C.0.6})$$

$$= 2\pi \left(-\frac{1}{2a} e^{-ar^2} \right) \Big|_0^\infty = 2\pi \cdot \frac{1}{2a} = \frac{\pi}{a}, \quad (\text{C.0.7})$$

$$\text{iz čega slijedi } I = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (\text{C.0.8})$$

Uvrstimo (C.0.8) u (C.0.4) i time je relacija dokazana.

Bibliografija

- [1] G. Roepstorff, *Path Integral Approach to Quantum Physics*, Springer-Verlag, 1994.
- [2] D. F. Styer, M. S. Balkin, K. M. Becker, M. R. Burns, C. E. Dudley, S. T. Forth, J. S. Gaumer, M. A. Kramer, D. C. Oertel, L. H. Park, M. T. Rinkoski, C. T. Smith, T. D. Wotherspoon, *Nine formulations of quantum mechanics*, Department of Physics, Oberlin College, Oberlin, Ohio 44074, American Association of Physics Teachers, 2002.
- [3] W. Heisenberg, *Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen*, Zeitschrift für Physik, vol. 33, no. 1, pp. 879-893, 1925.
- [4] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, Volume 1: Functional Analysis*, Academic Press, 1980.
- [5] E. Schrödinger, *Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung)*, Annalen der Physik, vol. 79, pp. 361–376, 1926.
- [6] E. Schrödinger, *Quantisierung als Eigenwertproblem (Dritte Mitteilung)*, Annalen der Physik, vol. 385, pp. 437-490, 1926.
- [7] R. P. Feynman, A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, Emended Edition, Dover Publications, 2010.
- [8] R. P. Feynman, *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics*, Reviews of Modern Physics, vol. 20, no. 2, pp. 367-387, 1948.
- [9] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, Springer, 1994.
- [10] R. Rattazzi, *The Path Integral approach to Quantum Mechanics*, Studylib.net, 2009.
- [11] L. de Broglie, *Recherches sur la théorie des quanta*, PhD Dissertation, Paris, 1924.
- [12] N. Bohr, *The Quantum Postulate and the Recent Development of Atomic Theory*, Nature, vol. 121, pp. 580-590, 1928.
- [13] W. Heisenberg, *The Physical Principles of the Quantum Theory*, University of Chicago Press, 1930.
- [14] Y. Li, Y. Chen, I. Podlubny, *Mittag-Leffler Stability of Fractional Order Nonlinear Dynamic Systems*, Automatica, 2009.
- [15] B. P. Lathi, *Linear Systems and Signals, 2nd Edition*, Oxford University Press, 2004.

- [16] P. A. M. Dirac, *The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation*, Proceedings of the Royal Society A, vol. 114, no. 767, pp. 243-265, 1927.
- [17] P. A. M. Dirac, *The Lagrangian in Quantum Mechanics*, Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion, vol. 3, pp. 64-72, 1933.
- [18] H. Goldstein, C. P. Poole, J. L. Safko, *Classical Mechanics*, 3rd edition, Addison-Wesley, 2001.
- [19] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised edition, Addison-Wesley, 1994.
- [20] R. P. Feynman, *The Principle of Least Action in Quantum Mechanics*, Ph.D. dissertation, Princeton University, 1942.
- [21] H. Y. Huang, *Computational Quantum Mechanics: From Fourier Grid Hamiltonian Method to Quantum Monte Carlo*, National Taiwan University, December 10, 2016.
- [22] E. Manoukian, *Path Integrals*, In: Quantum Theory, Springer, Dordrecht, 2006.
- [23] L. Euler, *Introduction to the Analysis of the Infinite*, vol. 1, 1748.
- [24] H. Baker, *On the Exponential Theorem for a Product of Matrices*, Proc. London Math. Soc., vol. 1, no. 2, pp.55-64, 1902.
- [25] H. F. Trotter, *On the Product of Semi-Groups of Operators*, Proc. Amer. Math. Soc., vol. 10, no. 4, pp.545-551, 1959.
- [26] W. Rudin, *Functional Analysis*, 2nd ed., McGraw-Hill, New York, 1991.
- [27] F. Dowker, S. Johnston, R. D. Sorkin, *Hilbert Spaces from Path Integrals*, May 31, 2010.
- [28] I. M. Gelfand, S. V. Fomin, *Calculus of Variations*, Dover Publications, 2000.
- [29] Y. Hatsugai, *Geometry and Topology in Condensed Matter Physics*, University of Tsukuba, 2020.
- [30] W. Dittrich, M. Reuter, *Classical and Quantum Dynamics: From Classical Paths to Path Integrals*, Springer-Verlag, 2001.
- [31] C. F. Gauss, *Theoria motus corporum coelestium in sectionibus conicis solem ambientium*, Hamburg, 1809.
- [32] G. B. Arfken, H. J. Weber, F. E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists*, 7th edition, Academic Press, 2012
- [33] N. Laskin, *Fractional Quantum Mechanics*, World Scientific, 2018.
- [34] P. Ehrenfest, *Bemerkung über die angenäherte Gültigkeit der klassischen Mechanik innerhalb der Quantenmechanik*, Zeitschrift für Physik, vol. 45, pp. 455-457, 1927.
- [35] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, World Scientific, 2009.

- [36] M. Sandström, *Path Integrals and Quantum Mechanics*, Department of Physics, Umeå University, 2015.
- [37] W. R. Hamilton, *On a General Method in Dynamics*, Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Part II, pp. 247-308, 1834.
- [38] C. G. J. Jacobi, *Vorlesungen über Dynamik*, Berlin, 1866 (predavanja održana 1842).
- [39] S. G. Krantz, *Differential Equations Demystified*, McGraw-Hill, 2005.
- [40] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields Volume 1: Foundations*, Cambridge University Press, 1995.
- [41] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Dover Publications, 2005.
- [42] R. N. Bracewell, *The Fourier Transform and Its Applications*, McGraw-Hill, 2000.
- [43] W. K. Pritchard, *Fourier Series and Boundary Value Problems*, Routledge, 1986.
- [44] M. Spivak, *Calculus*, Publish or Perish, 1994.
- [45] M. E. Peskin, D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Addison-Wesley, 1995.
- [46] C. Rovelli, *Quantum Gravity*, Cambridge University Press, 2004.
- [47] C. Kiefer, *Quantum Gravity*, Oxford University Press, 2012.