Kapitola 18

Propagátor a dráhový integrál

Přehled teorie

Propagátor

Propagátor je integrální jádro, které převádí $\psi(\vec{x}_0, t_0)$ na $\psi(\vec{x}_f, t_f)$

$$\psi(\vec{x}_f, t_f) = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x_0 \; K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0)\psi(\vec{x}_0, t_0).$$

Jedná se tedy o maticový element evolučního operátoru v x-reprezentaci

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \langle \vec{x}_f | \hat{U}(t_f, t_0) | \vec{x}_0 \rangle.$$

Propagátor je řešením Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \hat{H} K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0),$$

s počáteční podmínkou

$$K(\vec{x}_f, t_0; \vec{x}_0, t_0) = \delta(\vec{x}_f - \vec{x}_0). \tag{18.1}$$

Vzhledem k tomu, že časový vývoj zachovává normu, splňuje propagátor podmínku

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x \; K(\vec{x}, t_f; \vec{x}_0, t_0) K(\vec{x}, t_f; \vec{x}_0', t_0) = \delta(\vec{x}_0 - \vec{x}_0'). \tag{18.2}$$

Propagátor můžeme vyjádřit i v p-reprezentaci

$$\tilde{K}(\vec{p}_f, t_f; \vec{p}_0, t_0) = \langle \vec{p}_f | \hat{U}(t_f, t_0) | \vec{p}_0 \rangle.$$

Dráhový integrál

Propagátor lze vyjádřit pomocí dráhového integrálu způsobem

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \lim_{N\to+\infty} \left(\frac{M}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{3(N+1)}{2}} \int \prod_{k=1}^{N} d^3x_k e^{\frac{i}{\hbar}\sum\limits_{k=1}^{N+1} L(\vec{x}_k, \frac{\vec{x}_k-\vec{x}_{k-1}}{\Delta t}, t_k)\Delta t} \tag{18.3}$$

$$= \int \mathscr{D}\vec{x}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t')dt'\right) = \int \mathscr{D}\vec{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[\vec{x}(t)]},$$

kde $\Delta t = \frac{t-t_0}{N+1}$, $\vec{x}_{N+1} = \vec{x}_f$, $t_{N+1} = t_f$ a symbolicky jsme zavedli

$$\mathscr{D}\vec{x}(t) \equiv \lim_{N\to\infty} \left(\prod_{k=1}^{N} d^3x_k\right) \left(\frac{M(N+1)}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right)^{\frac{3(N+1)}{2}}.$$

Trajektorie $\vec{x}(t)$ spojuje body $\vec{x}_0$ a $\vec{x}_f$, tj. $\vec{x}(t_0) = \vec{x}_0$ a $\vec{x}(t_f) = \vec{x}_f$. Zapíšeme ji ve tvaru

$$\vec{x}(t) = \vec{x}_{cl}(t) + \vec{y}(t),$$

kde $\vec{x}_{cl}(t)$ je klasická trajektorie, tj. řešení pohybových rovnic pro Lagrangián L s příslušnými počátečními podmínkami, a $\vec{y}(t)$ splňuje podmínku pevných konců

$$\vec{y}(t_0) = \vec{y}(t_f) = 0.$$

Pokud je Lagrangián maximálně kvadratickou funkcí $\vec{x}$ a $\dot{\vec{x}}$, pak lze dokázat, že platí

$$S[\vec{x}_{cl}(t) + \vec{y}(t)] = S[\vec{x}_{cl}(t)] + S[\vec{y}(t)].$$

Propagátor pak lze zapsat ve tvaru

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}S[\vec{x}_{cl}(t)]} \int\limits_{\substack{\vec{y}(t_0)=0 \\ \vec{y}(t_f)=0}} \mathscr{D}\vec{y}(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[\vec{y}(t)]}, \tag{18.4}$$

přičemž zbývající integrál už nezávisí na $\vec{x}_0$ ani $\vec{x}_f$. Je to tedy pouze funkce času $F(t_f, t_0)$. Její absolutní hodnotu lze určit z podmínky zachování normy (18.2), fázi z počáteční podmínky (18.1).

Matice hustoty termálního stavu

Propagátor lze využít mimo jiné pro určení matice hustoty termálního stavu

$$\hat{\rho}_{\mathrm{th}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta\hat{H}},$$

v x-reprezentaci. Pro časově nezávislý hamiltonián je evoluční operátor, a tedy i propagátor, funkcí rozdílu $t_f - t_0$, tj.

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) \equiv K(\vec{x}_f, \vec{x}_0; t_f - t_0).$$

Matici hustoty termálního stavu v x-reprezentaci pak můžeme vyjádřit jako propagátor v imaginárním čase

$$\rho_{\mathrm{th}}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = (\langle \vec{x}_2 | \hat{\rho}_{\mathrm{th}} | \vec{x}_1 \rangle = \frac{1}{Z} \langle \vec{x}_2 | e^{-\beta \hat{H}} | \vec{x}_1 \rangle = \frac{1}{Z} K(\vec{x}_2, \vec{x}_1; -i\hbar\beta). \tag{18.5}$$

Partiční sumu určíme integrálem

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta \hat{H}}\right) = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x \; K(\vec{x}, \vec{x}; -i\hbar\beta). \tag{18.6}$$

Příklady

Cvičení 53. *Určete propagátor volné kvantové částice v* $\mathbb{R}^3$ $K_0(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0)$.

Návod: Začneme v p-reprezentaci, kde je $\tilde{K}_0$ určeno rovnicí

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{K}_0(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0) = \frac{p^2}{2M} \tilde{K}_0(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0), \tag{18.7}$$

s počáteční podmínkou

$$\tilde{K}_0(\vec{p}, t_0; \vec{p}_0, t_0) = \delta(\vec{p} - \vec{p}_0).$$

Řešením rovnice (18.7) je

$$\tilde{K}_0(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2M}(t - t_0)} \delta(\vec{p} - \vec{p}_0).$$

Propagátor v x-reprezentaci je s $\tilde{K}_0$ spojený vztahem

$$\begin{aligned} K_0(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) &= \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}_0 \rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_0 \; \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{p}_0 \rangle \langle \vec{p}_0 | \vec{x}_0 \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_0 \; e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \tilde{K}_0(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_0 \cdot \vec{x}_0} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p \; e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2M}(t - t_0)}. \end{aligned}$$

Integrál na pravé straně diverguje, situaci je možné zachránit regularizací $M \to M + i\varepsilon$ a na konci provést limitu $\varepsilon \to 0$,

$$\begin{aligned}
K_0(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) &= \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \; e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}_0)} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}(t-t_0)} e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\frac{p^2}{2}(t-t_0)} \\
&= \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \; e^{-\frac{(\varepsilon+\frac{i}{M})(t-t_0)}{2\hbar}\left(\vec{p}-i\frac{\vec{x}-\vec{x}_0}{(\varepsilon+\frac{i}{M})(t-t_0)}\right)^2} e^{\frac{(\vec{x}-\vec{x}_0)^2}{2\hbar(\varepsilon+\frac{i}{M})(t-t_0)}} \\
&= \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{2\pi\hbar}{(\varepsilon+\frac{i}{M})(t-t_0)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{(\vec{x}-\vec{x}_0)^2}{2\hbar(\varepsilon+\frac{i}{M})(t-t_0)}} \\
&= \left(\frac{M}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{iM(\vec{x}-\vec{x}_0)^2}{2\hbar(t-t_0)}}. \qquad (18.8)
\end{aligned}$$

Cvičení 54. *S použitím propagátoru (18.8) určete časový vývoj vlnové funkce volné částice, která má v čase t_0 tvar*

$$\psi(\vec{x}, t_0) = Ce^{-\frac{(\vec{x}-\vec{y})^2}{4\sigma^2}+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}.$$

Návod: Vlnová funkce v čase t je určena integrálem

$$\psi(\vec{x}, t) = C\left(\frac{M}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_0 \; e^{\frac{iM(\vec{x}-\vec{x}_0)^2}{2\hbar(t-t_0)}} e^{-\frac{(\vec{x}_0-\vec{y})^2}{4\sigma^2}+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}_0}. \qquad (18.9)$$

To je gaussův integrál, exponent stačí upravit na čtverec

$$iM\frac{(\vec{x}-\vec{x}_0)^2}{2\hbar(t-t_0)} - \frac{(\vec{x}_0-\vec{y})^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}_0 = \alpha(\vec{x}_0 - \frac{1}{2\alpha}\vec{a})^2 + iM\frac{x^2}{2\hbar(t-t_0)} - \frac{y^2}{4\sigma^2} + \frac{1}{4\alpha}a^2,$$

kde jsme zavedli

$$\begin{aligned}
\alpha &= \frac{1}{4\sigma^2} - i\frac{M}{2\hbar(t-t_0)}, \\
\vec{a} &= \frac{i}{\hbar}\vec{p} + \frac{1}{2\sigma^2}\vec{y} - i\frac{M}{\hbar(t-t_0)}\vec{x}.
\end{aligned}$$

Integrál (18.9) je pak roven

$$\psi(\vec{x}, t) = C\left(\frac{M}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{3}{2}} e^{iM\frac{x^2}{2\hbar(t-t_0)} - \frac{y^2}{4\sigma^2} + \frac{1}{4\alpha}a^2}. \qquad (18.10)$$

Označíme si

$$\chi(t) = 1 + \frac{i\hbar}{2\sigma^2 M}(t-t_0).$$

Koeficient před exponenciálou v (18.10) pak lze zjednodušit do tvaru

$$C\left(\frac{M}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{3}{2}} = C\chi^{-\frac{3}{2}}.$$

Do exponentu v (18.10) dosadíme za $\vec{a}$ a opět upravíme na čtverec

$$iM\frac{x^2}{2\hbar(t-t_0)} - \frac{y^2}{4\sigma^2} + \frac{1}{4\alpha}a^2 = -\frac{1}{4\sigma^2\chi(t)}\left(\vec{x}-\vec{y}-\frac{2i\sigma^2}{\hbar}\vec{p}\right)^2 + \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{y} - \frac{\sigma^2}{\hbar^2}p^2$$

Celkem má tedy vlnová funkce v čase t tvar

$$\psi(\vec{x},t) = C\chi^{-\frac{3}{2}}\exp\left[-\frac{1}{4\sigma^2\chi(t)}\left(\vec{x}-\vec{y}-\frac{2i\sigma^2}{\hbar}\vec{p}\right)^2 + \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{y} - \frac{\sigma^2}{\hbar^2}p^2\right].$$

Cvičení 55. *Ukažte, že pro* $\mathrm{Re}\lambda > 0$ *platí vztah*

$$\int\limits_{\mathbb{R}^N} e^{-\lambda\sum\limits_{k=1}^{N+1}(x_k-x_{k-1})^2}dx_1\dots dx_N = \sqrt{\frac{\pi^N}{(N+1)\lambda^N}}e^{-\frac{\lambda}{N+1}(x_{N+1}-x_0)^2}.$$

Návod: Důkaz provedeme indukcí. Pro $N=1$ vztah ověříme přímým výpočtem

$$\int\limits_{\mathbb{R}} e^{-\lambda(x_1-x_0)^2-\lambda(x_2-x_1)^2} = e^{-\lambda(x_0^2+x_2^2)}\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}}e^{\frac{\lambda}{2}(x_0+x_2)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}}e^{-\frac{\lambda}{2}(x_2-x_0)^2}.$$

Indukční krok provedeme od $N-1$ k N:

$$\begin{aligned}\int\limits_{\mathbb{R}^N} e^{-\lambda\sum\limits_{k=1}^{N+1}(x_k-x_{k-1})^2}dx_1\dots dx_N &\overset{\mathrm{IP}}{=} \int\limits_{\mathbb{R}}\sqrt{\frac{\pi^{N-1}}{N\lambda^{N-1}}}e^{-\frac{\lambda}{N}(x_N-x_0)^2-\lambda(x_{N+1}-x_N)^2}dx_N \\ &= \sqrt{\frac{\pi^{N-1}}{N\lambda^{N-1}}}e^{-\frac{\lambda}{N}x_0^2-\lambda x_{N+1}^2}\sqrt{\frac{\pi N}{\lambda(N+1)}}e^{\frac{\lambda(x_0+Nx_{N+1})^2}{N(N+1)}} \\ &= \sqrt{\frac{\pi^N}{(N+1)\lambda^N}}e^{-\frac{\lambda}{N+1}(x_{N+1}-x_0)^2}.\end{aligned}$$

Analogicky bude platit vztah

$$\int\limits_{\mathbb{R}^{3N}} e^{-\lambda\sum\limits_{k=1}^{N+1}(\vec{x}_k-\vec{x}_{k-1})^2}d^3x_1\dots d^3x_N = \left(\frac{\pi^N}{(N+1)\lambda^N}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{\lambda}{N+1}(\vec{x}_{N+1}-\vec{x}_0)^2}. \tag{18.11}$$

Cvičení 56. *Určete propagátor volné částice v* $\mathbb{R}^3$ *pomocí definičního vztahu pro dráhový integrál (18.3).*

Návod: Pro volnou částici má vztah (18.3) tvar

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \lim_{N\to+\infty} \left(\frac{M}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \int \prod_{k=1}^{N} d^3x_k e^{\frac{i}{\hbar}\frac{M}{2\Delta t}\sum_{k=1}^{N+1}(\vec{x}_k-\vec{x}_{k-1})^2}.$$

Integrály divergují, musíme použít regularizaci $M \to M+i\varepsilon$. Poté lze použít vzorec (18.11) s $\lambda = \frac{\varepsilon - iM}{2\hbar\Delta t}$ a provést limitu $\varepsilon \to 0$

$$\begin{aligned} K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) &= \lim_{N\to+\infty} \left(\frac{M}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \left(\frac{(2\pi i\hbar\Delta t)^N}{(N+1)M^N}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{M}{2\Delta t(N+1)}(\vec{x}_{N+1}-\vec{x}_0)^2} \\ &= \lim_{N\to+\infty} \left(\frac{M}{2\pi i\hbar\Delta t(N+1)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{M}{2\Delta t(N+1)}(\vec{x}_{N+1}-\vec{x}_0)^2}. \end{aligned}$$

Na závěr využijeme toho, že

$$\vec{x}_{N+1} = \vec{x}_f, \quad \Delta t(N+1) = t_f - t_0,$$

čímž se zbavíme N a dostaneme výsledek

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \left(\frac{M}{2\pi i\hbar(t_f-t_0)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{iM(\vec{x}_f-\vec{x}_0)^2}{2\hbar(t_f-t_0)}}.$$

Cvičení 57. *Určete propagátor volné částice na přímce pomocí vztahu (18.4).*

Návod: Pro volnou částici lze díky vztahu (18.4) propagátor zapsat ve tvaru

$$K_0(x_f, t_f; x_0, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]}F(t_f, t_0).$$

Nejprve určíme akci podél klasické trajektorie. Volná částice se pohybuje konstantní rychlostí, takže

$$x_{cl}(t) = x_0 + \frac{x_f - x_0}{t_f - t_0}(t - t_0).$$

Akce podél klasické trajektorie je tedy rovna

$$S[x_{cl}(t)] = \int_{t_0}^{t_f} \frac{1}{2}M\dot{x}_{cl}^2 dt = \frac{1}{2}M\frac{(x_f-x_0)^2}{t_f-t_0}.$$

Absolutní hodnotu funkce $F(t_f, t_0)$ určíme z podmínky (18.2), která pro volnou částici vede na

$$|F(t_f, t_0)|^2 \int_{\mathbb{R}} dx_f \; e^{-i\frac{M(x_f-x_0)^2}{2\hbar(t_f-t_0)}} e^{i\frac{M(x_f-x_0')^2}{2\hbar(t_f-t_0)}} \stackrel{!}{=} \delta(x_0 - x_0'). \tag{18.12}$$

Po algebraických úpravách a substituci $\frac{M}{\hbar(t_f-t_0)}x_f = y$ dostaneme na levé straně integrální vyjádření δ-funkce (exponenciála před integrálem bude rovna jedné díky δ-funkci)

$$\begin{aligned}
\text{LS} &= |F(t_f,t_0)|^2 \frac{\hbar(t_f-t_0)}{M} e^{-i\frac{M(x_0^2-x_0'^2)}{2\hbar(t_f-t_0)}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dy\ e^{iy(x_0-x_0')}}_{2\pi\delta(x_0-x_0')} \\
&= |F(t_f,t_0)|^2 \frac{2\pi\hbar(t_f-t_0)}{M}\delta(x_0-x_0').
\end{aligned}$$

Porovnáním s (18.12) dostaneme

$$|F(t_f,t_0)| = \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar(t_f-t_0)}}.$$

Zbývá určit fázi funkce F, kde využijeme podmínku (18.1). Spočítáme nejprve limitu

$$\lim_{t\to t_0} |F(t_f,t_0)|\, e^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]} = \lim_{t\to t_0} \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar(t_f-t_0)}} e^{i\frac{M(x_f-x_0)^2}{2\hbar(t_f-t_0)}}.$$

Pomocí limitního vyjádření δ-funkce

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{2\sqrt{\pi\varepsilon}} e^{\frac{x^2}{4\varepsilon}},$$

zjistíme, že platí

$$\lim_{t\to t_0} \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar(t_f-t_0)}} e^{i\frac{M(x_f-x_0)^2}{2\hbar(t_f-t_0)}} = \sqrt{i}\delta(x_f-x_0).$$

Abychom dostali správnou limitu, musíme $\sqrt{i}$ podělit. Propagátor volné částice na přímce je tedy roven

$$K_0(x_f,t_f;x_0,t_0) = \sqrt{\frac{M}{2\pi i\hbar(t_f-t_0)}} e^{i\frac{M(x_f-x_0)^2}{2\hbar(t_f-t_0)}} \tag{18.13}$$

Cvičení 58. *Určete propagátor LHO.*

Návod: Lagrangián LHO je kvadratický v x a $\dot{x}$

$$L = \frac{1}{2}M\dot{x}^2 - \frac{1}{2}M\omega^2 x^2,$$

takže můžeme využít vztah (18.4) a napsat propagátor ve tvaru

$$K(x_f,t_f;x_0,t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]}F(t_f,t_0).$$

Výpočet akce podél klasické trajektorie, kterou zapíšeme jako

$$x_{cl}(t) = a \sin \omega t + b \cos \omega t,$$

je poměrně pracný. Lagrangián má na klasické trajektorii hodnotu

$$L(x_{cl}, \dot{x}_{cl}, t) = \frac{1}{2} M\omega^2 \left((a^2 - b^2)\cos(2\omega t) - 2ab\sin(2\omega t)\right),$$

takž akce je rovna

$$S[x_{cl}(t)] = \frac{1}{4} M\omega \left((a^2 - b^2)(\sin(2\omega t_f) - \sin(2\omega t_0)) + 2ab(\cos(2\omega t_f) - \cos(2\omega t_0)\right). \quad (18.14)$$

Ve vztahu musíme vyjádřit a a b pomocí počátečního a koncového bodu trajektorie x_0 a x_f, pro které platí

$$\begin{aligned} x_{cl}(t_0) &= x_0 = a \sin \omega t_0 + b \cos \omega t_0, \\ x_{cl}(t_f) &= x_f = a \sin \omega t_f + b \cos \omega t_f. \end{aligned}$$

Řešením soustav rovnic dostaneme

$$\begin{aligned} a &= \frac{x_f \cos \omega t_0 - x_0 \cos \omega t_f}{\sin \omega(t_f - t_0)}, \\ b &= \frac{x_f \sin \omega t_0 - x_0 \sin \omega t_f}{\sin \omega(t_f - t_0)}. \end{aligned}$$

Po dosazení do (18.14) vyjádříme akci podél klasické trajektorie LHO ve tvaru

$$S[x_{cl}(t)] = \frac{1}{2} M\omega \frac{(x_f^2 + x_0^2)\cos \omega(t_f - t_0) - 2x_0 x_f}{\sin \omega(t_f - t_0)}.$$

Zbývá určit funkci $F(t_f, t_0)$. Její absolutní hodnota je daná podmínkou (18.2), která pro LHO vede na

$$|F(t_f, t_0)|^2 \int_{\mathbb{R}} dx_f \; e^{-iM\omega \frac{(x_f^2 + x_0^2)\cos \omega(t_f - t_0) - 2x_0 x_f}{2\hbar \sin \omega(t_f - t_0)}} e^{iM\omega \frac{(x_f^2 + x_0'^2)\cos \omega(t_f - t_0) - 2x_0' x_f}{2\hbar \sin \omega(t_f - t_0)}} \overset{!}{=} \delta(x_0 - x_0'). \quad (18.15)$$

Po algebraických úpravách a substituci

$$\frac{M\omega x_f}{\hbar \sin \omega(t_f - t_0)} = y, \quad dx_f = \frac{\hbar \sin \omega(t_f - t_0)}{M\omega} dy,$$

upravíme levou stranu (18.15) do tvaru

$$\begin{aligned} \text{LS} &= |F(t_f, t_0)|^2 e^{-i\frac{M\omega(x_0^2 - x_0'^2)\cos \omega(t_f - t_0)}{2\hbar \sin \omega(t_f - t_0)}} \frac{\hbar \sin \omega(t_f - t_0)}{M\omega} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dy \; e^{iy(x_0 - x_0')}}_{2\pi\delta(x_0 - x_0')} \\ &= |F(t_f, t_0)|^2 \frac{2\pi\hbar \sin \omega(t_f - t_0)}{M\omega} \delta(x_0 - x_0'). \end{aligned}$$

Porovnáním s pravou stranou (18.15) nalezneme

$$|F(t_f, t_0)| = \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi\hbar \sin\omega(t_f - t_0)}}.$$

Pro určení fáze využijeme toho, že pro $\omega \to 0$ musíme dostat propagátor volné částice (18.13). Spočítáme limity

$$\begin{aligned}
\lim_{\omega\to 0} |F(t_f, t_0)| &= \lim_{\omega\to 0} \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi\hbar \sin\omega(t_f - t_0)}} = \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar(t_f - t_0)}}, \\
\lim_{\omega\to 0} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}(t)]} &= \lim_{\omega\to 0} e^{iM\omega \frac{(x_f^2 + x_0^2)\cos\omega(t_f - t_0) - 2x_0 x_f}{2\hbar \sin\omega(t_f - t_0)}} = e^{i\frac{M(x_f - x_0)^2}{2\hbar(t_f - t_0)}},
\end{aligned}$$

a porovnáním s (18.13) zjistíme, že ve výsledku chybí faktor $1/\sqrt{i}$. Celkem tedy pro propagátor LHO dostaneme vztah

$$K(x_f, t_f; x_0, t_0) = \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi i\hbar \sin\omega(t_f - t_0)}} e^{iM\omega \frac{(x_f^2 + x_0^2)\cos\omega(t_f - t_0) - 2x_0 x_f}{2\hbar \sin\omega(t_f - t_0)}}. \tag{18.16}$$

Cvičení 59. *Určete matici hustoty termálního stavu LHO v x-reprezentaci. Nalezněte příslušnou partiční sumu.*

Návod: Vyjdeme ze vztahu (18.5) a výsledku (18.16)

$$\begin{aligned}
\rho_{\text{th}}(x_1, x_2) &= \frac{1}{Z} K(x_2, x_1; -i\hbar\beta) \\
&= \frac{1}{Z} \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi i\hbar \sin(-i\hbar\omega\beta)}} \exp\left(iM\omega \frac{(x_2^2 + x_1^2)\cos(-i\hbar\omega\beta) - 2x_1 x_2}{2\hbar \sin(-i\hbar\omega\beta)} \right).
\end{aligned}$$

Nahradíme sinus a cosinus exponenciálou

$$\sin(-i\hbar\omega\beta) = \frac{e^{\hbar\omega\beta} - e^{-\hbar\omega\beta}}{2i}, \quad \cos(-i\hbar\omega\beta) = \frac{e^{\hbar\omega\beta} + e^{-\hbar\omega\beta}}{2},$$

a po úpravách dostaneme

$$\rho_{\text{th}}(x_1, x_2) = \frac{1}{Z} \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar(e^{\hbar\omega\beta} - e^{-\hbar\omega\beta})}} \exp\left(-M\omega \frac{(x_2^2 + x_1^2)(e^{\hbar\omega\beta} + e^{-\hbar\omega\beta}) - 4x_1 x_2}{2\hbar(e^{\hbar\omega\beta} - e^{-\hbar\omega\beta})} \right).$$

Partiční sumu určíme ze vztahu (18.6)

$$\begin{aligned}
Z &= \int_{\mathbb{R}} dx\ K(x,x;-i\hbar\beta) \\
&= \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar(e^{\hbar\omega\beta}-e^{-\hbar\omega\beta})}} \int_{\mathbb{R}} dx\ \exp\left(-M\omega\frac{x^2(e^{\hbar\omega\beta}+e^{-\hbar\omega\beta}-2)}{\hbar(e^{\hbar\omega\beta}-e^{-\hbar\omega\beta})}\right) \\
&= \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar(e^{\hbar\omega\beta}-e^{-\hbar\omega\beta})}}\sqrt{\frac{\pi\hbar(e^{\hbar\omega\beta}-e^{-\hbar\omega\beta})}{M\omega(e^{\hbar\omega\beta}+e^{-\hbar\omega\beta}-2)}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{\left(e^{\frac{\hbar\omega\beta}{2}}-e^{\frac{\hbar\omega\beta}{2}}\right)^2}} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega\beta}{2}}-e^{-\frac{\hbar\omega\beta}{2}}} = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega\beta}{2}}}{1-e^{\hbar\omega\beta}}.
\end{aligned}$$