# 1 Propagátor

Otázka dráhového integrálu a propagátorů se historicky váže hlavně k postavě Richarda Feynmana, jehož pojednání o štěrbinovém experimentu lze doporučit jako zajímavou četbu pro rozšíření motivační části poznámek. Tato kapitola jinak vychází hlavně z knihy Quantum Field Theory [**?**].

## 1.1 Všechny možné historie

Uvažujme vlnovou funkci (pro jednoduchost jednorozměrnou) $\psi(q_i, t_i)$ v čase $t_i$. **Propagátor** $K\left(q_f, t_f; q_i, t_i\right)$ je jednoznačně určené integrační jádro, které nám umožní napsat vlnovou funkci v nějakém pozdějším čase $t_f$ podobně jako v Huygens–Fresnelově principu pro vlnění:

$$\psi(q_f, t_f) = \langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | \psi_i \rangle = \int K\left(q_f, t_f; q_i, t_i\right) \psi(q_i, t_i) \mathrm{d}q_i \tag{1.1}$$

Pokud bychom za počáteční stav formálně dosadili zobecněný vlastní stav polohy, zůstal by na pravé straně (1.1) propagátor samotný, který je tak možné interpretovat jako amplitudu pravděpodobnosti přechodu z místa $q_i$ v čase $t_i$ do $q_f$ v čase $t_f$. Nicméně odpovídající rozdělení pravděpodobnosti je pochopitelně nenormalizovatelné (protože takové bylo pro počáteční stav).

Rozdělme nyní časový interval $\langle t_i, t_f \rangle$ do dvou podintervalů $\langle t_i, t_m \rangle$ a $\left(t_m, t_f\right\rangle$. Pokud použijeme definici propagátoru dvakrát pro výpočet $\psi(q_f, t_f)$ z $\psi(q_i, t_i)$ přes pomocnou funkci $\psi(q_m, t_m)$, dostaneme

$$\psi(q_f, t_f) = \int \int K\left(q_f, t_f; q_m, t_m\right) K\left(q_m, t_m; q_i, t_i\right) \psi(q_i, t_i) \mathrm{d}q_i \mathrm{d}q_m, \tag{1.2}$$

což nám dává rovnost platnou pro propagátor

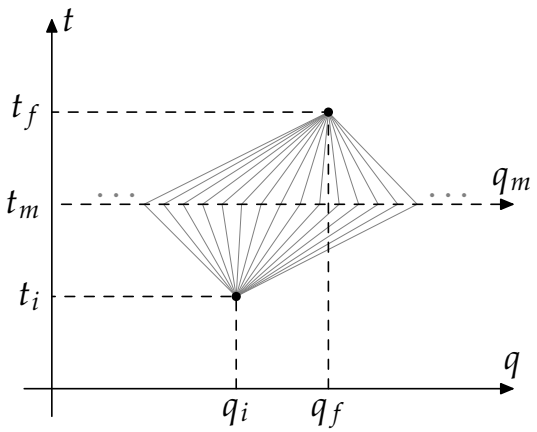
$$K\left(q_f, t_f; q_i, t_i\right) = \int K\left(q_f, t_f; q_m, t_m\right) K\left(q_m, t_m; q_i, t_i\right) \mathrm{d}q_m. \tag{1.3}$$

Jinými slovy na přechod z $(q_i, t_i)$ do $(q_f, t_f)$ můžeme nahlížet jako na přechod skrz *všechny možné mezibody* $q_m$, které mohou ležet i kdekoli mimo interval vymezený $q_i$ a $q_f$, jak ukazuje obr. 1.

Hezká ilustrace tohoto principu je průchod světla optickou štěrbinou. Víme, že dochází k difrakci (ohybu), namísto toho, aby některé paprsky prošly a jiné byly pohlceny. Teprve když tloušťka štěrbiny jde k nekonečnu a světelné vlny tak skrz ní mohou projít kterýmkoli bodem roviny, dostáváme v limitě neporušený průchod paprsku.

Ukážeme nyní, že propagátor je vlastně maticový element operátoru časového vývoje. Ve Schrödingerově obraze

$$\psi(q_f, t_f) = \langle q_f | \psi(t_f) \rangle = \langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | \psi(t_i) \rangle = \int \underbrace{\langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | q_i \rangle}_{K\left(q_f, t_f; q_i, t_i\right)} \underbrace{\langle q_i | \psi(t_i) \rangle}_{\psi(q_i, t_i)} \mathrm{d}q_i.$$




Obrázek 1: Možné vývoje systému mezi fixními polohami $q_i$ v čase $t_i$ a $q_f$ v čase $t_f$, uvažujeme-li mezistav v čase $t_m$, $t_i < t_m < t_f$.

Ještě elegantnější zápis získáme v Heisenbergově obraze, kde

$$|\psi^H\rangle = U(t,t_0)^{-1}|\psi^S(t)\rangle$$

pro libovolně fixně zvolený referenční čas $t_0$. Definujme zobecněný stav $|q,t\rangle$, který odpovídá zobecněnému vlastnímu stavu $|q\rangle$ v čase $t$, tedy

$$|q,t\rangle := U(t,t_0)^{-1}|q\rangle.$$

Tyto stavy mají význam pohybující se vztažné soustavy, protože

$$\langle q,t|\psi^H\rangle = \langle q|U(t,t_0)|\psi^S(t_0)\rangle = \langle q|\psi(t)\rangle = \psi(q,t). \tag{1.4}$$

Díky tomu, že ortonormální báze stavů zůstává při časovém vývoji ortonormální, můžeme psát

$$\langle q_f,t_f|\psi^H\rangle = \int \langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle\langle q_i,t_i|\psi^H\rangle \mathrm{d}q_i, \tag{1.5}$$

což díky (1.4) znamená

$$\psi(q_f,t_f) = \int \langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle\psi(q_i,t_i)\mathrm{d}q_i, \tag{1.6}$$

odsud plyne zápis

$$K\left(q_f,t_f;q_i,t_i\right) = \langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle. \tag{1.7}$$

## 1.2 Rovnice pro propagátor

Jakou rovnici propagátor musí splňovat zjistíme, když zkusíme spočítat jeho časovou derivaci (a $q_f, t_f$ přeznačíme na $q, t$):

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}K\left(q,t;q_i,t_i\right) &= \langle q|i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}(t,t_i)|q_i\rangle = \langle q|\hat{H}\hat{U}(t,t_i)|q_i\rangle \\ \int \mathrm{d}y\langle q|\hat{H}|y\rangle\langle y|\hat{U}(t,t_i)|q_i\rangle &= \int \mathrm{d}y\langle q|\hat{H}|y\rangle K\left(y,t;q_i,t_i\right). \end{aligned} \tag{1.8}$$

Je-li $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q,t)$, potom

$$\langle q|\hat{H}|y\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}(\delta\left(q-y\right)) + V(q,t)\delta\left(q-y\right), \tag{1.9}$$

a po přetažení derivace z delta funkce k propagátoru dostaneme

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}K\left(q,t;q_i,t_i\right) = \int \mathrm{d}y\delta(q-y)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2}{\partial y^2}K\left(y,t;q_i,t_i\right) + \\ + \int \mathrm{d}yV(q,t)\delta(q-y)K\left(y,t;q_i,t_i\right). \end{aligned} \tag{1.10}$$

To dává:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}K\left(q,t;q_i,t_i\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}K\left(q,t;q_i,t_i\right) + V(q,t)K\left(q,t;q_i,t_i\right), \tag{1.11}$$

což je hledaná rovnice, která by ve 3D vypadala (postup úplně stejný):

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}K\left(\vec{x},t;\vec{x}_i,t_i\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta K\left(\vec{x},t;\vec{x}_i,t_i\right) + V(\vec{x},t)K\left(\vec{x},t;\vec{x}_i,t_i\right). \tag{1.12}$$

Neboli $K\left(\vec{x},t;\vec{x}_i,t_i\right)$ je řešením Schrödingerovy rovnice (jakožto funkce proměnné $\vec{x}$ parametrizovaná časem $t$) s počáteční podmínkou

$$K\left(\vec{x},t_i;\vec{x}_i,t_i\right) = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}_i). \tag{1.13}$$

Mnoho výpočtů se později zjednoduší, když navíc zavedeme propagátory respektující kauzalitu, tj. nulové pro $t_f < t_i$ resp. $t_f > t_i$: **retardovaný propagátor**

$$K^{(+)}\left(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i\right) = \theta(t_f-t_i)K\left(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i\right) \tag{1.14}$$

a **advancovaný propagátor**

$$K^{(-)}\left(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i\right) = \theta(t_i-t_f)K\left(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i\right), \tag{1.15}$$

kde $\theta$ je Heavisideova funkce.

## 1.3 Volná částice

Zde se budeme, jak název napovídá, zabývat systémem s hamiltoniánem $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$. Abychom si usnadnili postup, přejdeme nyní do hybností reprezentace, kde

$$\tilde{K}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right) \equiv \langle \vec{p}, t | \vec{p}_i, t_i \rangle, \tag{1.16}$$

podobně jako dříve. Když se podíváme na Schrödingerovu rovnici v této reprezentaci, obdržíme

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \tilde{K}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \tilde{K}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right). \tag{1.17}$$

Ta má řešení

$$\tilde{K}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right) = e^{\frac{-i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_i)} \delta^{(3)}\left(\vec{p} - \vec{p}_i\right), \tag{1.18}$$

resp. pro retardovaný/advancovaný propagátor obdobně:

$$\tilde{K}^{(\pm)}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right) = \theta\left(\pm(t - t_i)\right) \delta^{(3)}\left(\vec{p} - \vec{p}_i\right) e^{\frac{-i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_i)}. \tag{1.19}$$

Náš cíl je ovšem propagátor v $q$-reprezentaci. Abychom se k němu dostali, připomeneme si

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}}, \tag{1.20}$$

a přepíšeme výsledek v hybností reprezentaci do $q$-reprezentace

$$\begin{aligned}
\tilde{K}^{(\pm)}\left(\vec{x}, t; \vec{x}_i, t_i\right) &= \int \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle K^{(\pm)}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right) \langle \vec{p}_i | \vec{x}_i \rangle \mathrm{d}^3 p \mathrm{d}^3 p_i \\
&= \theta\left(\pm(t - t_i)\right) \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathrm{d}^3 p \mathrm{d}^3 p_i \delta^{(3)}\left(\vec{p} - \vec{p}_i\right) e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} e^{\frac{-i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_i)} e^{-i\frac{\vec{p}_i\vec{x}_i}{\hbar}} \\
&= \theta\left(\pm(t - t_i)\right) \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\frac{(\vec{x}-\vec{x}_i)\vec{p}}{\hbar}} e^{\frac{-i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_i)},
\end{aligned} \tag{1.21}$$

což je ale divergentní integrál. To pro nás ale není překvapivé, i na levé straně je zobecněná funkce. Integrál lze přesto různými způsoby spočítat. Jedna cesta vedoucí k cíli by byla vektor $|\vec{x}_i\rangle$ v (1.21) nahradit funkcí k $\delta$-funkci konvergující a limitu provést až jako poslední krok. V částicové fyzice je běžnější alternativou postup **regularizace**, který si na tomto snadném příkladu ilustrujeme.

Regularizaci provedeme nahrazením[1]

$$\frac{i}{2m} \longrightarrow \frac{i}{2m} + \varepsilon \tag{1.22}$$

ve finálním tvaru integrálu v (1.21), díky čemuž dostaneme v (1.21) integrál gaussovského typu s kladnou reálnou částí koeficientu, který rozhoduje o konvergenci. To nám umožní integrál vyčíslit, pročež provedeme limitu a pošleme $\varepsilon$ do nuly.

[1] Často se potká ve tvaru funkčně ekvivalentního požadavku $m \to m + i\varepsilon$.

Pro zapomnětlivé připomeneme vzoreček platný pro $\mathrm{Re}\, a > 0$

$$\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}. \tag{1.23}$$

Po nahrazení a použití tohoto vzorečku dostáváme

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\theta\left(\pm(t-t_i)\right)}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{\pi}{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2m} \mp i\varepsilon\right)(t-t_i)}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{-(\vec{x}-\vec{x}_i)^2}{4\hbar^2\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2m} \mp i\varepsilon\right)(t-t_i)}\right), \tag{1.24}$$

což po zkrácení konstant a provedení limity dává výsledek

$$K^{(\pm)}\left(\vec{x},t;\vec{x}_i,t_i\right) = \theta\left(\pm(t-t_i)\right)\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_i)}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{im(\vec{x}-\vec{x}_i)^2}{2\hbar(t-t_i)}\right), \tag{1.25}$$

který si dobře zapamatujeme, protože spolu s výsledkem v hybnostní reprezentaci ho budeme extenzivně využívat v dalších kapitolách.

### 1.3.1 Rozplývání vlnového balíku

Nyní znovu navštívíme první cvičení z prvního semestru kvantové mechaniky. Nechť je na počátku náš systém ve stavu jednorozměrného gaussovského balíku, zbaveného fyzikálních rozměrů,

$$\psi_i(x,t=0) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-x^2}, \tag{1.26}$$

časový vývoj tohoto stavu je určen propagátorem volné částice jako

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \int \mathrm{d}x' K\left(x,t;x',t'=0\right)\psi_i(x'), \tag{1.27}$$

pokud označíme $\alpha = \frac{m}{2\hbar t}$, dosadíme za propagátor z předchozí kapitolky a za $\psi_i$ dosadíme gaussovský balík, dostaneme

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \int \mathrm{d}x' \sqrt{\frac{\alpha}{i\pi}} e^{i\alpha(x-x')^2} e^{-x'^2}, \tag{1.28}$$

což je gaussovský integrál. Za pomoci (1.23) tak dostáváme

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{\alpha}{i\pi}} e^{i\alpha x^2} \sqrt{\frac{\pi}{1-i\alpha}} e^{\frac{-4\alpha^2x^2}{4(1-i\alpha)}} \\ &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{i\alpha}{i\alpha-1}} e^{\frac{-i\alpha}{i\alpha-1}x^2}.\end{aligned} \tag{1.29}$$

Z tohoto řešení dostaneme hustotu pravděpodobnosti

$$\rho = |\psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2\alpha^2}{\pi(1+\alpha^2)}} e^{-\frac{2\alpha^2}{1+\alpha^2}x^2}, \tag{1.30}$$

a to je na první pohled Gaussovo rozdělení se střední kvadratickou odchylkou

$$\sigma = \sqrt{\frac{1+\alpha^2}{2\alpha^2}} = \sqrt{\frac{m^2+(2\hbar t)^2}{2m^2}}. \tag{1.31}$$

Vlnový balík se rozplývá stejně jako v zimě. Všimněme si hlavně limit pro $t \to 0$, kde dostáváme původní vlnovou funkci, a $t \to +\infty$, kde $\sigma$ roste asymptoticky lineárně v čase (shodně jako u Brownova pohybu).