1 Partiční suma

Nezávisí-li $\hat{H}$ explicitně na čase, lze propagátor přepsat s pomocí báze $(|\psi_j\rangle)_{j\in\mathscr{I}}$, $\hat{H}|\psi_j\rangle = E_j|\psi_j\rangle$ na

$$\begin{aligned} K(\vec{x}_2,t_2;\vec{x}_1,t_1) =: K(\vec{x}_2;\vec{x}_1;t_2-t_1) &= \langle \vec{x}_2,t_2|\vec{x}_1,t_1\rangle \\ &= \sum_n \langle \vec{x}_2,t_2|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\vec{x}_1,t_1\rangle \\ &= \sum_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(t_2-t_1)\right)\psi_n(\vec{x}_2)\overline{\psi}_n(\vec{x}_1). \end{aligned}$$

Pokud se formálně označí $t_2 - t_1 = -i\beta\hbar$, dostáváme matici hustoty Gibbsova rozdělení v x-reprezentaci

$$K(\vec{x}_2;\vec{x}_1;-i\beta\hbar) = \sum_n e^{-\beta E_n}\psi_n(\vec{x}_2)\overline{\psi}_n(\vec{x}_1) = \langle \vec{x}_2|e^{-\beta\hat{H}}|\vec{x}_1\rangle.$$

Metody výpočtu propagátoru tedy můžeme použít pro získání tohoto objektu.

Z nezávislosti stopy na volbě báze a jejích vzorců v energetické a v x-reprezentaci můžeme určit partiční funkci

$$Z(\beta) = \sum_n e^{-\beta E_n} = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\hat{H}}\right) = \int \mathrm{d}^3x K(\vec{x};\vec{x};-i\hbar\beta),$$

Úplně stejně jako ve statistické fyzice se nyní může odvodit, že střední hodnoty a další momenty se dají vyjádřit jako

$$\begin{aligned} \langle E\rangle_{\hat{\rho}} &= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z(\beta)), \\ \langle (E-\langle E\rangle)^2\rangle_{\hat{\rho}} &= \frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\ln(Z(\beta)), \\ &\vdots \end{aligned}$$

1.1 Použití k výpočtu středních hodnot pozorovatelných ve vakuovém stavu

Uvažujme pozorovatelnou $\hat{A}$ a stav $|0\rangle$ s minimální energií. Úloha určení střední hodnoty $\langle A\rangle_{|0\rangle}$ je obzvlášť důležitá v teorii pole, se kterou se setkáme v poslední kapitole, a kde je mnoho problémů možno převést na hledání **vakuových středních hodnot**.

Trik, který se použije k výpočtu takové střední hodnoty operátoru $\hat{A}$, závisejícího jen

na $A = A(\vec{x})$, je následující:

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{A}|0\rangle &= \lim_{T\to 0^+} \frac{\mathrm{Tr}\left(\hat{A}\hat{\rho}(T)\right)}{Z(\beta)} = \lim_{\beta\to+\infty} \frac{\mathrm{Tr}\left(\hat{A}\hat{\rho}(\beta)\right)}{Z(\beta)} \\ &= \lim_{\beta\to+\infty} \frac{\int \mathrm{d}^3x \sum_n e^{-\beta E_n}\psi_n(\vec{x})\overline{\psi}_n(\vec{x})A(\vec{x})}{Z(\beta)} \\ &= \lim_{\beta\to+\infty} \frac{\int \mathrm{d}^3x A(\vec{x})K(\vec{x};\vec{x};-i\beta\hbar)}{Z(\beta)}.\end{aligned} \tag{1.1}$$

Do (1.1) dosadíme za propagátor pomocí dráhového integrálu

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \lim_{\beta\to+\infty} \frac{1}{Z(\beta)} \int \mathscr{D}\vec{x}(\tau)A(\vec{x}(0)) \exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} L_{\text{Eukl.}}(\vec{x}(\tau),\dot{\vec{x}}(\tau),\tau)\mathrm{d}\tau\right),$$

kde se integruje přes všechny uzavřené trajektorie $\vec{x}(\tau) : \langle 0, \beta\hbar\rangle \to \mathbb{R}^3$, $\vec{x}(0) = \vec{x}(\beta\hbar)$ a $L_{\text{Eukl.}}$ získáme nahrazením:

$$t \to -i\tau, \tag{1.2}$$

$$\mathrm{d}t \to -i\mathrm{d}\tau, \tag{1.3}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \to i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}. \tag{1.4}$$

Toto nahrazení dává

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m\dot{\vec{x}}^2 - V(\vec{x}) \\ \to L_{\text{Eukl.}} &= -\frac{1}{2}m\dot{\vec{x}}^2 - V(\vec{x}),\end{aligned} \tag{1.5}$$

takže $L_{\text{Eukl.}} \leq 0$ pro kladné V. Abychom mohli pokračovat dál, musíme si definovat další pojem.

1.1.1 Funkcionální derivace

Bez soustředění se na matematickou korektnost se zde stručně seznámíme s **funkcionální derivací**. Je-li

$$F[\eta] = \int G(\eta, \dot{\eta}, \ddot{\eta}, \ldots, \eta^{(k)}, t)\mathrm{d}t, \tag{1.6}$$

kde $\eta : \langle a, b\rangle \to \mathbb{R}$ s příslušnými derivacemi, zavedeme funkcionální derivaci

$$\frac{\delta F}{\delta \eta(t)} \tag{1.7}$$

pomocí výpočtu variace F:

$$\delta F[\eta] = \int_a^b \frac{\delta F}{\delta \eta(t)}\delta\eta(t)\mathrm{d}t. \tag{1.8}$$

Příklad takového systému jsme už viděli v [**?**]

$$S[\eta] = \int_a^b L(\eta, \dot{\eta}, t)\mathrm{d}t, \tag{1.9}$$

kde $\frac{\delta S}{\delta \eta(t)}$ dává přesně levou stranu Euler–Lagrangeových rovnic. Při výpočtu tedy rozvineme funkci $G(\eta, \dot{\eta}, \ddot{\eta}, \ldots, \eta^{(k)}, t)$ do Taylorovy řady a ponecháme jen první řád.

Často lze psát

$$\frac{\delta F}{\delta \eta(t)} = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \frac{1}{\varepsilon} \left(F[\eta + \varepsilon\delta(t)] - F[\eta] \right), \tag{1.10}$$

podobně jako jsme to provedli při výpočtu propagátoru LHO dráhovým integrálem.

Vraťme se k výpočtu střední hodnoty pozorovatelné $\hat{A}$ ve stavu $|0\rangle$. Označíme si

$$Z[\beta, \vec{\eta}] = \int \mathscr{D}\vec{x}(\tau) \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \left\{ L_{\text{Eukl.}}(\vec{x}(\tau), \dot{\vec{x}}(\tau), \tau) + \vec{x}(\tau) \cdot \vec{\eta}(\tau) \right\} \mathrm{d}\tau \right), \tag{1.11}$$

kde dráhový integrál je opět přes všechny uzavřené trajektorie $\vec{x} : \langle 0, \hbar\beta \rangle \to \mathbb{R}^3$.

Zapišme $A(\vec{x})$ pomocí vytvořujícího funkcionálu (Taylorova rozvoje)

$$A(\vec{x}) = \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n}} x_1^{n_1} x_2^{n_2} x_3^{n_3} \equiv \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n}} \vec{x}^{\vec{n}}, \tag{1.12}$$

potom

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \lim_{\beta \to +\infty} \frac{1}{Z(\beta)} \int \mathscr{D}\vec{x}(\tau) \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n}} \vec{x}^{\vec{n}}(0) \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \left\{ L_{\text{Eukl.}} + \vec{x}\vec{\eta} \right\} \mathrm{d}\tau \right) \Bigg|_{\vec{\eta}=0},$$

kde každé $x_i^k(0)$ rozepíšeme pomocí funkcionální derivace jako $\left(\frac{\hbar\delta}{\delta\eta_i(0)} \right)^k$ díky exponenciále, která za nimi následuje. Obdržíme tak výsledek ve velmi kompaktní formě, zapsaný pomocí zavedeného označení

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \lim_{\beta \to +\infty} \frac{1}{Z(\beta)} A\left(\frac{\hbar\delta}{\delta\eta_1(0)}, \frac{\hbar\delta}{\delta\eta_2(0)}, \frac{\hbar\delta}{\delta\eta_3(0)} \right) Z[\beta, \vec{\eta}] \Big|_{\vec{\eta}(\tau) \equiv 0}. \tag{1.13}$$

To je mimořádně užitečný vztah pro zájemce o QFT. Zápisem funkcionálních derivací v závorce máme na mysli dosazení za příslušné složky $\vec{x}$ do vytvořujícího funkcionálu pro $A(\vec{x})$.