

Московский государственный университет имени
М.В.Ломоносова
Физический факультет
Кафедра физики частиц и космологии

Непертурбативное вычисление функциональных интегралов

Курсовая работа
студента 2 курса, 211 группы
Котенко Максима Алексеевича

Научный руководитель
д. ф.-м. н.
Белокуров Владимир Викторович

Москва, 2021

Содержание

1	Введение	2
2	Понятие функционального интеграла	3
2.1	Описание подхода функционального интеграла	3
2.2	Функциональный интеграл в виде статистической суммы	4
3	Вычисление	6
4	Результаты	9
5	Заключение	11

1 Введение

Существует 3 основных подхода к формализации квантовой механики. В данной работе рассматривается применение функциональных интегралов, разработанных Ричардом Фейнманом. Намного проще для простых систем найти волновую функцию, решив уравнение Шрёдингера. Применение функционального интеграла в данном случае было бы нецелесообразно. Однако особенностью этого подхода является то, что его легко обобщить на систему многих частиц и на квантовые поля, в отличие от остальных формализаций. Поэтому он широко применяется как в квантовой механике, так и в квантовой теории поля.

Впервые интеграл по траекториям был введён в работах по теории броуновского движения. С математической точки зрения он представляет собой интеграл по функциональному пространству. Строго обоснован был этот метод Винером, который определил меру в соответствующем функциональном пространстве.

Большую трудность представляет вычисление функционального интеграла. Точному решению поддаются только простейшие случаи свободного движения частицы и гармонического осциллятора, поэтому приходится использовать приближённые методы.

Используется, например, метод теории возмущений. Его суть заключается в разложении подынтегрального выражения в ряд по степеням малого параметра. Меняя местами затем знак интегрирования и суммирования, возможно получить нужную сумму. Однако, такая сумма расходится, что требует введения множителей, которые устраняли бы эту проблему, что вызывает трудности.

В данной работе же применяется другой метод, метод численного интегрирования. Он основан на технике интегрирования Монте-Карло. С его помощью здесь вычисляются средние кинетическая и потенциальная энергии квантового ангармонического осциллятора.

2 Понятие функционального интеграла

2.1 Описание подхода функционального интеграла

Физический смысл функционального интеграла заключается в том, что фактически суммируется вклад всех возможных траекторий в вероятность перехода частицы из точки a в точку b . То есть амплитуда вероятности

$$K(b, a) = \sum const \cdot e^{\frac{iS[x(t)]}{\hbar}} \quad (1)$$

Представить интеграл по траекториям в одномерном случае наиболее наглядно можно, разделив промежуток времени на отрезки длиной ϵ , то есть в каждом t_i имеем координату x_i . Тогда интеграл по всем траекториям представляет собой N -кратный интеграл. Что можно представить в виде

$$K(b, a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \int \dots \int e^{\frac{i}{\hbar} S} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_N}{A} \quad (2)$$

где число отрезков на которые делится траектория $N = \frac{t_b - t_a}{\epsilon}$, A^{-N} -нормирующий множитель необходимый для сходимости интеграл, где $A = \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m}\right)^{1/2}$, а ϵ -длина отрезка, на которые делится исходный промежуток времени.

Но обычно для удобства это же представляют в виде

$$K(b, a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar} S} \mathcal{D}x \quad (3)$$

Фаза вклада каждой траектории определяется действием S и равна

$$\phi(x(t)) = C e^{\frac{i}{\hbar} S} \quad (4)$$

Где действие равно

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt, L = \frac{p^2}{2m} - V(x) \quad (5)$$

Таким образом вероятность перехода из точки a в точку b $P(b, a) = |K(b, a)|^2$

Для точного вычисления функционального интеграла можно интегрировать по всем возможным отклонениям от классической траектории. То есть удобно представить $x(t) = \bar{x}(t) + y(t) \Rightarrow \mathcal{D}x(t) = \mathcal{D}y(t)$, где $S_{cl.}[b, a] = S[\bar{x}(t)]$ То есть

$$K(b, a) = e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl.}} \times \int_0^0 e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2] dt} \mathcal{D}y(t) \quad (6)$$

$\bar{x}(t)$ - классическая траектория. Почленным интегрированием можно найти, что интеграл от суммы членов, пропорциональных первой степени y , равен нулю.

Но таким способом непосредственно возможно вычислить только простейшие системы: гармонический осциллятор и свободно движущаяся частица.

Например, для квантового гармонического осциллятора, так как все траектории выходят из 0 в момент $t=0$ и возвращаются в 0 в момент $t=T$, то функцию $y(t)$ возможно разложить в ряд Фурье по синусам

$$y(t) = \sum_n a_n \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \quad (7)$$

То есть можно считать траектории функциями от a_n . И переходя от y_i к a_n можно непосредственно затем найти, что для квантового гармонического осциллятора

$$K(x_b, T; x_a, 0) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} [(x_a^2 - x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b]} \quad (8)$$

2.2 Функциональный интеграл в виде статистической суммы

Для осуществления вычислений при применении приближённых методов, в частности метода Монте-Карло, намного удобнее будет работать с интегралом, осуществив виков поворот.

Виков поворот преобразует время в мнимое время $d\tau = idt$. Тогда действие преобразовывается в

$$S' = -\frac{1}{i} \int \left(\frac{p^2}{2m} + V(x) \right) d\tau \quad (9)$$

Таким образом фаза $e^{\frac{i}{\hbar} S}$ перестаёт быть комплексной и намного проще становится проводить вычисления.

Теперь становится возможным использовать статистическую сумму Z для работы с функциональным интегралом.

$$\mathcal{Z}(b) = \langle e^{b \cdot x} \rangle = \int d^n x \Omega(x) e^{b \cdot x} \quad (10)$$

где $b \cdot x = \sum^n b_i x_i$, а $\Omega(x)$ - мера, распределение вероятностей.

В общем виде можно представить в виде

$$\mathcal{Z}(A, b) = \int d^n x e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j} x_i A_{ij} x_j + \sum^b b_i x_i} \quad (11)$$

В данном же случае удобна запись

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x | e^{-\frac{HT}{\hbar}} | x \rangle = \text{Tr} e^{-\frac{HT}{\hbar}} \quad (12)$$

В квантовой теории поля широко используются n -точечные корреляционные функции $\Gamma^{(n)}$.

$$\Gamma^{(n)} = \frac{\text{Tr} e^{-\frac{HT}{\hbar}} x(\tau_1) \dots x(\tau_n)}{Z} \quad (13)$$

В пределе большого времени тогда для двуточечной функции можно получить

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \Gamma^{(2)} = \langle 0 | x(0) x(\tau) | 0 \rangle - \langle 0 | x | 0 \rangle^2 = \sum_{n \neq 0} e^{-\frac{(E_n - E_0)\tau}{\hbar}} |\langle 0 | x | n \rangle|^2 \quad (14)$$

Можно получить, что нулевое собственное значение энергии E_0 выражается как

$$E_0 = \langle 0|H|0\rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\text{Tre}^{-\frac{HT}{\hbar}} H}{\text{Tre}^{-\frac{HT}{\hbar}}} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{-1}{T} \frac{\partial}{\partial \hbar^{-1}} \ln Z \quad (15)$$

И уже зная эту величину можно найти энергию первого возбуждённого состояния по нижеприведённой формуле, определив корреляционную функцию, для чего она в данной работе и вычисляется.

Если выбрать $\tau' > \tau \rightarrow \infty$, то легко увидеть

$$\frac{\Gamma^{(2)}(\tau')}{\Gamma^{(2)}(\tau)} = e^{\frac{(E_1 - E_0)(\tau' - \tau)}{\hbar}} \quad (16)$$

То есть тогда

$$\frac{1}{\hbar}(E_1 - E_0) = \lim_{T \rightarrow \infty} \ln \frac{\frac{-1}{\Delta\tau} \Gamma^{(2)}(\tau + \Delta\tau)}{\Gamma^{(2)}(\tau)} \quad (17)$$

Подобным образом можно получить и другие сведения о системе, так как для любого оператора \hat{A} возможно определить

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\text{Tre}^{-\frac{HT}{\hbar}} \hat{A}}{\text{Tre}^{-\frac{HT}{\hbar}}} = \frac{\sum_n e^{\frac{E_n T}{\hbar}} \langle n|\hat{A}|n\rangle}{\sum_n e^{\frac{E_n T}{\hbar}}} \quad (18)$$

3 Вычисление

В данной работе с помощью метода Монте-Карло вычисляются значения кинетической и потенциальной энергии ангармонического осциллятора с гамильтонианом вида

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \lambda x^{2a} \quad (19)$$

В результате данной работы получается зависимость искомых величин от значений a

Далее буду использовать натуральную систему единиц $\hbar = c = 1$ и считать, что $m = 1, \omega = 1, \lambda = 1$

Для определения траекторий используется один из видов методов Монте-Карло— метод Метрополиса.

В интеграле величина $\exp[-\frac{S(x_\nu)}{\hbar}]$ может значительно варьироваться, поэтому вклад части траектории будет мал. Из-за этого в методе Монте-Карло для обеспечения практичности вычислений применяется идея существенной выборки. То есть выбирается не случайная траектория, а только лишь такая x_ν , а лишь дающая значительный вклад в интеграл. Исходя из статистической механики, необходимо выбирать x_ν удовлетворяющие распределению Больцмана

$$P^{eq}(x_\nu) \mathcal{D}x = \frac{\exp[-S(x_\nu)] \mathcal{D}x}{\int \mathcal{D}x \exp[-S(x)]} \quad (20)$$

Тогда среднее значение \bar{A} для $\langle A \rangle$ находится как

$$\bar{A} = \frac{1}{N} \sum_{\nu=1}^N A(x_\nu) \quad (21)$$

где N - число траекторий, по которым усредняется искомая величина. Реализовать существенную выборку можно с помощью Марковского процесса, который в пределе $N \rightarrow \infty$ совпадает с выборкой соответствующей распределению Больцмана. Марковская цепь описывается матрицей W , где W_{ij} даёт вероятность перехода системы из состояния s_i в состояние s_j за один Марковский шаг, при чём $\sum W_{ij} = 1$. Для непрерывного пространства состояний же аналогично $W(x, x') \geq 0$, $\int dx' W(x, x') = 1$ Для двухшагового процесса:

$$W^{(2)}(x, x'') = \int dx' W(x, x') W(x', x'') \quad (22)$$

Если количество шагов стремится к бесконечности, то функция $W(x, x')$ имеет равновесный стационарный предел.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W^{(n)}(x, x') = P^{eq}(x'), \int P^{eq}(x') dx' = 1 \quad (23)$$

где $P^{eq}(x')$ - плотность вероятности того, что траектория имеет вид x' . Для Марковского процесса такое стационарное распределение единственно. Поэтому должно выполняться условие детального баланса, то есть равенства вероятности прямого и обратного процессов.

$$\frac{W(x, x')}{W(x', x)} = \frac{P^{eq}(x')}{P^{eq}(x)} \quad (24)$$

Рассматриваю траектории, отличающиеся в одном узле. Пусть x_i — изменяемая точка. Тогда для функции перехода можно получить

$$\frac{W_S(x, x')}{W_S(x', x)} = \frac{e^{-\frac{S(x')}{\hbar}}}{e^{-\frac{S(x)}{\hbar}}} \quad (25)$$

$S(x_i)$ — часть действия, связанная с x_i .

В методе Метрополиса $W(x_i, x'_i)$ представляется в виде

$$W(x_i, x'_i) = T(x_i, x'_i)A(x_i, x'_i) - \delta(x_i, x'_i)(1 - \int dx'' T(x_i, x'')A(x_i, x'')) \quad (26)$$

где $T(x_i, x'_i)$ - вспомогательная вероятность перехода, а $A(x_i, x'_i)$ - вероятность принятия пробного перехода. Причём последнее обладает свойствами функции перехода и определяется выражением

$$A(x_i, x'_i) = \min \left[1, \frac{P^{eq}(x'_i)T(x_i, x'_i)}{P^{eq}(x_i)T(x'_i, x_i)} \right] \quad (27)$$

В данной работе для удобства выбирается в качестве $T(x'_i, x_i)$ равномерная вероятность $[-0.5; 0.5]$. Тогда критерием для сохранения новой точки является выполнение неравенства

$$\exp(-\Delta S) > r \quad (28)$$

где $\Delta S = S(x') - S(x)$, а r - случайное число с равномерным распределением между 0 и 1.

Таким образом программа выделяет для данной траектории случайную точку и смещает её на $[-0.5; 0.5]$. Если критерий выполнен, то новая точка сохраняется. Так генерируется нужное число траекторий.

Тогда я могу найти среднюю потенциальную энергию как

$$\langle V \rangle = m\omega^2 \frac{\langle x^2 \rangle}{2} + \lambda \langle x^{2a} \rangle \quad (29)$$

Среднюю энергию могу найти как

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = -\frac{\partial}{\partial \tau} \int dx_n \langle x_{n+1} | e^{-\beta H} | x_n \rangle \quad (30)$$

где считаю, что $H = \frac{p^2}{2m}$
так как

$$\langle p | q_n \rangle = e^{-ipq_n} \quad (31)$$

и так как

$$\int \frac{|p\rangle dp \langle p|}{2\pi} = 1 \quad (32)$$

То тот же самый интеграл для средней кинетической энергии могу представить в виде

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = -\frac{\partial}{\partial \tau} \int \int \frac{dx_n dp_n}{2\pi} e^{-\frac{p_n^2}{2m}\tau - ip_n(x_{n+1} - x_n)} \quad (33)$$

Вычислив этот интеграл, получаю в итоге

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2\tau} - \left\langle \frac{m(x_{n+1} - x_n)^2}{2\tau^2} \right\rangle \quad (34)$$

Могло бы показаться, что значение средней кинетической энергии будет расходиться при стремлении τ к нулю. На самом деле этого не происходит, потому что $\langle x_{n+1} - x_n \rangle = \langle x(t + \tau) - x(t) \rangle \sim \sqrt{\tau}$

Кроме средней потенциальной и кинетической энергии также вычисляю коррелятор для каждого квантового ангармонического осциллятора.

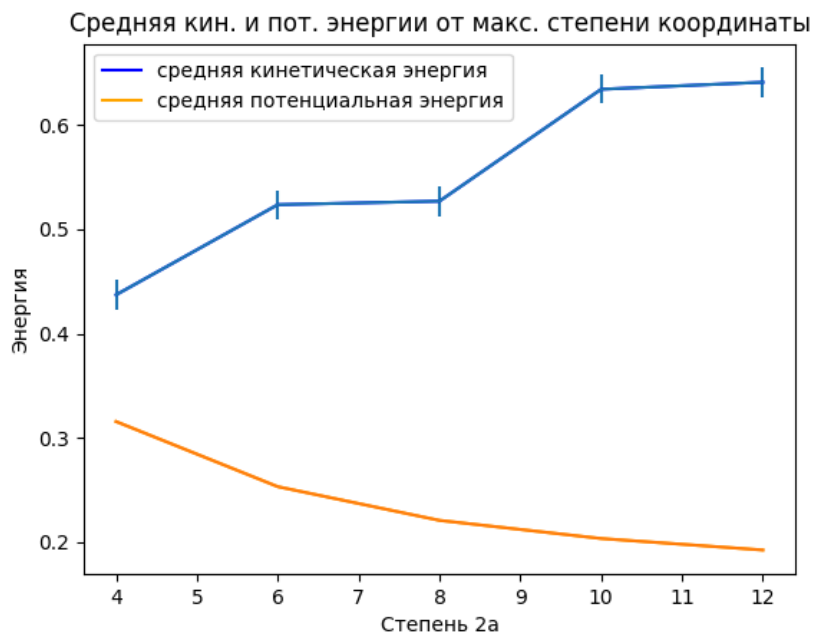
$$\langle x(0)x(\tau) \rangle = \frac{1}{N} \sum_N x(t_n)x(t_n + \tau) \quad (35)$$

Практически при выполнении работы я разбиваю промежуток времени на N отрезков и N моментов времени. С помощью описанного выше метода Метрополиса я получаю серию траекторий, в каждой из которых известно положение в любой момент времени t_n .

Благодаря этому и могу вычислить все необходимые мне величины.

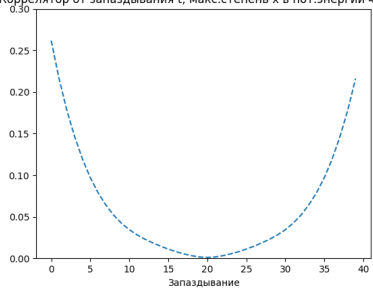
Для вычисления использовались значения числа циклов $N_{cycle} = 5000$ с длиной каждого $L = 100$, промежуток времени $T = 4$ разбивался на $N = 40$ временных отрезков.

4 Результаты

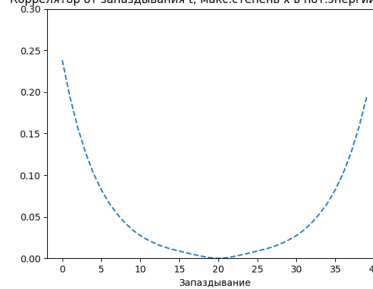


При увеличении старшей степени многочлена потенциальной энергии средняя потенциальная энергия падала, а средняя кинетическая энергия, напротив, росла.

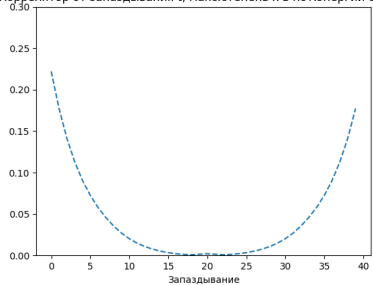
Коррелятор от запаздывания t, макс. степень x в пот. энергии 4.0000



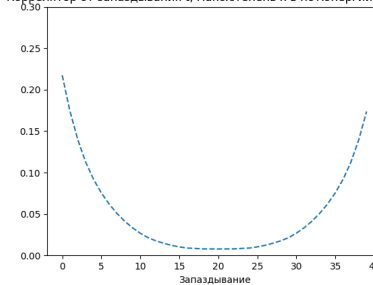
Коррелятор от запаздывания t, макс. степень x в пот. энергии 6.0000

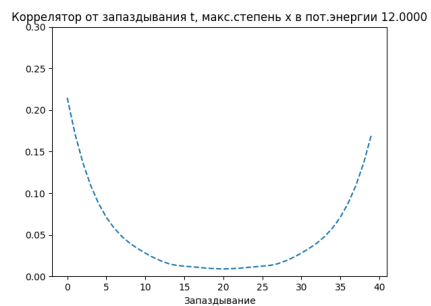


Коррелятор от запаздывания t, макс. степень x в пот. энергии 8.0000



Коррелятор от запаздывания t, макс. степень x в пот. энергии 10.0000





Видно, что при увеличении старшей степени многочлена потенциальной энергии график зависимости коррелятора от времени уплотнился, и одновременно с этим уменьшались его пиковые значения на краях.

5 Заключение

Функциональный интеграл имеет фундаментальное значение в квантовой механике и в квантовой теории поля, поэтому его вычисление представляет практический интерес. В мнимом времени он эквивалентен статистической сумме, что значительно упрощает численную работу с ним.

В данной работе был рассмотрен ангармонический осциллятор с потенциальной энергией вида $\frac{m\omega^2 x^2}{2} + \lambda x^{2a}$ с значениями a от 2 до 6. Продемонстрировано, что возможно исследование таких квантовых систем с помощью методов Монте-Карло.

Интерес представляет сравнение полученных результатов с результатами, найденными иными методами. Исследование системы ангармонического осциллятора пертурбативными методами может являться задачей дальнейших исследований, а полученные в данной работе результаты требуют улучшения, так как точность вычислений была невысока в связи с отсутствием соответствующих вычислительных мощностей. Все вычисления проводились на домашнем компьютере.

Дальнейшей целью может являться оптимизация и улучшение качества результатов, а также освоение альтернативных методов вычисления функционального интеграла для сравнения полученных таким образом результатов с имеющимися.

Список литературы

- [1] Фейнман Р., Хиббс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — Мир, 1968.
- [2] Ж. Зинн-Жюстен. Континуальный интеграл в квантовой механике. — Москва, ФИЗМАТЛИТ, 2010.
- [3] M. Creutz and B.A. Freedman, "A statistical approach to quantum mechanics—
Ann. Phys. 132, 427-462 (1981).