«ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА»,
1982, том 13, вып. 5

УДК 530.145

ГАМИЛЬТОНОВЫ КОНТИНУАЛЬНЫЕ ИНТЕГРАЛЫ

Л. В. Прохоров

Ленинградский государственный университет, Ленинград

В статье рассматриваются свойства континуальных интегралов, которые связаны с учетом нестандартных членов, отражающих операторную природу канонических переменных. Формулируются правила обращения с такими членами («правила эквивалентности»). Обсуждаются особенности описания в рамках метода задач с границей, поведение континуальных интегралов при канонических преобразованиях и проблема квантования динамических систем со связями.

Properties of path integrals connected with the operator nature of canonical variables (appearance of non-standard terms) are studied. The rules for treating such terms (the equivalence rules) are formulated. The following problems are also considered: canonical transformations of Hamiltonian path integrals; quantization of theories with constraints, path integrals in the problems with nontrivial boundaries.

ВВЕДЕНИЕ

Континуальные интегралы, изобретенные Фейнманом в сороковых годах [1, 2] (очень близко к их определению подошел Дирак [3]), превратились в важный инструмент современной теоретической физики. Они находят применение не только там, где требуется дать квантовое описание систем с бесконечным (или очень большим) числом степеней свободы, например в квантовой теории поля или теории твердого тела, но и в задачах обычной квантовой механики. Более того, имеется тенденция переформулировать привычные квантовомеханические задачи (например, частица в ящике [4]) на языке континуальных интегралов.

Популярность континуальных интегралов в квантовой теории поля связана с тем, что это наиболее адекватный задаче математический аппарат, позволяющий записывать формулы в весьма компактном виде и, следовательно, избегать громоздких вычислений. Но помимо этих чисто технических (хотя и весьма важных) преимуществ метод континуальных интегралов открывает новые возможности для приложений — так, в рамках метода естественно строится квазиклассическое приближение, позволяющее выйти за пределы теории возмущений. В квантовой механике континуальные интегралы, благодаря своей наглядности, помогают по-новому взглянуть на старые, хорошо известные задачи. Работы в этом направлении полезны не только для изучения возможностей метода, но и для лучшего понимания самого аппарата. Дело в том, что, несмотря на широкое применение «исчисления континуальных интегралов» (особенно в последнее десятилетие), оно все еще недостаточно разработано. Помимо чисто математических проблем, связанных с этим методом, сюда следует отнести проблему вычисления интегралов. По существу, не считая тривиальных случаев, умеют вычислять лишь гауссовы или сводящиеся к ним континуальные интегралы.

Гораздо менее трудные, но весьма существенные для практических приложений вопросы касаются учета в рамках данного аппарата неперестановочности операторов, поведения континуальных интегралов при канонических преобразованиях, особенностей формулирования на этом языке теорий со связями. Они важны не только для квантовой механики, но и для квантовой теории поля. Некоторые аспекты последних трех вопросов обсуждаются в настоящей статье, посвященной гамильтоновым континуальным интегралам в нерелятивистской квантовой механике.

Ключевыми для обсуждаемой ниже проблематики следует признать, наряду со статьей Фейнмана [1], работы Паули [4], Моретт [5] и Де Витта [6]. Паули [4], исходя из замечания Фейнмана ([1], с. 185 перевода) и опираясь на работу Ван Флека [7] о квазиклассическом приближении для волновой функции (см. также [8]):

$$\langle q(t)|q'(0)\rangle \approx cD^{1/2}\exp\left[\mathrm{i}S(q,q')/\hbar\right];\; D=\det\left|-\frac{\partial^2 S}{\partial q^i\partial q'^j}\right| \qquad (1)$$

(S — классическое действие), предложил именно (1) считать точным выражением для функции распространения в пределе, когда время $t\to 0$. Независимо эта же формула была введена и обоснована в [5]. В своих лекциях (1950—1951 гг.) Паули вывел также уравнение Шредингера, которому удовлетворяет функция (1) при $t\to 0$ [(П. 31) для $g_{ij}=c_i\delta_{ij}$]. Де Витт обобщил этот результат на случай криволинейных координат. В работе Де Витта [6] в явном виде фигурировало два важных момента. Во-первых, действие S $(q,\ q')$ вычислено вплоть до членов $(\Delta q)^4/t$ $(t\to 0,\ \Delta q=q-q')$ *, и, во-вторых, указано, что метод автоматически распространяется на пространства с кривизной (при этом меняется гамильтониан — к нему добавляется член $\hbar^2R/12$, где R — скалярная кривизна).

В связи с появлением в действии нестандартных членов типа $(\Delta q)^3/t$, $(\Delta q)^4/t$, $t\to 0$ («экстрачлены») встает вопрос о том, как с ними обращаться. Маклафлин и Шульман [10] показали, что теория с экстрачленами эквивалентна теории без экстрачленов, но с видоизмененным потенциалом, и в явном виде сформулировали правила построения нового потенциала («правила эквивалентности»). В неявном

* Здесь следует упомянуть работу Эдвардса и Гуляева [9], которые, изучая особенности континуального интеграла в полярных координатах и, очевидно, не зная о [6], также пришли к выводу о необходимости учета в действии более высоких степеней Δq.

виде эти правила содержались уже в работе Де Витта [6] *. Разработанный аппарат позволил Жервэ и Жевицкому [11] выяснить, как преобразуется лагранжев континуальный интеграл, т. е. интеграл по траекториям в конфигурационном пространстве, при точечных канонических преобразованиях (см. также [12]). В работах [13—15] идеи Паули — Де Витта применялись для квантования на групповом пространстве; их применение в квантовой теории поля обсуждалось в [16, 17]. Ченг [18] провел вычисления, параллельные работе [6], и получил уравнение Шредингера, используя правила эквивалентности; при этом он почему-то пренебрег множителем $D^{1/2}$ в (1).

Необходимость учета не только низших степеней Δq хорошо известна математикам, изучающим случайные (диффузионные) процессы. Так, если $q\,(t)$ — траектория броуновской частицы, то дифференциал функции $f\,(q\,(t))$:

$$df\,(q) = f'\,(q)\,dq + f''\,(q)\,dt/2 \tag{2}$$

(формула Ито), т. е.

$$\int\limits_{t'}^{t} f'\,(q)\,dq = f\,(q)\Big|_{q'}^{q} - \frac{1}{2}\int\limits_{t'}^{t} f''\,(q)\,dt. \tag{3}$$

Здесь, во-первых, учитываются члены $(dq)^2$, во-вторых, по существу используется эквивалентность $(dq)^2 \sim dt$. Появление формул типа (3) связано, конечно, с недифференцируемостью траектории броуновской частицы (см. [19]).

С этим же обстоятельством сталкиваются и в математической физике при исследовании уравнений методом континуальных интегралов. В [20] строилось уравнение типа уравнения Гамильтона — Якоби (II. 23) и искалось его решение при $\varepsilon = t - t' \to 0$, причем удерживались члены $(\Delta q)^3/\varepsilon$, $(\Delta q)^4/\varepsilon$ (см. также [21], где по существу использовали правила эквивалентности).

Вскоре после выхода работы [1] Фейнман сформулировал квантовую механику на языке интегралов по траекториям в фазовом пространстве [22] («гамильтонов» континуальный интеграл). Этот же вопрос был рассмотрен позднее в [23—25]. Гамильтоновы континуальные интегралы привлекли к себе довольно значительное внимание, что объясняется несколькими причинами. Прежде всего, стандартный способ квантования [3] связан именно с теорией Гамильтона, поэтому создание такого аппарата позволяет установить непосредственную связь между стандартной и фейнмановской формулировками квантовой механики. Далее, в гамильтоновом формализме легче всего проконтролировать унитарность S-матрицы. Наконец, гамильтонов континуальный интеграл существен для формулирования калибровочных теорий. В связи с известными особенностями фиксации калибровки в теории полей Янга — Миллса [26] понятно желание с са-

* Впрочем, в одном простом случае соответствующее правило сформулировано в [6] явно.

мого начала исключить все нефизические переменные [27, 28]. Естественно это сделать в гамильтоновом формализме, поэтому, если мы по-прежнему хотим пользоваться всеми преимуществами метода континуальных интегралов, необходима гамильтонова формулировка метода.

Гамильтонов континуальный интеграл проще всего выглядит для систем с лагранжианами вида $\dot{q}^2/2 - V(q)$. В данном случае нет проблемы упорядочения операторов и в интеграле фигурирует классический гамильтониан. Благодаря тесной связи получающегося формализма с классической механикой возникает иллюзия, что на таком пути удается обойти типичные для квантовой механики проблемы (например, проблему упорядочения). Довольно быстро заметили, что это не так [24, 29, 30]. Вместе с тем надлежащие правила учета подобных квантовых особенностей, возникающих в более сложных задачах, не были достаточно разработаны. Ниже этот и связанные с ним вопросы обсуждаются, опираясь в основном на [31—33]. В качестве дополнительной литературы обзорного характера, посвященной нерелятивистским континуальным интегралам, можно привести работы [34—47], которые делятся на ясно выраженные математические работы [34—40], и на физические [41—47].

Настоящая статья построена следующим образом: в разд. 1 обсуждаются фейнмановское квантование, учет нестандартных членов, правила эквивалентности, неоднозначность обычной записи интегралов в лагранжевом формализме, там же рассмотрены особенности задач с границей; проблема экстрачленов в гамильтоновом формализме и связанные с ней вопросы разобраны в разд. 2; разд. 3 посвящен каноническим преобразованиям гамильтоновых континуальных интегралов; в разд. 4 обсуждаются вопросы квантования динамических систем со связями. После заключительных замечаний следуют Приложения, в которые вынесены некоторые громоздкие выкладки и вспомогательные формулы.

Обозначения. За исключением специально оговоренных случаев, рассмотрена частица единичной массы в n-мерном пространстве. Канонические переменные обозначим q^i, p_i, $i = 1, 2, \ldots, n$, скобки Пуассона $\{\ ,\ \}$, $\{q, p\} = 1$. Как правило, значок i опускаем, например: $\Sigma_i q^i p_i = q^i p_i = qp$. Вместо $d^n q$ будем писать dq. g_{ij} и g^{ij} — соответственно ко- и контравариантные метрические тензоры; $g^{ik} g_{kj} = \delta^i_j$, $g = \det g_{ij}$, $\sqrt{g} dq \equiv \overline{d}q$. Функции g в точках q' и q будем обозначать соответственно g' и g. Производные по координатам обозначаются индексом с запятой: $\partial f / \partial q^i \equiv f_{,i}$.

Следуя Дираку [3], под $| t, q>$ будем понимать собственный вектор оператора $\hat{q}(t)$ с собственным значением q. Время t иногда будем писать в виде индекса, например: $q(t) \equiv q_t$, $\partial/\partial t \equiv \partial_t$, $\psi(q, t) \equiv \psi_t(q)$ и т. п. По повторяющимся индексам, как правило, подразумевается суммирование (интегрирование), например: $|q\rangle \langle q| \equiv \int dq\, |q\rangle \langle q|$ и т. п.

1. НЕСТАНДАРТНЫЕ ЧЛЕНЫ И ПРАВИЛА ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ. ЛАГРАНЖЕВ ФОРМАЛИЗМ

Нестандартные члены. Рассмотрим матричный элемент (ядро) оператора эволюции $\hat{\mathrm{U}}\,(t-t')=\exp\,[-\mathrm{i}\hat{H}\,(t-t')/\hbar]$; разбивая временно́й интервал $t-t'$ на N промежутков $\varepsilon=(t-t')/N$, представим это ядро в виде [3]:

$$\langle q|\,\hat{\mathrm{U}}_{t-t'}\,|q'\rangle=\int dq_1\ldots dq_{N-1}\langle q|\,\hat{\mathrm{U}}_\varepsilon\,|q_{N-1}\rangle\ldots\langle q_1|\,\hat{\mathrm{U}}_\varepsilon\,|q'\rangle. \tag{4}$$

Если вместо $\langle q_{i+1}\mid\hat{\mathrm{U}}_\varepsilon\mid q_j\rangle$ подставить согласно Дираку [3] $\exp\,[\mathrm{i}\,S\,(q_{j+1},\,q_j)/\hbar]$, где $S\,(q_{j+1},\,q_j)$ — классическое действие, и перейти к пределу $N\to\infty$, то с точностью до бесконечного множителя получим представление для функции распространения в виде континуального интеграла Фейнмана [1], который будем понимать как предел конечнократного (4) и записывать так:

$$\langle q|\,\hat{\mathrm{U}}_{t-t'}\,|q'\rangle=\int\limits_{q(t')=q'}^{q(t)=q}\mathscr{D}q\,(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,S\,[q\,(t)]\right\}\equiv$$

$$\equiv\int\prod_t\frac{dq\,(t)}{(2\pi i\varepsilon\hbar)^{n/2}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\limits_{t'}^{t}L\,dt\right\}. \tag{5}$$

Бесконечный множитель есть предел $(2\pi\,\mathrm{i}\,\varepsilon\hbar)^{-nN/2}$ при $N\to\infty$, и он включен в определение меры $\mathscr{D}q\,(t)$. Отметим, что наиболее существенной для приложений является возможность трактовать повторный интеграл (4) как многократный, используя после перехода к пределу обобщения соответствующих допредельных формул. В значительной мере с этим и связана плодотворность метода.

Для дальнейшего важным будет следующее замечание: матричные элементы оператора $\hat{\mathrm{U}}_\varepsilon$ в (4) необходимо знать вплоть до членов порядка ε (члены порядка ε^2 не дают вклада в предел при $N\to\infty$). Суть замечания проста. Поскольку $\hat{U}_\varepsilon\to\hat{I}$ (единичный оператор) при $\varepsilon\to0$, формула (4) есть формула типа $(1+a/N)^N$, $N\to\infty$ и членами порядка $1/N^2$ в круглых скобках можно пренебречь. Мы не будем заниматься вопросом о существовании этого предела, отослав читателя к соответствующей литературе [34—40, 48—53]. Во всех последующих выкладках элементарные составляющие $\langle q\mid\hat{\mathrm{U}}_\varepsilon\mid q'\rangle$ в допредельных выражениях типа (4) будут вычисляться с указанной точностью.

Сформулированный рецепт получения континуального интеграла (5) нуждается в уточнении. Он годится только для лагранжианов вида

$$L=\dot{q}^2/2+A\dot{q}-V\,(q),\;\;A=\mathrm{const}. \tag{6}$$

В этом случае элементарные сомножители в допредельной формуле (4) можно записать следующим образом ($\varepsilon \to 0$):

$$\langle q_{j+1} | \hat{\mathrm{U}}_\varepsilon | q_j \rangle \equiv \mathrm{U}_{q_{j+1} q_j}(\varepsilon) = \\ = (2\pi \mathrm{i} \hbar)^{-n/2} D^{1/2} \exp \left\{ \frac{\mathrm{i}}{\hbar} S(q_{j+1}, q_j) \right\}, \tag{7}$$

где

$$S(q_{j+1}, q_j) \equiv \Delta S \approx \varepsilon L \approx \Delta^2/2\varepsilon + A\Delta - \varepsilon V; \\ D = \det | -\partial^2 S / \partial q^k_{j+1} \partial q^l_j | = \varepsilon^{-n}, \tag{8}$$

причем $\Delta = q_{j+1} - q_j$. Формулы (5), (7), (8) неприменимы для лагранжианов вида

$$L = g_{ij}(q) \dot{q}^i \dot{q}^j / 2 + A_i(q) \dot{q}^i - V(q) \tag{9}$$

(здесь и в дальнейшем предполагается, что функции g_{ij} и A_i не зависят от времени). Что служит критерием справедливости или несправедливости формул типа (5)? Функция (5) есть пропагатор частицы при $t > t'$, т. е. она описывает распространение частицы и должна обладать следующими свойствами:

1) подчиняться уравнению Шредингера

$$\mathrm{i}\hbar \partial_t \langle q | \hat{\mathrm{U}}_{t-t'} | q' \rangle = \hat{H} \langle q | \hat{\mathrm{U}}_{t-t'} | q' \rangle, \; t - t' > 0, \tag{10}$$

где $\hat{H}$ — оператор Гамильтона, действующий на первый аргумент ядра;

2) при $t \to t'$ стремиться к ядру единичного оператора

$$\langle q | \hat{\mathrm{U}}_{t-t'} | q' \rangle \xrightarrow[t \to t']{} \langle q | q' \rangle; \tag{11}$$

3) обеспечивать выполнение граничных (или эквивалентных им) условий.

Как станет ясно, функция (5) не подчиняется надлежащему уравнению Шредингера при использовании формул (7)—(9). Условие 3 будет обсуждаться отдельно (см. ниже).

Для того чтобы найти правильное выражение для $\langle q | \hat{\mathrm{U}}_\varepsilon | q' \rangle$, обратим внимание на следующее. Не установлено, с какой точностью следует вычислять действие в (7). Согласно Дираку [3] $S(q_{j+1}, q_j)$ — классическое действие, которое вычислено на истинной траектории, соединяющей точки q_j, q_{j+1}. Фейнман [1, 2] обнаружил, что для лагранжианов типа (6) классические траектории в (5) можно аппроксимировать ломаными линиями, которые состоят из отрезков прямых, соединяющих точки q_j и q_{j+1}. Между тем этот рецепт может оказаться неверным для более сложных лагранжианов типа (9), что и имеет место в действительности [1]. Далее, запись ядра $\langle q | \hat{\mathrm{U}}_\varepsilon | q' \rangle$ в виде (7) по форме совпадает с квазиклассическим разложением волновой функции [7, 8] и пригодна для обобщений; напрашивается мысль, что именно так должна выглядеть соответствующая функция в более сложных случаях. В приложении 2 указанный вид ядра обосновывается из других соображений.

Итак, постулируем, что в допредельную формулу (4) в качестве лементарной составляющей интеграла (с ней в основном мы и будем эработать) следует подставлять выражение

$$U_{qq'}(\varepsilon) \approx (2\pi i\hbar)^{-n/2}(gg')^{-1/4} D^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S(q, q')\right\};$$

$$D = \det\left|-\frac{\partial^2 S}{\partial q^j \partial q'^i}\right|, \tag{12}$$

где $g = g(q)$, $g' = g(q')$. Множитель $(gg')^{-1/4}$ всегда появляется при матричных элементах, если $g \neq 1$ (см. приложение 1, п. 1); при этом в (4) необходимо заменить $dq \to \overline{d}q$. Предполагается, что $S(q, q')$ — действие, которое вычислено на истинной классической траектории, соединяющей точки q', q. Предэкспоненциальный множитель должен обеспечивать выполнение условий 1, 2 и правильно воспроизводить соответствующую классическую картину (см. приложение 2).

Обратимся к вопросу о точности, с которой необходимо вычислять $S(q, q')$. Пусть $t' = 0$. Чтобы найти это действие, в функцию Лагранжа под интегралом

$$S(q,q') = \int_0^\varepsilon L(q, \dot{q})\, dt; \quad q = q(\varepsilon); \quad q' = q(0); \quad \varepsilon \to 0 \tag{13}$$

следует подставить решение, зависящее от *начальных и конечных значений координат*, т. е. $q = q(t, q, q')$, причем $q(0, q, q') = q'$, $q(\varepsilon, q, q') = q$. Действие (13) вычисляется в приложении 3, п. 2. Найдено следующее разложение $S(q, q')$ по степеням $\Delta = q - q'$ при $\varepsilon \to 0$:

$$S(q, q') = \frac{1}{2\varepsilon}\Big[g_{ij}\Delta^i\Delta^j + \frac{1}{2} g_{ij,k}\Delta^i\Delta^j\Delta^k +$$
$$+ \frac{1}{6}\Big(g_{ij,kl} - \frac{1}{2}[ij, m]\, g^{mn}[kl, n]\Big)\Delta^i\Delta^j\Delta^k\Delta^l + \ldots\Big]_{q'} +$$
$$+ \Big[A_i\Delta^i + \frac{1}{2} A_{j,i}\Delta^i\Delta^j + \ldots + \varepsilon V + \ldots\Big]_{q'} \equiv \widetilde{S}(q', \Delta); \tag{14}$$

q' у квадратных скобок означает, что все функции берутся в точке q'. Несложно получить соответствующее разложение $S(q, q') \equiv \widetilde{S}(q, \Delta)$ по степеням Δ в точке q. Для этого достаточно заменить все функции в (14) рядами по степеням Δ: $f(q') = f(q) - \Delta f'(q) + \ldots$ Новая формула будет отличаться от старой знаками при членах Δ^3/ε и Δ^2. Действие (14) получено для реальной траектории. Аппроксимация траекторий прямой $q(t) = q' + t\Delta/\varepsilon$ также порождает экстрачлены: $S(q,\ \Delta) = S_{\text{ст}}(q,\ \Delta)$ + нестандартные члены, где

$$S_{\text{ст}}(q,\ \Delta) = g_{ij}(q)\,\Delta^i\Delta^j/2\varepsilon + A_i(q)\,\Delta^i - \varepsilon V(q) \tag{15}$$

(стандартное действие), но ведет к неправильному уравнению Шредингера.

Итак, необходимо установить, какие экстрачлены надлежит учитывать и как при этом будет выглядеть уравнение Шредингера. Нужно также выяснить, как обращаться с экстрачленами — ведь в их присутствии не вычисляются допредельные интегралы, поскольку они не гауссовы.

Правила эквивалентности. Покажем, что в (14) подлежат учету только выписанные члены и что найденное действие эквивалентно некоторому эффективному действию стандартного вида, т. е. без экстрачленов, как в (15). По определению

$$\psi_\varepsilon(q) \approx \int \bar{d}q'\,\mathrm{U}_{qq'}(\varepsilon)\,\psi_0(q');\quad \bar{d}q = \sqrt{g}\,dq, \tag{16}$$

где ядро $\mathrm{U}_{qq'}$ задано формулами (12), (14); $\psi_0 = \psi(q,\ t')$; $\psi_\varepsilon = \psi(q,\ t' + \varepsilon)$. Убедимся, что с точностью до членов более высокого порядка малости по сравнению с ε функцию $\mathrm{U}_{qq'}$ в (16) можно заменить на функцию $\mathrm{U}^{\text{эф}}_{qq'}$, заданную формулой (7), в которой $D = \varepsilon^{-n}$, а S заменено на $S^{\text{эф}}$ стандартного вида:

$$S^{\text{эф}}(q,\ q') = \frac{1}{2}\,g_{ij}(q)\,\frac{\Delta^i\Delta^j}{\varepsilon} + A^{\text{эф}}_i(q)\,\Delta^i - \varepsilon V^{\text{эф}}(q). \tag{17}$$

Более точно, на физически реализуемых функциях $\psi(q)$ имеет место равенство

$$\int \bar{d}q'\,(\mathrm{U}_{qq'}(\varepsilon) - \mathrm{U}^{\text{эф}}_{qq'}(\varepsilon))\,\psi(q') = O(\varepsilon^2),\ \varepsilon \to 0. \tag{18}$$

Для доказательства достаточно найти асимптотику интеграла (16) при $\varepsilon \to 0$, которая согласно [54] вычисляется методом стационарной фазы. Главный вклад дает точка $q' = q$. Следующие члены асимптотики получаются разложением всех подынтегральных функций [кроме $\exp(\mathrm{i}\,g\Delta^2/2\varepsilon)$, но включая $\psi_0(q')$] в ряды по степеням Δ. После перехода к новой переменной интегрирования Δ все сводится к вычислению многомерных гауссовых интегралов от произведений Δ. Соответствующая формула выведена в приложении 1 [см. п. 2, формула (П. 16)]; ее можно переписать в виде

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n\Delta}{(2\pi\mathrm{i}\varepsilon\hbar)^{n/2}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,g_{ij}\,\frac{\Delta^i\Delta^j}{2\varepsilon}\right)\{\Delta^{j_1}\ldots\Delta^{j_{2k}} - (\mathrm{i}\varepsilon\hbar)^k\,g^{j_1\cdots j_{2k}}\} = 0. \tag{19}$$

Здесь $g^{j_1 \ldots j_{2k}}$ обозначает тензор в квадратной скобке в (П. 16). Иногда бывает полезна обобщенная формула

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n\Delta}{(2\pi i\varepsilon\hbar)^{n/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} g_{ij} \frac{\Delta^i\Delta^j}{2\varepsilon}\right) \times$$
$$\times \{\Delta^{j_1} \ldots \Delta^{j_{2k}} - (i\varepsilon\hbar)^l \Sigma g^{j_1 \cdots j_{2l}} \Delta^{j_{2l+1}} \ldots \Delta^{j_{2k}}\} = 0, \qquad (20)$$

в которой сумма берется по $(2k-1)!!/(2l-1)!!\,(2k-2l-1)!!$ перестановкам индексов между совокупностями $(j_1, \ldots, j_{2l})$ и $(j_{2l+1}, \ldots, j_{2k})$, отвечающим перестановкам в тождестве $g^{j_1 \ldots j_{2k}} = \Sigma g^{j_1 \ldots j_{2l}} g^{j_{2l+1} \ldots j_{2k}}$, l — произвольное число, $1 \leqslant l < k$. Эти равенства и лежат в основе правил эквивалентности — под знаком интеграла произведение $\Delta^{j_1} \ldots \Delta^{j_{2k}}$ эквивалентно тензору $(i\,\varepsilon\hbar)^k g^{j_1 \ldots j_{2k}}$; произведение нечетного числа Δ эквивалентно, очевидно, нулю. Отсюда же явствует, что в действии необходимо учитывать экстра-члены Δ^3/ε, Δ^4/ε, Δ^2, а в множителях при экспоненте — аналогичные члены, если таковые появятся; практически при экспоненте встречаются члены Δ, Δ^2. Ясно, что в данном классе задач при разложении экспоненты в ряд необходимо учитывать также члены $(\Delta^3/\varepsilon)^2$.

Найдем явный вид эффективного действия. Типичный интеграл, с которым приходится иметь дело, выглядит так:

$$\bar{\psi}_\varepsilon(q) \approx \int \frac{dq' g^{1/2}}{(2\pi i\varepsilon\hbar)^{n/2}} [1 + \alpha_i\Delta^i + \alpha_{ij}\Delta^i\Delta^j] \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(q, \Delta)\right] \psi_0(q'); \qquad (21)$$

$$S(q, \Delta) = g_{ij}\frac{\Delta^i\Delta^j}{2\varepsilon} + B_{ijk}\frac{\Delta^i\Delta^j\Delta^k}{\varepsilon} + C_{ijkl}\frac{\Delta^i\Delta^j\Delta^k\Delta^l}{\varepsilon} +$$
$$+ A_i\Delta^i + D_{ij}\Delta^i\Delta^j - \varepsilon V, \qquad (22)$$

где в нашем конкретном случае [лагранжиан (9), действие (14), разложенное в окрестности точки q]

$$B_{ijk} = -g_{ij,\,k}/4; \quad C_{ijkl} =$$
$$= \left(g_{ij,\,kl} - \frac{1}{2}[ij, m]\, g^{mn}\,[kl, n]\right)\Big/6; \quad D_{ij} = -A_{j,\,i}/2. \qquad (23)$$

Члены в квадратных скобках в (21) могут происходить от разложения предэкспоненциального множителя в (12) или функции $g'^{1/2}$ в ряд по степеням Δ; в последнем случае

$$\alpha_i = -g^{jk}g_{jk,\,i}/2; \quad \alpha_{ij} = [(g_{kl,\,i}g_{mn,\,j}/2 -$$
$$- g_{km,\,i}g_{ln,\,j})\, g^{kl}g^{mn} + g^{mn}g_{mn,\,ij}]/4. \qquad (24)$$

Предполагается, что $\psi(q')$ в (21) также разложена в ряд: $\psi(q) - \Delta^i\partial_i\psi(q) + \ldots$

Преобразуя интеграл (21), полезно иметь в виду следующее утверждение: четные в Δ члены (кроме главного Δ^2/ε) в экспоненте или при экспоненте можно заменять на эквивалентные согласно (19) на любом этапе вычислений. Действительно, как легко видеть, любая степень четных в Δ членов, равно как и их произведения или их комбинации с нечетными, дают вклад порядка ε^2. Следовательно, четные члены можно заменять на эквивалентные прямо в экспоненте, а члены при экспоненте переносить в ее показатель. Применяя это правило к четным членам в (21), находим, что к потенциалу добавятся члены

$$\hbar^2 C_{ijkl} g^{ijkl} - \mathrm{i}\,\hbar D_{ij} g^{ij} - \hbar^2 \alpha_{ij} g^{ij}. \tag{25}$$

В (21) останутся лишь нечетные члены. Появляющийся при разложении экспоненты в ряд их квадрат $(\mathrm{i}\hbar)^2\,(B\Delta^3/\varepsilon + A\Delta)^2/2$ также содержит лишь четные члены, так что к потенциалу добавится еще член:

$$[-\hbar^2 B_{ijk}\breve{B}^{ijk} + 2\mathrm{i}\hbar A_l \hat{B}^l + A_i A^i]/2, \tag{26}$$

где

$$\breve{B}^{ijk} = B_{lmn} g^{ijklmn};\quad \hat{B}^l = B_{ijk} g^{ijkl};\quad A^i = A_j g^{ij}. \tag{27}$$

Наконец, произведение $\alpha\Delta$ и нечетных членов от экспоненты даст вклад в потенциал

$$\alpha_i\,(\hbar^2 \hat{B}^i - \mathrm{i}\hbar A^i). \tag{28}$$

Остается лишь сумма нечетных членов, которая комбинируется с $-\Delta^i \partial_i \psi$:

$$-\left[\alpha_i \Delta^i + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(B_{ijk}\,\frac{\Delta^i\Delta^j\Delta^k}{\varepsilon} + A_i\Delta^i\right)\right]\Delta^l \partial_l \psi. \tag{29}$$

Члены, содержащие четвертую степень Δ, с помощью (20) можно превратить в квадратичные:

$$B_{ijk}\,\frac{\Delta^i\Delta^j\Delta^k\Delta^l}{\varepsilon} \to \mathrm{i}\hbar B_{\{ijk\}} g^{ij}\Delta^k\Delta^l;\quad B_{\{ijk\}} = B_{ijk} + B_{jki} + B_{kij}. \tag{30}$$

Используя в (29) эту замену, добиваемся линейности по Δ коэффициента при $\Delta^l \partial_l \psi$. Теперь преобразованную сумму в квадратных скобках (29) можно перенести в показатель экспоненты. Надо лишь принять во внимание, что при разложении получающейся экспоненты в ряд должен учитываться квадрат линейных членов, т. е. в потенциал необходимо добавить компенсирующее этот квадрат слагаемое

$$-\beta_i \beta_j g^{ij}/2;\quad \beta_j = A_j + \mathrm{i}\,\hbar\,(B_{\{jik\}} g^{ik} - \alpha_j). \tag{31}$$

Собирая все включаемые в потенциал члены, находим с учетом (29), (30), (27), что в эффективном действии (17)

$$\left.\begin{aligned} A_j^{\text{эф}} &= A_j + \mathrm{i}\hbar\,(\breve{B}_j - \alpha_j);\\ V^{\text{эф}} &= V + \hbar^2\,[C_{ijkl} g^{ijkl} - B_{ijk} B^{\{ijk\}} +\\ &\quad + (\alpha_i\alpha_j/2 - \alpha_{ij})\,g^{ij}] - \mathrm{i}\hbar D_{ij} g^{ij}. \end{aligned}\right\} \tag{32}$$

Так как нечетные степени Δ эквивалентны нулю, то опускавшиеся при выводе члены имеют порядок ε^2. Тем самым доказывается утверждение (18). Формулы (17), (32) составляют содержание правил эквивалентности для действия с экстрачленами общего вида [как в (21), (22)]. Не представляет труда убедиться, снова используя соотношения (19), что функция $\overline{\psi}_\varepsilon$ (q) (21) удовлетворяет уравнению

$$i\hbar\partial_\varepsilon\overline{\psi}_\varepsilon = [-\hbar^2 g^{ij}\partial_i\partial_j/2 + i\hbar g^{ij}A_i^{\text{эф}}\partial_j + g^{ij}A_i^{\text{эф}}A_j^{\text{эф}}/2 + V^{\text{эф}}]\,\overline{\psi}_\varepsilon. \qquad (33)$$

Если фигурирующие в (22) тензоры определяются формулами (23), (24), то, подставляя эти выражения в (33), находим, заменяя $\varepsilon \to t$:

$$i\hbar\partial_t\overline{\psi}_t = (\hat{H} + \hbar^2 R/6)\,\overline{\psi}_t, \qquad (34)$$

где $\hat{H}$ дается равенством (П.32); R — скалярная кривизна (П.11).

До сих пор мы игнорировали множитель $(gg')^{-1/4}D^{1/2}$ перед экспонентой (12). Как показано в приложении 3, п. 3:

$$D = [(gg')^{1/2}/\varepsilon^n]\,(1 + R_{ij}\Delta^i\Delta^j/6), \qquad (35)$$

т. е. учет указанного множителя приведет лишь к изменению тензора $\alpha_{ij} \to \alpha_{ij} + R_{ij}/12$, что согласно (32) означает добавку в потенциал слагаемого $(-\hbar^2 R/12)$. Тем самым второе слагаемое в правой части (34) заменится на $\hbar^2 R/12$. Этому же уравнению будет удовлетворять и ядро (12) с действием (14) при $t \to 0$:

$$i\hbar\partial_t \mathbf{U}_{qq'}(t) = (\hat{H} + \hbar^2 R/12)\,\mathbf{U}_{qq'}(t) \qquad (36)$$

($\hat{H}$ действует на первый аргумент ядра). Полученное уравнение идентично (П.33). Здесь бросаются в глаза два обстоятельства. Во-первых, мы получили правильное выражение для $\hat{H}$ с учетом порядка следования операторов. Именно так выглядит гамильтониан при переходе от декартовых к криволинейным координатам. Во-вторых, появился пропорциональный $\hbar^2$ член, отсутствующий в классическом гамильтониане и исчезающий при переходе к плоскому пространству. Эти особенности уравнения (36) обсуждаются в разд. 5.

Отметим, что присутствие в (21) зависящего от q' предэкспоненциального множителя [например, γ (q')] не меняет проделанного вывода — множитель можно временно включить в ψ_0 (q'). Легко перейти от γ (q') к γ (q); это приведет лишь к переопределению стандартного действия. Пусть $\gamma(q') = \gamma(q)\,(1 + \gamma_i\Delta^i + \gamma_{ij}\Delta^i\Delta^j)$, тогда, пользуясь формулой

$$1 + \gamma_i\Delta^i + \gamma_{ij}\Delta^i\Delta^j = \exp[\gamma_i\Delta^i + (\gamma_{ij} - \gamma_i\gamma_j/2)\,\Delta^i\Delta^j] + O(\Delta^3) \qquad (37)$$

и правилом (19), находим, что все изменение $S^{\text{эф}}$ сводится к заменам:

$$A_i^{\text{эф}} \to A_i^{\text{эф}} - i\hbar\gamma_i;\quad V^{\text{эф}} \to V^{\text{эф}} + \hbar^2(\gamma_i\gamma_j/2 - \gamma_{ij})\,g^{ij}. \qquad (38)$$

Тот факт, что γ_i и γ_{ij} [или α_i, α_{ij} в (32)] не свертываются с остальными тензорами, и означает возможность пользоваться (32) независимо от аргумента предэкспоненциального множителя.

Неоднозначность формальной записи (5). С экстрачленами приходится сталкиваться не только при квантовании классических систем с функциями Лагранжа типа (9). Они появляются также и при нелинейных преобразованиях координат, с ними нужно считаться при записи предела (4) в виде (5). Обсудим эти вопросы подробнее.

Начнем с вопроса о том, какой смысл вкладывается в формальное выражение (5). После перехода к эффективному действию (17) показатель экспоненты в (5) можно записать в виде интеграла по времени от эффективного лагранжиана:

$$S(q, q')=\int_{t'}^{t} L^{\text{эф}}(q, \dot{q})\, dt;\ L^{\text{эф}}=g_{ij}(q)\, \dot{q}^i\dot{q}^j/2+A_i^{\text{эф}}(q)\, \dot{q}^i-V^{\text{эф}}(q). \qquad (39)$$

Такая запись, однако, двусмысленна и не содержит однозначного правила вычисления интеграла. Дело в том, что континуальный интеграл (5) определен как предел (4). Но по (5), (39) нельзя однозначно восстановить допредельную формулу (4). Восстановленное инфинитезимальное действие будет иметь вид (17), причем функции g_{ij} и $A_i^{\text{эф}}$ могут браться в любой точке интервала $[q, q']$, т. е. их аргументом можно взять $q_\alpha = q - \alpha(q - q')$, $0 \leqslant \alpha \leqslant 1$. Когда $\alpha = 0$, это будет точка q, при $\alpha = 1$ — точка q'; взяв $\alpha = 1/2$, получим $(q + q')/2$. При обычной записи любой выбор α в пределе, когда $N \to \infty$, формально дает одно и то же выражение для интегралов (5), (39), но соответствующие пределы формулы (4) после подстановки в неё выражения (12) будут разными. Они будут зависеть от α, поскольку теперь от α зависит действие $S_\alpha(q, q') \equiv S(q_\alpha, \Delta)$. В самом деле, если все функции в (17) брать, например, в точках q_α или q_β, то ввиду равенства $q_\alpha = q_\beta - (\alpha - \beta)\,\Delta$ оба действия будут отличаться на члены

$$S_\alpha - S_\beta = -\frac{(\alpha-\beta)}{2}\, g_{ij,k}(q_\beta)\frac{\Delta^i\Delta^j\Delta^k}{\varepsilon} + \\ +\frac{(\alpha-\beta)^2}{4}\, g_{ij,kl}(q_\beta)\frac{\Delta^i\Delta^j\Delta^k\Delta^l}{\varepsilon} - (\alpha-\beta)\, A_{i,j}^{\text{эф}}\Delta^i\Delta^j, \qquad (40)$$

которыми нельзя пренебрегать. Все это напоминает ситуацию с упорядочением некоммутирующих операторов в гамильтониане. В разд. 2 увидим, что здесь действительно имеется связь.

Итак, привычная формальная запись континуального интеграла в виде (5) требует доопределения при работе с лагранжианами вида (9). Необходимо указать точку, в которой берутся функции при реконструкции допредельных выражений (4), например, с помощью значка α у интеграла

$$\int (\alpha)\, \mathscr{D}q(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right), \qquad (41)$$

или у действия (лагранжиана, функции при экспоненте). Очевидно, аргументы функций в различных промежутках $\Delta t_i = \varepsilon$ временнóго интервала можно выбирать произвольно, т. е. α в (41) может быть функцией времени. Это придает аппарату определенную гибкость, например появляется возможность дифференцировать (вариационно) по $\alpha(t)$.

Отметим в заключение, что континуальный интеграл с индексом α всегда можно записать в виде интеграла с любым другим индексом, но с соответственно измененным действием. Пользуясь связью между q_α и q_β, все функции в стандартном инфинитезимальном действии можно разложить в ряды по степеням $(\alpha - \beta)\,\Delta$ в окрестности q_β, удерживая экстрачлены (для лагранжиана (39) они даются формулой (40)]. От этих последних можно избавиться с помощью правил эквивалентности (можно доказать их справедливость при любом q_α), учитывая, что в силу (40):

$$B_{ijk} = -\frac{\alpha-\beta}{2}\, g_{ij,\,k}(q_\beta);\quad C_{ijkl} = \\ = \frac{(\alpha-\beta)^2}{4}\, g_{ij,\,kl}(q_\beta);\quad D_{ij} = -(\alpha-\beta)\, A^{\text{эф}}_{i,\,j}(q_\beta), \tag{42}$$

и переходя к новым эффективным потенциалам A_i, V согласно (32). Тем самым доказывается формула

$$\int \mathscr{D}q(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_\alpha\right) = \int \mathscr{D}q(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_\beta^{\text{эф}}\right), \tag{43}$$

где $S_\beta^{\text{эф}}$ для бесконечно малого интервала времени ε есть

$$S_\beta^{\text{эф}}(q_\beta, \Delta) = S_\beta + i\hbar\widetilde{B}_i(q_\beta)\,\Delta^i - \\ -\varepsilon\,\{\hbar^2\,[C_{ijkl}g^{ijkl} - B_{ijk}B^{\{ijk\}}] - i\hbar D_{ij}g^{ij}\}; \tag{44}$$

S_β получается из S_α заменой $q_\alpha \to q_\beta$, а тензоры B, C и т. п. определяются равенствами (27), (30), (42). В (43) не учитываются весовые множители при экспоненте — их тоже необходимо снабжать индексом (аргументы у функций в экспоненте и при экспоненте могут и не совпадать). Изменение индекса $\alpha \to \beta$ у предэкспоненциального множителя $\gamma_\alpha \equiv \gamma(q_\alpha)$ меняет согласно (37), (38) $S_\beta^{\text{эф}}$ в (43):

$$S_\beta^{\text{эф}} \to S_\beta^{\text{эф}} + i\hbar(\alpha-\beta)(\ln\gamma_\beta)_{,\,j}\,\Delta^j + \varepsilon\,\frac{\hbar^2}{2}(\alpha-\beta)^2 g^{ij}(\ln\gamma_\beta)_{,\,ij}.$$

Учет граничных условий. До сих пор рассматривали задачи в безграничном пространстве, в которых естественное требование убывания волновой функции на бесконечности автоматически вытекало из общей формулы (5) [или из (16)]. Нередко встречаются задачи, в которых граница находится на конечном расстоянии. Примером может служить упоминавшаяся задача о частице в ящике [4, 55]. Похожие проблемы возникают при преобразовании координат (переход к угловым переменным), при изучении динамики на группе [13—15], в киральных теориях. В этих случаях прямолинейное применение стандартной схемы [1] не ведет к цели. Причина неудачи очевидна — решение должно удовлетворять надлежащим граничным условиям, тогда как формализм, рассмотренный выше, гарантирует лишь убывание решения на бесконечности. Поскольку функция Грина должна обеспечивать выполнение граничных условий, приведенные выше формулы требуют надлежащей модификации.

Чтобы пояснить возникающие при этом трудности, рассмотрим простейший пример: частица единичной массы в одномерном ящике длиной L; пусть точки 0 и L — «стенки» ящика. Запись ядра оператора эволюции в виде

$$\langle q|\,\hat{\mathrm{U}}_t\,|q'\rangle = \lim_{N\to\infty}(2\pi i\varepsilon\hbar)^{-1/2}\int_0^L \ldots$$

$$\ldots \int_0^L \prod_{j=1}^{N-1} \frac{dq_j}{(2\pi i\varepsilon\hbar)^{1/2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}\frac{(q_{j+1}-q_j)^2}{2\varepsilon}\right\} \tag{45}$$

(где $\varepsilon = t/N$; $q_N = q$; $q_0 = q'$) неверна, поскольку уже при $t = \varepsilon$, $\varepsilon \to 0$, волновая функция

$$\psi_\varepsilon(q) \approx \int_0^L \frac{dq'}{(2\pi i\varepsilon\hbar)^{1/2}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{(q-q')^2}{2\varepsilon}\right]\psi_0(q') \equiv$$

$$\equiv \int_0^L \mathrm{U}_\varepsilon(q-q')\,\psi_0(q')\,dq' \tag{46}$$

хотя и удовлетворяет уравнению Шредингера при $0<q<L$, не удовлетворяет граничным условиям $\psi_\varepsilon(0) = \psi_\varepsilon(L) = 0$ [даже если $\psi_0(0) = \psi_0(L) = 0$]. Следовательно, (45) не решает задачу. К тому же интеграл (45) не вычисляется явно, несмотря на простоту подынтегрального выражения (гауссова экспонента).

Правильный путь был указан уже в [4]. Функция (45) удовлетворяет уравнению Шредингера, поэтому нужно взять несколько подобных решений и так их скомбинировать, чтобы выполнялись условия на границе. В результате, «используя метод изображений» (Паули), получаем, что под интегралом (46) вместо U_ε должна стоять функция

$$K'(q, q';\ \varepsilon) = \sum_{n=-\infty}^{\infty}[\mathrm{U}_\varepsilon(q-q'+2Ln) - \mathrm{U}_\varepsilon(q+q'+2Ln)]. \tag{47}$$

Несложно показать, что K' (при всех временах $t>0$) есть функция Грина задачи

$$K(q, q';\ t) = \sum_{n=1}^{\infty}\psi_n(q)\,\psi_n^*(q')\exp(-iE_n t/\hbar),\ t>0, \tag{48}$$

где $\psi_n(q) = (2/L)^{1/2}\sin(\pi nq/L)$; $E_n = \pi^2\hbar^2 n^2/2L^2$. Решение найдено, однако переход к континуальному интегралу связан с неприятной необходимостью интегрировать гауссовы экспоненты (ядра K') в конечных пределах. Формулу (46) с ядром (47) можно переписать в виде

$$\psi_\varepsilon(q) \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \int_{2Ln}^{L+2Ln} dq' \mathbf{U}_\varepsilon(q-q')\, \psi_0(q'-2Ln) - \right.$$

$$\left. - \int_{2Ln-L}^{2Ln} dq' \, \mathbf{U}_\varepsilon(q-q')\, \psi_0(-q'+2Ln) \right\}. \qquad (49)$$

Определим на вещественной оси функцию Ψ_0 ($\Psi_0 = \psi_0(q)$, если $q \in [0,\ L]$):

$$\Psi_0(-q) = -\Psi_0(q);\ \Psi_0(q+2Ln) = \Psi_0(q);\ \Psi_0(0) = \Psi_0(L) = 0. \qquad (49\text{a})$$

С ее помощью (49) перепишем так:

$$\psi_\varepsilon(q) \approx \int_{-\infty}^{\infty} dq' \mathbf{U}_\varepsilon(q-q')\, \Psi_0(q'). \qquad (50)$$

Легко проверить, что функция ψ_ε (50) удовлетворяет условиям (49а) и подчиняется уравнению Шредингера. Следовательно, теперь в континуальном интеграле можно интегрировать по всей вещественной оси, но получающееся ядро применять к функции Ψ_0, которая определена во всем пространстве и конструируется по функции ψ_0 (в данном случае как нечетная, периодическая с периодом $2L$). Задача решена. Ядро $\mathbf{U}_t\ (q-\ q')$ можно представить в виде континуального интеграла (45), в котором происходит интегрирование в бесконечных пределах. Применение его к функции Ψ_0 дает искомый ответ.

Итак, имеется две возможности: 1) можно использовать функцию Грина задачи (47) и интегрировать в конечных пределах или 2) можно использовать ядро $\mathbf{U}_\varepsilon\ (q-q')$ и интегрировать в бесконечных пределах. В последнем случае $\mathbf{U}_\varepsilon\ (q-q')$ следует применять к функции Ψ_0, построенной по начальному значению ψ_0 и определенной согласно (49а) во всем пространстве.

Установим общую структуру решения для ряда задач данного типа [56]. Пусть $\hat{H} = -\hbar^2\Delta/2 + V$ — гамильтониан, описывающий движение частицы в n-мерном евклидовом пространстве, и пусть потенциал $V(q)$ — аналитическая функция по каждой переменной q^i в окрестности всей вещественной оси; обозначим Γ границу области движения Ω. Будем считать, что граница достаточно гладкая и (для определенности) объем области Ω ограничен. Пусть $\mathbf{U}\ (q,\ q';\ t)$ дается формулой (5), в которой $t' = 0$, $L = \dot{q}^2/2 - V$ и по q интегрируется в бесконечных пределах. Тогда соответственно возможностям 1) и 2) нужно уметь строить или функцию Грина $K(q,\ q';\ t)$, или функцию Ψ_0 (q). Решения даются формулами.:

$$K(q, q'; t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{U}(q, q''; t)\, Q(q'', q')\, dq'', \quad t > 0; \tag{51}$$

$$\Psi_0(q) = \int_{q' \in \Omega} Q(q, q')\, \psi_0(q')\, dq', \tag{52}$$

где

$$Q(q, q') = \sum_{(k)} \psi_{(k)}(q)\, \psi^*_{(k)}(q'), \tag{53}$$

$\psi_{(k)}$ (q) — полный ортонормированный набор собственных функций оператора $\hat{H}$; $\hat{H}\psi_{(k)} = E_{(k)}\psi_{(k)}$, удовлетворяющих граничным условиям

$$\psi_{(k)}(q)\,|_{\Gamma} = 0; \tag{54}$$

(k) обозначен полный набор квантовых чисел, характеризующий векторы $\psi_{(k)}$. В силу аналитичности потенциала функции $\psi_{(k)}$ (q) можно аналитически продолжить за пределы области Ω, определяя тем самым Q (q, q') и Ψ_0 (q) при всех значениях q.

Отметим, что для q, $q' \in \Omega$ величина Q (q, q') есть просто δ-функция. Если же $q \overline{\in} \Omega$, то Q — некоторое естественное для данной задачи продолжение δ-функции за пределы Ω. Несложно показать справедливость высказанных утверждений. Пользуясь формулой ([1, 2]; см. также разд. 2):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{U}(q, q'; \varepsilon)\, \Psi_0(q')\, dq' \approx \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{H}\right) \Psi_0(q), \quad \varepsilon \to 0, \tag{55}$$

имеем для (51) с учетом (53)

$$\begin{aligned} K(q, q'; \varepsilon) &\approx \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{H}\right) Q(q, q') \approx \\ &\approx \sum_{(k)} \exp\left(-\frac{i\varepsilon E_{(k)}}{\hbar}\right) \psi_{(k)}(q)\, \psi^*_{(k)}(q'), \end{aligned} \tag{56}$$

откуда вытекает, что K $(q, q'; t)$ действительно есть функция Грина задачи: она очевидным образом удовлетворяет уравнению Шредингера, граничным условиям [в силу (54)] и стремится к δ-функции при $t \to 0$. Необходимость интегрировать в (51) именно в бесконечных пределах потребовалась при переходе от этой формулы к первому равенству (56). При конкретных применениях данной схемы нужно следить за сходимостью выписываемых интегралов, точнее, за возможностью придать им смысл. Впрочем. интегралам типа (50) с ядром (46) легко придать смысл даже при довольно быстро (например, как гауссова экспонента) растущих на бесконечности функциях Ψ_0 (функция Ψ_0 нормируется в физической области). В работе [56] найденные формулы были использованы для решения задачи о частице внутри круга. В данном случае все вычисления выполняются явно.

В квантовой механике встречаются задачи, в которых координата меняется в конечных пределах, а на волновую функцию накладывается лишь условие периодичности, т. е. не требуется ее обращения в нуль на концах. В этом случае от функции Грина K требуется лишь периодичность. Тогда если функция $\mathbf{U}(q, q'; t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера и обладает свойством $\mathbf{U}(q + nL, q'; t) = \mathbf{U}(q, q' - nL, t)$, причем $\mathbf{U}(q, q'; t) \to \delta(q - q')$, $t \to 0$, то K дается суммой

$$K(q, q'; t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathbf{U}(q + nL, q'; t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathbf{U}(q, q' - nL; t), \tag{57}$$

т.е.

$$\psi_t(q) = \int_0^L dq' K(q, q'; t)\, \psi_0(q') - \tag{58}$$

решение задачи $[\psi_t(q + nL) = \psi_t(q)]$. Так как $\psi_0(q)$ — периодическая функция, формула (58) с учетом (57) переписывается в виде

$$\psi_t(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dq' \mathbf{U}(q, q'; t)\, \psi_0(q'), \tag{59}$$

пригодном для перехода к континуальному интегралу.

Смысл появления сумм или разностей в (47), (57) прост. В (47) помимо прямой, соединяющей точки q и q', есть экстремальные траектории, касающиеся границы (отраженные лучи). В силу нулевых граничных условий они не должны давать вклада, поэтому-то и вычитаются компенсирующие их члены. Напротив, в (57) учитывается тот факт, что помимо прямой (кратчайшей), соединяющей точки q, q', имеются экстремальные траектории, отличающиеся на nL (например, n раз обегающие окружность), вкладом которых нельзя пренебречь. Формула (57) применяется ниже. Внешняя задача (частица вне выпуклой области) кратко обсуждается в [20].

Замена переменных. Теперь уже почти очевидно, что с экстрачленами придется иметь дело и при нелинейных заменах переменных в лагранжевом континуальном интеграле. Поскольку инфинитезимальное действие стандартного вида (15) зависит от разностей координат $\Delta = q - q'$, при переходе к новым переменным $q^i = q^i(Q)$ разности Δ^i заменятся отрезком ряда ($\Delta_Q = Q - Q'$):

$$\Delta^i = q^i(Q) - q^i(Q') = q^i_{,j}(Q)\, \Delta^j_Q - \frac{1}{2} q^i_{,jk}(Q)\, \Delta^j_Q \Delta^k_Q + \\ + \frac{1}{6} q^i_{,jkl}(Q)\, \Delta^l_Q \Delta^j_Q \Delta^k_Q - \ldots \tag{60}$$

Все выписанные члены (см. выше) необходимо учитывать [Δ_Q^3 даст вклад $\sim \Delta^4/\varepsilon$ при подстановке (60) в первый член (15)].

Введем следующие обозначения. Пусть d-матрица с элементами $d_j^i = q^i_{,j}(Q)$. Определим

$$c^i_{jk} = -(d^{-1})^i_{i'} q^{i'}_{,jk}(Q)/2; \quad c^i_{jkl} = \frac{1}{6}(d^{-1})^i_{i'} q^{i'}_{,jkl}(Q), \tag{61}$$

где d^{-1} — обратная матрица. В новых обозначениях

$$\Delta^{i'} = d^{i'}_i (\Delta^i_Q + c^i_{jk}\Delta^j_Q\Delta^k_Q + c^i_{jkl}\Delta^j_Q\Delta^k_Q\Delta^l_Q + \ldots). \tag{62}$$

Подставляя (62) в действие (15), находим, что оно по структуре идентично выражению (22), в котором $g_{ij} \to \tilde{g}_{ij}$, $A_i \to \tilde{A}_i$ и тензоры $\tilde{g}_{ij}$, $\tilde{A}_i$, B_{ijk} и т. п. выражаются через тензоры d^j_i, c^i_{jk}, ...:

$$\left.\begin{aligned} \tilde{g}_{ij}(Q) = g_{i'j'}(q(Q))\, d^{i'}_i d^{j'}_j; \quad B_{ijk} = \tilde{g}_{ii'}c^{i'}_{jk}; \\ C_{ijkl} = \tilde{g}_{ii'}c^{i'}_{jkl} + \tilde{g}_{i'j'}c^{i'}_{ij}c^{j'}_{kl}/2; \quad \tilde{A}_i = d^j_i A_j; \quad D_{ij} = \tilde{A}_k c^k_{ij}. \end{aligned}\right\} \tag{63}$$

Теперь можно воспользоваться общей формулой (32). После некоторых вычислений получаем следующий результат: $S^{\text{эф}}$ дается формулой (17), в которой g_{ij} надо заменить на $\tilde{g}_{ij}$, а в качестве $A_j^{\text{эф}}$ и $V^{\text{эф}}$ взять

$$\left.\begin{aligned} A_j^{\text{эф}} = A_j + \mathrm{i}\hbar(\tilde{g}_{jl}c^l_{kk} + 2c^k_{jk}); \\ V^{\text{эф}} = V + \hbar^2[3c^j_{jkk} + c^l_{jj}c^l_{kk}/2 - 2c^l_{ij}c^i_{lj}] + \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}A_k q^k_{,jj}. \end{aligned}\right\} \tag{64}$$

Суммирование по повторяющимся нижним (или верхним) индексам производится с помощью тензора $\tilde{g}^{ij}$ ($\tilde{g}_{ij}$), например $c^l_{kk} = c^l_{ik}\tilde{g}^{ik}$. В итоге приходим к искомому правилу преобразования выражения (16) при замене переменных:

$$\psi_\varepsilon \approx \int \frac{\sqrt{g'}\,dq'}{(2\pi\mathrm{i}\varepsilon\hbar)^{n/2}} \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_0(q, q')\right]\psi_0(q') =$$

$$= \int \frac{\sqrt{\tilde{g}'}\,dQ'}{(2\pi\mathrm{i}\varepsilon\hbar)^{n/2}} \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_0^{\text{эф}}(Q, Q')\right]\psi_0(q(Q')). \tag{65}$$

Здесь $\tilde{g}' = g'J^2(Q')$; $J = \det q^j_{,i}$ (якобиан преобразования): предполагается, что S_0 имеет стандартный вид (15) и берется в точке q, т. е. $\alpha = 0$, а $S_0^{\text{эф}}$ дается формулами (17) и (64) (в первой $g_{ij} \to \tilde{g}_{ij}$). Для лагранжианов частного вида $L = \dot{q}^2/2 - V$ соответствующее $S^{\text{эф}}$ было получено в [11].

Пример. Рассмотрим переход к полярным координатам в задаче о свободной частице в двумерном пространстве. Имеем ($\Delta_\varphi = \varphi -$

$-\varphi'$):

$$\frac{1}{2\pi i t\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}')^2}{2t}\right] =$$

$$= \frac{1}{2\pi i t\hbar} \left[\frac{i}{2t\hbar} (r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \Delta_\varphi)\right] = K(r, r', \Delta_\varphi;\ t); \quad (66)$$

как и полагается, функция Грина обладает свойством периодичности $K(r, r', \Delta_\varphi + 2n\pi;\ t) = K(r, r', \Delta_\varphi;\ t)$. Но при построении континуального интеграла используется лишь асимптотика K при $t \to 0$, которая определяется критическими точками показателя экспоненты, т. е. решениями уравнений $\sin \Delta_\varphi = 0$, $r - r' \cos \Delta_\varphi = 0$: $\Delta_\varphi = 0$, π (или $-\pi$, так, чтобы решение φ_0' лежало в интервале $[0, 2\pi]$) и соответственно $r_0' = \pm r$. Следовательно, ограничиваясь несколькими первыми членами разложения показателя экспоненты в окрестности критических точек, переходим к представлению для функции K ($t = \varepsilon \to 0$, $\Delta_r = r - r'$):

$$K_{ac} = \frac{1}{2\pi i \varepsilon\hbar} \left\{\exp\left[\frac{i}{2\varepsilon\hbar}\left(\Delta_r^2 + rr'\left(\Delta_\varphi^2 - \frac{\Delta_\varphi^4}{12}\right)\right)\right] + \begin{pmatrix} r' \to -r' \\ \varphi' \to \varphi' + \pi \end{pmatrix}\right\} \quad (67)$$

(выписаны лишь существенные экстрачлены). Однако K_{ac} не обладает свойством периодичности по φ, т. е. K_{ac} не есть функция Грина задачи. Согласно (57) правильное выражение для K дается суммой

$$K_\varepsilon = \sum_{n=-\infty}^{\infty} K_{ac}(r, r', \Delta_\varphi + 2\pi n;\ \varepsilon). \quad (68)$$

С учетом (68) формула для сдвинутой во времени функции запишется в следующем виде:

$$\psi_\varepsilon(r, \varphi) \approx \int_0^\infty \int_0^{2\pi} r'\, dr'\, d\varphi' K_\varepsilon(r, r', \Delta_\varphi)\, \psi_0(r', \varphi') =$$

$$= \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{r'\, dr'\, d\varphi'}{2\pi i\varepsilon\hbar} \exp\left\{\frac{i}{2\varepsilon\hbar}\left[\Delta_r^2 + rr'\left(\Delta_\varphi^2 - \frac{\Delta_\varphi^4}{12}\right)\right]\right\} \Psi_0(r', \varphi'), \quad (69)$$

где функция Ψ_0 определена во всем пространстве [Ψ_0 — функция, периодическая по φ', и $\Psi_0(-r, \varphi) = \Psi_0(r, \varphi + \pi)$, причем $\Psi_0 = \psi_0$ в физической области]. С помощью правила замены переменных (64), (65) эту формулу можно переписать следующим образом:

$$\psi_\varepsilon \approx \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{rr'}\, dr'\, d\varphi'}{2\pi i\varepsilon\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\Delta_r^2}{2\varepsilon} + \frac{r^2\Delta_\varphi^2}{2\varepsilon} + \varepsilon\frac{\hbar^2}{8r^2}\right]\right\} \Psi_0(r', \varphi'). \quad (70)$$

Отсюда непосредственно следует, что ψ_ε удовлетворяет уравнению Шредингера и доопределяется в нефизической области так же, как и Ψ_0, т. е. допустим переход к континуальному интегралу. Правильность этой формулы подтверждается выкладками приложения 4, п. 1, где она получена из других соображений [без использования (57)]. Из (70) вытекает, что в получающемся континуальном интеграле по r и φ нужно интегрировать в бесконечных пределах.

2. НЕСТАНДАРТНЫЕ ЧЛЕНЫ И ПРАВИЛА ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ. ГАМИЛЬТОНОВ ФОРМАЛИЗМ

Гамильтонов континуальный интеграл и нестандартные члены. Гамильтонов континуальный интеграл также получается из (4) подстановкой следующего интегрального представления для $\mathrm{U}_{qq'}(\varepsilon)$:

$$\langle q|\,\hat{\mathrm{U}}(\varepsilon)\,|q'\rangle = \langle q|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\varepsilon\right)|q'\rangle \approx$$

$$\approx \langle q|\,1-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}H(\hat{q},\,\hat{p})\,|q'\rangle = \langle q|\,1-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}H(q,\,p)\,|p\rangle\langle p|q'\rangle \approx$$

$$\approx \int dp\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(q,\,p)\,\varepsilon\right]\langle q|p\rangle\langle p|q'\rangle. \qquad (71)$$

Здесь было использовано равенство

$$\langle q|\,H(\hat{q},\,\hat{p})\,|p\rangle = H(q,\,p)\,\langle q|p\rangle; \qquad (72)$$

кроме того, на втором и последнем этапах вывода пренебрегали членами порядка ε^2 (предполагается, что они не дадут вклада при переходе в (4) к пределу $N\to\infty$). Если определитель метрического тензора g равен единице, то, учитывая, что $< q \mid p > = (2\pi\hbar)^{-n/2}$ $\exp(\mathrm{i}\,pq/\hbar)$, имеем

$$\langle q|\,\hat{\mathrm{U}}(\varepsilon)\,|q'\rangle \approx \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^n}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[p(q-q')-\varepsilon H(q,\,p)]\right\}. \qquad (73)$$

Аппроксимационная формула для гамильтонова континуального интеграла будет выглядеть так:

$$\langle q|\,\hat{\mathrm{U}}_{t-t'}\,|q'\rangle \approx \int \prod_{k=1}^{N-1}\frac{dp_k\,dq_k}{(2\pi\hbar)^n}\,\frac{dp_0}{(2\pi\hbar)^n}\times$$

$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{k=1}^{N}[p_{k-1}(q_k-q_{k-1})-\varepsilon H(q_k,p_{k-1})]\right\}, \qquad (74)$$

где $q_N = q$; $q_0 = q'$; после перехода к пределу $N\to\infty$ получим стандартное представление для $\mathrm{U}_{qq'}$ в виде континуального интеграла

$$\langle q|\,\hat{\mathrm{U}}_{t-t'}\,|q'\rangle = \int \prod_t \frac{dq(t)\,dp(t)}{(2\pi\hbar)^n}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t'}^{t}[p\dot{q}-H(q,\,p)]\,dt\right\}. \qquad (75)$$

По поводу этого хорошо известного вывода сделаем несколько замечаний.

Во-первых, в (71) мы подставляли разложение единицы $|\, p><p\,|$ у правой обкладки. Если бы мы вставили это разложение у левой обкладки, то вместо (72) получили

$$\langle p|\, H(\hat{q}, \hat{p})\, |q'\rangle = H(q', p)\langle p|q'\rangle. \tag{76}$$

При использовании подобных формул обычно подразумевается, что гамильтониан имеет простейший вид $H = p^2/2 + V(q)$. В этом случае функция $H(q, p)$ в (75) тождественна классической функции Гамильтона и несложно убедиться в равноправности обоих путей, поскольку разность $\varepsilon[H(q, p) - H(q', p)] \approx \varepsilon V_{,i}\Delta^i$ дает вклад более высокого порядка малости по сравнению с ε. Ясно, что для более сложных гамильтонианов, содержащих произведения некоммутирующих операторов (например, сумму $\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}$) формулы (72), (76) будут неприменимы, так как в них классические функции $H(q, p)$, $H(q', p)$ получаются заменой операторов $\hat{q}$, $\hat{p}$ в $H(\hat{q}, \hat{p})$ на классические переменные q, p или q', p, тогда как матричный элемент $<q\,|\,\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}\,|\,q'>$ равен $<q\,|\,p>p<p\,|\,q'>(q + q')$. Правомерность замены $q' \to q$ здесь неочевидна. Этот вопрос будет разбираться ниже. Наличие в $\hat{H}$ еще более сложных выражений с некоммутирующими операторами может сильно повлиять на привычный вид континуального интеграла (см. ниже).

Во-вторых, формула (75) непригодна в криволинейных координатах. Действительно, согласно (П.3) амплитуда $<q\,|\,p>$ приобретает множитель $g^{-1/4}$, т. е. ядро (73) умножится на $(gg')^{-1/4}$. Так как элемент объема в (4) также меняется: $dq \to \sqrt{g}dq$, заключаем, что в криволинейных координатах гамильтонов континуальный интеграл имеет вид [11]:

$$\langle q|\, \hat{\mathrm{U}}_{t-t'}\, |q'\rangle = (gg')^{-1/4} \int \prod_t \frac{dq(t)\, dp(t)}{(2\pi\hbar)^n} \times$$
$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t} [p\dot{q} - H(q, p)]\, dt\right\}, \tag{77}$$

где g и g' берутся при значениях крайних аргументов, т. е. при q и q'.

Наконец, при выводе формулы (77) мы не задумывались о спектрах операторов $\hat{q}$, $\hat{p}$ в криволинейных координатах, об их самосопряженности и т. п. Между тем эти вопросы существенны для правильного понимания формальных выражений (75), (77); они будут обсуждаться ниже.

Обсудим подробнее вопрос о членах с некоммутирующими операторами в гамильтониане. В классе систем, задаваемых лагранжианами типа (9), оператор Гамильтона имеет вид (П.32) и с учетом (П.2) его можно представить в форме

$$\hat{H}^{c} = \frac{1}{2} g^{ij}(\hat{q})\, \hat{\mathbf{P}}_i \hat{\mathbf{P}}_j + f^j(\hat{q})\, \hat{\mathbf{P}}_j + \mathscr{V}(\hat{q});$$

$$\mathscr{V} = V + h,\ \hat{\mathbf{P}}_j = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} g^{-1/4} \partial_j g^{1/4}, \tag{78}$$

где

$$f^j = \frac{\hbar}{2\mathrm{i}} g^{jk}_{\ ,k} - A^j;\ h = -\frac{\hbar^2}{2} g^{1/4} \Box g^{-1/4} + \frac{\mathrm{i}\hbar}{2} A^j_{,j} + \frac{1}{2} A_j A^j, \tag{79}$$

причем $A^j = g^{ij} A_i$, а $\Box$ определяется формулой (П.5). В (78) операторы $\hat{\mathbf{P}}$ стоят справа от $\hat{q}$ — такой порядок следования будем называть *стандартным* (отсюда индекс с у $\hat{H}$). Обратный порядок ($\hat{\mathbf{P}}$ слева от $\hat{q}$) будем называть *антистандартным* и для его обозначения употреблять индекс а. Подстановка $\hat{H}^c$ в (72) дает в качестве функции $H(q,\ p)$:

$$H^c(q, p) = q^{ij}(q)\, p_i p_j/2 + f^j(q)\, p_j + \mathscr{V}(q). \tag{80}$$

Возьмем другой гамильтониан $\hat{H}'$, который отличается от $\hat{H}^c$ порядком следования операторов, т. е.

$$\hat{H}'^{a} = \hat{\mathbf{P}}_i \hat{\mathbf{P}}_j g^{ij}(\hat{q})/2 + \hat{\mathbf{P}}_j f^j(\hat{q}) + \mathscr{V}(\hat{q}). \tag{81}$$

Очевидно, теперь выгоднее воспользоваться формулой (76) и тогда получим

$$H'^{a}(q', p) = q^{ij}(q')\, p_i p_j/2 + f^j(q')\, p_j + \mathscr{V}(q'). \tag{82}$$

Функции H^c и H'^a отличаются на члены

$$H^c - H'^a = \frac{1}{2} p_i p_j \left(g^{ij}_{,k}(q)\, \Delta^k - \frac{1}{2} g^{ij}_{,kl}(q)\, \Delta^k \Delta^l + \ldots \right) + $$
$$+ p_j (f^j_{,k}(q)\, \Delta^k + \ldots) + \mathscr{V}_{,k} \Delta^k + \ldots \tag{83}$$

Нужно ли их учитывать в формуле (74)? Если бы разностью (83) можно было пренебречь, то это означало бы, что для гамильтоновых континуальных интегралов безразличен порядок некоммутирующих операторов в $\hat{H}$ и что существенно разные гамильтонианы $\hat{H}^c$ и $\hat{H}'^a$ ведут к одному и тому же интегралу по траекториям (75). Разумеется, это не так и разность (83) должна давать в интеграл подлежащий учету вклад.

Таким образом, встает вопрос о том, какие экстрачлены необходимо удерживать. Чтобы ответить на него, выпишем наиболее общее выражение для инфинитезимального действия в (73) с экстрачленами

$$S(q,\, q',\, p) \approx p_i c^i(q,\,\Delta) - -\varepsilon\left[\frac{1}{2}\,p_i p_j \bar{g}^{ij}(q,\,\Delta) + p_j \bar{f}^j(q,\,\Delta) + \bar{\mathscr{V}}(q,\,\Delta)\right], \tag{84}$$

где

$$\left.\begin{aligned} &\bar{g}^{ij}(q,\,\Delta) = g^{ij}(q) + a^{ij}_k(q)\,\Delta^k + a^{ij}_{kl}(q)\,\Delta^k\Delta^l + \ldots; \\ &\bar{f}^j(q,\,\Delta) = f^j(q) + b^j_k(q)\,\Delta^k + \ldots; \\ &c^i(q,\,\Delta) = \Delta^i + c^i_{jk}(q)\,\Delta^j\Delta^k + c^i_{jkl}(q)\,\Delta^j\Delta^k\Delta^l + \ldots; \\ &\bar{\mathscr{V}}(q,\,\Delta) = \mathscr{V}(q) + \ldots \end{aligned}\right\} \tag{85}$$

Подставляя (84) вместо действия в квадратных скобках (73) и интегрируя по p, получаем

$$\mathrm{U}_{qq'}(\varepsilon) \approx (gg')^{-1/4}\,\frac{(\det \bar{g}^{ij})^{-1/2}}{(2\pi i\varepsilon\hbar)^{n/2}} \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\bar{g}_{ij}(c^i - \varepsilon\bar{f}^i)(c^j - \varepsilon\bar{f}^j)}{2\varepsilon} - \varepsilon\bar{\mathscr{V}}\right]\right\}; \tag{86}$$

здесь $\bar{g}_{ij}(q,\,\Delta)$ — матрица, обратная $\bar{g}^{ij}$; множитель $(gg')^{-1/4}$ включен в соответствии с приложением 1. Следовательно, задача свелась к проблеме учета экстрачленов в лагранжевом формализме и можно воспользоваться результатами, полученными в разд. 1. Разлагая $(\det \bar{g}^{ij})^{-1/2}$ по степеням Δ, убеждаемся, что подстановка ядра (86) в интеграл

$$\psi_\varepsilon(q) \approx \int dq'\,\sqrt{g'}\,\mathrm{U}_{qq'}(\varepsilon)\,\psi_0(q') \tag{87}$$

ведет к выражению, аналогичному (21) с действием типа (22), где в качестве векторов α, A и тензоров B, C, ... взято

$$\left.\begin{aligned} &\alpha_i = -\frac{1}{2}\,g_{jk}a^{jk}_i; \quad \alpha_{ij} = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{4}\left(a^{kk}_i a^{ll}_j + 2g_{kl}g_{mn}a^{km}_i a^{nl}_j\right) - a^{kk}_{ij}\right]; \\ &A_j = -f_j; \\ &B_{ijk} = \frac{1}{2}\left(g_{il}c^l_{jk} + g_{jl}c^l_{ik} - g_{im}g_{jn}a^{mn}_k\right); \\ &D_{ij} = g_{il}a^{lk}_j f_k - g_{ik}b^k_j - f_k c^k_{ij}; \\ &C_{ijkl} = \frac{1}{2}\left[g_{im}g_{jn}\left(a^{mn'}_k a^{n'n}_l - a^{mn}_{kl}\right) - 2g_{jn}a^{mn}_i c^m_{kl} + \right. \\ &\left. + 2g_{jn}c^n_{ikl} + c^n_{ij}c^n_{kl}\right], \end{aligned}\right\} \tag{88}$$

а вместо V стоит

$$\tilde{V} = \mathscr{V} - f_i f^i/2. \tag{89}$$

Опускание, поднятие и свертывание индексов производится с помощью метрического тензора g_{ij} (например, $a_i^{kk} \equiv g_{kl}a_i^{kl}$). Члены более высокого порядка, не выписанные явно в (85), приводят к пренебрежимо малым слагаемым в действии (типа Δ^3, $\Delta^5/\varepsilon, \ldots$). Следовательно, в допредельной формуле (74) при замене переменных, при переупорядочении операторов в гамильтониане или при изменении точки разложения необходимо удерживать следующие экстрачлены:

$$p\Delta^2,\ p\Delta^3,\ \varepsilon p\Delta,\ \varepsilon p^2\Delta,\ \varepsilon p^2\Delta^2. \tag{90}$$

Как и в лагранжевом формализме, здесь возникает вопрос о технике обращения с подобными нестандартными членами. В свете результатов разд. 1 ответ на него очевиден. Покажем, что выражение (84) эквивалентно стандартному действию с гамильтонианом стандартного вида, т. е. что в (73) с действием (84) можно сделать замену:

$$S = p_i c^i(q, \Delta) - \varepsilon H(q, p, \Delta) \to p_i\Delta^i - \varepsilon H^{\text{эф}}(q, p) \equiv S^{\text{эф}}. \tag{91}$$

Как показано в разд. 1, действие (22) эквивалентно в смысле (18) стандартному эффективному действию (17), в котором коэффициент при Δ и эффективный потенциал даются формулами (32) [присутствие в (86), (87) зависящих от q' множителей не меняет правил эквивалентности]. Поскольку нас интересует эффективный гамильтониан, нужно обратиться к формуле (33), с учетом которой убеждаемся, что действие (84) с нестандартными членами эквивалентно эффективному действию $S^{\text{эф}}$ (91), в котором

$$H^{\text{эф}}(q, p) = g^{ij}p_ip_j/2 + f^j_{\text{эф}}p_j + \mathcal{V}^{\text{эф}}, \tag{92}$$

где

$$\left.\begin{aligned} &f^j_{\text{эф}} = i\hbar(\alpha^j - \widetilde{B}^j) - A^j \equiv -A^j_{\text{эф}};\\ &\mathcal{V}^{\text{эф}} = \widetilde{V} + \hbar^2[C_{ijkl}g^{ijkl} - B_{ijk}B^{\{ijk\}} + (\alpha_i\alpha_j/2 - \alpha_{ij})g^{ij}] -\\ &- i\hbar D_{jj} + g^{ij}A_i^{\text{эф}}A_j^{\text{эф}}/2. \end{aligned}\right\} \tag{93}$$

Учитывая далее, что билинейный в $A^{\text{эф}}$ член даст вклад в $\widetilde{V}$ и в пропорциональные $\hbar$ и $\hbar^2$ слагаемые, получим, используя конкретные выражения (88), (89) (одномерный случай рассматривался в [87, 32]):

$$\left.\begin{aligned} &f^j_{\text{эф}} = f^j + i\hbar(a_k^{jk} - c^j_{kk} - 2g^{jn}c^k_{kn});\\ &\mathcal{V}^{\text{эф}} = \mathcal{V} + i\hbar(b^k_k - 2f^j c^k_{kj}) + \hbar^2[3c^n_{nkk} - a^{kn}_{kn} + 2c^k_{lk}a^{ln}_n +\\ &+ c^l_{kn}a^{kn}_l - 2(c^l_{kk}c^n_{nl} + c^n_{nm}c^k_{km} + c^l_{mn}c^n_{lm})]. \end{aligned}\right\} \tag{94}$$

Если при экспоненте в (87) имеется зависящий от q' множитель $\gamma(q')$ [для $U_{qq'}$ (86) это $g'^{1/4}$)], то его можно включить в ψ_0; тогда уравнению Шредингера с гамильтонианом, получающимся из (92) заменой $p_j \to -i\hbar\partial_j$, будет удовлетворять функции $\gamma(q)\,\psi(q)$ [для

(86) функция $\widetilde{\psi} = g^{1/4}\psi$]. Формально от множителя $g^{1/4}$ легко избавиться, переходя в (92) от p_j k $\hat{\mathrm{P}}_j = -i\hbar g^{-1/4}\partial_j g^{1/4}$; отсюда заключаем: функция ψ удовлетворяет уравнению Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H}^{\text{эф}} = g^{ij}(\hat{q})\,\hat{\mathrm{P}}_i\hat{\mathrm{P}}_j/2 + f^j_{\text{эф}}(\hat{q})\,\hat{\mathrm{P}}_j + \mathscr{V}^{\text{эф}}. \tag{95}$$

В гамильтоновом континуальном интеграле экстрачлены могут появиться и перед экспонентой, например в виде множителя $1 + \alpha_i\Delta^i + \alpha_{ij}\Delta^i\Delta^j$, или, что эквивалентно [см. (37)], в экспоненте. После интегрирования по импульсам они учитываются в соответствии с правилом (38), т. е. к инфинитезимальному действию добавятся слагаемые $-i\hbar\alpha_i\Delta^i - \varepsilon\hbar^2(\alpha_i\alpha_j/2 - \alpha_{ij})g^{ij}$. Согласно формуле (33) это эквивалентно добавлению в функцию Гамильтона членов $i\hbar\alpha^i(p_i + f_i) + (i\hbar)^2\alpha_i\alpha_j g^{ij}/2 + \hbar^2(\alpha_i\alpha_j/2 - \alpha_{ij})g^{ij}$. Следовательно, для гамильтоновых интегралов имеет место правило

$$1 + \alpha_i\Delta^i + \alpha_{ij}\Delta^i\Delta^j \approx \exp\left\{\frac{-i\varepsilon}{\hbar}\left[i\hbar\alpha^j(f_j + p_j) - \hbar^2\alpha_{ij}g^{ij}\right]\right\}. \tag{96}$$

Исчезновение билинейных по α_i членов свидетельствует о том, что присутствие в действии других линейных по Δ членов не скажется на результате (96). Итак, к списку (90) надо добавить экстрачлены

$$\Delta, \Delta^2 \tag{97}$$

в показателе экспоненты или в предэкспоненциальном множителе. Отметим общности ради, что в предэкспоненциальных множителях, содержащих импульсы, необходимо удерживать члены

$$p^n\Delta^k,\ k = 1, 2, \ldots, n+2. \tag{98}$$

Формулы (90), (92) — (96) решают задачу о перечислении значимых экстрачленов и построении эффективного гамильтониана.

Проблема упорядочения и неоднозначность записи (75). Проделанные выкладки содержат ответ на вопрос о том, как проявляется некоммутативность канонических переменных в гамильтоновом континуальном интеграле *. Из формул (83), (85), (93) явствует, что некоммутативность операторов $\hat{q}$, $\hat{p}$ отражается в необходимости учета экстрачленов. Два гамильтониана $\hat{H}^{\text{с}}$ (78) и $H'^{\text{а}}$ (81), неразличимые с точки зрения классической физики, дают разные картины при кван-

* Здесь и в [30] (см. также [39, 52]) обсуждаются разные аспекты проблемы упорядочения в гамильтоновом континуальном интеграле. В [30] речь идет о сопоставлении классической функции оператору $\hat{U} = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$; в зависимости от выбора порядка следования q и p в U получаются разные классические функции (даже для одномерного гармонического осциллятора). В данном пункте речь идет об упорядочении операторов в гамильтониане и о связи между расположением операторов в $\hat{H}$ и видом континуального интеграла. Проблема учета порядка следования операторов в гамильтониане полевых теорий рассматривалась также в работе [88].

товом описании: различие этих гамильтонианов сказывается в появлении подлежащих учету нестандартных членов (83) (кроме последнего).

Разумеется, помимо стандартного или антистандартного порядка следования операторов можно рассмотреть и промежуточные случаи. Например, линейным по импульсам членом можно взять $\alpha p f(\hat{q}) + \beta f(\hat{q})\hat{p} \equiv \hat{F}_\alpha$, $\alpha + \beta = 1$, что приведет после вычисления в (71) матричного элемента $\langle q \mid \hat{F}_\alpha \mid q' \rangle$ к появлению в «гамильтониане» выражения

$$p[\alpha f(q') + \beta f(q)] = p[f(q_\alpha) + O(\Delta^2)]; \; q_\alpha = q - \alpha\Delta; \tag{99}$$

это соответствует выбору $q_\alpha \in [q, q']$ в качестве опорной точки, т. е. в качестве аргумента функций координат в (73) [или выбору $q_{\alpha k} \in \in [q_k, q_{k-1}]$ в допредельном интеграле (74)].

Из сказанного следует недостаточность записи континуального интеграла в виде (75). Для гамильтонианов общего вида (78) необходимо указывать точку интервала деления, в которой берутся функции подынтегрального выражения в допредельной формуле (74). Если функции берутся в точке q_α, то, как и в случае лагранжева формализма, достаточно снабдить интеграл [или гамильтониан в (75)] индексом α, $0 \leqslant \alpha \leqslant 1$. Это устраняет неоднозначность в обычно применяемой записи (75).

Отметим, что правила эквивалентности (94) найдены для случая $\alpha = 0$. Полезно установить аналогичные правила для произвольного $\alpha \in [0, 1]$. Оказывается, что эти правила верны при любом α, как и для лагранжевой формулировки.

Очевидно, найденные выше формулы позволяют найти связь между интегралами, отвечающими разным опорным точкам, т. е. позволяют перейти от интеграла, снабженного индексом α, к интегралу с индексом β. Формула перехода элементарно следует из (84), (85), в которых нужно положить $c(q, \Delta) = \Delta$, а в качестве $\bar{g}^{ij}$, $\bar{f}^j$ взять g^{ij}, f^j в точках q_α или q_β. Разлагая функции $g^{ij}(q_\alpha)$, $f^j(q_\alpha)$ по степеням $\alpha\Delta$, вычисляем тензоры a и b согласно определениям (85):

$$a_k^{ij} = -\alpha g^{ij}_{,k}(q); \; a_{kl}^{ij} = \frac{\alpha^2}{2} g^{ij}_{,kl}(q); \; b_k^j = -\alpha f^j_{,k}(q); \tag{100}$$

разложения тензоров $g^{ij}(q_\beta)$, $f^j(q_\beta)$ получаются отсюда заменой $\alpha \to \beta$. Тогда, пользуясь результатом (94), находим, что соответствующие $H^{\text{эф}}$ отличаются на члены:

$$\delta H = H_\alpha - H_\beta \approx -i\hbar(\alpha - \beta) g^{jk}_{,k}(q) p_j - \\ - i\hbar(\alpha - \beta) f^j_{,j}(q) - (\alpha^2 - \beta^2) g^{ij}_{,ij}(q)/2. \tag{101}$$

Поскольку мы собираемся переходить от q_α к q_β, здесь в правой части в качестве аргумента желательно иметь q_β. Разлагая функции от от q в окрестности точки q_β и пренебрегая несущественными членами, имеем

$$\delta H_\beta \approx -i\hbar(\alpha-\beta)\, g^{jk}_{,k}(q_\beta)\, p_j - i\hbar(\alpha-\beta)\, f^j_{,j}(q_\beta) - \frac{\hbar^2}{2}(\alpha-\beta)^2 g^{ij}_{,ij}(q_\beta). \tag{102}$$

При выводе (102) было использовано правило эквивалентности $\Delta^i p_j \leftrightarrow i\hbar\delta^i_j$, вытекающее из того факта, что тензор b^i_j в (85) проявляется только слагаемым $i\hbar b^j_j$ в $\mathcal{V}^{\text{эф}}$; еще проще воспользоваться тем, что член $\Delta^i p_j$ в функции H возникает из коммутатора $[\hat q^i, \hat p_j] = i\hbar\delta^i_j$ в операторе $\hat H$. Так или иначе, в итоге получаем следующее правило перехода от одной опорной точки к другой:

$$\int \prod_t \frac{dp\,dq}{(2\pi\hbar)^n} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}(p\dot q - H_\alpha)\,dt\right] =$$
$$= \int (\beta) \prod_t \frac{dp\,dq}{(2\pi\hbar)^n} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}(p\dot q - H - \delta H)\,dt\right], \tag{103}$$

где $\delta H = \delta H_\beta$ дается формулой (102). Данное соотношение аналогично соотношению (43); при его выводе можно было воспользоваться тем обстоятельством, что правила (94) верны при любом q_α.

Поучительно рассмотреть еще один аспект некоммутируемости операторов в гамильтониане. Пусть операторы $\hat q$ и $\hat p$ расположены в разбивку [31] (см. также [46]), как в гамильтониане (П.32), записанном в виде

$$\hat H = \frac{1}{2} g^{-1/4}(\hat q)\, \hat{\mathbf{P}}_i \tilde g^{ij}(\hat q)\, \hat{\mathbf{P}}_j g^{-1/4}(\hat q), \quad \tilde g^{ij} = \sqrt{g}\, g^{ij}; \tag{104}$$

для простоты положено $A_i = V = 0$. Обозначим $g^{-1/4} = \bar g$. Тогда фигурирующий в (71) матричный элемент $\hat H$ запишется, с учетом (П.3), так:

$$\langle q|\hat H|q'\rangle = \frac{1}{2}\bar g(q)\langle q|\hat{\mathbf{P}}_i|p''\rangle\langle p''|\tilde g^{ij}(\hat q)|q''\rangle\langle q''|\hat{\mathbf{P}}_j|p'\rangle\langle p'|q'\rangle\,\bar g(q') =$$
$$= \int \frac{dp''\,dq''\,dp'}{(2\pi\hbar)^{2n}(gg')^{1/4}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[p''(q-q'') + p'(q''-q')]\right\} \times$$
$$\times H(q, q'', q', p', p''), \tag{105}$$

где

$$H(q, q'', q', p', p'') = \bar g(q)\, p''_i \tilde g^{ij}(q'')\, p'_j \bar g(q')/2, \tag{106}$$

т. е. для самого ядра (71) имеем

$$\langle q|\hat{\mathrm{U}}(\varepsilon)|q'\rangle \approx (gg')^{-1/4}\int \frac{dp''\,dq''\,dp'}{(2\pi\hbar)^{2n}}\times$$
$$\times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[p''(q-q'')+p'(q''-q')-\varepsilon H]\right\}. \qquad (107)$$

Именно так выглядит ядро оператора эволюции, если $\hat{q}$ и $\hat{p}$ чередуются как в (104). Континуальный интеграл, по-прежнему, определен формулой (4), но теперь с использованием функций (107). Ясно, что он отличается от простого выражения, которое получится, если в (107) вместо H подставить соответствующую классическую функцию $g^{ij}p_ip_j/2$. Аналог интеграла (74) будет выглядеть так, как если бы мы разбили временнóй интервал на вдвое большее число промежутков, т. е. не на N интервалов, а на $2N$, хотя коэффициентом при H как и раньше стоит $\varepsilon = (t-t')/N$. Сама функция H в (107) содержит координаты и импульсы, относящиеся к соседним интервалам.

Выясним, что получится, если в (107) проинтегрировать сперва по p', а затем по q''. Имеем

$$\mathrm{U}_{qq'}(\varepsilon)\approx(gg')^{-1/4}\int\frac{dp''\,dq''}{(2\pi\hbar)^n}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p''(q-q'')\right]\times$$
$$\times\,\delta^{(n)}\left(q''-q'-\frac{\varepsilon}{2}\bar{g}p''\tilde{g}(q'')\bar{g}'\right)\approx(gg')^{-1/4}\int\frac{dp''}{(2\pi\hbar)^n\,|J|}\times$$
$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p''\left[q-q'-\frac{\varepsilon}{2}\bar{g}p''\tilde{g}(q''_0)\bar{g}'\right]\right\}, \qquad (108)$$

где $J=\det|\delta^i_j-(\varepsilon/2)\bar{g}p''_k\tilde{g}^{ki}_{j}(q''_0)\bar{g}'|$ и q''_0 обращает аргумент δ-функции под интегралом (108) в нуль. Очевидно, $q''_0=q'+O(\varepsilon)$, поэтому $J\approx 1-(\varepsilon/2)\bar{g}p''_i\tilde{g}^{ij}_{,j}(q')\bar{g}'$ и (108) можно переписать в виде

$$\mathrm{U}_{qq'}\approx(gg')^{-1/4}\int\frac{dp}{(2\pi\hbar)^n}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[p(q-q')-\right.\right.$$
$$\left.\left.-\varepsilon\left(\frac{1}{2}\bar{g}p_ip_j\tilde{g}^{ij}(q')\bar{g}'-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\bar{g}\bar{g}'}{2}p_i\tilde{g}^{ij}_{,j}(q')\right)\right]\right\}. \qquad (109)$$

Так как здесь выражение в круглых скобках есть матричный элемент оператора $\hat{H}$, записанного в виде

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\bar{g}\hat{\mathrm{P}}_i\hat{\mathrm{P}}_j\tilde{g}^{ij}\bar{g}-\frac{\hbar}{2\mathrm{i}}\bar{g}\hat{\mathrm{P}}_i\tilde{g}^{ij}_{,j}\bar{g}, \qquad (110)$$

формула (109) и соответствует такому частичному упорядочению операторов $\hat{q}$ и $\hat{p}$ в $\hat{H}$. Если бы мы проинтегрировали в (107) по p'', q'', то получили результат, соответствующий упорядочению:

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\bar{g}\tilde{g}^{ij}\hat{\mathrm{P}}_i\hat{\mathrm{P}}_j\bar{g}+\frac{\hbar}{2\mathrm{i}}\bar{g}\tilde{g}^{ij}_{,j}\hat{\mathrm{P}}_i\bar{g}. \qquad (111)$$

Эти выкладки характеризуют связь между порядком следования операторов в гамильтониане и видом континуального интеграла: интеграл сохраняет информацию о взаиморасположении операторов.

Особенности формулирования гамильтонова континуального интеграла в криволинейных координатах. При выводе формул (73) — (76) молчаливо предполагалось, что спектры операторов $\hat{q}$ и $\hat{p}$ простираются от $-\infty$ до $+\infty$ и что сами операторы — самосопряженные. Между тем уже на следующем простом примере видно, что это не так. Рассмотрим переход от декартовых координат к цилиндрическим в трехмерном пространстве. Спектры операторов x_i, p_i, $i = 1, 2, 3$, занимающие всю вещественную ось, меняются на следующие:

$$\left.\begin{array}{lll} \hat{z}=\hat{x}_3 & :[-\infty,\ \infty];\ \hat{p}_z=-i\hbar\partial_z & :[-\infty,\ \infty]; \\ \hat{r}=(\hat{x}_1^2+\hat{x}_2^2)^{1/2} & :[0,\ \infty];\ \hat{p}_r=-\dfrac{i\hbar}{\sqrt{r}}\partial_r\sqrt{r} & :[-\infty,\ \infty]; \\ \hat{\varphi}=\operatorname{arctg}(\hat{x}_2\hat{x}_1^{-1}) & :[0,\ 2\pi];\ \hat{p}_\varphi=-i\hbar\partial_\varphi & :0,\ \pm\hbar,\ \pm2\hbar,\ \ldots \end{array}\right\} \tag{112}$$

Таким образом, даже при этом весьма простом преобразовании встречается четыре вида спектров. Собственные функции операторов $\hat{p}_z$, $\hat{p}_r$, $\hat{p}_\varphi$ таковы:

$$\frac{c}{\sqrt{r}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_z z+p_r r+m\hbar\varphi)\right],\quad m=0,\ \pm1,\ \ldots, \tag{113}$$

т. е. в формулах типа (74) будут встречаться интегрирования в самых различных пределах и даже суммирование. Кроме того, $\hat{p}_r$ не есть самосопряженный оператор на полуоси $[0, \infty]$ [57] и его собственные функции не ортогональны. Все это влияет на вид (74) и делает, казалось бы, невозможной запись в виде (77). В то же время если в криволинейных координатах спектры $\hat{q}$ и $\hat{p}$ заполняют всю вещественную ось, то формула (77) правомерна. Столь резкое различие между системами криволинейных координат кажется несколько неестественным. В действительности, по-видимому, формула (77) верна независимо от вида координат, т. е. в ней по всем переменным можно интегрировать, причем в бесконечных пределах; правда, согласно разд. 1 результаты интегрирования нужно применять к надлежащим образом продолженным за пределы физических спектров функциям, доопределяя также и потенциал. Доказательство высказанного утверждения в настоящее время не представляется возможным — для этого нужно иметь общую теорию соответствия между каноническими и унитарными преобразованиями. Такой теории в данный момент не существует [58, 59], поэтому мы приведем лишь ряд соображений в пользу сказанного.

Спектры (112), очевидно, исчерпывают возможные типы спектров операторов $\hat{q}$, $\hat{p}$ в практически наиболее интересных координатных системах. Покажем, что суммирование по дискретному спектру $\hat{p}_\varphi$ ($m\hbar$, $m = 0, \pm 1, \ldots$) можно заменить интегрированием по p_φ в бесконечных пределах, переходя одновременно к бесконечным пределам и в интеграле по φ. Интересующие нас сумма по m и интеграл по φ в формуле (87) с учетом (73) выглядят так:

$$\psi_\varepsilon(\varphi) \approx \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp[im(\varphi-\varphi')]\, f_\varepsilon(m\hbar)\, \psi_0(\varphi'), \tag{114}$$

где $f_\varepsilon(m\hbar)$ обозначена экспонента с матричным элементом гамильтониана. Воспользуемся следующим приемом [14]. С помощью тождеств

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} F(m\hbar) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\hbar} F(p) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{p}{\hbar}-m\right);$$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{p}{\hbar}-m\right) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp(2\pi i p m/\hbar) \tag{115}$$

переписываем (114):

$$\psi_\varepsilon(\varphi) \approx \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_\varphi \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_\varphi (\varphi-\varphi'+2\pi m)\right] f_\varepsilon(p_\varphi)\, \psi_0(\varphi'). \tag{116}$$

Переходя, как и в разд. 1, к новой функции Ψ_0, которая определяется согласно условию $\Psi_0(\varphi+2\pi m) = \Psi_0(\varphi)$, $\Psi_0(\varphi) = \psi_0(\varphi)$, $\varphi \in [0, 2\pi]$ (или пользуясь периодичностью ψ_0), находим

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \exp(im\Delta_\varphi)\, f_\varepsilon(m\hbar)\, \psi_0(\varphi') =$$
$$= \int\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_\varphi\, d\varphi'}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_\varphi \Delta_\varphi\right) f_\varepsilon(p_\varphi)\, \Psi_0(\varphi'), \tag{117}$$

т. е. и по φ' и по p_φ теперь интегрируется в бесконечных пределах. Это прием достаточно общий.

Если по импульсным переменным интегрируется в бесконечных пределах, то для гамильтонианов типа (78) соответствующий гауссов интеграл берется, и мы приходим к лагранжеву континуальному интегралу. Теперь можно перейти к интегрированию по бесконечным интервалам, воспользовавшись найденными в разд. 1 результатами. Очевидно, тот же самый ответ получается, если с самого начала (до интегрирования по импульсам) считать все переменные меняющимися от $-\infty$ до $+\infty$. Таким образом, представляется вероятным, что в (77) по всем переменным можно интегрировать в бесконечных пределах.

Остановимся кратко на вопросе о несамосопряженности оператора p_r (112) [57, 60]. Его собственные функции $\langle r \mid p \rangle = c \exp(irp/\hbar)/\sqrt{r}$ не ортогональны, а интеграл

$$\langle p|p'\rangle = \langle p|r\rangle \langle r|p'\rangle =$$
$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^\infty r\, dr \frac{1}{r} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p'-p)\, r\right] = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{p'-p+i\varepsilon} \qquad (118)$$

не есть δ-функция (переменные z и φ игнорируем). Однако на физических функциях

$$\psi(p) = \langle p|r\rangle \langle r|\psi\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_0^\infty r\, dr \exp(-ipr/\hbar)\, \psi(r), \qquad (119)$$

аналитических при $\mathrm{Im}\, p < 0$ и убывающих при $\mathrm{Im}\, p \to -\infty$, выражение (118) есть ядро единичного оператора

$$\langle p|p'\rangle \langle p'|\psi\rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'\psi(p')}{p'-p+i\varepsilon} = \langle p|\psi\rangle. \qquad (120)$$

Имеется два способа перейти к гамильтонову континуальному интегралу в криволинейных координатах. Один мы уже рассмотрели. Он заключается в том, что в новых переменных записывают оператор Гамильтона, а затем строят континуальный интеграл, см. выше («операторный метод»). Другой способ связан с заменой переменных в допредельной формуле (74). Относительно этого второго пути заметим следующее. Как и в лагранжевом случае (см. разд. 1), следует различать замену переменных в интеграле и каноническое преобразование. Замена переменных есть операция, не затрагивающая конечных переменных [например, q и q' в (74)], по которым не интегрируется, и при переходе к пределу $N \to \infty$ необходимо лишь следить за тем, чтобы удержать все существенные экстрачлены. Хотя новые и старые переменные под интегралом и могут быть связаны каноническим преобразованием, такая замена не влечет поворота векторов в гильбертовом пространстве (унитарное преобразование). Новые переменные могут быть даже не каноническими. Другими словами, меняется лишь способ вычисления ядра $U_{qq'}$. Напротив, замена переменных, соответствующая операторному методу перехода к криволинейным координатам, должна во всяком случае сопровождаться преобразованием «внешних» (неинтегрируемых) координат в матричном элементе. Практически интересны и обычно имеются в виду именно такие преобразования. Они соответствуют некоторому унитарному преобразованию всех векторов состояния и рассматриваются ниже.

3. КАНОНИЧЕСКИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ И ГАМИЛЬТОНОВЫ КОНТИНУАЛЬНЫЕ ИНТЕГРАЛЫ

Канонические и унитарные преобразования. При работе с гамильтоновыми континуальными интегралами важно знать их поведение при канонических преобразованиях. Это достаточно трудный вопрос. Он связан с двумя проблемами: во-первых, с общей проблемой соответствия между каноническими и унитарными преобразованиями *; во-вторых, он касается специфики поведения гамильтоновых континуальных интегралов при канонических преобразованиях.

Важность первой проблемы очевидна. Поскольку аппарат континуальных интегралов есть чисто квантовый аппарат, ясно, что нужно иметь общую теорию поведения амплитуд вероятности при подобных преобразованиях. Хорошо известно утверждение Дирака [3] о том, что для систем, имеющих классический аналог, унитарные преобразования в квантовой механике аналогичны каноническим преобразованиям. Для бесконечно малых преобразований эта аналогия почти очевидна [3]. В целом данная проблема еще далека от своего решения [58, 59]. О характере встречающихся здесь трудностей свидетельствует хотя бы такой факт. Уже при простейшем точечном преобразовании координат $Q = q^2$ области изменения новых и старых переменных оказываются разными, тогда как унитарные преобразования, очевидно, не меняют спектров операторов (подробнее об этом см. [58]).

Что касается второй проблемы, то трудности здесь были связаны с необходимостью учета экстрачленов. Как уже отмечалось, при описании простейших систем в континуальных интегралах фигурирует лишь классическая функция Гамильтона; тем самым создается впечатление, что и при изучении вопроса о канонических преобразованиях можно обойтись лишь классическими формулами. На деле ситуация аналогична ситуации в лагранжевом формализме (см. разд. 1). Там в континуальных интегралах необходимо было удерживать экстрачлены, которые исчезают в классическом пределе. Так же и здесь. При не зависящих от времени канонических преобразованиях разность между старым и новым инфинитезимальными действиями дается формулой [61]

$$p\Delta q - P\Delta Q = \frac{\partial F_1(q, Q)}{\partial q}\Delta q + \frac{\partial F_1(q, Q)}{\partial Q}\Delta Q + O(\Delta^2), \qquad (121)$$

где $F_1(q, Q)$ — производящая функция. Если равенство (121) разделить на ε, то, устремляя временной интервал ε к нулю, получим в пределе известное соотношение $p\dot{q} - P\dot{Q} = dF_1/dt$, поскольку члены типа $(\Delta q)^2/\varepsilon \approx \dot{q}\Delta q$ стремятся к нулю вместе с ε. Этими членами нельзя пренебрегать при квантовом описании системы, т. е. в контину-

* Здесь и далее термины *каноническое преобразование* и *унитарное преобразование* относятся соответственно к преобразованиям в классической и квантовой теориях.

альных интегралах. Как и в формуле Ито (2), в (121) необходимо удерживать члены $O(\Delta^2)$ — это ключ к проблеме.

Еще одна трудность, которая обсуждается ниже, связана с построением оператора унитарного преобразования по заданной производящей функции. Эта задача, очевидно, не решается однозначно, поэтому в данном разделе речь будет идти о канонических преобразованиях, заданных генератором. Кроме того, для простоты ниже ограничимся системой с одной степенью свободы (это ограничение не принципиальное). Приведем сначала явные формулы для инфинитезимальных канонических и унитарных преобразований, которые потребуются в дальнейшем, а также соответствующие точные формулы для конечных преобразований. Классическая и квантовая теории рассматриваются параллельно.

Инфинитезимальные преобразования. Исходные переменные будем обозначать строчными буквами q^j, p_j, $j = 1, 2, \ldots, n$, а преобразованные — прописными Q^j, P_j. Кроме того, краткости ради индексы, как правило, будем опускать, т. е. писать q, p, Q, P.

Каноническое преобразование можно задать любой из четырех производящих функций [61] $F_1(q, Q)$, $F_2(q, P)$, $F_3(p, Q)$, $F_4(p, P)$. Для наших целей удобнее всего использовать функцию F_2; в этом случае переход от старых переменных к новым осуществляется с помощью формул

$$\partial F_2(q, P)/\partial q = p; \ \partial F_2(q,P)/\partial P = Q. \tag{122}$$

Инфинитезимальное каноническое преобразование задается функцией $F_2^\omega = qP + G(q, P)\,\omega$, где ω — некоторый параметр, $\omega \to 0$; функцию G будем именовать генератором преобразования. Согласно (122) имеем

$$p = P + \frac{\partial G(q, P)}{\partial q}\,\omega; \quad Q = q + \frac{\partial G(q, P)}{\partial P}\,\omega. \tag{123}$$

Поскольку $P = p + O(\omega)$, эти формулы, пренебрегая членами порядка ω^2, можно переписать так:

$$P = p - \frac{\partial G(q, p)}{\partial q}\,\omega; \quad Q = q + \frac{\partial G(q, p)}{\partial p}\,\omega. \tag{124}$$

Старое и новое действия за бесконечно малый интервал времени dt отличаются на полный дифференциал:

$$dt\,[p\dot{q} - H(q, p)] - dt\,[P\dot{Q} - \tilde{H}(Q, P)] = p\,dq - P\,dQ = dF_1(q, Q), \tag{125}$$

где $p\dot{q} \equiv p_j\dot{q}^j$; $pdq \equiv p_j dq^j$ и т. п.; $\tilde{H}(Q, P) \equiv H(q(Q,P), p(Q,P))$. Зная функцию F_2, можно найти F_1 (и наоборот):

$$F_1(q, Q) = F_2(q, P) - QP; \tag{126}$$

здесь $P = P(q, Q)$ — решение второго уравнения системы (122). Для инфинитезимальных преобразований

$$F_1^{\omega}(q, Q) = P(q - Q) + G(q, P)\,\omega. \tag{127}$$

Унитарное преобразование, соответствующее каноническому преобразованию (124), задается генератором $\hat{G}$, который определим формулой

$$\hat{G} = G(\hat{q}, \hat{p}), \tag{128}$$

т. е. $\hat{G}$ получается заменой $q, p \to \hat{q}, \hat{p}$ в функции $G(q, p)$, причем $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$. Предполагается, что: а) замена производится в декартовых координатах, б) так или иначе решена проблема выбора порядка следования операторов в $\hat{G}$, так что оператор $\hat{G}$ — самосопряженный. Конечное унитарное преобразование осуществляется оператором

$$\hat{\mathcal{U}}_\tau = \exp\left[-(i/\hbar)\,\hat{G}\tau\right] \tag{129}$$

(τ — параметр преобразования) согласно правилу

$$\hat{A}_\tau = \hat{\mathcal{U}}_\tau^+ \hat{A} \hat{\mathcal{U}}_\tau; \quad |\tau A'\rangle = \hat{\mathcal{U}}_\tau^+ |A'\rangle, \tag{130}$$

где $\hat{A}$ — произвольный оператор; $|\tau A'>$ — собственный вектор оператора $\hat{A}_\tau$ с собственным значением A'. Для инфинитезимальных преобразований ($\tau \equiv \omega \to 0$) имеем:

$$\left.\begin{aligned} \hat{q}_\omega &= \hat{q} + \frac{i}{\hbar}[\hat{G}, \hat{q}]\,\omega = \hat{q} + \frac{\partial \hat{G}(\hat{q}, \hat{p})}{\partial \hat{p}}\,\omega; \\ \hat{p}_\omega &= \hat{p} + \frac{i}{\hbar}[\hat{G}, \hat{p}]\,\omega = \hat{p} - \frac{\partial \hat{G}(\hat{q}, \hat{p})}{\partial \hat{q}}\,\omega. \end{aligned}\right\} \tag{131}$$

Ради аналогии с формулами (124) здесь введены символы производных по операторам, определение которых очевидно. Формулы (131) в явном виде задают бесконечно малое унитарное преобразование величин $\hat{q}$ и $\hat{p}$, соответствующее бесконечно малому каноническому преобразованию (124).

Конечные преобразования. В классической и квантовой теориях они задаются соответственно производящей функцией $F_1(q, Q)$ [или $F_2(q, P)$] и оператором $\hat{\mathcal{U}}_\tau$. Покажем, как по функции $G(q, P)$ построить $F_1(q, Q)$, $F_2(q, P)$, и найдем представление для ядра оператора $\hat{\mathcal{U}}_\tau$ в виде континуального интеграла.

Каноническое преобразование. Если τ — параметр конечного преобразования, то формулы (124) можно переписать в виде уравнений:

$$\left.\begin{aligned} \mathring{p}(\tau) &= -\partial G(q, p)/\partial q(\tau); \\ \mathring{q}(\tau) &= \partial G(q, p)/\partial p(\tau), \end{aligned}\right\} \tag{132}$$

в которых производные $df(\tau)/d\tau$ по параметру τ обозначены $\overset{\circ}{f}(\tau)$. Пусть $q(0)=q$, $p(0)=p$, $q(\bar{\tau})=Q$, $p(\bar{\tau})=P$ ($\bar{\tau}$ — конечное значение параметра τ), тогда решения уравнений (132) в явном виде дают выражения для новых координат через старые: $Q=Q(q, p, \bar{\tau})$; $P=P(q, p, \bar{\tau})$.

Найдем функцию F_2. Для этого сперва найдем F_1. Согласно (127) имеем

$$F_1^{\omega}(q, Q)=[-P\overset{\circ}{q}+G(q, P)]\,\omega\equiv -\mathbf{K}(\overset{\circ}{q}, q)\,\omega, \tag{133}$$

где $\overset{\circ}{q}\omega=Q-q$; $q=q(\tau)$; $Q=q(\tau+\omega)$; $P=p(\tau+\omega)$ и вместо P подставлено решение второго уравнения (системы уравнений) (132). Нетрудно убедиться, что решения уравнений

$$\frac{d}{d\tau}\frac{\partial\mathbf{K}(\overset{\circ}{q}, q)}{\partial\overset{\circ}{q}}-\frac{\partial\mathbf{K}(\overset{\circ}{q}, q)}{\partial q}=0 \tag{134}$$

вместе с условием $\partial\mathbf{K}/\partial\overset{\circ}{q}=p$ дают то же самое каноническое преобразование, что и решения уравнений (132) (сравним с доказательством эквивалентности лагранжевых и гамильтоновых уравнений в аналитической механике — аналогия здесь полная). Докажем, что производящая функция конечного преобразования $F_1(q, Q)$ есть экстремум (минимум) функционала $-\int\mathbf{K}(\overset{\circ}{q}, q)\,d\tau$ [граничные значения $q(\tau)$ фиксированы: $q(0)=q$, $q(\bar{\tau})=Q$]:

$$-F_1(q, Q)\equiv R(q, Q)=\operatorname{extr}\int_0^{\bar{\tau}}\mathbf{K}(\overset{\circ}{q}, q)\,d\tau. \tag{135}$$

Очевидно, функционал (135) принимает экстремальные значения на решениях уравнений (134). Ясно также, что вытекающие из определения (125) уравнения

$$\partial F_1(q, Q)/\partial q=p,\quad \partial F_1(q, Q)/\partial Q=-P \tag{136}$$

и уравнения (132) или (134) задают одно и то же каноническое преобразование. Действительно, согласно (135), т. е. если выполняются уравнения (134), $\delta F_1=-\partial\mathbf{K}/\partial\overset{\circ}{q}\,\delta q\,\big|_0^{\bar{\tau}}$, с учетом равенств $\partial\mathbf{K}/\partial\overset{\circ}{q}=p(\tau)$, $p(0)=p$, $p(\bar{\tau})=P$ получаем: $\delta F_1=-P\delta q(\bar{\tau})+p\delta q(0)$, т. е. уравнения (136). Это доказывает эквивалентность уравнений (134) и (136). Следовательно, (135) действительно определяет функцию $F_1(q, Q)$, фигурирующую в (125). Функция $F_2(q, P)$ связана с $F_1(q, Q)$ посредством (126), где вместо Q подставлено решение уравнения $\partial F_1/\partial Q=-P$. Формулы (133) и (135) показывают, как по заданному генератору построить производящую функцию конечного преобразования.

Унитарное преобразование. Матричный элемент $\langle Q \mid \hat{\mathcal{U}}_{\bar\tau} \mid q \rangle$ с помощью стандартной процедуры (см. разд. 2) представляется гамильтоновым континуальным интегралом

$$\langle Q | \hat{\mathcal{U}}_{\bar\tau} | q \rangle = \int\limits_{q(0)=q}^{q(\bar\tau)=Q} \prod_{\tau} \frac{dp\,dq}{(2\pi\hbar)^n} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\limits_0^{\bar\tau} [p\overset{\circ}{q} - G(q, p)]\,d\tau\right\}. \qquad (137)$$

Подчеркнем, что выражение (137) имеет смысл лишь в том случае, если указан порядок следования операторов в генераторе $\hat{G}$, матричный элемент которого $G(q, p)$ здесь присутствует; пусть операторы $\hat{p}$ стоят справа от $\hat{q}$, тогда $G(q, p)$ определяется равенством $G(q, p) < q \mid p \rangle = \langle q \mid \hat{G} \mid p \rangle$. Предположим, что функция G содержит не более чем вторые степени импульсов. Тогда, интегрируя в (137) по импульсам, получаем

$$\langle Q | \hat{\mathcal{U}}_{\bar\tau} | q \rangle = \int \mathscr{D}q(\tau) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\limits_0^{\bar\tau} \mathbf{K}(\overset{\circ}{q}, q)\,d\tau\right\}. \qquad (138)$$

Это и есть точная формула для ядра унитарного оператора $\hat{\mathcal{U}}_{\bar\tau}$. Переходя к пределу $\hbar \to 0$, для билинейных по $\overset{\circ}{q}$ функций $\mathbf{K}(\overset{\circ}{q}, q)$ получаем, с учетом (135), известное квазиклассическое приближение для данного ядра [7, 8]:

$$\langle Q | \hat{\mathcal{U}}_{\bar\tau} | q \rangle \approx \frac{D^{1/2}}{(2\pi \mathrm{i}\hbar)^{n/2}} \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar} R(q, Q)\right]; \quad D = \det\left| -\frac{\partial^2 R}{\partial q^j\,\partial Q^k}\right|. \qquad (139)$$

Асимптотику (139) в принципе можно получить непосредственно из (138) (см. [62], с. 113, а также [41]), проще, однако, воспользоваться уравнением Шредингера $i\hbar\partial\mathcal{U}/\partial\tau = G(Q, -\mathrm{i}\hbar\partial/\partial Q)\mathcal{U}$ в применении к ядру $\langle Q \mid \hat{\mathcal{U}}_{\bar\tau} \mid q \rangle$, записанному в виде (139). Для функций D и R получатся уравнения, аналогичные уравнениям (П.23), (П.25), с помощью которых легко показать, что функции R и D (135), (139) действительно удовлетворяют этим уравнениям [7, 8].

Пример. Рассмотрим бесконечно малое точечное преобразование $Q(q) = q + \varphi(q)\,\omega$, где φ — произвольная функция. Оно задается генератором $G(q, P) = P_i\,\varphi^i(q)$, т. е. согласно (124) имеем

$$P_j = p_j - \varphi_{,j}(q)\,p_i\omega; \quad Q^j = q^j + \varphi^j(q)\,\omega. \qquad (140)$$

Соответствующий квантовый генератор

$$\hat{G} = \frac{1}{2}[\varphi^j(\hat{q})\,\hat{p}_j + \hat{p}_j\varphi^j(\hat{q})] = \varphi(\hat{q})\,\hat{p} + \frac{\hbar}{2\mathrm{i}}\varphi^j_{,j}(\hat{q}). \qquad (141)$$

В силу линейности $G(q, P)$ по импульсам проблема упорядочения решается простой симметризацией, т. е. требованием эрмитовости $\hat{G}$. Для унитарного оператора $\hat{\mathcal{U}}_\omega$ имеем

$$\hat{\mathcal{U}}_\omega = \exp[-(\mathrm{i}/\hbar)\,\hat{G}(\omega)].$$

Волновые функции преобразуются согласно формуле

$$\tilde{\psi}=\hat{\mathscr{U}}_{\omega}^{+}\psi\approx\left(1+\omega\varphi^{i}\frac{\partial}{\partial q^{i}}+\frac{\omega}{2}\varphi^{j}_{,j}\right)\psi(q)\approx$$

$$\approx\left(1+\frac{\omega}{2}\varphi^{j}_{,j}(q)\right)\psi(q+\varphi(q)\omega)\approx J^{1/2}\psi(Q(q)), \tag{142}$$

где $J=\det Q^{i}_{,j}\approx 1+\varphi^{j}_{,j}\omega$ — якобиан преобразования. Если исходные координаты евклидовы, то $J=\sqrt{g}$, g_{ij} — новая метрика. Из (142), в частности, вытекает, что операция замены переменных $\psi(q)\to\psi(Q(q))$ не унитарна (нужно добавить множитель $J^{1/2}=g^{1/4}$); она «унитарна» в скалярном произведении (под знаком интеграла), поскольку $dq\to J dq$. Несложно установить закон преобразования операторов

$$\langle q\mid\tilde{A}\mid q'\rangle=(J(q)J(q')^{1/2}\langle Q(q)\mid A\mid Q(q')\rangle. \tag{143}$$

В приложении 1 показано, что в нетривиальной метрике ядра операторов приобретают множитель $(gg')^{-1/4}$, тогда как в (143) стоит $(gg')^{1/4}$. Дело в том, что, во-первых, применение ядер с множителем $(gg')^{-1/4}$ предполагает интегрирование с инвариантной мерой $\bar{d}q=\sqrt{g}\,dq$, в то время как здесь подразумевается интегрирование с мерой dq; во-вторых, операторы $\tilde{A}$ действуют в пространстве функций $\tilde{\psi}$, тогда как ядро $\langle q\mid\tilde{A}\mid q'\rangle/(gg')^{1/4}$ действует в пространстве функций $\psi(Q(q))$.

Канонические преобразования гамильтоновых континуальных интегралов. Результаты разд. 2 и приведенные выше позволяют разобраться с проблемой поведения гамильтоновых континуальных интегралов при канонических преобразованиях. Чтобы пояснить, с какими вопросами приходится при этом сталкиваться, обратимся снова к простейшей формуле

$$\psi_{\varepsilon}(q)\approx\int\frac{dq''\,dp''}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[p''(q-q'')-\varepsilon H(q'',p'')]\right\}\psi_0(q''). \tag{144}$$

Для простоты рассмотрим систему с одной степенью свободы ($n=1$) и со стандартным гамильтонианом [см. (150)], а затем обсудим обобщение. Бесконечно малое каноническое преобразование (124) q'', $p''\to q'$, p' (роль Q, P играют q'', p'' — по существу совершаем обратное преобразование) сводится, очевидно, к простой замене переменных в (144). Преобразуя аналогичным образом переменные q, $p\to\tilde{q}$, $\tilde{p}$ и пренебрегая членами порядка ω^2, переписываем формулу (144) в виде

$$\psi_{\varepsilon}\approx\int\frac{dq'\,dp'}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p'\frac{\partial G(\tilde{q},\tilde{p})}{\partial\tilde{p}}\omega+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[p'(\tilde{q}-q')-\varepsilon H_{\omega}(q',p')]-\right.$$

$$\left.-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p'\frac{\partial G(q',p')}{\partial p'}\omega-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\tilde{q}-q')\frac{\partial G(q',p')}{\partial q'}\omega\right\}\psi_0\left(q'+\frac{\partial G(q',p')}{\partial p'}\omega\right), \tag{145}$$

где $H_\omega(q', p') = H(q' + \omega\partial G/\partial p', p' - \omega\partial G/\partial q')$. Соответствующее выражение при унитарном преобразовании (129)—(131) получается следующим образом. По определению,

$$\psi_\varepsilon(q) = \langle q|\hat{\mathrm{U}}_\varepsilon|\psi_0\rangle = \langle q|\hat{\mathcal{U}}_\omega \hat{\mathrm{U}}_\varepsilon^\omega \hat{\mathcal{U}}_\omega^+|\psi_0\rangle, \qquad (146)$$

где $\hat{\mathrm{U}}_\varepsilon^\omega = \hat{\mathcal{U}}_\omega^+ \hat{\mathrm{U}}_\varepsilon \hat{\mathcal{U}}_\omega = \exp(-\,\mathrm{i}H_\omega \varepsilon/\hbar)$. Дважды пользуясь в (146) разложением единицы по полной системе собственных функций оператора $\hat{q}$, а также формулами для матричных элементов операторов $\hat{\mathcal{U}}_\omega$, $\hat{\mathrm{U}}_\varepsilon^\omega$ и $\hat{\mathcal{U}}_\omega^+$, аналогичными формуле (73), имеем

$$\psi_\varepsilon(q) \approx \int \frac{dP\,dQ}{2\pi\hbar}\,\frac{dP'\,dQ'}{2\pi\hbar}\,\frac{dp'\,dq'}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[P(q-Q) - \omega G(q, P) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + P'(Q-Q') - \varepsilon H_\omega^{\mathrm{a}}(Q', P') + p'(Q'-q') + \omega G(q', p')\right]\right\} \psi_0(q'). \quad (147)$$

Написанное выражение требует пояснений. Согласно (130), (131)

$$\hat{H}_\omega = H(\hat{q}_\omega, \hat{p}_\omega) = H\left(\hat{q} + \frac{\partial G}{\partial p}\omega,\ \hat{p} - \frac{\partial G}{\partial q}\omega\right), \qquad (148)$$

т. е. в $\hat{H}_\omega$ операторы $\hat{q}$ и $\hat{p}$ не упорядочены. Чтобы получить формулу (147), необходимо в выражении (148) упорядочить операторы. Расположим $\hat{p}$ слева от $\hat{q}$ (разумеется, с учетом их некоммутативности). Тогда матричный элемент так определенного оператора

$$\langle P'|H_\omega^{\mathrm{a}}(\hat{q}, \hat{p})|Q'\rangle = H_\omega^{\mathrm{a}}(Q', P')\langle P'|Q'\rangle \qquad (149)$$

и дает ту функцию, которая выписана в (147). При стандартном способе упорядочения ($\hat{p}$ расположены справа от $\hat{q}$) в равенстве (147) стояла бы функция $H_\omega^{\mathrm{c}}(Q, P')$; для наших целей удобно взять функцию H_ω^{a}. Очевидно, в (147) необходимо учитывать все члены порядка ε, ω, $\varepsilon\omega$. Сделаем несколько замечаний по поводу формул (145), (147).

Из равенства (147) видно, что результат применения унитарного преобразования по внешнему виду весьма сильно отличается от аналогичного результата (145), полученного каноническим преобразованием переменных в (144). Из общих соображений ясно, что формулы (145) и (147) задают одно и то же преобразование. Желательно все же иметь прямое доказательство этого.

Как отмечалось в разд. 2, следует различать замену переменных в допредельном интеграле и переход к новым переменным (к новому представлению) в квантовой механике. Первая операция в отличие от второй не влечет поворота векторов в гильбертовом пространстве и есть лишь прием для вычисления многомерного интеграла. Вторая практически более важна, ибо, как правило, переход к новым переменным диктуется физикой задачи. Именно это обстоятельство предопределяет в значительной степени важность проблемы канонических преобразований гамильтоновых континуальных интегралов.

Хотя, как мы увидим, доказательство идентичности формул (145) и (147) оказывается довольно длинным, оно достаточно поучительно. Во-первых, в процессе вычислений будет проиллюстрирована формула (121) и станет ясно, с чем связана необходимость учета в ней членов $O(\Delta^2)$. Во-вторых, познакомимся со случаем, когда необходимо учитывать экстрачлены еще более высокого порядка (Δ^4) по сравнению с членами (90), (97). Специфика примера связана, очевидно, с наличием двух малых параметров ε, ω и с необходимостью удерживать члены порядка $\varepsilon\omega$.

Проведем соответствующую выкладку. Наиболее естественный путь, ведущий к цели,— интегрирование в (147) по P, Q, P', Q'. Это можно сделать явным образом, лишь если функции H и G содержат импульсы не более чем во второй степени. Ограничимся функциями вида

$$H(q, p) = p^2/2 + V(q);\; G(q, p) = \alpha p^2/2 + U(q) \tag{150}$$

(α — произвольный параметр). Тогда

$$H_\omega^a(\hat{q}, \hat{p}) = H(\hat{q}, \hat{p}) - \hat{p}Y(\hat{q})\,\omega - \frac{i\hbar}{2} Y'(\hat{q})\,\omega + O(\omega^2), \tag{151}$$

где

$$Y(q) = U'(q) - \alpha V'(q);\; Y' = dY/dq. \tag{152}$$

Заметим попутно, что функция $H_\omega(q', p')$ в формуле (145) соответствует лишь первым двум слагаемым в (151). Интегрирование по Q в (147) дает δ-функцию от $P - P'$, которая убирается последующей интеграцией по P. Опуская штрихи у Q', P' в получающемся интеграле, имеем

$$\psi_\varepsilon(q) \approx \int \frac{dP\,dQ}{2\pi\hbar}\frac{dp'\,dq'}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[-G(q, P)\,\omega + P(q-Q) - \right.$$
$$\left. -\varepsilon H_\omega^a(Q, P) + p'(Q-q') + G(q', p')\,\omega]\right\}\psi_0(q'). \tag{153}$$

Следующий шаг — интегрирование в (153) по P. Обозначим $q - Q = \Delta_\omega$. В экспоненте под интегралом коэффициент при P^2 есть $\varepsilon + \alpha\omega \equiv \Omega$. Этот факт, а также то, что необходимо удерживать члены порядка $\varepsilon\omega$, не позволяет в чистом виде применять правила эквивалентности из разд. 2, хотя общий метод годится и здесь. Интегрируя по P, получаем

$$\psi_\varepsilon(q) \approx \int \frac{dQ\,dp'\,dq'}{2\pi\hbar\,(2\pi i\Omega\hbar)^{1/2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{[\Delta_\omega + \varepsilon\omega Y(Q)]^2}{2\Omega} - p'\Delta_\omega - U(q)\,\omega - \right.\right.$$
$$\left.\left. - V(Q)\,\varepsilon + \frac{i\hbar}{2} Y'(Q)\,\varepsilon\omega + p'(q-q') + G(q', p')\,\omega\right]\right\}\psi_0(q'). \tag{154}$$

Главные члены интеграла (154) при ε, $\omega \to 0$ вычисляются с помощью стандартной уже процедуры — разложения подынтегрального выражения в ряд по степеням Δ_ω и интеграции по Q, т. е. опять используется формула (19), в которой $n=1$, $g_{ij}\to 1$, $g^{j_1\ldots j_{2k}}\to$ $\to(2k-1)!!$ и $\varepsilon\to\Omega$. В разложениях Y и V необходимо удерживать соответственно линейные и квадратичные члены, т. е. $Y(Q)\approx$ $\approx Y(q)-Y'(q)\,\Delta_\omega$, $V(Q)\approx V(q)-V'(q)\,\Delta_\omega+V''(q)\,\Delta_\omega^2/2$, а в $Y'(Q)$ аргумент можно сразу заменить на q, так как коэффициент при нем $\varepsilon\omega$. Бросается в глаза отличие от правил эквивалентности из разд. 1 — учитываются члены $\varepsilon\Delta_\omega^2$, эквивалентные согласно (19) $\varepsilon\Omega\approx\alpha\varepsilon\omega$. По той же причине в разложении $\exp(p'\Delta_\omega/\mathrm{i}\hbar)$ приходится удерживать члены вплоть до $\Delta_\omega^4\sim\Omega^2\approx2\alpha\varepsilon\omega$. Разумеется, члены $\varepsilon\omega\Delta_\omega/\Omega$ также подлежат учету. Выполняя указанные действия, находим

$$\psi_\varepsilon(q)\approx\int\frac{dp'\,dq'}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[-G(q,\,p')\,\omega+p'(q-q')-\right.\right.$$
$$\left.\left.-\varepsilon\left(\frac{p'^2}{2}+V(q)-U'(q)\,p'\,\omega+\frac{\mathrm{i}\hbar\omega}{2}U''(q)\right)+G(q',\,p')\,\omega\right]\right\}\psi_0(q'). \tag{155}$$

Полученное выражение теперь уже несложно привести к виду, сопоставимому с формулой (145). Коэффициент при $p'^2/2$ в экспоненте (155) есть ε, поэтому можно пользоваться результатами разд. 2. Совершим следующие операции: (i) заменим $q\to q'$ в $V(q)$ и $U''(q)$; (ii) подставим $p'U'(q)\approx p'U'(q')+p'U''(q')\,\Delta$; ($iii$) вместо q подставим $\tilde q+\omega\partial G(\tilde q,\,\tilde p)/\partial\tilde p$; ($iv$) выполним сдвиг переменной интегрирования $q'\to q'+\omega\partial G(q',\,p')/\partial p'$. Законность ($i$) очевидна — старый и новый члены отличаются на величины типа $\varepsilon\Delta$. Пользуясь формулами (84), (92), (94), в которых все тензоры c и a равны нулю, а $b_k^j\to-U''(q')$, заменяем в (155) после операции (ii) $U''(q')\,p'\Delta\to$ $\to\mathrm{i}\hbar\,U''(q')$. Наконец учитывая, что $H(q'+\omega\partial G/\partial p',\,p'-$ $-\omega\partial G/\partial q')\approx H(q'+\omega\partial G/\partial p',\,p')-p'U'(q')\,\omega\equiv H_\omega(q',\,p')$, переписываем (155):

$$\psi_\varepsilon(q)\approx\int\frac{dp'\,dq'}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[p'\frac{\partial G(\tilde q,\,\tilde p)}{\partial\tilde p}\,\omega-G(\tilde q,\,p')\,\omega+p'(\tilde q-q')-\right.\right.$$
$$-\varepsilon H_\omega(q',\,p')+\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}U''(q')\,\varepsilon\omega-p'\frac{\partial G(q',\,p')}{\partial p'}\,\omega+$$
$$\left.\left.+G(q',\,p')\,\omega\right]\right\}\psi_0\left(q'+\frac{\partial G}{\partial p'}\,\omega\right). \tag{156}$$

Эта формула все еще отличается от формулы (145). Заменим разность:

$$G(q',\,p')-G(\tilde q,\,p')\approx(q'-\tilde q)\,\frac{\partial G(q',\,p')}{\partial q'}-\frac{(q'-\tilde q)^2}{2}\,\frac{\partial^2G(q',\,p')}{\partial q'^2}. \tag{157}$$

Как несложно убедиться, снова пользуясь равенством (19) или правилом (96), в (157) можно совершить замену $(\tilde q-q')^2\to\mathrm{i}\varepsilon\hbar$. В итоге члены порядка $\varepsilon\omega$ сократятся и получающаяся формула будет идентична (145).

Выясним теперь, как следует выполнять бесконечно малые канонические преобразования в гамильтоновом континуальном интеграле. Согласно проведенной выкладке можно или 1) с помощью соответствующего унитарного оператора преобразовать $\hat{H} \to \hat{H}_\omega$, а затем с помощью стандартной процедуры выписать континуальный интеграл для матричного элемента оператора $\hat{\mathrm{U}}_t^\omega = \exp(-\mathrm{i}\hat{H}_\omega t/\hbar)$, или 2) совершить надлежащую замену переменных в аппроксимационной формуле для гамильтонова интеграла. Этот второй путь, естественный при работе с континуальными интегралами, практически оказывается более сложным при сравнительно простых генераторах G. Во-первых, в соответствии с формулой (145) получающееся ядро действует на функции вида $\langle q + \omega\partial G/\partial p \mid \psi\rangle$, тогда как согласно (130) нас интересует ядро оператора в пространстве преобразованных функций $\langle q \mid \omega\psi\rangle = \langle q \mid \hat{\mathcal{U}}_\omega^+ \mid \psi\rangle$. Другими словами, полученное с помощью канонического преобразования ядро нужно соответствующим образом видоизменить (применением операторов $\hat{\mathcal{U}}_\omega^+, \mathcal{U}_\omega$).

Во-вторых, при этом придется вести скрупулезный учет экстрачленов — занятие достаточно утомительное. Поэтому при совершении канонического преобразования целесообразнее использовать первый путь. Тогда несложно написать преобразованный континуальный интеграл

$$\langle q|\hat{\mathrm{U}}_t^\omega|q'\rangle = \int\limits_{q(0)=q'}^{q(t)=q} \prod_t \frac{dp(t)\,dq(t)}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\limits_0^t [p\dot{q} - H_\omega^{\mathrm{a}}(q, p)]\,dt\right\}, \quad (158)$$

где H_ω^{a} дается равенством (149). Вывод этой формулы заменой переменных в аппроксимационном интеграле описан в [33].

Обратимся к вопросу о конечных канонических преобразованиях. Пусть речь идет о преобразованиях, заданных генератором и не меняющих области изменения переменных. Тогда, очевидно, $\hat{\mathrm{U}}_t \to \hat{\mathrm{U}}_t^\tau = \exp(-\mathrm{i}\hat{H}_\tau t/\hbar)$, где

$$\hat{H}_\tau = \hat{\mathcal{U}}_\tau^+ H(\hat{q}, \hat{p})\,\hat{\mathcal{U}}_\tau = H(\hat{q}_\tau, \hat{p}_\tau), \quad (159)$$

и задача сводится к стандартной процедуре, связанной с соотношениями (4), (71), (73). Соответствующая формула будет отличаться от выражения (158) заменой $\hat{H}_\omega^{\mathrm{a}} \to \hat{H}_\tau^{\mathrm{a}}$. Следует помнить, что получающийся континуальный интеграл имеет в значительной степени формальный смысл. Так, даже для генераторов G вида (150) оператор $\hat{H}_\tau$ может содержать любые степени импульса p, т. е. интеграл по импульсам не будет гауссовым. В принципе подобным интегралам можно придать строгий смысл [63, 64] (можно определить интегралы и более общего вида [49], не использующие экспоненту), но они малопригодны для вычислений.

Отметим, что антистандартное упорядочение [индекс «а» в (158)] появилось по чисто техническим причинам при доказательстве идентичности (145) и (147). Разумеется, в (158) можно перейти к любому другому индексу, следуя правилам, приведенным в разд. 2.

Обсудим формулу (121) несколько подробнее. Слагаемые вне квадратных скобок под экспонентой в (145) представляют из себя разность $\delta = p''(q - q'') - p'(\tilde{q} - q')$. В классической механике это есть полный дифференциал dF_1, если $\Delta t = \varepsilon \to 0$ [см. (125)]. Как отмечалось, при работе с гамильтоновыми континуальными интегралами подобная аппроксимация недостаточна. Учитывая, что $p'' = p' - \omega\partial G(q', p')/\partial q'$ и $q - q'' = \tilde{q} - q' + O(\omega)$, имеем, пренебрегая членами порядка ω^2:

$$\delta \approx -\left[p'(\tilde{q} - q) - p'(q' - q'') + (\tilde{q} - q')\frac{\partial G(q', p')}{\partial q'}\omega\right]. \tag{160}$$

Используя теперь формулу (157), а также определение (127) функции $F_1^\omega(q', q'') = p'(q' - q'') + G(q', p')\,\omega$ (здесь вместо p' следует подставить решение уравнения $q'' = q' + \omega\partial G(q', p')/\partial p'$), получаем

$$\delta = -\left[F_1^\omega(\tilde{q}, q) - F_1^\omega(q', q'') - \frac{(\tilde{q} - q')^2}{2}\frac{\partial^2 G(q', p')}{\partial q'^2}\omega\right]. \tag{161}$$

Очевидно, в классике отношение δ/ε при $\varepsilon \to 0$ стремится к $-dF_1^\omega/dt$, так как последний член формулы (161) в пределе дает нуль. В гамильтоновых континуальных интегралах последним членом, как мы видели, пренебрегать нельзя. Необходимость его учета связана с наличием «неклассического» члена $i\hbar U''(q')\,\varepsilon\omega/2$ в формуле (156), который появился в силу некоммутативности операторов $\hat{q}$ и $\hat{p}$ [см. (151)]. Таким образом, здесь, как и ранее, в экстрачленах находит отражение операторная природа канонических переменных.

Итак, гамильтонов континуальный интеграл меняет свой вид при канонических преобразованиях, ибо, как мы выяснили, нельзя ограничиться заменой исходной классической функции Гамильтона на преобразованную ввиду возможного появления в $\hat{H}_\omega^{\mathrm{a}}$ неклассических членов $-(i\hbar\omega/2)\,[U''(q) - \alpha V''(q)]$ [см. (151)]. В этом смысле гамильтонов континуальный интеграл не преобразуется «ковариантно» при канонических преобразованиях. Он не ковариантен, строго говоря, даже при линейных канонических преобразованиях, когда функция $U(q)$ в (150) квадратична в q, поскольку и в этом случае пропорциональный $\hbar$ член Y' в (151) отличен от нуля ($Y' = \mathrm{const} \neq 0$). Что касается S-матрицы, то ее трансформационные свойства при данных преобразованиях не будут отличаться от свойств, характерных для произвольных унитарных преобразований.

Нами были рассмотрены лишь генераторы вида (150). К ним можно добавить линейные по p члены — проделанные выкладки, попрежнему, будут осуществимы. Если же в функции G присутствуют более высокие степени p, то соответствующий анализ невозможен, так как интегралы по импульсам не берутся. Впрочем, это не лишает возникающие формальные выражения смысла, поскольку аналогичные выражения получаются и при конечных канонических преобразованиях с генераторами из класса (150).

Несколько слов о произвольных канонических преобразованиях, заданных не генератором, а производящей функцией $F_1(q, Q)$. В этом случае, вероятно, нельзя построить точное ядро соответствующего унитарного оператора, так как для этого требуется по F_1 однозначно восстановить генератор G, а затем и соответствующий оператор $\hat{G}$. Хотя сказанное и не означает, что подобному каноническому преобразованию не отвечает некоторое унитарное, описанная выше процедура построения континуального интеграла в новых переменных не годится. В частности, однозначный рецепт записи интеграла в новых переменных связан с операторным формализмом, а этот последний требует вполне определенного расположения некоммутирующих операторов в выражениях старых переменных через новые. Классический формализм, точнее, функция $F_1(q, Q)$, такого рецепта не содержит.

Остановимся в заключение на точечных преобразованиях в гамильтоновых континуальных интегралах. Преобразование $q, p \to Q, P$, $q^i = q^i(Q)$, $P_i = d_i^j p_j$, $d_i^j = q^j_{,i}$ линейно по импульсам. Появление экстрачленов связано со слагаемым $p_i \Delta^i$ в экспоненте, которое превращается в $p_i c^i(Q, \Delta_Q)$, где c^i определяется формулами (85), (60) (в последней следует разлагать в точке Q'). Теперь можно воспользоваться общими правилами эквивалентности (92)—(94) в точке Q', положив в них тензоры a, b равными нулю и заменив

$$g_{ij} \to \tilde{g}_{ij} = d_i^k d_j^l g_{kl}, \quad f^i \to \tilde{f}^i = f^j (d^{-1})_j^i. \qquad (162)$$

Следует лишь помнить, что в силу канонической инвариантности меры $dq'\,dp$ множитель $\sqrt{g'}\,(gg')^{-1/4} = (g'/g)^{1/4}$ останется неизменным. Для сохранения явной ковариантности записи следует и здесь перейти к тензорам $\tilde{g}_{ij}$, т. е. $(g'/g)^{1/4} = (\tilde{g}'/\tilde{g})^{1/4}(J/J')^{1/2}$, $J = \det q^i{}_{,j}$, а множитель $(J/J')^{1/2}$ включить с помощью (96) в $H_{\text{эф}}$. Ввиду ковариантности формализма $H_{\text{эф}}$, очевидно, получается из старого заменой (162) с учетом формул, аналогичных (79) для $H^{\mathrm{a}}(q', p)$ [см. (П.32)]. Тем самым доказывается допустимость в гамильтоновом интеграле конечных точечных преобразований, заданных производящей функцией.

4. ГАМИЛЬТОНОВЫ КОНТИНУАЛЬНЫЕ ИНТЕГРАЛЫ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ СО СВЯЗЯМИ

Особенности квантования систем со связями. Проблема квантования гравитационного поля стимулировала изучение классических систем со связями [65, 66]. Дирак дал общие правила квантового описания таких систем [65]. Прежде чем переходить к континуальным интегралам, сформулируем основные для дальнейшего моменты, касающиеся их квантования:

1) динамические системы со связями первого и второго рода квантуются по-разному [65];

2) для связей первого рода операции исключения нефизических переменных и квантования не перестановочны.

Прокомментируем первое утверждение и докажем второе. Как известно [67], связи, т. е. функции $\varphi_s(q, p)$, $s = 1, 2 \ldots, S$, которые фиксируются условием $\varphi_s = 0$, в окрестности физической области всегда можно рассматривать как часть полного набора канонических переменных. Так как существование связей второго рода означает, что нужно одновременно фиксировать некоторые канонически сопряженные переменные, т. е. переменные типа q^s, p_s, то отсюда автоматически следует неприменимость стандартной процедуры квантования [65], поскольку фиксировать их — значит вступить в противоречие с условием квантования $[\hat{q}^s, \hat{p}_{s'}] = i\hbar\delta^s_{s'}$. Следовательно, при наличии связей второго рода необходимо или исключить их до квантования, или (что то же самое) перейти от скобок Пуассона к скобкам Дирака [65] и затем уже квантовать с использованием новых скобок. Поскольку скобки Дирака для связей второго рода равны нулю, канонические переменные, соответствующие этим связям, останутся классическими и после квантования (их коммутатор будет равен нулю). Другими словами, при квантовании системы со связями второго рода с использованием скобок Дирака безразлично, на каком этапе исключать отвечающие этим связям нефизические переменные — до квантования или после.

Иначе квантуются системы со связями первого рода. В этом случае связи φ_s играют роль канонических импульсов, сопряженных нефизическим координатам. Их фиксация допустима и при квантовом описании — условия $\varphi_s = 0$ трансформируются в условия на векторы состояния [65]:

$$\hat{\varphi}_s \psi_{\text{физ}} = 0. \tag{163}$$

Поскольку в обоих случаях, т. е. как при наличии связей первого рода, так и второго рода, дело сводится к сужению первоначального фазового пространства до некоторого подпространства, которое определяется лишь физическими переменными, встает вопрос, сказывается ли различие в рецептах квантования на физике? Нельзя ли и для связей первого рода сначала исключить все нефизические переменные, а затем квантовать? Ответ на эти вопросы дает второе из приведенных выше утверждений. Если сначала исключить нефизические переменные, а затем перейти к квантовому описанию, то физическая картина будет отличаться от картины, возникающей при квантовании по Дираку (163). Различие возникает в физически наиболее интересных системах, когда исключаемые переменные связаны с криволинейными координатами (при исключении переменных, связанных с декартовыми координатами, оба пути ведут к одному и тому же результату). Причина различия проста: если исключаемые переменные связаны с криволинейными координатами, то стандартный рецепт квантования (замена $q,\ p \to \hat{q},\ \hat{p},\ H(q,\ p) \to H(\hat{q},\ \hat{p})$, $[q, \hat{p}] = i\hbar$) для них уже не годится; между тем остающиеся физические переменные могут не сохранить информации о своей «криволинейности». Покажем это на примере, который одновременно послужит и доказательством утверждения 2 [31, 32]. Чтобы его доказать, достаточно привести хотя бы один пример указанной неперестановочности.

Пример *. Рассмотрим динамическую систему, заданную лагранжианом

$$L(\mathbf{x},\ \dot{\mathbf{x}},\ y,\ \dot{y}) = [(d/dt - yT)\,\mathbf{x}]^2/2 - V(\mathbf{x}^2), \tag{164}$$

где $\mathbf{x}$ — двумерный вектор, $\mathbf{x} = (x_1,\ x_2)$; $T = -i\tau_2$, τ_2 — матрица Паули; $(T\mathbf{x})_i \equiv T_{ij}x_j$. Теория инвариантна относительно калибровочных преобразований

$$\delta y = \dot{\omega}(t);\quad \delta\mathbf{x} = \omega(t)\,T\mathbf{x}, \tag{165}$$

где $\omega(t)$ — бесконечно малая произвольная функция времени. По существу, (164) есть лагранжиан скалярной электродинамики в пространстве $(1+0)$, где электромагнитное поле $A_\mu \to A_0 \equiv y$, а комплексное «поле» φ записано в виде $\varphi = (x_1 + ix_2)/\sqrt{2}$. Формально этот лагранжиан, описывающий движение частицы единичной массы в плоскости x, и есть простейший пример калибровочной теории.

Первичная связь дается равенством $\pi = \partial L/\partial\dot{y} = 0$. Гамильтониан таков:

$$H = \mathbf{p}^2/2 + V(\mathbf{x}^2) + ypTx, \tag{166}$$

и вторичная связь $\Phi = pTx = p_iT_{ij}x_j$, так как $\{y,\ \pi\} = 1$.

В соответствии с рецептом Дирака [65] при квантовании на физические векторы состояний накладываются условия

$$\hat{\pi}\psi_{\text{физ}} = \hat{\Phi}\psi_{\text{физ}} = 0. \tag{167}$$

Найдем уравнение, которому подчиняются физические волновые функции. Переходя в (166) к операторам $\mathbf{x} \to \hat{\mathbf{x}}$, $\mathbf{p} \to \hat{\mathbf{p}}$, запишем

* Фактически этот же пример рассматривается в статье [68]. Модели данного типа с неабелевой калибровочной группой изучались в работе [69].

гамильтониан в полярных координатах $(x_1, x_2) \to (r, \varphi)$:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) + V(r^2) + y\hat{p}_\varphi, \qquad (168)$$

где $\hat{p}_\varphi = -i\hbar\partial/\partial\varphi = \hat{p}T\hat{x} \equiv \hat{\Phi}$. С учетом (167) заключаем, что физические волновые функции удовлетворяют уравнению

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{\text{физ}}}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r^2)\right]\psi_{\text{физ}}. \qquad (169)$$

Таков ответ, вытекающий из рецепта Дирака (163). Выясним, что получится, если сначала исключить нефизические переменные, а затем квантовать. Классический гамильтониан (166) в полярных координатах записывается так:

$$H = (p_r^2 + p_\varphi^2/r^2)/2 + V(r^2) + yp_\varphi. \qquad (170)$$

Исключая нефизические переменные, т. е. полагая $p_\varphi = \varphi = 0$, получаем

$$H' = p_r^2/2 + V(r^2). \qquad (171)$$

Мы пришли к одномерной задаче на полуоси. Квантование проводится стандартным образом, причем оператор

$$\hat{H}' = -\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r^2) \qquad (172)$$

расширяется до самосопряженного [57]. Ясно, что гамильтониан в уравнении Шредингера (169) не совпадает с гамильтонианом (172). Это и доказывает утверждение 2.

Рассмотренный пример демонстрирует еще одну особенность квантования с условием (163): после перехода к физическому фазовому подпространству сохраняется информация об исключенном нефизическом. Физические векторы, удовлетворяющие уравнению (169), образуют подпространство гильбертова пространства, натянутого на собственные векторы оператора (168). Последние нормированы согласно условию

$$\int_0^\infty r\,dr \int_0^{2\pi} d\varphi\, |\psi(r, \varphi)|^2 = 1 \qquad (173)$$

Векторы $\psi_{\text{физ}}$, удовлетворяющие условию $\hat{p}_\varphi\psi_{\text{физ}} = 0$, не зависят от φ и для них (173) записывается в виде

$$2\pi\int_0^\infty r\,dr\,|\psi_{\text{физ}}(r)|^2 = 1, \qquad (174)$$

т. е. решения одномерного уравнения (169) должны нормироваться согласно (174) (с весом, зависящим от размерности нефизического конфигурационного подпространства, см. также [68, 70]).

Еще один вопрос, встающий при квантовании систем со связями первого рода, касается проблемы упорядочения операторов в связях [71, 72]. Для лагранжианов рассматриваемого класса [билинейные по скоростям функции типа (9)] можно предложить следующую процедуру. Несложно показать, что для таких систем первичные связи $\varphi^{(1)}_s$ будут линейны в импульсах *, а проблема упорядочения в подобных операторах однозначно (с точностью до унитарной эквивалентности) решается требованием их эрмитовости [3] или простой симметризацией (полагаем, что $\varphi^{(1)}_s$ можно считать новыми каноническими импульсами). Предположим, что проблема упорядочения операторов в гамильтониане тоже решена. Тогда ввиду отсутствия связей второго рода все вторичные связи получаются следующим образом. Из (163) и условия, что гамильтониан не выводит $\psi_{\text{физ}}$ за пределы физического подпространства, вытекают условия

$$[\hat{\varphi}^{(1)}_s, \hat{H}]\,\psi_{\text{физ}} \equiv \hat{\varphi}^{(2)}_s \psi_{\text{физ}} = 0. \tag{175}$$

Если эти равенства выполняются автоматически на векторах $\psi_{\text{физ}}$, удовлетворяющих (163), то вторичные связи отсутствуют. В противном случае необходимо еще более сузить гильбертово пространство, потребовав выполнения также и условий (175). Очевидно, процедуру следует продолжить, т. е. коммутатор $[\hat{\varphi}^{(2)}, \hat{H}]$ также должен обращаться в нуль на физических функциях (напомним: все связи находятся в инволюции, т. е. $[\hat{\varphi}_s, \hat{\varphi}_{s'}]\,\psi_{\text{физ}} = 0$). Описанный путь позволяет найти связи с учетом расстановки операторов в них.

Отметим, что логически при наличии связей первого рода имеется два способа квантования: 1) можно сначала исключить из гамильтониана все нефизические переменные, а затем квантовать, 2) можно квантовать с использованием условия (163). По-видимому, априори нет оснований предпочесть какой-либо из этих способов. Решить данный вопрос может только опыт. Как известно, квантовая электродинамика строится, опираясь на условие типа (163).

Исключение нефизических переменных в гамильтоновом континуальном интеграле. Проделанный анализ с учетом результатов разд. 2 позволяет сформулировать правила исключения лишних степеней свободы в методе континуальных интегралов.

Связи первого рода. Имеющийся здесь рецепт [73] (воспроизведенный затем в монографиях [74—76]), по существу соответствует квантованию после изгнания всех нефизических переменных (см. [31, 32] и приложение 4, п. 2). Согласно разобранному примеру он ведет к отличным от вытекающих из требования (163) результатам. Оба рецепта, как отмечалось, ведут к одинаковым ответам лишь в про-

* Уравнения $p_i = \partial L/\partial \dot{q}^i$ в данном случае линейны по $\dot{q}$ и p. Если ранг матрицы $\partial^2 L/\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j$ есть R, то решения $\dot{q}^r = f^r(q, p)$ R уравнений также линейны в импульсах. Подставляя эти решения в остающиеся уравнения, которые и дают первичные связи, убеждаемся в линейности последних по импульсам.

стейших случаях, когда нефизические переменные связаны с декартовыми координатами.

Итак, пусть имеется оператор Гамильтона $\hat{H}$ и операторы $\hat{\varphi}_s$, отвечающие связям. Предположим, что с помощью унитарного преобразования можно перейти к новым каноническим переменным $\hat{q}, \hat{p} \to \hat{Q}, \hat{P}; \hat{\chi}, \hat{\pi}$ $[\hat{Q}^r, \hat{P}_{r'}] = i\hbar\delta^r_{r'}$; $[\hat{\chi}^s, \hat{\pi}_{s'}] = i\hbar\delta^s_{s'}$; $[\hat{\chi}, \hat{Q}] = [\hat{\chi}, \hat{P}] = [\hat{\pi}, \hat{Q}] = [\hat{\pi}, \hat{P}] = 0$, таким, что некоторые новые импульсы можно отождествить со связями $\hat{\pi}_s = \hat{\varphi}_s(\hat{q}, \hat{p})$ (в окрестности физической области). Расположим импульсы $\hat{\pi}$ (связи) в $H(\hat{Q}, \hat{P}, \hat{\chi}, \hat{\pi})$ справа от операторов координат (с учетом их некоммутативности). Так как при действии гамильтониана на физическое состояние члены, содержащие связи, дадут нуль, то их можно положить равными нулю. Очевидно, оставшаяся часть $\hat{H}\,|_{\hat{\pi}=0} = \overline{H}$ не должна зависеть от $\hat{\chi}$ [иначе, в силу (175), в нее входили бы и некоторые π, что противоречит сделанному предположению $\hat{\pi} \to 0$], т. е. должно выполняться условие $[\hat{\pi}_s, \overline{H}] = 0$. Оператор $\overline{H} \equiv \hat{H}_{\text{физ}}$ и есть искомый физический гамильтониан. После исключения нефизических степеней свободы можно написать континуальный интеграл для оператора эволюции, пользуясь общими правилами разд. 2. Его можно написать и для оператора $\hat{H}(\hat{Q}, \hat{P}, \hat{\chi}, \hat{\pi})$, зависящего от $\hat{\chi}$ и $\hat{\pi}$. Так как оператор эволюции применяется лишь к физическим состояниям, удовлетворяющим условиям $\hat{\pi}\chi_{\text{физ}} = 0$, т. е. не зависящим от χ, ясно, что нефизические переменные можно исключить введением подынтегрального множителя $\Pi_s (2\pi\hbar)\,\delta(\chi^s)\,\delta(\pi_s)$. Эта общая процедура неудобна для практического применения, ибо, как правило, трудно найти $\hat{H}$ в новых переменных. Желательно иметь формулы с гамильтонианом и связями, зависящими от исходных величин q и p. Для этого в полученном выражении необходимо сделать каноническое преобразование к старым переменным. Результатом и будет искомая формула. К сожалению, вопрос о произвольных канонических преобразованиях в гамильтоновом континуальном интеграле остается открытым, поэтому ниже ограничимся практически важным случаем связей, получающихся из старых переменных точечным преобразованием. Можно показать, что такие связи линейны в импульсах, так что проблема упорядочения, если она и возникает, решается простой симметризацией.

Итак, в новых переменных формула для физических ψ_ε с исключенными переменными запишется в виде

$$\psi_\varepsilon \approx \int \frac{dQ'\,dP\,d\chi'\,d\pi}{(2\pi\hbar)^{n-S}} \left(\frac{g'}{g}\right)^{1/4} \prod_{s=1}^{S} \delta(\chi'^s)\,\delta(\pi_s) \times$$
$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[P\Delta Q + \pi\Delta\chi - \varepsilon\left(\overline{H}_{\text{эф}}(Q', P) + H_1(Q', P, \chi', \pi)\right)\right]\right\}\psi_0(Q'). \tag{176}$$

Комбинация определителей $(g'/g)^{1/4}$, как и в разд. 3, связана с тем, что применение ядра, имеющего множитель $(gg')^{-1/4}$, предполагает интегрирование с мерой $\sqrt{g'}\,dq'$. Индекс «эф» у $\overline{H}$ означает, что эта функция записана с учетом правил коммутации операторов. Далее, $\Delta\chi = \chi - \chi'$, поэтому в (176) следовало бы положить $\chi = 0$, но, принимая во внимание последующий переход к континуальному интегралу, этого не сделано. Теперь можно вернуться к исходным переменным, совершив подстановку $Q = Q(q)$, $P = P(q, p)$, $\chi = \chi(q)$, $\pi = \varphi(q, p)$ (точечное преобразование); в качестве $\varphi_s(q, p)$ берем функции, фигурирующие в равенстве:

$$\langle p|\hat{\varphi}_s^{\mathrm{a}}(\hat{q}, \hat{p})|q\rangle = \varphi_s(q, p)\langle p|q\rangle. \tag{177}$$

Если бы в (176) не было δ-функций, то с учетом экстрачленов получился бы интеграл в исходных переменных с исходным гамильтонианом. Наличие δ-функций делает ненужным учет экстрачленов, связанных с нефизическими переменными q^s, которые фиксируются дополнительными условиями $\chi^s = 0$. В результате получаем не первоначальный гамильтониан $H(q, p)$, а некоторый эффективный, и формула (176) перепишется так:

$$\psi_\varepsilon \approx \int \frac{dq'\,dp}{(2\pi\hbar)^{n-S}} \prod_{s-1}^{S} \delta(\chi^s(q'))\,\delta(\varphi_s(q', p)) \times$$
$$\times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[p\Delta q - \varepsilon H_{\text{эф}}(q', p)]\right\}\psi_0(q'). \tag{178}$$

Явный вид $H_{\text{эф}}$ определяется в результате перехода от (176) к (178); множитель $(g'/g)^{-1/4}$ включен в определение $H_{\text{эф}}$ (это всегда можно сделать, так как g'/g имеет вид $1 + c\Delta + \ldots$, см. разд. 1, 2). Изменение гамильтониана отражает операторную природу канонических переменных. Оно связано также с особенностью замены переменных в присутствии δ-функций — они аннулируют не только сами переменные, но и порождаемые ими экстрачлены. Из формулы (178) вытекает следующее представление для ядра оператора эволюции:

$$\langle q|\hat{\mathrm{U}}_t|q'\rangle = \int\limits_{q(0)=q'}^{q(t)=q} (1) \prod_t \left[\frac{dq\,dp}{(2\pi\hbar)^{n-S}} \times\right.$$
$$\left.\times \prod_{s=1}^{S} \delta(\chi^s(q))\,\delta(\varphi_s(q, p))\right] \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\limits_0^t (p\dot{q} - H_{\text{эф}})\,dt\right]. \tag{179}$$

Следует иметь в виду, что применение ядра (179) предполагает интегрирование по мере dq', т. е. без множителя $\sqrt{g'}$. Главное отличие этой формулы от (П.50) связано с учетом, во-первых, неперестановочности операций исключения нефизических переменных и операции квантования; во-вторых, неперестановочности операторов как в гамильтониане, так и в связях; в-третьих, специфики криволинейных координат [появление множителя $(gg')^{-1/4}$ в ядрах, см. разд. 2]; в-четвертых, с тем что переход q, $p \to Q$, P, χ, φ есть точечное преобразование. Написать обоснованные формулы для произвольного канонического преобразования q, $p \to Q$, P, χ, φ, [а тем более неканонического, как в (П.50)], в настоящее время не представляется возможным. Известные трудности возникают и при учете порядка следования операторов в более сложных связях, хотя они, по-видимому, преодолимы.

Связи второго рода. Системы со связями второго рода встречаются в квантовой физике несколько реже. Примером может служить калибровочное векторное поле, если в его лагранжиане присутствует член с массой [77]. Итак, пусть $\theta_1, \ldots, \theta_{2s}$ — связи второго рода, т. е. $\det\{\theta_\sigma\theta_\rho\} \neq 0$. Как разъяснялось выше, связи второго рода следует исключать до квантования (или оставлять их классическими параметрами и после квантования), следовательно, казалось бы, под знак интеграла (179) можно подставить $\Pi_{t\sigma}\delta(\theta_\sigma)\,[\det\{\theta_\sigma,\ \theta_\rho\}]^{1/2}$ [77]. Это действительно так, если физическое конфигурационное пространство евклидово, а физические координаты — декартовы. В противном случае меняются процедура квантования и вид интеграла (см. разд. 1, 2 и 5). Нужно иметь в виду, что переход от скобок Пуассона к скобкам Дирака [65] означает изменение критерия «каноничности», т. е. переменные, канонические с точки зрения скобок Пуассона, могут и не быть таковыми с точки зрения скобок Дирака. Далее нефизические переменные формально тоже «квантуются», причем отвечающие им операторы коммутируют со всеми остальными. Поэтому при наличии связей второго рода следует сперва выяснить характер физического подпространства и свойства метрического тензора $g_{ij}^{\text{физ}}$. Если $g_{ij}^{\text{физ}} \neq \text{const}$, то возникает проблема упорядочения в гамильтониане, необходимость учета множителя $(g^{\text{физ}}g'^{\text{физ}})^{-1/4}$. Если к тому же конфигурационное подпространство обладает кривизной, то к H следует добавить член $\hbar^2 R/12$ (см. разд. 1). Наконец, применяя разложение единицы по полной системе функций (см. разд. 2), нужно учитывать отмеченные особенности нефизических переменных. При использовании аналога формулы (179):

$$\langle q|\hat{\mathrm{U}}_t|q'\rangle = \int\limits_{q(0)=q'}^{q(t)=q} (1) \prod_t \frac{dq\,dp}{(2\pi\hbar)^{n-S}} \times$$
$$\times \prod_\sigma^{2S} \delta(\theta_\sigma)\,[\det\{\theta_\sigma,\ \theta_\rho\}]^{1/2} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t (p\dot{q} - H_{\text{эф}})\,dt\right] \qquad (180)$$

необходимо считаться со всеми указанными обстоятельствами.

Приведенные правила не претендуют на универсальность. Так, искривленным может оказаться и физическое фазовое пространство (в некоторых калибровочных теориях фазовое пространство — конус [69]). Правила квантования в этом случае меняются [78]. Более того, оно может быть наделено нетривиальной топологической структурой, что еще более усложняет задачу. Все эти возможности здесь не рассматривались. В задаче об исключении нефизических переменных в гамильтоновых континуальных интегралах накладывается сразу несколько трудностей. Помимо двух, отмеченных в начале разд. 3, добавляется еще и недостаточная разработанность общей (классической) теории систем со связями. Сюда можно отнести и проблему формулирования континуальных интегралов для систем с нетривиальными (геометрическими или топологическими) фазовыми пространствами. Все это делает универсальные формулы исключения нефизических степеней свободы делом не слишком близкого будущего.

ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

О процедуре квантования Дирака — Фейнмана — Паули — Де Витта. Утверждение, что ядро оператора инфинитезимального сдвига во времени задается формулой (12), есть, фактически, независимый постулат квантования. Действительно, по существу, проквантовать — значит по классической функции Гамильтона (или Лагранжа, т. е. зная классические уравнения движения) указать закон изменения волновых функций во времени. Стандартная процедура квантования [3] сводится к утверждению: волновые функции системы подчиняются уравнению Шредингера, оператор Гамильтона в котором получается из функции Гамильтона заменой канонических переменных на операторы. Ограниченность этого рецепта связана с тем, что он, во-первых, справедлив только в декартовой системе координат, во-вторых, дает ответ лишь тогда, когда нет проблемы упорядочения операторов [3]. Между тем функция (12) вместе с действием (14) как раз и определяет закон развития системы во времени, причем для ее вычисления достаточно знать лишь функцию Лагранжа (иначе: зная функцию (12), можно найти $\hat{H}$). Преимущество данного метода квантования состоит в том, что он справедлив в любой системе координат и автоматически дает правильное расположение операторов в гамильтониане (см. [1, с. 186 перевода]). Более того, он без труда обобщается на случай искривленного пространства [6]. Весьма вероятно, что (12) есть правильный рецепт квантования в пространствах с кривизной. Желательно, конечно, иметь независимое подтверждение этого. К сожалению, простейшая модель (частица в слое между двумя концентрическими сферами, толщина слоя стремится к нулю) не дает однозначного ответа [18]. По-видимому, вместо сфер следовало бы взять эллипсоиды.

Критерий Фейнмана — Паули. Относительно формулы (16) Фейнман вскользь заметил, что она верна лишь для потенциалов, растущих не быстрее второй степени q (см. [1, примечание на с. 185 перевода]). Паули [4] уделил этому вопросу больше внимания, приведя, в частности, конкретный пример недостаточности формул (16), (12) [частица в ящике — потенциал дается формулой $V(q) = (2 \mid q - L/2 \mid /L)^\infty$, т. е. растет быстрее любой степени q, см. разд. 1]. Обстоятельное исследование этой проблемы опубликовал Шокар [79].

Суть вопроса заключается в следующем. Как подчеркивалось в разд. 1, в характерных для континуальных интегралов формулах типа

$$\psi_\varepsilon(q) \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq'}{(2\pi i\varepsilon\hbar)^{n/2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{(q-q')^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V(q')\right]\right\} \psi_0(q'), \quad \varepsilon \to 0, \quad (181)$$

необходимо учитывать члены порядка ε. Следовательно, значение континуального интеграла целиком определяется асимптотикой выражения (181), которую можно найти методом статфазы [54]. Главным членом в показателе экспоненты традиционно считается $\Delta q^2/\varepsilon$. Это действительно так для потенциалов, растущих на бесконечности не быстрее, чем q^2. Однако для более быстро растущих потенциалов при больших q' членом $\varepsilon V(q')$ уже нельзя пренебрегать по сравнению с $\Delta q^2/\varepsilon$. Проиллюстрируем сказанное на примере потенциала $V(q) = \lambda q^k$ в одномерном пространстве ($n = 1$). Для нахождения асимптотики подобных интегралов используется следующий метод *. В (181) переходят к новым переменным $q = y/\varepsilon^\alpha$, $q' = y'/\varepsilon^\alpha$, причем α находят из условия равенства степеней ε при обоих членах в квадратных скобках, т. е. из уравнения $1/\varepsilon^{1+2\alpha} = \varepsilon^{1-\alpha k}$:

$$\alpha = 2/(k-2). \quad (182)$$

Формула (181) приобретает вид

$$\psi_\varepsilon(y/\varepsilon^\alpha) \approx \frac{1}{\varepsilon^\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy'}{(2\pi i\varepsilon\hbar)^{1/2}} \times$$

$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{\varepsilon^{2\alpha+1}}\left[\frac{(y-y')^2}{2} - \lambda y'^k\right]\right\} \psi_0(y'/\varepsilon^\alpha). \quad (183)$$

Так как $2\alpha + 1 > 0$ при $k > 2$, асимптотика интеграла (183) находится стандартным методом. Стационарные точки показателя экспоненты получаем из уравнения

$$y' - y - k\lambda y'^{k-1} = 0, \quad (184)$$

которое имеет $k - 1$ решений. Одно из них для $y \to 0$ [при $\varepsilon \to 0$ и фиксированном q имеем $y = O(\varepsilon^\alpha)$] вычисляется по теории возмущений

$$y'_0 \approx y + k\lambda y^{k-1} \quad (185)$$

---

* Автор благодарен С. Ю. Славянову, указавшему на этот прием.

и соответствует предположению о старшинстве $\Delta q^2/\varepsilon$. Остальные решения не малы. Они дают вклад вида

$$\sum_m c_m \exp\left(\mathrm{i}A_m/\hbar\varepsilon^{2\alpha+1}\right)\psi_0\left(y'_m/\varepsilon^\alpha\right), \tag{186}$$

где y'_m — корень уравнения (184) с номером m, а коэффициент A_m равен $(y - y'_m)^2/2 - \lambda y'^k_m$. Похожие выражения получаются при интегрировании в (181) по конечному или полубесконечному интервалу. Для конечных интервалов амплитуда ψ_0 берется в точке границы; здесь при $\varepsilon \to 0$ асимптотика (186) определяется поведением ψ_0 на бесконечности. Ясно, что для достаточно быстро убывающих функций ($\psi_0 \sim 1/q^{(1/\alpha+\delta)}$, $\delta > 0$) вкладом остальных стационарных точек можно пренебречь. Чтобы их вкладом можно было пренебречь и в континуальном интеграле, требуется столь же быстрое убывание ψ_t при конечных t. Для состояний с конечной энергией (четные k) $\psi \sim \sim 1/q^{(k+1+2\delta)/2}$, $\delta > 0$ и $(k + 1 + 2\delta)/2 > 1/\alpha + \delta = (k - 2)/2 + \delta$, т. е. указанное условие выполняется всегда.

Шокар [79] исследовал вклады в асимптотику (181) траекторий, соединяющих точки $q(0)$ и $q(t)$. Для потенциалов типа $V = q^{2k}$ помимо основной траектории имеются и отраженные, также обладающие экстремальными свойствами. Вывод работы [79]: при достаточно малых временах вкладом отраженных траекторий можно пренебречь.

О других определениях континуальных интегралов. Иногда высказывается мнение (см., например, [62, с. 60]), что неоднозначности континуальных интегралов, отмеченные в работах [30, 52], свидетельствуют о дефектности их определения как пределов многократных интегралов. Отчасти в связи с этим делались (и делаются) попытки найти независимое определение континуальных интегралов. Одно из таких предложений сводится к определению их как объектов, обладающих лишь теми свойствами, которые присущи простейшим ($g_{ij} = \mathrm{const}$) гауссовым интегралам [76, 80, 81]. Прежде всего подчеркнем уместность поисков других определений континуальных интегралов [45] — представляется очевидной необходимость иметь более совершенный или, по крайней мере, более разработанный аппарат. Вместе с тем отметим следующее. Неоднозначности, связанные с интегралами по траекториям, имеют двоякий характер. Во-первых, они отражают зависимость результата от расположения операторов. Но это отнюдь не недостаток. Недостатком следовало бы признать как раз нечувствительность пределов типа (4), (75) к порядку следования операторов. Во-вторых, записи типа (5), (75) не определяют интеграла однозначно (см. разд. 1 и 2). Эта последняя неоднозначность также не есть недостаток объекта (континуального интеграла, определяемого предельным переходом от конечнократного) — это недостаток записи. Как разъяснялось в разд. 1 и 2, формулы (5), (75) следует снабдить значком, указывающим точку, в которой берутся функции в допредельной формуле. Тогда формально записанные континуальные интегралы становятся вполне определенными. Похожая ситуация имеет место с сингулярными интегралами типа $\int dx/x$. Для того чтобы придать им смысл, необходимо указать, что понимается под написанными символами, дополнив их соответствующим значком, скажем, буквой P перед интегралом. Таким образом, если задача поставлена физически, т. е. задана функция Лагранжа или оператор Гамильтона, то, пользуясь результатами разд. 1 или 2, можно однозначно построить континуальный интеграл, сообразуясь с постулатами квантования и законами квантовой механики.

Наконец, относительно определения их как объектов, наделенных лишь свойствами гауссовых интегралов. Поскольку интегралы с $g_{ij} \neq \mathrm{const}$ сильно отличаются от обычных гауссовых (необходимость введения индекса α и т. п., см. разд. 1 и 2), обсуждаемое определение относится лишь к узкому кругу объектов — это во-первых. Во-вторых, как следствие, оказывается слишком узким круг операций, которые можно совершать при работе с такими интегралами, ибо уже нелинейная замена переменных не принадлежит к числу допустимых операций. Относительно ситуации в полевых теориях см. ниже.

О континуальных интегралах в квантовой теории поля [82, 83]. Хотя данная статья посвящена нерелятивистской квантовой механике, конечной ее целью является квантовая теория поля. Эта теория сложна сама по себе, поэтому естественно желание изучить отдельные ее особенности, связанные с континуальными интегралами, на более простых моделях. Наиболее существенные моменты, обсуждавшиеся выше (нестандартные члены и правила эквивалентности), сохраняются и в квантовой теории поля, правда, в модифицированном виде. Разница в том, что коммутатор канонических переменных теперь содержит δ-функцию: $[\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}(\mathbf{x}', t)] = i\hbar\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$. Но правила эквивалентности есть по существу способ учета некоммутируемости операторов, так как появление пропорциональных $\hbar$ и $\hbar^2$ слагаемых в $A^{\text{эф}}$ и $V^{\text{эф}}$ — результат фактического использования коммутационных соотношений. Поэтому учет экстрачленов связан здесь с появлением в $H_{\text{вз}}^{\text{эф}}$ сингулярных членов типа $\hbar\delta^{(3)}(0)$ и $[\hbar\delta^{(3)}(0)]^2$. Такие добавки встречались при изучении систем, содержавших вторые производные во взаимодействии [84, 85, 16, 17]. В работе [85] на примере киральной теории показана необходимость включения пропорциональных $[\hbar\delta^{(3)}(0)]^2$ членов в $H_{\text{вз}}^{\text{эф}}$ (S-матрица определяется как виковское T-произведение: $S = T^* \{\exp[-(i/\hbar) \times \int d^4x \hat{H}_{\text{вз}}^{\text{эф}}]\})$ — их вклад сокращается с соответствующими членами, возникающими в диаграммах с более чем одной петлей. Применение релятивистски инвариантной размерной регуляризации делает, очевидно, ненужным их учет [17].

Автор искренне признателен Н. В. Борисову, В. В. Нестеренко, указавшим на работы [12, 55], и В. А. Франке за полезные обсуждения, а также В. С. Буслаеву, предоставившему оттиски своих работ.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

1. **Криволинейные координаты.** Несложно убедиться, что в криволинейных координатах известные формулы квантовой механики меняются следующим образом. *Скалярное произведение*

$$\langle\psi_1 \mid \psi_2\rangle \equiv \langle\psi_1 \mid q\rangle \langle q \mid \psi_2\rangle \equiv \int d^nq \sqrt{g}\,\psi_1^*(q)\,\psi_2(q); \tag{П.1}$$

операторы импульса

$$\hat{\mathrm{P}}_j = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} g^{1/4} \frac{\partial}{\partial q^i} g^{1/4}; \quad [\hat{q}^i, \hat{\mathrm{P}}_j] = \mathrm{i}\hbar\delta^i_j. \tag{П.2}$$

Эти операторы эрмитовы, если скалярное произведение векторов гильбертова пространства определено согласно (П.1). Их *собственные функции* есть

$$\langle q | p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}}\, g^{-1/4} \exp(\mathrm{i}p_j q^j/\hbar), \tag{П.3}$$

и *δ-функция* дается формулой

$$\langle g \mid p\rangle \langle p \mid q'\rangle = (gg')^{-1/4}\,\delta^{(n)}(q - q') \equiv \delta(q, q'). \tag{П.4}$$

Оператор Лапласа — Бельтрами выглядит так:

$$\square = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} \sqrt{g}\, g^{ij} \frac{\partial}{\partial q^j} = -\frac{1}{\hbar^2}\, g^{-1/4}\hat{\mathrm{P}}_i g^{1/2} g^{ij} \hat{\mathrm{P}}_j g^{-1/4}. \tag{П.5}$$

Если в (П.1) интегрируется от $-\infty$ до $+\infty$, то операторы (П.2) — самосопряженные. В работе [6] рассмотрен более общий случай, когда метрический тензор зависит от времени.

Если $g \neq 1$, то ядра операторов видоизменяются следующим образом. Пусть задан произвольный оператор $F(\hat{q}, \hat{p})$. Перейдем к стандартно упорядоченному оператору $F(\hat{q}, \hat{p}) = F^{\mathrm{c}}(\hat{q}, \hat{p})$. Тогда ядро $\hat{F}^{\mathrm{c}}$ можно представить в виде

$$\langle q | F^{\mathrm{c}}(\hat{q}, \hat{p}) | q'\rangle = \int dp\, \langle q | p\rangle\, F^{\mathrm{c}}(q, p)\, \langle p | q'\rangle. \tag{П.6}$$

Поскольку при $g \neq 1$ $\langle q \mid p\rangle \to \widetilde{\langle q \mid p\rangle} = g^{-1/4}\langle q \mid p\rangle$, ядра всех операторов приобретают множитель $(gg')^{-1/4}$, где $g' = g(q')$. От множителя $(gg')^{-1/4}$ можно избавиться, перейдя к функциям $\tilde{\psi} = g^{1/4}\psi$ и ядрам $\tilde{\mathrm{U}}_{qq'} = (gg'')^{1/4}\mathrm{U}_{qq'}$; в этом случае во всех формулах исчезают множители $\sqrt{g}$ при dq:

$$\int \bar{d}q\,\psi_1^*\psi_2 = \int dq\,\tilde{\psi}_1^*\tilde{\psi}_2, \quad \tilde{\psi}_\varepsilon(q) = \int dq'\, \tilde{\mathrm{U}}_{qq'}\tilde{\psi}_0(q'), \tag{П.7}$$

а оператор $\hat{\mathrm{P}}_j$ (П.2) превращается в обычный:

$$\int \sqrt{g}\, dq\,\psi_1^*\hat{\mathrm{P}}_j\psi_2 = \int dq\,\tilde{\psi}_1^* \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial q^j}\tilde{\psi}_2. \tag{П.8}$$

В пространстве функций $\tilde{\psi}$ оператор $H(\hat{q}, \hat{\mathrm{P}})$ превращается в

$$q^{1/4} H(\hat{q}, \hat{\mathrm{P}})\, g^{-1/4} = H(q, -\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q).$$

В статье используются следующие обозначения:
символ Кристоффеля

$$[ij, k] = (g_{ik,j} + g_{jk,i} - g_{ij,k})/2, \tag{П.9}$$

тензор Римана — Кристоффеля

$$R_{ikjl} = (g_{ij,kl} - g_{il,kj} - g_{kj,il} + g_{kl,ij})/2 + \\ + g^{mn}([ij, m][kl, n) - [kj, m][il, n]), \tag{П.10}$$

тензор Риччи и скалярная кривизна

$$R_{ij} = g^{kl}R_{iklj}; \; R = g^{ij}R_{ij} \tag{П.11}$$

($R > 0$ для сферы в трехмерном евклидовом пространстве).

2. **Вывод формулы (19).** Дифференцируя очевидное равенство

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n\Delta}{(2\pi i\varepsilon\hbar)^{n/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} g_{ij} \frac{\Delta^i\Delta^j}{2\varepsilon}\right) = g^{-1/2} \tag{П.12}$$

по g_{ij} с использованием формулы

$$dg = gg^{ij}dg_{ij}, \tag{П.13}$$

которая немедленно следует из соотношения $\ln\det\hat{A} = \operatorname{tr}\ln\hat{A}$, имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n\Delta\Delta^k\Delta^l}{(2\pi i\varepsilon\hbar)^{n/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} g_{ij} \frac{\Delta^i\Delta^j}{2\varepsilon}\right) = g^{-1/2}g^{kl}\,(i\varepsilon\hbar). \tag{П.14}$$

Повторное дифференцирование по g_{ij} с учетом равенства

$$dg^{ij} = -g^{ik}g^{jl}dg_{kl}, \tag{П.15}$$

вытекающего из тривиального тождества $d\,(g^{ik}g_{kj}) = 0$, дает формулу

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n\Delta\Delta^{j_1}\ldots\Delta^{j_{2k}}}{(2\pi i\varepsilon\hbar)^{n/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} g_{ij} \frac{\Delta^i\Delta^j}{2\varepsilon}\right) = \\ = g^{-1/2}\,(i\varepsilon\hbar)^k\,[g^{j_1j_2}\ldots g^{j_{2k-1}j_{2k}} + \text{перест.}]_{(2k-1)!!}, \tag{П.16}$$

эквивалентную с учетом (П.12) формуле (19). Здесь в квадратных скобках стоит сумма всевозможных различных произведений k тензоров g^{ij}, всего $(2k)!/(k!2^k) = (2k-1)!!$ членов.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Определение предэкспоненциального множителя в формуле (12) [7]. Рассмотрим ансамбль частиц, распределенных с постоянной плотностью в фазовом пространстве. Тогда число частиц в бесконечно малом элементе фазового объема

$$dN = Cdp'dq', \quad C = \text{const}. \tag{П.17}$$

Число частиц, в момент t' находившихся в объеме dq', а в момент t — в объеме dq, дается формулой

$$dN = C\det\left|\frac{\partial p'}{\partial q}\right| dq\,dq', \tag{П.18}$$

где p' согласно (136) есть $p'_i = -\partial S\,(q, q')/\partial q'^i$, так как переход $q', p' \to q, p$ есть каноническое преобразование с производящей функцией $S\,(q, q') = -F_1\,(q', q)$.

При квантовомеханическом описании этой задачи разбиваем пространство на ячейки $\Delta q'$ и, полагая, что в каждой ячейке находится одна частица, имеем

$$\psi_t(q) = \int U_{qq'}\psi_{t'}(q')\sqrt{g'}\,dq' \approx U_{qq'}\psi_{t'}(q')\sqrt{g'}\,\Delta q'. \qquad (\text{П}.19)$$

Предполагается, что волновая функция сосредоточена целиком внутри ячейки, а ячейка достаточно мала. Учитывая условие нормировки

$$\int |\psi_{t'}(q')|^2\sqrt{g'}\,dq' \approx |\psi_{t'}(q')|^2\sqrt{g'}\,\Delta q' = 1, \qquad (\text{П}.20)$$

имеем с учетом (П.19):

$$dN = |\psi_t(q)|^2\sqrt{g}\,\Delta q = |U_{qq'}|^2\sqrt{g}\,\Delta q\sqrt{g'}\,\Delta q'. \qquad (\text{П}.21)$$

Сравнивая (П.18) с (П.21), заключаем

$$(gg')^{1/2}|U_{qq'}|^2 = |c|^2\det|-\partial^2 S/\partial q^j\,\partial q'^i| \equiv |c^2|D, \qquad (\text{П}.22)$$

где c — некоторая константа, т. е. $|U_{qq'}| = |c|D^{1/2}(gg')^{-1/4}$.

Постоянная c определяется из условия $U_{qq'}(\varepsilon) \to \delta(q, q')$ при $\varepsilon \to 0$ [5, 8] и равна $(2\pi i\hbar)^{-n/2}$.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

1. Вывод уравнения Шредингера [4, 6]. Найдем уравнение, которому удовлетворяет ядро (12), если лагранжиан имеет вид (9). Нам потребуется уравнение Гамильтона — Якоби [61]

$$\partial S/\partial t + H(\partial S/\partial q,\ q) = 0, \qquad (\text{П}.23)$$

где

$$H = g^{ij}(p_i - A_i)(p_j - A_j)/2 + V, \qquad (\text{П}.24)$$

и закон сохранения

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q^i}\left[g^{ij}\left(\frac{\partial S}{\partial q^i} - A_j\right)D\right] = 0. \qquad (\text{П}.25)$$

Равенство (П.25) выводится элементарно. Обозначим

$$\varphi_{ij} = \frac{\partial^2 S(q, q')}{\partial q^i\,\partial q'^j};\quad \varphi^{jk}\varphi_{ki} = \varphi^{kj}\varphi_{ik} = \delta^j_i \quad (\varphi_{ij} \neq \varphi_{ji}). \qquad (\text{П}.26)$$

Поскольку $D = \det|-\varphi_{ij}|$, из тождества $\ln\det\varphi = \mathrm{Sp}\ln\varphi$ имеем

$$\partial D/\partial t = D\varphi^{ji}\partial\varphi_{ij}/\partial t;\quad \partial D/\partial q^k = D\varphi^{ji}\partial\varphi_{ij}/\partial q^k. \qquad (\text{П}.27)$$

Применяя к уравнению (П.23) оператор $\partial^2/\partial q^i\partial q'^j$, умножая его на φ^{ji} и свертывая, получаем с учетом (П.26), (П.27) равенство (П.25). Для вывода уравнения Шредингера воспользуемся следующими соотношениями:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial U}{\partial t} = \left[\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\hbar}{i}\frac{1}{D}\frac{\partial D}{\partial t}\right]U; \qquad (\text{П}.28)$$

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q^j} - A_j\right)U = \left[\frac{\partial S}{\partial q^j} - A_j + \frac{\hbar}{2i}\frac{1}{Dg^{-1/2}}\frac{\partial}{\partial q^j}(Dg^{-1/2})\right]U; \qquad (\text{П}.29)$$

$$\frac{1}{2\sqrt{g}}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q^i} - A_i\right)\sqrt{g}\,g^{ij}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q^j} - A_j\right)U =$$

$$= \frac{1}{2}g^{ij}[\ ]_i[\ ]_j + \frac{\hbar}{2i\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial q^i}\{\sqrt{g}\,g^{ij}[\ ]_j\}\,U, \qquad (\text{П}.30)$$

где U дается формулой (12) и $[\ ]_j$ обозначено выражение в квадратных скобках из (П.29). Складывая теперь левые и правые части равенств (П.28), (П.30) и добавляя к обеим частям член $V\mathrm{U}$, находим [учитывая, что справа члены, не содержащие $\hbar$ и линейные в $\hbar$, сократятся с учетом, соответственно (П.23) и (П.25)]:

$$\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial t}+\hat{H}\right)\mathrm{U}=-\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{\sqrt{Dg^{-1/2}}}\,\Box\,\sqrt{Dg^{-1/2}}\,\mathrm{U}, \tag{П.31}$$

где

$$\hat{H}=\frac{1}{2\sqrt{g}}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q^i}-A_i\right)\sqrt{g}\,g^{ij}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q^j}-A_j\right)+V. \tag{П.32}$$

Члены в правой части (П.31), пропорциональные $\hbar^2$, Паули [4] называет «*the false terms*», употребляя, однако, кавычки. Их легко вычислить в явном виде. Используя формулы (П.44), (П.5) и пренебрегая членами $O(\Delta)$, находим, что (П.31) можно записать в виде

$$\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial t}+\hat{H}\right)\mathrm{U}=-\frac{\hbar^2 R}{12}\,\mathrm{U}. \tag{П.33}$$

2. Вычисления действия (14). В интеграл (13) следует подставить решение уравнений движения для лагранжиана (9)

$$g_{ij}\ddot{q}^j+[jk,\ i]\,\dot{q}^j\dot{q}^k-F_{ij}\dot{q}^j+V_{,i}=0\quad (F_{ij}=A_{j,\ i}-A_{i,\ j}), \tag{П.34}$$

зависящее от начальных q' и конечных q значений координат. Разложим решение $q(t)$ в ряд по степеням $\Delta=q-q'$. Для этого согласно разложению

$$q(t)=q'+\dot{q}'t+\ddot{q}'t^2/2+\dddot{q}'t^3/6+\cdots \tag{П.35}$$

требуется знать начальные значения производных от q по времени (как оказывается, вплоть до третьего порядка) в виде рядов по степеням Δ. Полагая в в (П.35) $t=\varepsilon$, имеем в низшем порядке по Δ: $\dot{q}'_{(0)}=\Delta/\varepsilon$. Для вычисления $\dot{q}'$ в следующих порядках требуется знать $\ddot{q}',\dddot{q}'$, ... Из уравнений (П.34) находим $\ddot{q}$ как функцию $\dot{q}$. Дифференцируя затем (П.34) по t, находим $\dddot{q}$ как функцию $\ddot{q}$, $\dot{q}$, а значит, учитывая еще раз уравнения движения, как функцию $\dot{q}$. Если найденные значения $\ddot{q}\ (\dot{q}')$ и $\dddot{q}\ (\dot{q}')$ подставить в (П.35), при $t=\varepsilon$, то получится нелинейное соотношение вида $\dot{q}'=(q-q')/\varepsilon+f(\dot{q}',\ \varepsilon)$, которое решается итерациями. В итоге имеем следующие выражения для $\dot{q}'$, $\ddot{q}'$, $\dddot{q}'$ (с требующейся нам точностью):

$$\dot{q}'^j\approx\frac{1}{\varepsilon}\left\{\Delta^j+\frac{1}{2}g^{jn}\left[[ik,\ n]\,\Delta^i\Delta^k+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{1}{3}\left([ik,\ n]_{,\,l}-g^{mm'}[lk,m]\,[in,m']\right)\Delta^i\Delta^k\Delta^l\right]\right\}+\frac{1}{2}g^{ij}F_{ki}\Delta^k; \tag{П.36}$$

$$\ddot{q}'^j\approx-\frac{1}{\varepsilon^2}g^{jk}\,[mn,\ k]\,\{\Delta^m\Delta^n+g^{mm'}\,[il,\ m']\,\Delta^i\Delta^l\Delta^n\}+g^{ij}F_{ik}\frac{\Delta^k}{\varepsilon}; \tag{П.37}$$

$$\dddot{q}'^j\approx-\frac{1}{\varepsilon^3}\{g^{jk}_{,l}\,[mn,k]+g^{jk}\,[mn,k_{,l}]-2g^{jk}\,[in,\ k]\,g^{im'}\,[ml,\ m']\}\,\Delta^m\Delta^n\Delta^l. \tag{П.38}$$

Все функции в правых частях этих формул взяты в точке q'. Имеем далее

$$S(q,\ q')=\int_0^{\varepsilon}L\,dt\approx L_0\varepsilon+\frac{\varepsilon^2}{2}\frac{dL_0}{dt}+\frac{\varepsilon^3}{6}\frac{d^2L_0}{dt^2}. \tag{П.39}$$

Здесь L_0, dL_0/dt, . . . обозначены значения лагранжиана и его полных производных по времени в момент $t = 0$, вычисленных после подстановки в L решения (П.35). Оказывается, что вклад от последнего члена в (П.39), имеющий порядок Δ^4/ε, равен нулю, а вклад от второго есть $(A_{m,n} - A^k[mn, k])\Delta^m\Delta^n/2$, который вместе с вкладом от первого члена [он легко вычисляется с использованием (П.36)] и дает приведенное в тексте действие (14). Это же действие можно получить другим путем, решая уравнение Гамильтона — Якоби (П.23).

3. Вычисление детерминанта D. Согласно определению (П.26) имеем, с учетом (14):

$$\varphi_{ji} \approx -\frac{1}{\varepsilon}\left\{ g_{ij} + [jk, i]\,\Delta^k + \frac{1}{6}\,[[kl, i],_j + [jl, i],_k + [jk, i],_l - g^{mn}([ij, m]\,[kl, n] + [jk, m][il, n]) + [jl, m]\,[ik, n])]\,\Delta^k\Delta^l - \frac{\varepsilon}{2}\,F_{ij}\right\}_{q'} \tag{П.40}$$

(как всегда, выписываем только существенные члены, индекс q' у фигурной скобки означает, что все функции берутся в точке q'). Для вычисления детерминанта тензора $-\varphi_{ji}$ воспользуемся операторной формулой [6]:

$$\det(A+B) = \det A\,\{1 + \mathrm{tr}\,(A^{-1}B) + \frac{1}{2}\,[\mathrm{tr}\,(A^{-1}B)]^2 - \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,(A^{-1}BA^{-1}B) + \ldots\}, \tag{П.41}$$

применяя которую ($A_{ij} \equiv g_{ij}/\varepsilon$), получаем

$$D = \frac{1}{\varepsilon^n}\,g'\left\{1 + \frac{1}{2g'}\,g,_k\Delta^k + \frac{1}{2}\,g^{ij}g^{mn}([jk, i]\,[ml, n] - [jk, m]\,[nl, i])\,\Delta^k\Delta^l + \frac{1}{6}\left[g^{ij}\left(g_{ij,\,kl} + g_{il,\,kj} - \frac{1}{2}\,g_{kl,\,ij}\right) - g^{ij}g^{mn}([ij, m]\,[kl, n] + 2\,[ik, m]\,[jl, n])\right]\Delta^k\Delta^l\right\}. \tag{П.42}$$

Пользуясь разложением

$$g^{1/2} \approx g'^{1/2}\left\{1 + \frac{1}{2g'}\,g,_k\Delta^k + \frac{1}{4}\,[g^{ij}g^{mn}(2\,[jk, i]\,[ml, n] - g_{jn,\,l}g_{im,\,k}) + g^{ij}g_{ij,\,kl}]\,\Delta^k\Delta^l\right\}_{q'}, \tag{П.43}$$

выражение (П.42) можно представить в виде

$$D = \frac{(gg')^{1/2}}{\varepsilon^n}\left[1 + \frac{1}{6}\,R_{kl}\Delta^k\Delta^l\right], \tag{П.44}$$

где R_{kl} — тензор Риччи (П.9). Аргумент тензора в (П.44) несуществен.

ПРИЛОЖЕНИЕ 4

1. Приведем другой вывод формулы (69). В исходной формуле

$$\psi_\varepsilon(r, \varphi) \approx \int_0^\infty\int_0^{2\pi} \frac{r'\,dr'\,d\varphi'}{2\pi i\varepsilon\hbar}\exp\left\{\frac{i}{2\varepsilon\hbar}\,[r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\Delta_\varphi]\right\}\psi_0(r', \varphi') \tag{П.45}$$

воспользуемся разложением [86]

$$\exp(-iz\cos\Delta_\varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(z)\exp[i(\Delta_\varphi + 3\pi/2)\,m] \tag{П.46}$$

и заменим функции Бесселя их асимптотикой ($|z| \to \infty$, $|\arg z| < \pi$)

$$J_m(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left[z - \left(m + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2} + \frac{m^2 - 1/4}{2z}\right] + O(z^{-5/2}); \qquad (\text{П}.47)$$

это представление легко получается из общей формулы, приведенной в [86]. Подставляя (П.46), (П.47) в (П.45) (с учетом того, что $z = rr'/\varepsilon\hbar$), получаем

$$\psi_\varepsilon(r, \varphi) \approx \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{r'\,dr'\,d\varphi'}{2\pi i\varepsilon\hbar} \exp\left[i(r^2 + r'^2)/2\varepsilon\hbar\right] \left(\frac{i\varepsilon\hbar}{2\pi r r'}\right)^{1/2} \times$$

$$\times \exp(im\Delta_\varphi) \left\{\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{rr'}{\varepsilon} + \varepsilon\frac{m^2 - 1/4}{2rr'}\hbar^2\right)\right] -\right.$$

$$\left. - i(-1)^m \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\ldots)\right]\right\} \psi_0(r', \varphi'),$$

откуда, совершая замену переменной интегрирования во втором члене фигурных скобок $r' \to -r'$, находим

$$\psi_\varepsilon(r, \varphi) \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{r'\,dr'}{2\pi i\varepsilon\hbar} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\varphi' \times$$

$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[m\hbar\Delta_\varphi - \varepsilon\frac{(m\hbar)^2 - \hbar^2/4}{2r^2} + \frac{\Delta_r^2}{2\varepsilon}\right]\right\} \sqrt{\frac{i\varepsilon\hbar}{2\pi r r'}}\,\Psi_0(r', \varphi'). \qquad (\text{П}.48)$$

Здесь мы пренебрегли членами порядка $\varepsilon\Delta$; $\Psi_0(r', \varphi')$ определена как $\psi_0(r', \varphi')$ при $r' > 0$ и $\psi_0(-r', \varphi' + \pi)$ при $r' < 0$. Теперь, пользуясь формулой (117), переписываем (П.48) в виде

$$\psi_\varepsilon \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{r'\,dr'}{2\pi i\varepsilon\hbar} \int_{-\infty}^{\infty}\int \frac{dp_\varphi\,d\varphi'}{\hbar} \sqrt{\frac{i\varepsilon\hbar}{2\pi r r'}} \times$$

$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p_\varphi\Delta_\varphi - \varepsilon\frac{p_\varphi^2}{2r^2} + \frac{\Delta_r^2}{2\varepsilon} + \frac{\varepsilon\hbar^2}{8r^2}\right]\right\} \Psi_0(r', \varphi'). \qquad (\text{П}.49)$$

В (П.49) учтена периодичность Ψ_0 по φ'. Интегрируя по p_φ, приходим к формуле (70). Итак, переход к пределу $\varepsilon \to 0$ после применения разложения (П.46) сохраняет периодичность ядра оператора эволюции.

2. **Рецепт [73] в применении к модели из разд.** 4. Покажем, что прямолинейное исключение нефизических переменных в гамильтоновом континуальном интеграле путем подстановки в него соответствующих δ-функций от связей ведет к другому ответу, чем постулат (163). Согласно этому рецепту [73]:

$$\langle q|\hat{U}(t-t')|q'\rangle = \int \prod_t \frac{dq\,dp}{(2\pi\hbar)^{n-S}} \prod_s \delta(\varphi_s)\,\delta(\chi^s) \times$$

$$\times \det\{\chi^s, \varphi_{s'}\} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t} [p_i\dot{q}^i - H(q, p)]\,dt\right\}, \qquad (\text{П}.50)$$

где φ_s — связи первого рода; χ^s — дополнительные условия, обладающие свойствами $\{\chi^s, \chi^{s'}\} = 0$, $\det\{\chi^s, \varphi_{s'}\} \neq 0$.

Применяя (П.50) к модели, рассмотренной в разд. 4 (берем $t - t' = \varepsilon \to 0$), имеем

$$\overline{\Psi}_\varepsilon(r, \varphi) \approx \int \frac{dp_r\, dp_\varphi\, dr'\, d\varphi'}{2\pi\hbar} \times$$
$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p_r(r\cos\Delta_\varphi - r') + p_\varphi \frac{r}{r'}\sin\Delta_\varphi - \right.\right.$$
$$\left.\left. - \varepsilon\left(\frac{p_r^2}{2} + \frac{p_\varphi^2}{2r^2} + V\right)\right]\right\} \delta(\varphi')\,\delta(p_\varphi)\,\psi_0(r', \varphi'), \qquad (\text{П.51})$$

где $\Delta_\varphi = \varphi - \varphi'$. В интеграле (П.51) совершен переход к полярной системе координат: $p_r = (\mathbf{p}, \mathbf{n}'_r)$; $p_\varphi = r'(\mathbf{p}, \mathbf{n}'_\varphi)$; $\mathbf{x} = r'\mathbf{n}'_r$; $\mathbf{x} = r\mathbf{n}_r$; $\mathbf{n}_r$ и $\mathbf{n}_\varphi$ — единичные орты; в качестве дополнительного условия взято $\chi \equiv \varphi' = 0$ (переменные y и π исключены — их присутствие ничего не меняет). Если в (П.51) проинтегрировать по φ', p_φ и в соответствии со смыслом (П.50) положить $\varphi = 0$, то получим

$$\overline{\Psi}_\varepsilon(r) \approx \int \frac{dp_r\, dr'}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p_r\Delta_r - \varepsilon\left(\frac{1}{2}p_r^2 + V\right)\right]\right\}\psi_0(r'). \qquad (\text{П.52})$$

Несложно убедиться, что $\overline{\Psi}_\varepsilon$ подчиняется уравнению Шредингера с гамильтонианом (172), которое отличается от уравнения (169) для физических волновых функций.

ДОБАВЛЕНИЕ

1. Использованный в приложении 4 прием допускает обобщение на случай сферических координат в n-мерном пространстве. При этом в континуальном интеграле по радиальной переменной, по всем угловым переменным и всем импульсам интегрируется в бесконечных пределах, а правило доопределения волновой функции вне физической области в процессе вывода получается автоматически. Это правило также можно задать с помощью оператора Q (см. раздел. 1), так что окончательные формулы имеют вид (51).

2. В практически важном случае, когда связи первого рода образуют алгебру Ли (при этом связи линейны в импульсах и координатах) и если нет проблемы упорядочения в связях, можно указать явный вид гамильтониана $H_{эф}$ в формуле (179). Пусть исключаемые нефизические переменные будут q^s, p_s, а остающиеся физические — q^r, p_r, причем решения связей $\varphi_s = 0$ есть $p_s = f_{sr}(q)\, p_r$. Пусть далее решения дополнительных условий $\chi^s(q) = 0$ есть $q^s = 0$ [функции χ^s не зависят от p и $\{\chi^s, \varphi_{s'}\} = \delta_{s'}{}^s$]. Поскольку $f_{sr}|_{q^s=0} = 0$, казалось бы, ввиду множителя $\Pi\delta(\chi)\,\delta(\varphi)$ под интегралом, в гамильтониане можно просто положить $q^s = p_s = 0$. В действительности равенство $p_s = f_{sr}(q)\, p_r$ выполняется лишь на функциях $\psi_{физ}$, поэтому билинейные по импульсам члены заменяются согласно правилу

$$p_s p_{s'} = p_s f_{s'r} p_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q^s} f_{s'r} p_r + f_{s'r} p_s p_r \qquad (\text{Д.1})$$

и член с производной не исчезает при $q^s \to 0$. С учетом этого обстоятельства гамильтониан (80) заменяется на следующий:

$$\hat{H}^c_{эф} = \hat{H}^c - \frac{i\hbar}{2} g^{ss'} \frac{\partial f_{s'r}}{\partial q^s} \hat{p}_r. \qquad (\text{Д.2})$$

Фигурирующий в (179) гамильтониан получается из $\hat{H}^c_{эф}$ переходом к антистандартному упорядочению. При наличии проблемы упорядочения в связях $H_{эф}$ выглядит несколько сложнее, хотя и в этом случае можно написать явные выражения.

3. Доказательство того, что вид лагранжевых и гамильтоновых правил эквивалентности не меняется при изменении точки разложения, т. е. точки, в которой берутся функции в формулах (22), (84), будет опубликовано отдельно (Вест. ЛГУ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Feynman R.**— Rev. Mod. Phys., 1948, v. 20, p. 367. (Пер. в кн.: Вопросы причинности в квантовой механике. М., Изд-во иностр. лит. 1955, с. 167).
2. **Фейнман Р., Хибс А.** Квантовая механика и интегралы по траекториям. Пер. с англ. М., Мир, 1968.
3. **Дирак П. А. М.** Принципы квантовой механики. Пер. с англ. М., Физматгиз, 1960 (см. § 32).
4. **Pauli W.** Pauli Lectures on Physics. V. 6. MIT Press, 1973.
5. **Morette C.**— Phys. Rev., 1951, v. 81, p. 848.
6. **DeWitt B.**— Rev. Mod. Phys., 1957, v. 29, p. 377.
7. **Van Vleck J.**— Proc. Nat. Acad. Sci., 1928, v. 14, p. 178.
8. **Фок В. А.** Начала квантовой механики. М., Наука, 1976.
9. **Edwards S., Gulyaev Y. V.**— Proc. Roy. Soc. A, 1964, v. 279, p. 229.
10. **McLaughlin D., Schulman L.**— J. Math. Phys., 1971, v. 12, p. 2520.
11. **Gervais J., Jevicki A.**— Nucl. Phys. B, 1976, v. 110, p. 93.
12. **Omote F.**— Nucl. Phys. B, 1977, v. 120, p. 325.
13. **Dowker J. S.**— Ann. Phys., 1971, v. 62, p. 361.
14. **Маринов М. С., Терентьев М. В.**— Ядерная физика, 1978, т. 28, с. 1418.
15. **Marinov M. S., Terentyev M. V.**— Fortschr. Phys., 1979, Bd. 27, S. 511.
16. **Charap J.**— J. Phys. A, 1973, v. 6, p. 393.
17. **Salomonson P.**— Nucl. Phys. B, 1977, v. 121, p. 433.
18. **Cheng K.**— J. Math. Phys., 1972, v. 13, p. 1723.
19. **Маккин Г.** Стохастические интегралы. Пер. с англ. М., Мир, 1972.
20. **Буслаев В. С.**— В кн.: Проблемы математической физики. Вып. 2. Изд-во ЛГУ, 1967, с. 85.
21. **Алимов А. Л., Буслаев В. С.**— Вестн. ЛГУ, 1972, № 1, с. 5.
22. **Feynman R.**— Phys. Rev., 1951, v. 84, p. 108.
23. **Tobocman W.**— Nuovo cimento, 1956, v. 3, p. 1213.
24. **Davies H.**— Proc. Cambridge Philos. Soc., 1963, v. 59, p. 147.
25. **Garrod C.**— Rev. Mod. Phys., 1966, v. 38, p. 483.
26. **Gribov V. N.**— Nucl. Phys. B, 1978, v. 139, p. 1.
27. **Goldstone J., Jackiw R.**— Phys. Lett. B, 1978, v. 74, p. 81.
28. **Изергин А. Г. и др.**— ТМФ, 1979, т. 38, с. 3.
29. **Arthurs A.**— Proc. Roy. Soc. A, 1969, v. 313, p. 445.
30. **Березин Ф. А.**— ТМФ, 1971, т. 6, с. 194.
31. **Прохоров Л. В.**— Ядерная физика, 1982.
32. **Прохоров Л. В.— В кн.**: Проблемы физики высоких энергий и квантовой теории поля. Т. I. III Междунар. семинар. Протвино: ИФВЭ, 1981, с. 103.
33. **Прохоров Л. В.**— Ядерная физика, 1982, т. 35, с. 498.
34. **Гельфанд И. М., Яглом А. М.**— УМН, 1956, т. 11, № 1, с. 77.
35. **Гельфанд И. М., Милнос Р. А., Яглом А. М.**— В кн.: Труды III Всесоюзного математического съезда. Т. 3. М., Изд-во АН СССР, 1958, с. 521.
36. **Далецкий Ю. Л.**— УМН, 1962, т. 17, № 5, с. 3.
37. **Ковальчик И. М.**— УМН, 1963, т. 18, № 1, с. 97.
38. **Streit I.**— Acta phys. austriaca. Suppl. II, 1965, p. 2.
39. **Березин Ф. А.**— УФН, 1980, т. 132, с. 497.
40. **Simon B.** Functional integration and quantum physics. N.-Y., Acad. Press, 1979.
41. **Berry M., Mount K.**— Repts Progr. Phys., 1972, v. 35, p. 315.
42. **Блохинцев Д. И., Барбашов Б. М.**— УФН, 1972, т. 106, с. 593.
43. **DeWitt-Morette C.**— Ann. Inst. Henri Poincaré, 1969, v. 11, p. 153.
44. **Keller J., McLaughlin D.**— Amer. Math. Monthly, 1975, v. 82, p. 475.

45. **DeWitt-Morette C., Macheshwari A., Nelson B.**— Phys. Repts, 1979, v. 50.
46. **Klauder J.**— In: Field Theory and Strong Interactions. Ed. P. Urban. N. Y., Springer-Verlag, 1980, p. 3.
47. **Marinov M. S.**— Phys. Repts, 1980, v. 60, p. 1.
48. **Минлос Р. А.**— Докл. АН СССР, 1958, т. 119, с. 439.
49. **Cameron R. M.**— J. Math. and Phys., 1960, v. 39, p. 126.
50. **Nelson E.**— J. Math. Phys., 1964, v. 5, p. 332.
51. **Евграфов М. А.** — Докл. АН СССР, 1970, т. 191, с. 979.
52. **Алимов А. Л.**— ТМФ, 1972, т. 11, с. 182.
53. **Алимов А. Л.**— ТМФ, 1974, т. 20, с. 302.
54. **Эрдейи А.** Асимптотические разложения. Пер. с англ. М., Физматгиз, 1962.
55. **Janke W., Kleinert H.**— Lett. Nuovo cimento, 1979, v. 25, p. 297.
56. **Прохоров Л. В.**— Вестн. ЛГУ, 1982.
57. **Смирнов В. И.** Курс высшей математики. Т. 5. М., Физматгиз, 1959.
58. **Moshinsky M., Seligman T.**— Ann. Phys., 1978, v. 114, p. 243; 1979, v. 120, p. 402.
59. **Deenen J., Moshinsky M., Seligman T.**— Ann. Phys., 1980, v. 127, p. 257.
60. **Мессиа А.** Квантовая механика. Т. 1. М., Наука, 1978, с. 335.
61. **Голдстейн Г.** Классическая механика. Пер. с англ. М., Гостехтеориздат, 1957.
62. **Васильев А. Н.** Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. Л., Изд-во ЛГУ, 1976.
63. **Далецкий Ю. Л.** Докл. АН СССР, 1961, т. 141, с. 1290.
64. **Крылов В. Ю.**— Докл. АН СССР, 1965, т. 163, с. 289.
65. **Дирак П. А. М.** Лекции по квантовой механике. Пер. с англ. М., Мир, 1968.
66. **Bergmann P.**— Rev. Mod. Phys., 1961, v. 33, p. 510.
67. **Maskawa T., Nakajima H.**— Progr. Theor. Phys., 1976, v. 56, p. 1295.
68. **Christ N. H., Lee T. D.**— Phys. Rev. D., 1980, v. 22, p. 939.
69. **Прохоров Л. В.**— Ядерная физика, 1982, т. 35, с. 229.
70. **Lovelace C.** Preprint Rutgers Univ. RU-80-244, 1980.
71. **Dirac P. A. M.**— В кн.: Доклад на симпозиуме «Современная физика», Триест, июнь, 1968 (ссылка из работы [73]).
72. **Tudron T. N.** Preprint COO-3533-156, SU-4217-156, 1979.
73. **Фаддеев Л. Д.**— ТМФ, 1969, т. 1, с. 3.
74. **Коноплева Н. П., Попов В. Н.** Калибровочные поля. М., Атомиздат, 1972.
75. **Попов В. Н.** Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике. М., Атомиздат, 1976.
76. **Славнов А. А., Фаддеев Л. Д.** Введение в квантовую теорию калибровочных полей. М., Наука, 1978.
77. **Senjanovic P.**— Ann. Phys., 1976, v. 100, p. 227.
78. **Beresin F. A.**— Comm. Math. Phys., 1978, v. 63, p. 131.
79. **Choquard P.**— Helv. Phys. Acta, 1955, v. 28, p. 89.
80. **Славнов А. А.**— ТМФ, 1975, т. 22, р. 177.
81. **Zinn-Justin J.** Lecture Notes in Physics. V. 37. Springer-Verlag, 1975, p. 2.
82. **Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В.** Введение в теорию квантованных полей. М., Наука, 1976.
83. **Новожилов Ю. В., Тулуб А. В.**— УФН, 1957, т. 61, с. 53.
84. **Dowker I. S., Mayes I. W.**— Nucl. Phys. B., 1971, v. 29, p. 259.
85. **Suzuki T., Hattori C.**— Progr. Theor. Phys., 1972, v. 47, p. 1722.
86. **Справочник** по специальным функциям. Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. Пер. с англ. М., Наука, 1979.
87. **Langouche F., Roekaerts D., Tirapegui E.**— Phys. Rev. D., 1979, v. 20, p. 419.
88. **Фрадкин Е. С.**— В кн.: Проблемы теоретической физики. М., Наука, 1972, с. 147.