ทฤษฎีการอินทิเกรตตามเส้นทางเบื้องต้น
(Introduction to path integral theory)

ดร. นิคม ชูศิริ

ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์

บทคัดย่อ

ได้แสดงแนวคิดของฟายน์แมนในการคำนวณตัวแผ่กระจาย (propagator) โดยอาศัยความคิดที่ว่าเส้นทางเดินของอนุภาคมีได้มากมายนอกเหนือจากเส้นทางแบบฉบับ (classical path) ตัวแผ่กระจายเป็นผลรวมของอำ พนของความน่าจะเป็น (probability amplitude) ของทุกเส้นทางที่เป็นไปได้ทั้งหมดและด้วยการเปลี่ยนการรวมอำพนเป็นการอินทิเกรตแทน ทำให้ฟายน์แมนสามารถคำนวณตัวแผ่กระจายได้ จากตัวแผ่กระจายที่ได้สามารถนำเราไปสู่ฟังก์ชันคลื่น (wave function) และพลังงานของระบบได้

abstract

The method of Feynman in evaluationg the particle propagator is reviewed. According to Feynman's ideas, apart from classical path, there are many possible paths of a particle to go from point a to point b in a given time interval. The propagator is the summation of the probability amplitude of all possible paths. By replacing the summation with integration the calculation can be done. Furthermore, the obtained propagator also leads to the wave functions and energy of the system.

1. บทนำ

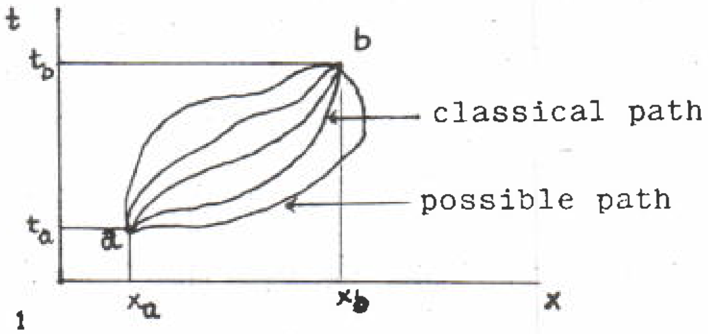
เป็นที่ทราบกันดีว่ากลศาสตร์ควอนตัมแบบใหม่ได้ถือกำเนิดขึ้นครั้งแรกจากการค้นพบของนักวิทยาศาสตร์ชาวเยอรมันชื่อไฮเซนเบอร์กในปี 1925 ไฮเซนเบอร์กได้อาศัยหลักการคล้องจอง (The correspondence principle) และได้อาศัยคณิตศาสตร์แบบใหม่ที่เรียกว่าเมตริกซ์เข้าช่วยในการแก้ปัญหาทำให้เกิดวิชากลศาสตร์ควอนตัมแบบใหม่เรียกว่า กลศาสตร์เมตริกซ์ (matrix mechanics) หลังจากนั้นเพียงเล็กน้อยในปีเดียวกันที่ประเทศสวิสเซอร์-แลนด์มีนักวิทยาศาสตร์ชื่อโชร์ดิงเจอร์ได้นำความคิดของเดอบรอยล์ (ความคิดที่ว่าสสารเป็นได้ทั้งคลื่นและอนุภาค) ไปเขียนเป็นสมการคลื่นนำไปประยุกต์กับปัญหาต่าง ๆ ปรากฏว่าได้ผลเป็นอย่างดี ทฤษฎีของโชร์ดิงเจอร์ก่อให้เกิดกลศาสตร์ควอนตัมแบบใหม่เรียกว่ากลศาสตร์เชิงคลื่น (wave mechanics) กลศาสตร์ทั้งสองแบบที่กล่าวข้างต้นแม้จะให้ผลตรงกับการทดลองเป็นอย่างดีแต่คณิตศาสตร์ที่ใช้ในการคำนวณปริมาณต่าง ๆ นั้นมีลักษณะแตกต่างจากคณิตศาสตร์ที่ใช้ในกลศาสตร์แบบฉบับ (classical mechanics) โดยสิ้นเชิง ปริมาณต่าง ๆ ในฟิสิกส์แบบฉบับถูกแทนด้วยตัวดำเนินการ (operator) แทนที่จะเป็นตัวเลขธรรมดาซึ่งเป็นสิ่งที่เข้าใจได้ค่อนข้างยาก ดังนั้นจึง

มีนักฟิสิกส์จำนวนไม่น้อยที่ได้พยายามคิดค้นกลศาสตร์โดยใช้คณิตศาสตร์ที่มีพร้อมอยู่แล้วในกลศาสตร์แบบฉบับโดยพยายามละทิ้งการใช้ตัวดำเนินการและหันมาใช้ความคิดในกลศาสตร์แบบฉบับแทนผู้ที่สำเร็จในการสร้างกลศาสตร์ควอนตัมในแนวนี้คือฟายน์แมน (Feynman) ในปี 1948 เขาเสนอกลศาสตร์ควอนตัมในรูปแบบของการอินทิเกรตตามเส้นทาง (path integration) ซึ่งสามารถพิสูจน์ได้ว่าให้ผลเหมือนกับกลศาสตร์เชิงคลื่นของโชร์ดิง เจอร์ทุกประการ

2. ทฤษฎีการอินทิเกรตตามเส้นทาง

ฟายน์แมนสังเกตว่าถ้าเราต้องการศึกษาพฤติกรรมของอิเลคตรอนเราอาจใช้วิธีการของโชร์ดิงเจอร์เพื่อคำนวณหาอำพนของความน่าจะเป็น (wave function) ของอิเลกตรอนที่ประพฤติตัวเป็นคลื่น แต่จากการวิเคราะห์ปัญหาเกี่ยวกับธรรมชาติของการเป็นไปได้ทั้งคลื่นและอนุภาคแสดงว่าอำพนของคลื่นอิเลกตรอนนั้นอาจคำนวณได้โดยถือว่าอิเลกตรอนเป็นอนุภาค

พิจารณาอนุภาคตัวหนึ่งเคลื่อนที่จากจุด a ณ เวลา t_a ไปยังจุด b ณ เวลา t_b (เพื่อความสะดวกพิจารณาการเคลื่อนที่ในหนึ่งมิติ) ในกลศาสตร์แบบฉบับเราสามารถบอกตำแหน่งของอนุภาคที่เวลาใด ๆ ได้ นั่นคือเราทราบเส้นทางที่แน่นอนของอนุภาคซึ่งมีอยู่เพียงเส้นทางเดียว แต่ในทางควอนตัมเราไม่สามารถบอกตำแหน่งของอนุภาคได้แน่นอนบอกได้เพียงโอกาสของความน่าจะเป็นเท่านั้น ฟายน์แมนพบว่าเส้นทางการเคลื่อนของอนุภาคมีได้มากมายหลายเส้นทางนอกเหนือจากเส้นทางแบบฉบับ (classical path) ดังรูปที่ 1



รูปที่ 1

นอกจากนั้นฟายน์แมนยังพบว่าอำพนของความน่าจะเป็น (probability amplitude) ของแต่ละเส้นทางมีขนาดเท่ากันต่างกันเฉพาะเฟสเท่านั้น และสามารถเขียนอยู่ในรูป

$$\Phi\,[x(t)] = (\text{const.}) \exp\left[\ S\,[x(t)]\ \right] \qquad (1)$$

$$\text{โดยที่}\quad S = \int^{t_b} L\,(x, \dot{x}, t)\,dt, \qquad (2)$$

$$\text{และ}\quad L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2} m\dot{x}^2 - v\,(x, t), \qquad (3)$$

คือแอคชัน (action) และลากรางเกียน (lagrangian) ตามลำดับ ฟายน์แมนได้นิยามอำพนของความน่าจะเป็นของอนุภาคที่เคลื่อนที่จากจุด a ณ เวลา t_a ไปยังจุด b ณ เวลา t_b ดังนี้

$$K(b,a) = \langle x_b, t_b, x_a, t_a \rangle = [X(t)]$$

ทุกเส้นทางจาก a b

$$= (\text{const}) \exp [\ S\ [(x(t)] \qquad (4)$$

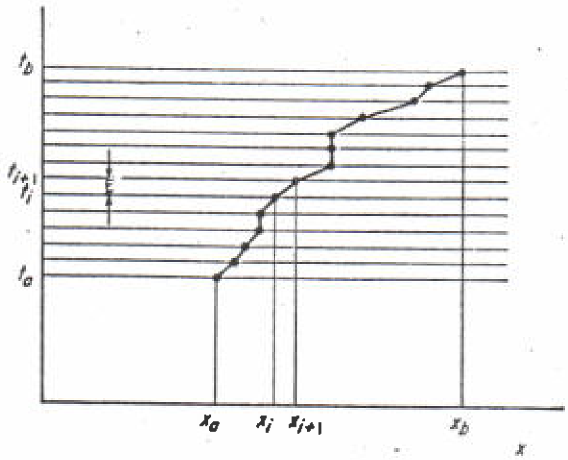
ทุกเส้นทางจาก a $\longrightarrow$ b

และเรียกอำพนนี้ว่าตัวแผ่กระจาย (propagator or transition amplitude) เนื่องจากจำนวนเส้นทางที่เป็นไปได้ทั้งหมดมีค่าเป็นอนันต์การรวมอำพนใน (4) จึงเป็นเรื่องยุ่งยากมากเพื่อแก้ปัญหานี้ฟายน์แมนได้เปลี่ยนการบวกใน (4) เป็นการอินทิเกรตแทนวิธีการมีดังนี้

แบ่งช่วงเวลาจาก t_a ถึง t_b ออกเป็นช่วงเล็ก ๆ กว้างเท่ากันเป็นจำนวน N ช่วงโดยที่

$$t_n - t_{n-1} = t_{n-1} - t_{n-2} = \dots = t_i - t_{i-1}$$
$$= t_2 - t_1 = t_1 - t_0 = \varepsilon \quad ,$$
$$N\varepsilon = t_b - t_a \,,\; t_0 = t_a \,,\; t_n = t_b \,,\; X(t_0) = X_a \text{ และ } X(t_n) = X_b$$

โดยการแบ่งเช่นนี้ทำให้เราได้เวลาเป็นชุด t_i ที่มีระยะห่างเท่ากันคือ ε แต่ละ t_i เราอาจเลือก x_i ที่คล้องจองกับ t_i หนึ่งจุด โดยการเชื่อมโยงจุดเหล่านั้นด้วยเส้นตรง เราก็จะได้ทางเดินของอนุภาคหนึ่งเส้นทาง ดังรูปที่ 2



ในการเดินทางของอนุภาคจากจุด x_i ไปยังจุด x_{i+1} ซึ่งเป็นช่วงสั้น ๆ อำพนของความน่าจะเป็นคือ

$$K(X_{i+1},X_i) = \frac{1}{A}\exp\left[\frac{i}{\hbar} S[X_{i+1},X_i]\right]$$

$$= \frac{1}{A}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_{i+1}} L(X,\dot{X},t)\,dt\right]$$

$$= \frac{1}{A}\exp\left[\frac{i}{\hbar} L\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\varepsilon},\frac{x_{i+1}+x_i}{2},\frac{t_{i+1}+t_i}{2}\right)\varepsilon\right] \qquad (5)$$

อำพนของความน่าจะเป็นในการเดินทางของอนุภาคจากจุด a ณ เวลา t_a ไปยังจุด b ณ เวลา t_b โดยใช้เส้นทางดังรูปที่ 2 (เส้นทางที่สร้างขึ้นมา) หาได้จากการคูณกันของอำพนย่อยในช่วงสั้น ๆ ทั้งหมด นั่นคือ

$$\underset{a\rightarrow b}{\Phi}[X(t)] = K(X_N,X_{N-1})K(X_{N-1},X_{N-2})\dots K(X_i,X_{i-1})\dots K(X_2,X_1)K(X_1,X_0)$$

$$= \prod_{i=1}^{N-1} K(X_{i+1},X_i) \qquad (6)$$

จากรูปที่ 2 จะเห็นว่ายกเว้น $x(t_0) = x_a$ และ $x(t_N) = x_b$ ซึ่งเป็นจุดปลายและคงที่แล้ว $x(t_i) = x_i$ ใด ๆ ในช่วงเวลาดังกล่าวจะแปรค่าได้ตั้งแต่ $-\infty$ ถึง ∞ ขึ้นอยู่กับเส้นทางที่เลือก ดังนั้นผลรวมของอำพนจากแต่ละเส้นทางซึ่งมีจำนวนเป็นอนันต์สามารถหาได้จากการอินทิเกรตสมการ(6) กล่าวคือ

$$K(b,a) = \sum_{a\to b} \Phi[X(t)] = \lim_{\varepsilon\to 0} \iint\dots\int \prod_{i=1}^{N-1} K(X_{i+1},X_i)dx_1 dx_2 \dots dx_i \dots dx_{N-2} dx_{N-1}$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0} \iint\dots\int \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^{N-1} L\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\varepsilon}, \frac{x_{i+1}+x_i}{2}, \frac{t_{i+1}+t_i}{2}\right)\right] \frac{dx_1}{A}\frac{dx_2}{A}\dots\frac{dx_{N-1}}{A} \qquad (7)$$

โดยที่ A คือตัวประกอบแบบอย่าง (normalizing factor) พบว่ามีค่าเป็น $\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$ สมการ (7) นิยามเขียนให้อยู่ในรูปที่กระทัดรัดกว่าดังนี้

$$K(b,a) = \int_a^b \exp\left[\frac{i}{\hbar} S[b,a]\right] \quad D[X(t)] \qquad (8)$$

ซึ่งเป็นที่รู้จักกันในนามของอินทิเกรตตามเส้นทาง (path integration)

3. ตัวแผ่กระจาย, ฟังก์ชันคลื่นและพลังงาน

พิจารณาสมการ 8

$$K(b,a) = \int_a^b \exp\left[\frac{i}{\hbar} S[b,a]\right] \quad D[X(t)] \qquad (9)$$

เนื่องจาก $S[b,a] = \int_{t_a}^{t_b} L(X, \dot{X}, t)dt$ จากคุณสมบัติของการอินทิเกรตเราสามารถแบ่งการอินทิเกรตออกเป็นสองส่วนได้กล่าวคือ

$$S[b,a] = \int_{t_a}^{t_b} Ldt = \int_{t_a}^{t_c} Ldt + \int_{t_c}^{t_b} Ldt$$

$$= S[b,c] + S[c,a] \qquad (10)$$

จากสมการ (9) และ (10) จะได้ว่า

$$K(b,a) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_c^b \exp\left[\frac{i}{\hbar} S[b,c]\right] D[X(t)] \quad \exp\left[\frac{i}{\hbar} S[c,a]\right] D[X(t)]dx_c$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} K(b,c)\, K(c,a)\, dx_c \qquad (11)$$

สูตรนี้เสมือนกับว่าอนุภาคเคลื่อนที่จากจุด a ถึง b จะเท่ากับอนุภาคเคลื่อนที่จาก a ถึง c แล้วจาก c ถึง b อำพนของอนุภาคที่เคลื่อนที่จาก a ถึง b จะเท่ากับผลคูณของอำพนแต่ละช่วงของการเดินทาง อำพนรวมทั้งหมดของอนุภาคที่เคลื่อนที่จาก a ถึง b จึงได้จากการอินทิเกรตตัวแปร X_c กล่าวคือ

$$K(a \rightarrow c \rightarrow b) = K(b,c)K(c,a)$$

$$K(a \rightarrow b) = \int_{-\infty}^{\infty} K(b,c)K(c,a)\ dx_c \qquad (12)$$

ในกรณีที่เราไม่สนใจว่าอนุภาคเริ่มต้นมาจากตำแหน่งใด (X_a อาจจะมาจากตำแหน่งใด ๆ ก็ได้) k(b,a) ก็จะกลายเป็นอำพนของความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคที่ตำแหน่ง X_b ณ เวลา t_b อำพนอันนี้ก็คือฟังก์ชันคลื่นนั่นเอง

$$K(b,a) = K(X_b,t_b,X_a,t_a) \xrightarrow[(X_a,t_a)]{\text{ไม่สนใจต้นกำเนิด}} \psi(X_b,t_b)$$

ดังนั้นจากสมการ (11) หรือ (12) ถ้าไม่สนใจตำแหน่งเริ่มต้น (X_a,t_a) จะได้

$$\Psi(X_b,t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} K((X_b,t_b;X_c,t_c)\psi(X_c,t_c)\ dx_c \qquad (13)$$

สรุปได้ว่าถ้าเราทราบฟังก์ชันคลื่น ณ เวลา t_c และทราบรูปแบบของตัวแผ่กระจายเราก็สามารถหาฟังก์ชันคลื่น ณ เวลา t ใด ๆ ได้ โดยที่ $t > t_c$

พิจารณาระบบคงที่ (stationary system) ใด ๆ แฮมิลโทเนียนของระบบไม่ขึ้นกับเวลาอย่างชัดแจ้ง คำตอบของสมการโชร์ดิงเจอร์,

$$H\psi(X,t) = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\psi(X,t), \qquad (14)$$

จะอยู่ในรูป

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(x) \qquad (15)$$

โดยที่ $$C_n = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,t)\ \psi_n^*(x)e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}\ dx \qquad (16)$$

แทนค่า C_n ลงใน (15) จะได้

:

$$\psi(x,t) = \sum_n \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x',t')\ \psi_n^*(x')e^{\frac{i}{\hbar}E_n t'}\ dx'\psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\sum_n \psi(x)\ \psi_n^*(x')e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t')}\ \psi_n(x',t')dx' \qquad (17)$$

เปรียบเทียบสมการ (17) กับ (13) จะได้ว่า

$$K(x,t;x',t') = \sum_n \Psi_n(x)\ \Psi_n^*(x')e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t')} \qquad (18)$$

จะเห็นว่าตัวแผ่กระจาย K(x,t;x',t') จะให้ความรู้แก่เราเกี่ยวกับฟังก์ชันคลื่นและพลังงานพร้อมกัน

4. สรุป

ตามความคิดของฟายน์แมน เส้นทางเดินของอนุภาคมีได้มากมายนอกเหนือจากเส้นทางแบบฉบับ ตัวแผ่กระจาย (propagator) สามารถหาได้จากผลรวมของอำพนย่อยของทุกเส้นทาง แต่ด้วยวิธีการอันชาญฉลาดเขาสามารถเปลี่ยนการรวม (summation) เป็นอินทิเกรตแทนซึ่งในทางปฏิบัติทำให้เราสามารถคำนวณตัวแผ่กระจายได้ (จะแสดงการคำนวณในโอกาสต่อไป) ตัวแผ่กระจายนี้มีความคล้ายคลึงกับฟังก์ชันคลื่นมากต่างกันเพียงฟังก์ชันคลื่นไม่ได้กำหนดจุดเริ่มต้นเท่านั้นแสดงว่าตัวแผ่กระจายให้รายละเอียดเกี่ยวกับอนุภาคมากกว่า พร้อมกันนี้ตัวแผ่กระจายยังได้ซ่อนฟังก์ชันคลื่นและพลังงานไว้ด้วยดังสมการ (18) ดังนั้นถ้าทราบตัวแผ่กระจายก็เท่ากับทราบทุกอย่างเกี่ยวกับระบบอย่างไรก็ตามทฤษฎีของฟายน์แมนปัจจุบันก็ยังมีอุปสรรคอยู่พอสมควรทั้งนี้เนื่องจากยังเป็นทฤษฎีใหม่คณิตศาสตร์ที่ใช้ยังอยู่ในระหว่างการพัฒนา

เอกสารอ้างอิง

1. Feynman, R.P. and Hibbs, A.R., 1965. Quantum Mechanics and Path Integral. Mc Graw-Hill Book Company. 365 p

2. วิรุฬห์ สายคณิต. 2525. ทฤษฎีควอนตัม. สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย.