

1

基础知识

路径积分可以处理涨落的类线状结构，这样的结构在自然界中以多种方式出现，例如连续时空中的粒子轨道，溶液中的聚合物，超流体中的涡线，晶体和液晶中的缺损线。它们的涨落可以来自量子力学、热力学或统计学。路径积分是描述这类波动类线结构的理想工具，并由此导致对众多不同物理现象的统一理解。在发展这一方法时，我们将不断援引经典力学、量子力学和统计物理中众所周知的概念，本章将给出这些概念的一个摘要。在1.13节中，我们将强调带曲率和挠率空间中算符量子力学的一些重要问题，这些问题将在第10章和第8章中通过路径积分的方法求解。¹

1.1 经典力学

经典力学系统的轨道由一组含时的广义坐标 $q_1(t), \dots, q_N(t)$ 描述。拉格朗日量

$$L(q_i, \dot{q}_i, t) \quad (1.1)$$

控制着系统的动力学，依赖 q_1, \dots, q_N 和相应的速度 $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N$ 。字符上的点表示对时间的导数 d/dt 。拉格朗日量最多可为 \dot{q}_i 的二次函数。拉格朗日量沿任一路径 $q_i(t)$ 对时间的积分

$$\mathcal{A}[q_i] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(q_i(t), \dot{q}_i(t), t) \quad (1.2)$$

称为这一路径上的作用量。被系统实际选择的路径，称为经典路径或者经典轨道 $q_i^{\text{cl}}(t)$ ，是时间的函数，与邻近的路径相比，这一路径可以使作用量取极值。邻近经典轨道的路径可以表示为

$$q_i(t) = q_i^{\text{cl}}(t) + \delta q_i(t) \quad (1.3)$$

端点与经典路径相同，为 $q(t_b), q(t_a)$ 。为了表述经典路径的极值性质，我们引入作用量的变分，即 $\mathcal{A}[q_i]$ 按 $\delta q_i(t)$ 的幂次做泰勒展开的线性项：

$$\delta \mathcal{A}[q_i] \equiv \{\mathcal{A}[q_i + \delta q_i] - \mathcal{A}[q_i]\}_{\text{lin term in } \delta q_i} . \quad (1.4)$$

¹熟悉这些基础知识的读者可直接从1.13节开始阅读。

经典力学的极值原理意味着对经典轨道附近的所有路径变分，都有

$$\delta \mathcal{A}[q_i] \Big|_{q_i(t)=q_i^{\text{cl}}(t)} = 0 \quad (1.5)$$

其中，路径的变分定义为 $\delta q_i(t) \equiv q_i(t) - q_i^{\text{cl}}(t)$ ，在端点处为0，即满足

$$\delta q_i(t_a) = \delta q_i(t_b) = 0. \quad (1.6)$$

由于作用量是拉格朗日量对时间的积分，这一极值性质可以用微分方程表示。直接计算 $\mathcal{A}[q_i]$ 的变分：

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A}[q_i] &= \{\mathcal{A}[q_i + \delta q_i] - \mathcal{A}[q_i]\}_{\text{lin}} \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt \{L(q_i(t) + \delta q_i(t), \dot{q}_i(t) + \delta \dot{q}_i(t), t) - L(q_i(t), \dot{q}_i(t), t)\}_{\text{lin}} \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i(t) \right\} \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right\} \delta q_i(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i(t) \Big|_{t_a}^{t_b}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

最后一项来自 $\delta \dot{q}_i$ 的分部积分。本书中，重复指标意味着求和（爱因斯坦的求和约定）。由于(1.6)式，可以舍弃 t 等于 t_a 和 t_b 处的端点项（表面项或者边界项）。因此，我们可以得出经典轨道 $q_i^{\text{cl}}(t)$ 的欧拉-拉格朗日方程：

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}. \quad (1.8)$$

此外，经典动力学还有另一种形式，基于拉格朗日量的勒让德变换函数-哈密顿量

$$H \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t). \quad (1.9)$$

其在任意时刻的值都等于系统的能量。根据勒让德变换的一般理论[1]， H 依赖的变量不再是 q_i 和 \dot{q}_i ，而是 q_i 和广义动量 p_i ，而后者可以由 N 个方程定义：

$$p_i \equiv \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(q_i, \dot{q}_i, t). \quad (1.10)$$

为了用合适的变量 p_i, q_i 表示哈密顿量 $H(p_i, q_i, t)$ ，必须对 \dot{q}_i 求解方程(1.10)，

$$\dot{q}_i = v_i(p_i, q_i, t). \quad (1.11)$$

如果海森度规 (*Hessian metric*)

$$H_{ij}(q_i, \dot{q}_i, t) \equiv \frac{\partial^2}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} L(q_i, \dot{q}_i, t) \quad (1.12)$$

非奇异，则可以进行这种求解。将结果带入(1.9)式，就得到了以 p_i 和 q_i 为变量的哈密顿量：

$$H(p_i, q_i, t) = p_i v_i(p_i, q_i, t) - L(q_i, v_i(p_i, q_i, t), t). \quad (1.13)$$

应用哈密顿量，作用量可以表述为 $p_i(t)$ 和 $q_i(t)$ 的泛函：

$$\mathcal{A}[p_i, q_i] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[p_i(t) \dot{q}_i(t) - H(p_i(t), q_i(t), t) \right]. \quad (1.14)$$

这就是所谓的作用量的正则形式。现在，经典运动轨道可以由 $p_i^{\text{cl}}(t)$, $q_i^{\text{cl}}(t)$ 指定。与邻近的路径相比，这类经典轨道可以使作用量取极值。当然，我们要求这些邻近路径的坐标 $q_i(t)$ 在固定端点间变化（详见(1.3), (1.6)），而对动量则没有限制：

$$\begin{aligned} q_i(t) &= q_i^{\text{cl}}(t) + \delta q_i(t), & \delta q_i(t_a) = \delta q_i(t_b) = 0, \\ p_i(t) &= p_i^{\text{cl}}(t) + \delta p_i(t). \end{aligned} \quad (1.15)$$

一般地，作用量的变分为

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A}[p_i, q_i] &= \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\delta p_i(t) \dot{q}_i(t) + p_i(t) \delta \dot{q}_i(t) - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i \right] \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \left[\dot{q}_i(t) - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right] \delta p_i - \left[\dot{p}_i(t) + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right] \delta q_i \right\} \\ &\quad + p_i(t) \delta q_i(t) \Big|_{t_a}^{t_b}. \end{aligned} \quad (1.16)$$

对经典轨道，这样的变分为零，进而可以发现 $p_i^{\text{cl}}(t), q_i^{\text{cl}}(t)$ 必须是下列哈密顿运动方程的解：

$$\begin{aligned} \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \\ \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

通过(1.9)式和(1.10)式，容易验证哈密顿方程与欧拉-拉格朗日方程(1.8)相符，所有的 p_i 和 q_i 构成了 $2N$ 维空间，称为相空间。

任意函数 $O(p_i(t), q_i(t), t)$ 沿着任意路径的改变有如下表示：

$$\frac{d}{dt} O(p_i(t), q_i(t), t) = \frac{\partial O}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial O}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial O}{\partial t}. \quad (1.18)$$

如果这条路径与经典轨道重合，可以将(1.17)式代入，进而发现

$$\begin{aligned} \frac{dO}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial O}{\partial q_i} - \frac{\partial O}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial O}{\partial t} \\ &\equiv \{H, O\} + \frac{\partial O}{\partial t}. \end{aligned} \quad (1.19)$$

这里引入了符号 $\{\dots, \dots\}$ ，称为泊松括号，定义为：

$$\{A, B\} \equiv \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} - \frac{\partial B}{\partial p_i} \frac{\partial A}{\partial q_i}, \quad (1.20)$$

再次强调，重复指标 i 意味着求和。泊松括号有明显的性质

$$\{A, B\} = -\{B, A\} \quad \text{反对称,} \quad (1.21)$$

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0 \quad \text{雅可比恒等式.} \quad (1.22)$$

如果两个量的泊松括号为零，则称它们为可对易量。

哈密顿方程是(1.19)式的特殊形式：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} p_i &= \{H, p_i\} = \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial p_i}{\partial q_j} - \frac{\partial p_i}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \\ \frac{d}{dt} q_i &= \{H, q_i\} = \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial q_i}{\partial q_j} - \frac{\partial q_i}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{\partial H}{\partial p_i}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

通过定义，相空间变量 p_i, q_i 满足下列泊松括号关系

$$\begin{aligned} \{p_i, q_j\} &= \delta_{ij}, \\ \{p_i, p_j\} &= 0, \\ \{q_i, q_j\} &= 0'' \end{aligned} \quad (1.24)$$

如果函数 $O(p_i, q_i)$ 不明显含时，并且与 H 对易(即 $\{O, H\} = 0$)，根据(1.19)式， $O(p_i, q_i)$ 不随时间变化，称之为经典路径上的运动常数。特别是哈密顿量 H ，通常不含时，即函数形式为

$$H = H(p_i, q_i). \quad (1.25)$$

而且与自身对易，所以能量是运动常数。

拉格朗日形式的一个特点是不依赖坐标 q_i 的选取。令 Q_i 为描述系统的任一其它组坐标，与 q_i 通过局域²或点变换相联系

$$q_i = f_i(Q_j, t). \quad (1.26)$$

实际上要求这种变换关系可逆，至少在经典路径的邻域内可逆，

$$Q_i = f^{-1}_i(q_j, t). \quad (1.27)$$

否则 Q_i 和 q_i 不能同时参数化同一个系统。因此 f_i 必须有非零的雅可比行列式：

$$\det \left(\frac{\partial f_i}{\partial Q_j} \right) \neq 0. \quad (1.28)$$

²这里的局域意味着特定的时间，而场论中的局域通常是指特定的时间-空间点。

初始的拉格朗日量可以用 Q_i 表示为

$$L' (Q_j, \dot{Q}_j, t) \equiv L (f_i(Q_j, t), \dot{f}_i(Q_j, t), t) \quad (1.29)$$

而作用量为

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \int_{t_a}^{t_b} dt L' (Q_j(t), \dot{Q}_j(t), t) \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt L (f_i(Q_j(t), t), \dot{f}_i(Q_j(t), t), t). \end{aligned} \quad (1.30)$$

在第一个表达式中进行变分 $\delta Q_j(t)$, $\delta \dot{Q}_j(t)$, 并保持 $\delta Q_j(t_a) = \delta Q_j(t_b) = 0$, 得到运动方程

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L'}{\partial \dot{Q}_j} - \frac{\partial L'}{\partial Q_j} = 0. \quad (1.31)$$

另一方面, 下面一个表达式的变分可以给出

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A} &= \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta f_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{f}_i \right) \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta f_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta f_i \Big|_{t_a}^{t_b}. \end{aligned} \quad (1.32)$$

如果 δq_i 是任意的, 那么 δf_i 同样也是。而且, 考虑到 $\delta q_i(t_a) = \delta q_i(t_b) = 0$, δf_i 也同样在端点处为零。因此, 与 $q_i(t)$ 的拉格朗日方程一样, $Q_j(t)$ 的方程也同样可以保证作用量取极值。

需要注意, 对于广义动量 $\dot{q}_i(t)$ 的变换, 局域性性质是相当强的约束, 要求它们必须线性依赖 \dot{Q}_j :

$$\dot{q}_i = \dot{f}_i(Q_j, t) = \frac{\partial f_i}{\partial Q_j} \dot{Q}_j + \frac{\partial f_i}{\partial t}. \quad (1.33)$$

在相空间中, 也存在将正则坐标 p_i, q_i 变换为新坐标 P_j, Q_j 的可能性。新旧坐标可以通过如下变换联系

$$\begin{aligned} p_i &= p_i(P_j, Q_j, t), \\ q_i &= q_i(P_j, Q_j, t), \end{aligned} \quad (1.34)$$

逆变换为

$$\begin{aligned} P_j &= P_j(p_i, q_i, t), \\ Q_j &= Q_j(p_i, q_i, t). \end{aligned} \quad (1.35)$$

尽管如此, 当欧拉-拉格朗日方程 在坐标的任意局域改变中保持不变时, 任意变换后坐标 $P_j(t), Q_j(t)$ 的哈密顿方程通常不再成立。使哈密顿方程仍然成立的局域变换 $p_i(t), q_i(t) \rightarrow P_j(t), Q_j(t)$ 称为正则变换。精确到任意表面项, 这类变换可以使作用量的形式保持不变,

$$\begin{aligned} \int_{t_a}^{t_b} dt [p_i \dot{q}_i - H(p_i, q_i, t)] &= \int_{t_a}^{t_b} dt [P_j \dot{Q}_j - H'(P_j, Q_j, t)] \\ &\quad + F(P_j, Q_j, t) \Big|_{t_a}^{t_b}, \end{aligned} \quad (1.36)$$

这里的 $H'(P_j, Q_j, t)$ 是某个新的哈密顿量。对连接相同端点的任一路径 $p_i(t), q_i(t)$, 至少是经典轨道邻域内的路径, $H'(P_j, Q_j, t)$ 与 $H(p_i, q_i, t)$ 的联系必须使作用量保持不变。如果这样的不变性存在, 作用量的变分可以给出 $P_j(t)$ 和 $Q_j(t)$ 的哈密顿运动方程:

$$\begin{aligned}\dot{P}_i &= -\frac{\partial H'}{\partial Q_i}, \\ \dot{Q}_i &= \frac{\partial H'}{\partial P_i}.\end{aligned}\tag{1.37}$$

重新将(1.36)式左边的积分用新变量 $P_j(t), Q_j(t)$ 表示, 不变性(1.36)可以有不同的表示

$$\int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ p_i \left(\frac{\partial q_i}{\partial P_j} \dot{P}_j + \frac{\partial q_i}{\partial Q_j} \dot{Q}_j + \frac{\partial q_i}{\partial t} \right) - H(p_i(P_j, Q_j, t), q_i(P_j, Q_j, t), t) \right\}, \tag{1.38}$$

从(1.36)右边减去该项, 可得

$$\begin{aligned}\int_{t_a}^{t_b} \left\{ \left(P_j - p_i \frac{\partial q_i}{\partial Q_j} \right) dQ_j - p_i \frac{\partial q_i}{\partial P_j} dP_j \right. \\ \left. - \left(H' + p_i \frac{\partial q_i}{\partial t} - H \right) dt \right\} = -F(P_j, Q_j, t) \Big|_{t_a}^{t_b}.\end{aligned}\tag{1.39}$$

现在的积分是 $(2N + 1)$ 维空间中曲线上的积分, 该空间由 $2N$ 维相空间变量 p_i, q_i 和时间 t 组成。上式右边只依赖于端点。因此可以推断, 左手边的积分中一定有全微分的形式, 也必须满足标准的施瓦茨可积条件[2], 根据这一条件, 所有的二次导数与求导的次序无关。这些条件可以表示为

$$\begin{aligned}\frac{\partial p_i}{\partial P_k} \frac{\partial q_i}{\partial Q_l} - \frac{\partial q_i}{\partial P_k} \frac{\partial p_i}{\partial Q_l} &= \delta_{kl}, \\ \frac{\partial p_i}{\partial P_k} \frac{\partial q_i}{\partial P_l} - \frac{\partial q_i}{\partial P_k} \frac{\partial p_i}{\partial P_l} &= 0, \\ \frac{\partial p_i}{\partial Q_k} \frac{\partial q_i}{\partial Q_l} - \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \frac{\partial p_i}{\partial Q_l} &= 0,\end{aligned}\tag{1.40}$$

和

$$\begin{aligned}\frac{\partial p_i}{\partial t} \frac{\partial q_i}{\partial P_l} - \frac{\partial q_i}{\partial t} \frac{\partial p_i}{\partial P_l} &= \frac{\partial(H' - H)}{\partial P_l}, \\ \frac{\partial p_i}{\partial t} \frac{\partial q_i}{\partial Q_l} - \frac{\partial q_i}{\partial t} \frac{\partial p_i}{\partial Q_l} &= \frac{\partial(H' - H)}{\partial Q_l}.\end{aligned}\tag{1.41}$$

前三个等式定义了所谓的拉格朗日括号, 上面的条件可以用这种符号表示为

$$\begin{aligned}(P_k, Q_l) &= \delta_{kl}, \\ (P_k, P_l) &= 0, \\ (Q_k, Q_l) &= 0.\end{aligned}\tag{1.42}$$

满足这些等式的含时坐标变换称为辛 (*symplectic*) 变换。经过一些涉及到矩阵求导的代数运算之后

$$J = \begin{pmatrix} \partial P_i / \partial p_j & \partial P_i / \partial q_j \\ \partial Q_i / \partial p_j & \partial Q_i / \partial q_j \end{pmatrix}, \quad (1.43)$$

它的逆矩阵

$$J^{-1} = \begin{pmatrix} \partial p_i / \partial P_j & \partial p_i / \partial Q_j \\ \partial q_i / \partial P_j & \partial q_i / \partial Q_j \end{pmatrix}, \quad (1.44)$$

其辛单位矩阵为

$$E = \begin{pmatrix} 0 & \delta_{ij} \\ -\delta_{ij} & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.45)$$

我们发现拉格朗日括号(1.42)等价于泊松括号

$$\begin{aligned} \{P_k, Q_l\} &= \delta_{kl}, \\ \{P_k, P_l\} &= 0, \\ \{Q_k, Q_l\} &= 0. \end{aligned} \quad (1.46)$$

这是由于形成自拉格朗日括号的 $2N \times 2N$ 矩阵

$$\mathcal{L} \equiv \begin{pmatrix} -(Q_i, P_j) & -(Q_i, Q_j) \\ (P_i, P_j) & (P_i, Q_j) \end{pmatrix} \quad (1.47)$$

可以写成 $(E^{-1} J^{-1} E)^T J^{-1}$, 而形成自泊松括号的类似矩阵

$$\mathcal{P} \equiv \begin{pmatrix} \{P_i, Q_j\} & -\{P_i, P_j\} \\ \{Q_i, Q_j\} & -\{Q_i, P_j\} \end{pmatrix} \quad (1.48)$$

则等于 $J(E^{-1} JE)^T$ 。因此有 $\mathcal{L} = \mathcal{P}^{-1}$, 所以等式(1.42)与(1.46)彼此等价。需要注意, 拉格朗日括号(1.42)要保证 $p_i \dot{q}_i - P_j \dot{Q}_j$ 是 $2N$ 维相空间中 P_j 和 Q_j 的某个函数的全微分, 泊松括号(1.46)也是如此:

$$p_i \dot{q}_i - P_j \dot{Q}_j = \frac{d}{dt} G(P_j, Q_j, t). \quad (1.49)$$

与原有相空间变量 p_i, q_i 的泊松括号(1.24)相比, P_i, Q_i 的泊松括号(1.46)有着一样的形式。

另外两个方程(1.41)联系着新旧哈密顿量。它们总是可以用于从 $H(p_i, q_i, t)$ 到 $H'(P_j, Q_j, t)$ 的构建。因此, 拉格朗日括号(1.42)或泊松括号(1.46)成为变换 $p_i, q_i \rightarrow P_j, Q_j$ 是否为正则变换的充要条件。

正则变换使相空间的体积保持不变, 这是由于矩阵乘积 $J(E^{-1} JE)^T$ 等于 $2N \times 2N$ 单位矩阵(1.48)。因此有 $\det(J) = \pm 1$, 进而

$$\prod_i \int [dp_i dq_i] = \prod_j \int [dP_j dQ_j]. \quad (1.50)$$

很明显，正则变换的过程是自反的。意味着可以从相反的方向看，交换 p_i, q_i 和 P_j, Q_j 的地位[即我们可以将(1.39)的被积函数视为 P_j, Q_j, t 空间中的全微分]。

一旦系统可以用新的正则坐标 P_j, Q_j 描述，引入新的泊松括号

$$\{A, B\}' \equiv \frac{\partial A}{\partial P_j} \frac{\partial B}{\partial Q_j} - \frac{\partial B}{\partial P_j} \frac{\partial A}{\partial Q_j}, \quad (1.51)$$

而通过与(1.19)式进行类比，任一可观测量 $O(P_j(t), Q_j(t), t)$ 的运动方程变为

$$\frac{dO}{dt} = \{H', O\}' + \frac{\partial O}{\partial t}, \quad (1.52)$$

新的泊松括号自动保证了正则对易规则

$$\begin{aligned} \{P_i, Q_j\}' &= \delta_{ij}, \\ \{P_i, P_j\}' &= 0, \\ \{Q_i, Q_j\}' &= 0. \end{aligned} \quad (1.53)$$

正则变换的标准类可以通过引入生成函数 F 进行构建，生成函数需要满足如式(1.36)的一类关系，但需要同时显含旧的和新的正则坐标，例如

$$F = F(q_i, Q_j, t). \quad (1.54)$$

现在可以考虑方程

$$\int_{t_a}^{t_b} dt [p_i \dot{q}_i - H(p_i, q_i, t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[P_j \dot{Q}_j - H'(P_j, Q_j, t) + \frac{d}{dt} F(q_i, Q_j, t) \right], \quad (1.55)$$

用 $-\dot{P}_j Q_j + \frac{d}{dt} P_j Q_j$ 替换 $P_j \dot{Q}_j$ ，定义

$$F(q_i, P_j, t) \equiv F(q_i, Q_j, t) + P_j Q_j,$$

并且进行微分运算，可以得到

$$\begin{aligned} &\int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ p_i \dot{q}_i + \dot{P}_j Q_j - [H(p_i, q_i, t) - H'(P_j, Q_j, t)] \right\} \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{\partial F}{\partial q_i}(q_i, P_j, t) \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial P_j}(q_i, P_j, t) \dot{P}_j + \frac{\partial F}{\partial t}(q_i, P_j, t) \right\}. \end{aligned} \quad (1.56)$$

对比上式左右两边，可以得到正则变换的方程

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial}{\partial q_i} F(q_i, P_j, t), \\ Q_j &= \frac{\partial}{\partial P_j} F(q_i, P_j, t). \end{aligned} \quad (1.57)$$

第二个方程表明 $F(q_i, P_j, t)$ 和 $F(q_i, Q_j, t)$ 的关系相当于勒让德变换。

新哈密顿量为

$$H'(P_j, Q_j, t) = H(p_i, q_i, t) + \frac{\partial}{\partial t} F(q_i, P_j, t). \quad (1.58)$$

当然，除(1.54)式外，我们还可以选择带有其它变量的函数，如 $F(q_i, P_j, t), F(p_i, Q_j, t), F(p_i, P_j, t)$ ，生成简单的正则变换。

如果选取的生成函数 $F(q_i, P_j)$ 可以导致不含时的动量 $P_j \equiv \alpha_j$ ，那么由此可以产生特别重要的正则变换。具有此性质的坐标 Q_j 称为循环坐标。为了找到循环坐标，我们必须寻找可以使(1.58)式中 H' 为零的生成函数 $F(q_j, P_j, t)$ 。所有对坐标的导数都为零，而且新动量 P_j 为平庸的常数。因此我们寻找如下方程的解

$$\frac{\partial}{\partial t} F(q_i, P_j, t) = -H(p_i, q_i, t), \quad (1.59)$$

这里哈密顿量中的动量变量遵循(1.57)的第一个方程。这导致了 $F(q_i, P_j, t)$ 的偏微分方程：

$$\partial_t F(q_i, P_j, t) = -H(\partial_{q_i} F(q_i, P_j, t), q_i, t), \quad (1.60)$$

称为哈密顿-雅可比方程。这里及以后，我们将经常应用偏导数的简写形式 $\partial_t \equiv \partial/\partial t$, $\partial_{q_i} \equiv \partial/\partial q_i$ 。

能够实现这一目标的生成函数可以由作用量泛函(1.14)提供。当沿着经典解（从固定的起点开始，直到 t 时刻可能的终点）前进时，与这些解相联系的作用量形成了函数 $A(q_i, t)$ 。从表达式(1.14)可以看出，如果粒子沿经典轨迹运动，在不固定端点的情况下，路径会变化，作用量的改变可以看做端点位置(1.16)的函数，表示为

$$\delta A[p_i, q_i] = p_i(t_b)\delta q_i(t_b) - p_i(t_a)\delta q_i(t_a). \quad (1.61)$$

从这里，我们可以立刻推出方程组(1.57)中的第一式，对于生成函数 $A(q_i, t)$ ，有：

$$p_i = \frac{\partial}{\partial q_i} A(q_i, t). \quad (1.62)$$

而且函数 $A(q_i, t)$ 有时间导数

$$\frac{d}{dt} A(q_i(t), t) = p_i(t)\dot{q}_i(t) - H(p_i(t), q_i(t), t). \quad (1.63)$$

与(1.62)式结合，可以得出

$$\partial_t A(q_i, t) = -H(p_i, q_i, t). \quad (1.64)$$

如果将等式右边的动量 p_i 按(1.62)式进行替换，则 $A(q_i, t)$ 可以视为哈密顿-雅可比微分方程的解：

$$\partial_t A(q_i, t) = -H(\partial_{q_i} A(q_i, t), q_i, t). \quad (1.65)$$

1.2 弯曲时空的相对论力学

在弯曲四维时空中，相对论性的无自旋点粒子的经典作用量通常可以写成如下积分形式

$$\mathcal{A} = -Mc^2 \int d\tau L(q, \dot{q}) = -Mc^2 \int d\tau \sqrt{g_{\mu\nu} \dot{q}^\mu(\tau) \dot{q}^\nu(\tau)}, \quad (1.66)$$

其中 τ 是粒子轨迹的任意参数，最终轨迹中选取合适的 τ 可以使 $L(q, \dot{q}) \equiv 1$ ，这种情况下它恰好为粒子的固有时间（proper time）。对任意的 τ ，欧拉-拉格朗日方程 (1.8) 可以写为

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{1}{L(q, \dot{q})} g_{\mu\nu} \dot{q}^\nu \right] = \frac{1}{2L(q, \dot{q})} (\partial_\mu g_{\kappa\lambda}) \dot{q}^\kappa \dot{q}^\lambda. \quad (1.67)$$

如果 τ 是使得 $L(q, \dot{q}) \equiv 1$ 的固有时间，上式可以简化为

$$\frac{d}{dt} (g_{\mu\nu} \dot{q}^\nu) = \frac{1}{2} (\partial_\mu g_{\kappa\lambda}) \dot{q}^\kappa \dot{q}^\lambda, \quad (1.68)$$

或者

$$g_{\mu\nu} \ddot{q}^\nu = \left(\frac{1}{2} \partial_\mu g_{\kappa\lambda} - \partial_\lambda g_{\mu\kappa} \right) \dot{q}^\kappa \dot{q}^\lambda. \quad (1.69)$$

为简单起见，我们用符号 ∂_μ 表示偏微分 $\partial/\partial q^\mu$ 。我们规定这里的偏微分只作用于其右侧的量。引入克里斯托弗符号（Christoffel symbol）

$$\bar{\Gamma}_{\lambda\nu\mu} \equiv \frac{1}{2} (\partial_\lambda g_{\nu\mu} + \partial_\nu g_{\lambda\mu} - \partial_\mu g_{\lambda\nu}), \quad (1.70)$$

和第二种克里斯托弗符号³

$$\bar{\Gamma}_{\kappa\nu}{}^\mu \equiv g^{\mu\sigma} \bar{\Gamma}_{\kappa\nu\sigma}. \quad (1.71)$$

(1.69)式可以写为

$$\ddot{q}^\mu + \bar{\Gamma}_{\kappa\lambda}{}^\mu \dot{q}^\kappa \dot{q}^\lambda = 0. \quad (1.72)$$

这个方程的解可以使时空中曲线的长度取最小值，所以称之为测地线。

1.3 量子力学

历史上，为了理解原子轨道和离散原子光谱，需要将经典力学扩展至量子力学。人们意识到这些现象反映了在足够小的尺度下，电子等微观粒子会体现波的性质，即物质波。在不增加波的频率，或者说能量的前提下，无法将波塞入任意小的体积内，正是这一事实使得电子不会坠入原子核，而在经典力学中，这是可能发生的。如同空腔中的电磁驻波，原子势阱中的物质驻波体现为原子中电子态的离散性。

³ 在很多教科书中，例如温伯格，*引力与宇宙学*, Wiley, New York, 1972, (1.70)式中上指标和第三个指标位于第一位位置。本书沿用J.A. Schouten, *Ricci Calculus*, Springer, Berlin, 1954. It will allow for a closer analogy with gauge fields in the construction of the Riemann tensor as a covariant curl of the Christoffel symbol in Chapter 10. 参见H. Kleinert, *Gauge Fields in Condensed Matter*, Vol. II *Stresses and Defects*, World Scientific Publishing Co., Singapore 1989, pp. 744-1443 (<http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/b2>).

1.3.1 Bragg反射和干涉

微观粒子波动性质最直观的体现就是周期结构上的衍射实验，例如电子被晶体衍射。如果动量为 \mathbf{p} 的电子束穿过晶体，大多数粒子会沿着某个特定的角度出射，这就是著名的Bragg反射。这与电磁波的干涉图样非常相似。事实上，可以用与电磁学中相同的数学框架解释这些图样。一个自由粒子携带动量

$$\mathbf{p} = (p^1, p^2, \dots, p^D). \quad (1.73)$$

穿过由笛卡尔坐标矢量

$$\mathbf{x} = (x^1, x^2, \dots, x^D) \quad (1.74)$$

张开的 D 维欧式空间。这样的粒子可以被当做平面波，它的场强或者波函数形式如下

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega t}, \quad (1.75)$$

其中 \mathbf{k} 为指向 \mathbf{p} 方向的波矢， ω 为波的频率。每一个散射中心，例如在 \mathbf{x}' 点，成为球面波的源，球面波的空间行为可以表示为 e^{ikR}/R (其中 $R \equiv |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ ， $k \equiv |\mathbf{k}|$)，波长为 $\lambda = 2\pi/k$ 。在探测器处，所有场强加在一起得到总场强 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 。总场强的模平方 $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$ 正比于到达探测器的电子数。

可以搭建标准实验，使这些规则得到最简单的应用，实验中电子束垂直入射到带有两个平行狭缝的屏幕上，两条狭缝间距为 d 。在屏幕后方很远的距离 R 处，可以观测到单位时间内到达的电子数。(见图. 1.1)

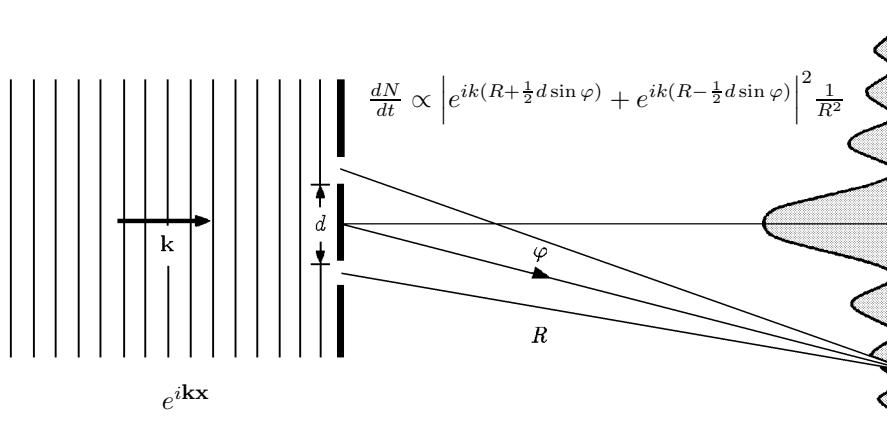


Figure 1.1 双缝后的粒子概率分布，正比于两个复场强之和的模平方。

$$\frac{dN}{dt} \propto |\Psi_1 + \Psi_2|^2 \approx \left| e^{ik(R+\frac{1}{2}d \sin \varphi)} + e^{ik(R-\frac{1}{2}d \sin \varphi)} \right|^2 \frac{1}{R^2}, \quad (1.76)$$

其中 φ 是偏离入射方向的角度。

常规上，为了描述单个粒子的行为，波函数 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 需要正规化（归一化）。波函数的模平方直接给出粒子在空间位置 \mathbf{x} 处出现的几率密度，即 $d^3x |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$ 为在 \mathbf{x} 附近的空间元 d^3x 内发现粒子的几率。

1.3.2 物质波

从实验上观测到的动量与衍射粒子束角度偏转 φ 之间的关系，可以推出动量和波矢的关系为

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad (1.77)$$

其中的 \hbar 为普适的普朗克常数，其量纲与作用量的量纲相同，

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.0545919(80) \times 10^{-27} \text{ erg sec} \quad (1.78)$$

(括号里的数字表示最后两位数字的实验不确定性)。波 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 的频率和能量之间也有类似的关系。这个关系可以由一个吸收过程确定，该过程中光波撞击电子并将电子撞出金属表面，这就是著名的光电效应。从这一效应的阈值性质，可以看出时间上按 $e^{-i\omega t}$ 振荡的电磁波可以向电子传递能量

$$E = \hbar\omega, \quad (1.79)$$

这里的比例常数 \hbar 与(1.77)式中相同。原因在于电磁波的性质，一方面频率 ω 和波矢 \mathbf{k} 满足关系式 $\omega/c = |\mathbf{k}|$ ，其中 c 为光速，其值为 $c \equiv 299\,792.458 \text{ km/s}$ 。另一方面，能量和动量通过关系式 $E/c = |\mathbf{p}|$ 相联系。因此，电磁波的量子，即光子满足(1.77)式，且常数 \hbar 一定与等式(1.79)中的相同。

物质波和光子都满足相同的关系式(1.77)，可以推测能量和频率间的关系式(1.79)应该对所有的粒子波成立，无论有质量还是无质量的粒子。动量为 \mathbf{p} 的自由粒子可以用平面波表示，波长为 $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}| = 2\pi\hbar/|\mathbf{p}|$ ，平面波可以表示为

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) = \mathcal{N} e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x} - E_{\mathbf{p}}t)/\hbar}, \quad (1.80)$$

其中的 \mathcal{N} 为归一化常数。在有限体积内，波函数需要归一化。在无限体积内，归一化使波函数消失。为了避免这点，粒子几率的流密度

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \equiv -i \frac{\hbar}{2m} \psi^*(\mathbf{x}, t) \overleftrightarrow{\nabla} \psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.81)$$

用某种方便的方式归一化，其中 符号 $\overleftrightarrow{\nabla}$ 表示向左求导和向右求导之差，即

$$\begin{aligned} \psi^*(\mathbf{x}, t) \overleftrightarrow{\nabla} \psi(\mathbf{x}, t) &\equiv \psi^*(\mathbf{x}, t) \overrightarrow{\nabla} \psi(\mathbf{x}, t) - \psi^*(\mathbf{x}, t) \overleftarrow{\nabla} \psi(\mathbf{x}, t) \\ &\equiv \psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \psi(\mathbf{x}, t) - [\nabla \psi^*(\mathbf{x}, t)] \psi(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (1.82)$$

能量 $E_{\mathbf{p}}$ 通过经典方式依赖粒子的动量，即对非相对论性、质量为 M 的物质粒子，有 $E_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/2M$ ；对相对论性粒子，有 $E_{\mathbf{p}} = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + M^2c^2}$ ；对光子等无质量粒子，有 $E_{\mathbf{p}} = c|\mathbf{p}|$ 。为了保证量子力学中的能量守恒，光子和物质波的关系式 $E_{\mathbf{p}} = \hbar\omega$ 必不可少。

一般来说，粒子的能量和动量并不按平面波函数(1.80)定义为某些确定的值。粒子波通常是若干平面波(1.80)的某种叠加

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x} - E_{\mathbf{p}}t)/\hbar}. \quad (1.83)$$

由傅里叶逆变换定理 (Fourier inversion theorem) , 可以通过计算以下积分得到 $f(\mathbf{p})$,

$$f(\mathbf{p}) = \int d^3x e^{-i\mathbf{px}/\hbar} \Psi(\mathbf{x}, 0). \quad (1.84)$$

通过选择合适的 $f(\mathbf{p})$ 就可以在某个初始时间 (比如 $t = 0$) , 以任意想要的方式制备 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 。例如, 要求 $\Psi(\mathbf{x}, 0)$ 是主要集中在空间点 $\bar{\mathbf{x}}$ 附近的函数, 那么 $f(\mathbf{p})$ 就近似为纯相位 $f(\mathbf{p}) \sim e^{-i\mathbf{p}\bar{\mathbf{x}}/\hbar}$, 并且波中以相同几率包含所有的动量。反之, 如果粒子振幅在全空间中散布, 则动量的分布就会局限在一个小的区域内。趋于极限时, $f(\mathbf{p})$ 就集中在一个特定的动量 $\bar{\mathbf{p}}$, 这时的粒子在空间中以相同几率分布在每一点, 它的振幅按 $\Psi(\mathbf{x}, t) \sim e^{i(\bar{\mathbf{p}}\mathbf{x}-E_{\bar{\mathbf{p}}}t)/\hbar}$ 振荡。

一般地, $\Psi(\mathbf{x}, 0)$ 在空间中的宽度和 $f(\mathbf{p})$ 在动量空间中的宽度彼此成反比:

$$\Delta\mathbf{x} \Delta\mathbf{p} \sim \hbar. \quad (1.85)$$

这就是海森堡的测不准原理 (Heisenberg's principle of uncertainty) 。如果波位于一个有限空间区域内, 同时其平均动量可以相当好地定义, 则称之为波包。等式(1.83)表明, 相关几率密度最大值的运动速度为

$$\bar{\mathbf{v}} = \partial E_{\bar{\mathbf{p}}} / \partial \bar{\mathbf{p}}. \quad (1.86)$$

这恰好为经典粒子的动量 $\bar{\mathbf{p}}$ 。

1.3.3 薛定谔方程

现在假定我们要研究的粒子是非相对论性的, 且质量为 M 。经典哈密顿量和能量 $E_{\mathbf{p}}$ 为

$$H(\mathbf{p}) = E_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2M}. \quad (1.87)$$

由此我们可以推导出波 $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t)$ 的恒等式:

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{p}) [H(\mathbf{p}) - E_{\mathbf{p}}] e^{i(\mathbf{px}-E_{\mathbf{p}}t)/\hbar} = 0. \quad (1.88)$$

积分中括号内变量的 \mathbf{p} 和 $E_{\mathbf{p}}$ 等效于下述微分算符

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}} &= -i\hbar\nabla, \\ \hat{E} &= i\hbar\partial_t \end{aligned} \quad (1.89)$$

所以等式(1.88)可以写成微分方程

$$[H(-i\hbar\nabla) - i\hbar\partial_t] \Psi(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (1.90)$$

这就是自由粒子波函数的薛定谔方程。

对任意哈密顿量 $H(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$, 可将方程(1.90)推广为

$$(\hat{H} - i\hbar\partial_t) \Psi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (1.91)$$

其中 \hat{H} 是微分算符

$$\hat{H} \equiv H(-i\hbar\nabla, \mathbf{x}, t). \quad (1.92)$$

做替换 $\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, 即可从经典哈密顿量 $H(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$ 出发得到算符 \hat{H} , 这一规则称为对应原理。⁴ 在1.13节至1.15节, 我们将看到这一简单的对应原理只在笛卡尔坐标中成立。

与 \mathbf{x} 和 t 一起, 能量和动量的薛定谔算符(1.89)满足所谓的正则对易关系

$$[\hat{p}_i, x_j] = -i\hbar, \quad [\hat{E}, t] = 0 = i\hbar. \quad (1.93)$$

如果哈密顿量不显含时间, 能量本征态 $\Psi_{E_n}(\mathbf{x}, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \Psi_{E_n}(\mathbf{x})$ 可以张开一个厄米空间, 其中 $\Psi_{E_n}(\mathbf{x})$ 是不依赖于时间的定态, 是不含时薛定谔方程的解

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{x}) \Psi_{E_n}(\mathbf{x}) = E_n \Psi_{E_n}(\mathbf{x}). \quad (1.94)$$

薛定谔理论(1.91)的正确性已经被实验确定, 尤其是对库伦哈密顿量

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} - \frac{e^2}{r}, \quad (1.95)$$

这样的哈密顿量在电子和质子的质心系中主导着氢原子的量子力学性质, 其中的 M 是两个粒子的约化质量。

由于波函数的模平方 $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$ 被解释为有限体积内单个粒子的几率密度, 对其进行整个空间上的积分, 结果必然为1:

$$\int d^3x |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 1. \quad (1.96)$$

对于稳定粒子, 归一化必须在任何时候都成立。只有当哈密顿算符为厄米时⁵, 即对任意波函数 Ψ_1, Ψ_2 , 等式

$$\int d^3x [\hat{H}\Psi_2(\mathbf{x}, t)]^* \Psi_1(\mathbf{x}, t) = \int d^3x \Psi_2^*(\mathbf{x}, t) \hat{H} \Psi_1(\mathbf{x}, t). \quad (1.97)$$

成立时, $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 才遵循薛定谔方程(1.91)。等式左边定义了算符 \hat{H} 的厄米共轭算符 \hat{H}^\dagger , 对任意波函数 $\Psi_1(\mathbf{x}, t), \Psi_2(\mathbf{x}, t)$, 等式

$$\int d^3x \Psi_2^*(\mathbf{x}, t) \hat{H}^\dagger \Psi_1(\mathbf{x}, t) \equiv \int d^3x [\hat{H}\Psi_2(\mathbf{x}, t)]^* \Psi_1(\mathbf{x}, t) \quad (1.98)$$

⁴Our formulation of this principle is slightly stronger than the historical one used in the initial phase of quantum mechanics, which gave certain translation rules between classical and quantum-mechanical relations. The substitution rule for the momentum runs also under the name *Jordan rule*.

⁵Problems arising from unboundedness or discontinuities of the Hamiltonian and other quantum-mechanical operators, such as restrictions of the domains of definition, are ignored here since they are well understood. Correspondingly we do not distinguish between Hermitian and self-adjoint operators (see J. v. Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Springer, Berlin, 1932). Some quantum-mechanical operator subtleties will manifest themselves in this book as problems of path integration to be solved in Chapter 12. The precise relationship between the two calls for further detailed investigations.

都成立。如果算符 \hat{H} 与其厄米共轭算符 \hat{H}^\dagger 相等：

$$\hat{H} = \hat{H}^\dagger. \quad (1.99)$$

则称之为厄米算符。任意两个波函数乘积的积分为 $\int d^3x \Psi_2^*(\mathbf{x}, t) \Psi_1(\mathbf{x}, t)$ ，我们考察其随时间的变化。由薛定谔方程 (1.91) 可以看出，只要 \hat{H} 为厄米算符，上面的积分就不随时间变化：

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{d}{dt} \int d^3x \Psi_2^*(\mathbf{x}, t) \Psi_1(\mathbf{x}, t) \\ &= \int d^3x \Psi_2^*(\mathbf{x}, t) \hat{H} \Psi_1(\mathbf{x}, t) - \int d^3x [\hat{H} \Psi_2(\mathbf{x}, t)]^* \Psi_1(\mathbf{x}, t) = 0. \end{aligned} \quad (1.100)$$

这也意味着存在不依赖时间的归一化积分 $\int d^3x |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 1$ 。

反之，如果 \hat{H} 不是厄米算符，则总可以找到 \hat{H} 的一个本征态，其模随着时间改变： $(H - H^\dagger)/i$ 的任意本征态都有此性质。

$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ 和 \mathbf{x} 本身即为厄米算符，如果 \hat{H} 只有动能和势能项组成，则 \hat{H} 也为厄米算符：

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) = T(\mathbf{p}, t) + V(\mathbf{x}, t). \quad (1.101)$$

对于笛卡尔坐标中的非相对论性粒子，通常就是这种情况。如果 \mathbf{p} 和 \mathbf{x} 同时出现在 H 的同一项中，例如 $\mathbf{p}^2 \mathbf{x}^2$ ，对应原理不会导致唯一的量子力学算符 \hat{H} 。那么在这样的例子中，原则上似乎可以通过两个 $\hat{\mathbf{p}}$ 算符和两个 $\hat{\mathbf{x}}$ 算符的乘积构建若干厄米算符[例如 $\alpha \hat{\mathbf{p}}^2 \hat{\mathbf{x}}^2 + \beta \hat{\mathbf{x}}^2 \hat{\mathbf{p}}^2 + \gamma \hat{\mathbf{p}} \hat{\mathbf{x}}^2 \hat{\mathbf{p}}$ ，其中 $\alpha + \beta + \gamma = 1$]，它们都对应于同一个经典量 $\mathbf{p}^2 \mathbf{x}^2$ 。看起来只有通过与实验的对比才能选择正确的算符次序，这被称为量子力学的算符排序问题，过去曾困扰了很多研究者。如果排序问题由粒子运动空间的几何引起，那么就会存在一个极为简单的几何原理，用以指定物理上正确的次序。为了避免混淆，在第10章处理这个问题之前，如果不特加说明，我们将假设 $H(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$ 具有如(1.101)式的标准形式。

1.3.4 粒子流守恒

总几率守恒(1.96)是更一般的局域守恒定律的结果，这个局域守恒定律将粒子几率的流密度

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \equiv -i \frac{\hbar}{2m} \psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.102)$$

与几率密度

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \psi^*(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.103)$$

通过关系式

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \quad (1.104)$$

联系起来。在体积 V (表面为 S) 上对流守恒定律积分，应用格林定理，可以发现

$$\int_V d^3x \partial_t \rho(\mathbf{x}, t) = - \int_V d^3x \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = - \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t), \quad (1.105)$$

其中 $d\mathbf{S}$ 是无穷小的表面元。这个等式表明一个空间内几率的减少量，等于从其表面通过流 $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ 的流出量。

将积分(1.105)扩展到全空间，并假设流在无穷远处为零，则可以重新得到整体几率守恒(1.96)。

欧式空间中含有 N 个粒子的更一般的动力学系统，可以通过 $3N$ 个笛卡尔坐标 \mathbf{x}_ν ($\nu = 1, \dots, N$) 参数化。哈密顿量的形式如下

$$H(\mathbf{p}_\nu, \mathbf{x}_\nu, t) = \sum_{\nu=1}^N \frac{\mathbf{p}_\nu^2}{2M_\nu} + V(\mathbf{x}_\nu, t), \quad (1.106)$$

其中 H 和 V 中的变量 $\mathbf{p}_\nu, \mathbf{x}_\nu$ 表示全部的 $\mathbf{p}_\nu, \mathbf{x}_\nu, \nu = 1, 2, 3, \dots, N$ 。波函数 $\Psi(\mathbf{x}_\nu, t)$ 满足 N 粒子的薛定谔方程

$$\left\{ -\sum_{\nu=1}^N \left[\frac{\hbar^2}{2M_\nu} \partial_{\mathbf{x}_\nu}^2 + V(\mathbf{x}_\nu, t) \right] \right\} \Psi(\mathbf{x}_\nu, t) = i\hbar \partial_t \Psi(\mathbf{x}_\nu, t). \quad (1.107)$$

1.4 狄拉克的左矢和右矢

从数学的角度，波函数 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 可以看作是无限维复矢量空间，即希尔伯特空间中的矢量。位形空间变量 \mathbf{x} 可以看做希尔伯特空间中矢量的连续“指标”。通常， D 维矢量 \mathbf{v} 可以通过其分量 v_i 表示，下标为 $i = 1, \dots, D$ ，类似地，可以将 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 中的变量 \mathbf{x} 写成下标：

$$\Psi(\mathbf{x}, t) \equiv \Psi_{\mathbf{x}}(t). \quad (1.108)$$

复矢量的模 (norm) 定义为

$$|\mathbf{v}|^2 = \sum_i v_i^* v_i. \quad (1.109)$$

这一定义对于连续的指标可以扩展为

$$|\Psi|^2 = \int d^3x \Psi_{\mathbf{x}}^*(t) \Psi_{\mathbf{x}}(t) = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t). \quad (1.110)$$

归一化条件(1.96)要求波函数 $|\Psi| = 1$ ，即 Ψ 为希尔伯特空间中的单位矢量。

1.4.1 基本变换

矢量空间中，可以有很多方式选取正交基矢量 $b_i^a, a = 1, \dots, D$ ，应用这些基矢量可以将矢量写为⁶

$$v_i = \sum_a b_i^a v_a, \quad (1.111)$$

分量 v_a 由标量积给出

$$v_a \equiv \sum_i b_i^{a*} v_i. \quad (1.112)$$

⁶数学家会采用更精确地表达式 $v_i = \sum_a b_i^a v_a^{(b)}$ ，但物理学家更喜欢用不同类型的下标区别不同的分量，以简化表达式，如用 i, j, k, \dots 表示初始分量，而 b 变换的分量用 a, b, c, \dots 表示。

这一等式是正交关系的结果⁷。

$$\sum_i b_i^{a*} b_i^{a'} = \delta^{aa'}, \quad (1.113)$$

也意味着在有限维矢量空间中存在完备性

$$\sum_a b_i^{a*} b_j^a = \delta^{ij}. \quad (1.114)$$

在波函数(1.108)的空间中，存在一组特殊的基函数，称为局域基函数。它可由下述方式构建：在空间点

$$\mathbf{x}_n = (n_1, n_2, n_3)\epsilon, \quad n_{1,2,3} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots. \quad (1.115)$$

处，将连续空间离散为立方体网格结构，网格边长为 ϵ 。构造函数 $h^n(\mathbf{x})$ ，使其在 \mathbf{x}_n 周围体积为 ϵ^3 的立方体内有值，其余位置均取零，

$$h^n(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1/\sqrt{\epsilon^3} & |x_i - x_n| \leq \epsilon/2, \quad i = 1, 2, 3. \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (1.116)$$

这样的函数显然彼此正交：

$$\int d^3x h^n(\mathbf{x})^* h^{n'}(\mathbf{x}) = \delta^{nn'}. \quad (1.117)$$

现在考虑展开式

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n h^n(\mathbf{x}) \Psi_n(t) \quad (1.118)$$

系数为

$$\Psi_n(t) = \int d^3x h^n(\mathbf{x})^* \Psi(\mathbf{x}, t) \approx \sqrt{\epsilon^3} \Psi(\mathbf{x}_n, t). \quad (1.119)$$

只要网格尺寸 ϵ 比波函数变化的尺度小得多，那么这个展开就是对真实波函数 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 的很好近似。事实上，如果 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 可积，那么对求和式(1.118)的积分总会收敛为 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 。任一标量积中可以发现离散近似具有同样的收敛性，也意味着任一可观测量的几率振幅中也有同样的性质。知道了(1.119)中的离散分量，在 $\epsilon \rightarrow 0$ 的极限下，可以在任意精度上计算这些几率振幅。因此，函数 $h^n(\mathbf{x})$ 与前面的基函数 $f^a(\mathbf{x}), g^b(\mathbf{x})$ 一样，可以作为近似的基，通过控制 ϵ ，可以达到任意想要的精度。

通常希尔伯特空间中存在很多满足正交关系的正交基函数 $f^a(\mathbf{x})$ ：

$$\int d^3x f^a(\mathbf{x})^* f^{a'}(\mathbf{x}) = \delta^{aa'}, \quad (1.120)$$

应用这些基函数，可以做展开

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_a f^a(\mathbf{x}) \Psi_a(t), \quad (1.121)$$

⁷ 正交关系往往意味着单位模，而真正的正交归一性反而很少使用 *orthonormality relation*。

其系数为

$$\Psi_a(t) = \int d^3x f^a(\mathbf{x})^* \Psi(\mathbf{x}, t). \quad (1.122)$$

假设我们用另外一组满足正交关系的正交基 $\tilde{f}^b(\mathbf{x})$:

$$\int d^3x \tilde{f}^b(\mathbf{x})^* \tilde{f}^{b'}(\mathbf{x}) = \delta^{bb'}, \quad \sum_b \tilde{f}^b(\mathbf{x}) \tilde{f}^b(\mathbf{x}')^* = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')'' \quad (1.123)$$

重新展开波函数

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_b \tilde{f}^b(\mathbf{x}) \tilde{\Psi}_b(t), \quad (1.124)$$

其分量为

$$\tilde{\Psi}_b(t) = \int d^3x \tilde{f}^b(\mathbf{x})^* \Psi(\mathbf{x}, t). \quad (1.125)$$

将(1.121)带入，可以得到两组分量间的关系为

$$\tilde{\Psi}_b(t) = \sum_a \left[\int d^3x \tilde{f}^b(\mathbf{x})^* f^a(\mathbf{x}) \right] \Psi_a(t). \quad (1.126)$$

1.4.2 左矢-右矢表示法

两个波函数的标量积可以用左矢-右矢表示法写为

$$\langle \tilde{b}|a \rangle \equiv \int d^3x \tilde{f}^b(\mathbf{x})^* f^a(\mathbf{x}). \quad (1.127)$$

在此表示法中，(1.122)和(1.125)式中态矢量 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 的分量为

$$\begin{aligned} \Psi_a(t) &= \langle a|\Psi(t)\rangle, \\ \tilde{\Psi}_b(t) &= \langle \tilde{b}|\Psi(t)\rangle. \end{aligned} \quad (1.128)$$

变换公式(1.126)则可以写为

$$\langle \tilde{b}|\Psi(t)\rangle = \sum_a \langle \tilde{b}|a\rangle \langle a|\Psi(t)\rangle. \quad (1.129)$$

将完备关系

$$\sum_a |a\rangle\langle a| = 1 \quad (1.130)$$

插入 $\langle \tilde{b}|$ 和 $|\Psi(t)\rangle$ 之间即可得到:

$$\langle \tilde{b}|\Psi(t)\rangle = \langle \tilde{b}|1|\Psi(t)\rangle = \sum_a \langle \tilde{b}|a\rangle \langle a|\Psi(t)\rangle. \quad (1.131)$$

因为只有当函数集 $f^b(\mathbf{x})$ 构成一组完备基时，才可以做这种展开，所以关系式(1.130)可以视为基函数完备性的体现，该式也被称为狄拉克的完备性关系。

由于标量积写成了括号的形式 $\langle a|a' \rangle$, 狄拉克称构成这一括号的两个部分 $\langle a|$ 和 $|a' \rangle$ 分别为左矢 (bra) 和右矢 (ket)。在左矢-右矢表示法中, 基 $f^a(\mathbf{x})$ 和 $g^b(\mathbf{x})$ 的正交归一性可以表示为

$$\begin{aligned}\langle a|a' \rangle &= \int d^3x f^a(\mathbf{x})^* f^{a'}(\mathbf{x}) = \delta^{aa'}, \\ \langle \tilde{b}|\tilde{b}' \rangle &= \int d^3x \tilde{f}^b(\mathbf{x})^* \tilde{f}^{b'}(\mathbf{x}) = \delta^{bb'}.\end{aligned}\quad (1.132)$$

用同样的方法, 我们为等式(1.116)引入左矢和右矢, 并分别表示为 $\langle \mathbf{x}_n|$ 和 $|\mathbf{x}_n\rangle$, 正交关系(1.117)在左矢-右矢表示法中可以写为

$$\langle \mathbf{x}_n|\mathbf{x}_{n'}\rangle \equiv \int d^3x h^n(\mathbf{x})^* h^{n'}(\mathbf{x}) = \delta_{nn'}.\quad (1.133)$$

分量 $\Psi_n(t)$ 可以看作是如下的标量积:

$$\Psi_n(t) \equiv \langle \mathbf{x}_n|\Psi(t)\rangle \approx \sqrt{\epsilon^3} \Psi(\mathbf{x}_n, t).\quad (1.134)$$

基矢量的变换, 例如从矢量基 $|\mathbf{x}_n\rangle$ 变为 $|a\rangle$, 可以通过插入如(1.130)所示的狄拉克完备性关系进行。因此可以做展开

$$\Psi_n(t) = \langle \mathbf{x}_n|\Psi(t)\rangle = \sum_a \langle \mathbf{x}_n|a\rangle \langle a|\Psi(t)\rangle.\quad (1.135)$$

同时也有:

$$\langle a|\Psi(t)\rangle = \sum_{\mathbf{n}} \langle a|\mathbf{x}_n\rangle \langle \mathbf{x}_n|\Psi(t)\rangle.\quad (1.136)$$

当然展开(1.135)是积分

$$\int d^3x h^n(\mathbf{x})^* \langle \mathbf{x}|\Psi(t)\rangle.\quad (1.137)$$

的近似。由(1.136)看出, $h^n(\mathbf{x})$ 的完备性可以表示为

$$\sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{x}_n\rangle \langle \mathbf{x}_n| \approx 1.\quad (1.138)$$

当网格尺寸趋于零时, 即 $\epsilon \rightarrow 0$, 上式中的约等于将会变成等于。

1.4.3 连续极限

在通常的微积分中, 对小量的求和最终会被积分替代。我们定义新的连续的标量积

$$\langle \mathbf{x}|\Psi(t)\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{\epsilon^3}} \langle \mathbf{x}_n|\Psi(t)\rangle,\quad (1.139)$$

其中 \mathbf{x}_n 是网格上最接近 \mathbf{x} 的点。由(1.134)式, 上式的右边等于 $\Psi(\mathbf{x}_n, t)$ 。在极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 下, \mathbf{x} 和 \mathbf{x}_n 重合, 并且有

$$\langle \mathbf{x}|\Psi(t)\rangle \equiv \Psi(\mathbf{x}, t).\quad (1.140)$$

应用完备性关系，有

$$\begin{aligned}\langle a|\Psi(t)\rangle &\approx \sum_{\mathbf{n}} \langle a|\mathbf{x}_n\rangle \langle \mathbf{x}_n|\Psi(t)\rangle \\ &\approx \sum_{\mathbf{n}} \epsilon^3 \langle a|\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\Psi(t)\rangle \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^n},\end{aligned}\quad (1.141)$$

在极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 下，求和变为积分

$$\langle a|\Psi(t)\rangle = \int d^3x \langle a|\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\Psi(t)\rangle. \quad (1.142)$$

这可以看做是在 $\langle a|$ 和 $|\Psi(t)\rangle$ 之间插入基矢量 $\langle \mathbf{x}|$ 和 $|\mathbf{x}\rangle$ 的完备性关系：

$$\int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = 1. \quad (1.143)$$

在局域基趋于极限的情况下，波函数可以看做态矢量 $|\Psi(t)\rangle$ 在局域基 $|\mathbf{x}\rangle$ 上的分量，类似于任意基 $|a\rangle$ 上的另一组分量。事实上，展开式

$$\langle a|\Psi(t)\rangle = \int d^3x \langle a|\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\Psi(t)\rangle \quad (1.144)$$

可以看做 $|\Psi(t)\rangle$ 在基 $|a\rangle$ 上分量，沿其它一组基 $|\mathbf{x}\rangle$ 的重新展开，与 (1.129) 式中一致。

为了能够用最紧致的方法表示全部这些变换性质，人们习惯用一种不依赖于基的方式处理任意物理态矢量，将其表示为一个右矢 $|\Psi(t)\rangle$ 。通过乘以完备性关系

$$\sum_a |a\rangle \langle a| = 1, \quad (1.145)$$

可以讲矢量按任意一组方便的基进行展开

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\Psi(t)\rangle. \quad (1.146)$$

上式可以左乘任一左矢，比如 $\langle b|$ ，得到展开式：(1.131)：

$$\langle b|\Psi(t)\rangle = \sum_a \langle b|a\rangle \langle a|\Psi(t)\rangle. \quad (1.147)$$

完备性关系(1.138)在连续情况下可以写为

$$\int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = 1, \quad (1.148)$$

且有展开式

$$|\Psi(t)\rangle = \int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\Psi(t)\rangle, \quad (1.149)$$

上式中波函数 $\Psi(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x}|\Psi(t)\rangle$ 可以作为态矢量 $|\Psi(t)\rangle$ 的第 \mathbf{x} 个分量。相应地， $|\mathbf{x}\rangle$ 就是离散基矢量 $|\mathbf{x}_n\rangle$ 的极限。

$$|\mathbf{x}\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{\epsilon^3}} |\mathbf{x}_n\rangle, \quad (1.150)$$

\mathbf{x}_n 是网格上最接近 \mathbf{x} 的点。

左矢和右矢可以同样好地描述一个矢量。为了自洽地应用上面的方法，我们注意如下的标量积

$$\begin{aligned}\langle a|\tilde{b}\rangle &= \int d^3x f^a(\mathbf{x})^* \tilde{f}^b(\mathbf{x}), \\ \langle \tilde{b}|a\rangle &= \int d^3x \tilde{f}^b(\mathbf{x})^* f^a(\mathbf{x})\end{aligned}\quad (1.151)$$

满足等式

$$\langle \tilde{b}|a\rangle \equiv \langle a|\tilde{b}\rangle^*. \quad (1.152)$$

因此，如果将右矢展开为

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\Psi(t)\rangle, \quad (1.153)$$

或者将左矢展开为

$$\langle \Psi(t)| = \sum_a \langle \Psi(t)|a\rangle \langle a|, \quad (1.154)$$

对第一式乘以左矢 $\langle \mathbf{x}|$ 得到的结果与对第二式乘以右矢 $|\mathbf{x}\rangle$ 得到的结果互为复共轭。

1.4.4 广义函数

狄拉克的左矢-右矢方法很优美，也很容易进行处理。尽管如此，只要涉及到矢量 $|\mathbf{x}\rangle$ ，就会出现一些与量子力学基本假设不融洽的问题：当引入态矢量时，总是要求其模为1，使单粒子态的几率诠释得以成立。但上面引入的趋于极限的矢量 $|\mathbf{x}\rangle$ 却并不满足这一要求。两个不同态 $\langle \mathbf{x}|$ 和 $|\mathbf{x}'\rangle$ 的标量积为

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle \approx \frac{1}{\epsilon^3} \langle \mathbf{x}_n|\mathbf{x}_{n'}\rangle = \frac{1}{\epsilon^3} \delta_{nn'}, \quad (1.155)$$

其中， \mathbf{x}_n 和 $\mathbf{x}_{n'}$ 分别是网格上距离 \mathbf{x} 和 \mathbf{x}' 最近的点。当 $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}'$ 时，两个态彼此正交。当 $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$ 时，在趋于极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 时，等式的左边为无穷大，趋于极限的行为可以用下式描述

$$\epsilon^3 \sum_{n'} \frac{1}{\epsilon^3} \delta_{nn'} = 1. \quad (1.156)$$

因此，趋于极限的态 $|\mathbf{x}\rangle$ 并不是希尔伯特空间中可以合适地进行归一化的矢量。为了表示方法的优美，通常将趋于极限的态 $|\mathbf{x}\rangle$ 纳入物理的希尔伯特空间，从而弱化了归一化的要求。事实上，我们允许所有经过合适的归一化、而后趋于极限而得到的态。

标量积 $\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle$ 并不是常规的函数，而是狄拉克 δ 函数 $\delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ ：

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle \equiv \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (1.157)$$

上式右边只在 $\mathbf{x} \approx \mathbf{x}'$ 的无穷小邻域内有值，在其余趋于为零，因此 δ 函数满足

$$\delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = 0 \quad \text{for } \mathbf{x} \neq \mathbf{x}'. \quad (1.158)$$

在 $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$, 其值很大, 使得整个空间的积分为1:

$$\int d^3x' \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = 1. \quad (1.159)$$

很明显, 并不存在常规函数满足上面两个要求(1.158)和(1.159)。只有(1.155)式中 δ 函数的有限大 ϵ 近似才是常规函数。在这个意义上, 标量积 $\langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle$ 与态 $|\mathbf{x}\rangle$ 一样, 都是具有合适定义的数学客体在 $\epsilon \rightarrow 0$ 时的极限行为。

注意到积分式(1.159)暗示着 δ 函数有如下性质:

$$\delta^{(3)}(a(\mathbf{x} - \mathbf{x}')) = \frac{1}{|a|} \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (1.160)$$

在一维的情况下, 有更普遍的性质

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i), \quad (1.161)$$

其中, x_i 是 $f(x)$ 的一阶零点。

数学上, δ 函数称为广义函数 (*generalized function*) 或分布 (*distribution*)。它定义了任意光滑测试函数 $f(\mathbf{x})$ 的线性泛函, 可以在任意想要的点上得到测试函数的值:

$$\delta[f; \mathbf{x}] \equiv \int d^3x \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') f(\mathbf{x}') = f(\mathbf{x}). \quad (1.162)$$

测试函数是无穷可导的函数, 并在无穷远处迅速衰减。

关于分布有很多很丰富的的数学文献[3]。这些分布可以形成线性空间, 通过与普通函数相比较, 这一空间有一重要的限制: δ 函数或其他分布之间的乘积还没有定义。尽管如此, 在10.8.1节, 我们将发现物理迫使我们跳过这些规则。量子力学一个重要的要求是坐标不变性。如果想要让量子力学的路径积分形式也达到这一要求, 我们必须对已有的分布理论做明确的扩展, 即为分布的乘积指定唯一的积分。

量子力学中, 测试函数就是指波函数 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 。通过将态 $|\mathbf{x}\rangle$ 纳入希尔伯特空间, 我们也将标量积 $\langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle$, 乃至所有的分布纳入波函数空间, 尽管它们并不是可正规化的。

1.4.5 狄拉克表示方法中的薛定谔方程

应用左矢-右矢表示法, 可以按不依赖基的方式将薛定谔方程表示为算符方程

$$\hat{H}|\Psi(t)\rangle \equiv H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}, t)|\Psi(t)\rangle = i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle, \quad (1.163)$$

正则算符对左矢的作用定义为:

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}} \equiv -i\hbar \nabla \langle \mathbf{x} |, \quad (1.164)$$

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{x}} \equiv \mathbf{x} \langle \mathbf{x} |. \quad (1.165)$$

从这些等式出发，右乘任意右矢可以得到相应的矩阵元，例如右乘局域基矢量 $|\mathbf{x}'\rangle$ ，有：

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{x}' \rangle = -i\hbar \nabla \langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle = -i\hbar \nabla \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (1.166)$$

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{x}} | \mathbf{x}' \rangle = \mathbf{x} \langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle = \mathbf{x} \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (1.167)$$

不依赖基的薛定谔方程(1.163)左乘左矢 $\langle \mathbf{x}|$ ，可以重新得到薛定谔方程原有的微分形式(1.91)：

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}, t) | \Psi(t) \rangle &= H(-i\hbar \nabla, \mathbf{x}, t) \langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle \\ &= i\hbar \partial_t \langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle. \end{aligned} \quad (1.168)$$

很明显， $\hat{\mathbf{p}}$ 和 $\hat{\mathbf{x}}$ 在任何基下都是厄米矩阵，

$$\langle a | \hat{\mathbf{p}} | a' \rangle = \langle a' | \hat{\mathbf{p}} | a \rangle^*, \quad (1.169)$$

$$\langle a | \hat{\mathbf{x}} | a' \rangle = \langle a' | \hat{\mathbf{x}} | a \rangle^*, \quad (1.170)$$

所以只要哈密顿量有如(1.101)式的形式，则也是厄米矩阵

$$\langle a | \hat{H} | a' \rangle = \langle a' | \hat{H} | a \rangle^*. \quad (1.171)$$

由 $|\mathbf{x}\rangle$ 张开的广义希尔伯特空间中，最一般的、不依赖基的算符可以构造成以 $\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}, t$ 为变量的函数

$$\hat{O}(t) \equiv O(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}, t). \quad (1.172)$$

一般地，如果其所有的矩阵元都有这样的性质，则称这样的算符为厄米算符。在不依赖基的狄拉克表示法中，厄米伴算符 $\hat{O}^\dagger(t)$ 的定义(1.97)暗示着矩阵元有恒等式

$$\langle a | \hat{O}^\dagger(t) | a' \rangle \equiv \langle a' | \hat{O}(t) | a \rangle^*. \quad (1.173)$$

所以可以用不依赖基的方式重新表示等式(1.169)–(1.171)

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}} &= \hat{\mathbf{p}}^\dagger, \\ \hat{\mathbf{x}} &= \hat{\mathbf{x}}^\dagger, \\ \hat{H} &= \hat{H}^\dagger. \end{aligned} \quad (1.174)$$

(1.94)式中的定态可以表示为狄拉克右矢 $|E_n\rangle$ ，且满足不含时的算符方程

$$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle. \quad (1.175)$$

1.4.6 动量态

让我们考虑动量 $\hat{\mathbf{p}}$ ，其本征态可以由本征值方程给出

$$\hat{\mathbf{p}} |\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle. \quad (1.176)$$

左乘 $\langle \mathbf{x}|$ 并应用(1.164)式，可以得到微分方程

$$\langle \mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = -i\hbar\partial_{\mathbf{x}}\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle. \quad (1.177)$$

其解为

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle \propto e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar}. \quad (1.178)$$

不考虑归一化因子，这就是之前在等式(1.75)中引入的平面波，用以描述动量为 \mathbf{p} 的自由粒子。

为了使 $|\mathbf{p}\rangle$ 的模 (norm) 有限，必须将系统局限在有限的体积内，例如边长为 L 、体积为 L^3 的立方体盒子。假定周期性的边界条件，动量是离散的，其值为

$$\mathbf{p}^m = \frac{2\pi\hbar}{L}(m_1, m_2, m_3), \quad m_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots . \quad (1.179)$$

接着调节 $\exp(i\mathbf{p}^m \mathbf{x}/\hbar)$ 前面的因子以保证归一化，有

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}^m\rangle = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(i\mathbf{p}^m \mathbf{x}/\hbar), \quad (1.180)$$

且离散态 $|\mathbf{p}^m\rangle$ 满足

$$\int d^3x |\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}^m\rangle|^2 = 1. \quad (1.181)$$

态 $|\mathbf{p}^m\rangle$ 是完备的：

$$\sum_m |\mathbf{p}^m\rangle \langle \mathbf{p}^m| = 1. \quad (1.182)$$

我们可以用这一关系和矩阵元 $\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}^m\rangle$ ，对盒子内的任意波函数进行展开：

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x}|\Psi(t)\rangle = \sum_m \langle \mathbf{x}|\mathbf{p}^m\rangle \langle \mathbf{p}^m|\Psi(t)\rangle. \quad (1.183)$$

如果盒子足够大，对离散动量 \mathbf{p}^m 的求和可以近似为动量空间上的积分[4]。

$$\sum_m \approx \int \frac{d^3p L^3}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (1.184)$$

在这一极限下， $|\mathbf{p}^m\rangle$ 可以用于定义一组连续基矢量

$$|\mathbf{p}\rangle \approx \sqrt{L^3}|\mathbf{p}^m\rangle, \quad (1.185)$$

正如同(1.150)中通过 $|\mathbf{x}_n\rangle$ 进行 $|\mathbf{x}\rangle$ 的定义： $|\mathbf{x}\rangle \sim (1/\sqrt{\epsilon^3})|\mathbf{x}^n\rangle$ 。动量态 $|\mathbf{p}\rangle$ 满足正交关系

$$\langle \mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (1.186)$$

这里的 $\delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ 也是狄拉克 δ 函数。其完备性关系为

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = 1, \quad (1.187)$$

这样，展开式(1.183)变为

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \Psi(t) \rangle, \quad (1.188)$$

其中动量本征函数为

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar}. \quad (1.189)$$

结合上式和对等关系

$$\langle \mathbf{p} | \Psi(t) \rangle = f(\mathbf{p}) e^{-iE\mathbf{p}t/\hbar} \quad (1.190)$$

展开式(1.188)与之前(1.83)和(1.84)中引入的波函数傅里叶分解相符合。

左矢-右矢方法可以自然地适用于傅里叶变换。简单地在 $\langle \mathbf{p} | \Psi(t) \rangle$ 中插入完备性关系式 $\int d^3 x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = 1$ ，即可得到傅里叶逆变换公式

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \Psi(t) \rangle &= \int d^3 x \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle \\ &= \int d^3 x e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} \Psi(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (1.191)$$

振幅 $\langle \mathbf{p} | \Psi(t) \rangle$ 称为动量空间波函数。

在正交关系(1.186)左边的动量态之间插入完备性关系式

$$\int d^3 x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = 1 \quad (1.192)$$

可以得到 δ 函数的傅里叶变换(1.186):

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle &= \int d^3 x \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle \\ &= \int d^3 x e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{x}/\hbar} = (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \end{aligned} \quad (1.193)$$

1.4.7 不完备性和泊松求和公式

对很多物理应用而言，如果想要将积分限制在位置的一个子集中，那么弄清楚完备性关系(1.148)就尤为重要。最为相关的是一维积分，

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1, \quad (1.194)$$

限制为均匀分布的空间点 $x_n = na$ 上的求和：

$$\sum_{n=-N}^N |x_n\rangle \langle x_n|. \quad (1.195)$$

将此求和式放入动量本征态 $|p\rangle$ 之间，得到

$$\sum_{n=-N}^N \langle p | x_n \rangle \langle x_n | p' \rangle = \sum_{n=-N}^N \langle p | x_n \rangle \langle x_n | p' \rangle = \sum_{n=-N}^N e^{i(p-p')na/\hbar} \quad (1.196)$$

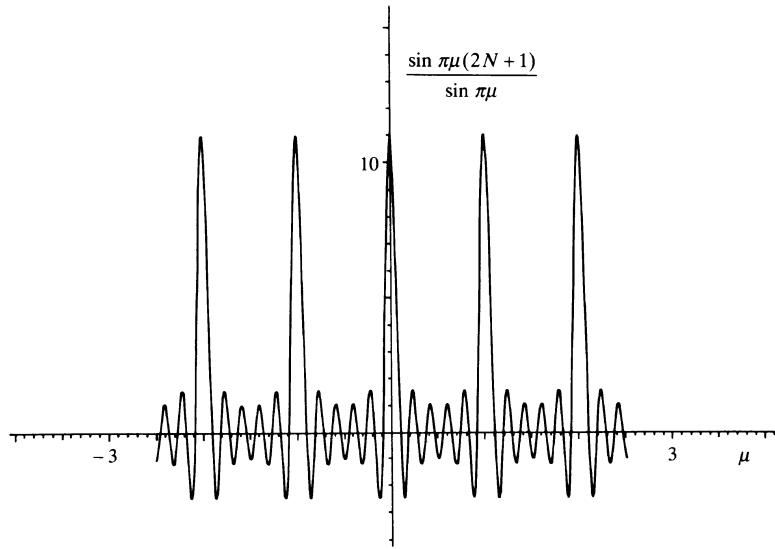


Figure 1.2 泊松求和公式中的函数 $\sum_{n=-N}^N e^{2\pi i \mu n}$ 。在 $N \rightarrow \infty$ 的极限下, μ 的分布被挤压为整数位置的峰。

对于 $N \rightarrow \infty$ 的情况, 我们可借助泊松求和公式进行计算,

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i \mu n} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(\mu - m). \quad (1.197)$$

将 $(p - p')a/2\pi\hbar$ 当做 μ , 应用等式(1.160), 我们发现:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \langle p|x_n\rangle \langle x_n|p' \rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{(p-p')a}{2\pi\hbar} - m\right) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{2\pi\hbar}{a} \delta\left(p - p' - \frac{2\pi\hbar m}{a}\right). \quad (1.198)$$

为了证明泊松公式(1.197), 我们观察到等式右边的求和式 $s(\mu) \equiv \sum_m \delta(\mu - m)$ 随 μ 周期性变化, 周期为1; 且有傅里叶序列 $s(\mu) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} s_n e^{2\pi i \mu n}$, 傅里叶系数 $s_n = \int_{-1/2}^{1/2} d\mu s(\mu) e^{-2\pi i \mu n} \equiv 1$, 这些系数与(1.197)式左边求和项的系数刚好相等。

对于有限大小的 N , (1.197)式左边对 n 的求和给出

$$\begin{aligned} \sum_{n=-N}^N e^{2\pi i \mu n} &= 1 + (e^{2\pi i \mu} + e^{2 \cdot 2\pi i \mu} + \dots + e^{N \cdot 2\pi i \mu} + \text{c.c.}) \\ &= -1 + \left(\frac{1 - e^{2\pi i \mu(N+1)}}{1 - e^{2\pi i \mu}} + \text{c.c.} \right) \\ &= 1 + \frac{e^{2\pi i \mu} - e^{2\pi i \mu(N+1)}}{1 - e^{2\pi i \mu}} + \text{c.c.} = \frac{\sin \pi \mu (2N+1)}{\sin \pi \mu}. \end{aligned} \quad (1.199)$$

这个函数在波动光学中广为人知 (见图 2.4), 它确定了带 $2N + 1$ 条狭缝的光栅后的衍射图样。在 $\mu = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ 处, 该函数有很大的峰值; 在

相邻的两个峰之间，在 $\nu = (1 + 4k)/(2(2N + 1))$ 处，有 $N - 1$ 个小的峰值；在 $\nu = (1 + 2k)/(2N + 1)$ 处为零，其中 $k = 1, \dots, N - 1$ 。

将 $\mu = (p - p')a/2\pi\hbar$ 带入(1.199)式，得到

$$\sum_{n=-N}^N \langle p|x_n\rangle \langle x_n|p' \rangle = \frac{\sin(p - p')a(2N + 1)/2\hbar}{\sin(p - p')a/2\hbar}. \quad (1.200)$$

让我们看看等式(1.199)的右边如何在极限 $N \rightarrow \infty$ 下变为等式(1.197)的右边。在这一极限下，每一个大峰值下的面积等于对中央大峰和附近 n 个小峰的积分：

$$\int_{-n/2N}^{n/2N} d\mu \frac{\sin \pi\mu(2N + 1)}{\sin \pi\mu} = \int_{-n/2N}^{n/2N} d\mu \frac{\sin 2\pi\mu N \cos \pi\mu + \cos 2\pi\mu N \sin \pi\mu}{\sin \pi\mu}. \quad (1.201)$$

保持固定的比例 $n/N \ll 1$ ，可以将积分中的 $\sin \pi\mu$ 替换为 $\pi\mu$ ， $\cos \pi\mu$ 替换为 1。那么在极限 $N \rightarrow \infty$ 下，在 n/N 比值固定的情况下，积分变为，

$$\begin{aligned} \int_{-n/2N}^{n/2N} d\mu \frac{\sin \pi\mu(2N + 1)}{\sin \pi\mu} &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \int_{-n/2N}^{n/2N} d\mu \frac{\sin 2\pi\mu N}{\pi\mu} + \int_{-n/2N}^{n/2N} d\mu \cos 2\pi\mu N \\ &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \int_{-\pi n}^{\pi n} dx \frac{\sin x}{x} + \frac{1}{2\pi N} \int_{-\pi n}^{\pi n} dx \cos x \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 1, \end{aligned} \quad (1.202)$$

上式中已经用到

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin x}{x} = \pi. \quad (1.203)$$

在 $N \rightarrow \infty$ 的极限下，我们确实得到了(1.197) 和(1.205)式。

此外还存在另一个表示泊松公式的有用方法。对任意光滑函数 $f(\mu)$ 进行收敛的求和

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m). \quad (1.204)$$

泊松公式(1.197)表明这一求和可以写成积分和辅助求和的形式：

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i \mu n} f(\mu). \quad (1.205)$$

对 n 的辅助求和可以将连续变化的 μ 挤压为分离的整数（见图1.2）。

1.5 可观测量

在对波矢量的物理可观测内容的分析中，基矢量的改变是很重要的工具。令 $A = A(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ 为任意不含时的实函数，变量为相空间变量 \mathbf{p} 和 \mathbf{x} 。对这样的 A ，重要的例子有 \mathbf{p} 和 \mathbf{x} 本身，哈密顿量 $H(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ 和角动量 $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 。从

量子力学的角度，每一个量都会有相应的可观测量算符。简单地将 A 中的变量 \mathbf{p} 和 \mathbf{x} 替换为相应的算符 $\hat{\mathbf{p}}$ 和 $\hat{\mathbf{x}}$ ，即可得到可观测量算符：

$$\hat{A} \equiv A(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}). \quad (1.206)$$

这种替换规则是将哈密顿算符(1.92)的对应原理扩展到更一般的函数，将其转化为可观测量算符。必须假定这样的替换可以导致唯一的厄米算符，即不存在前面提到的算符次序问题（见哈密顿量(1.101)所在章节）⁸。如果不能得到唯一确定的算符，那么朴素的对应原理就不足以确定可观测量算符。除非可以应用简单的几何原理进行指定，否则必须通过和实验对比才能确定正确的算符次序。在第8章中，就将这样处理哈密顿量算符。

一旦可观测量算符 \hat{A} 是厄米的，它就有这样一种有用的性质，即通过求解方程

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad (1.207)$$

得到的一组本征矢量 $|a\rangle$ ，可以作为希尔伯特空间中的基矢量。在这些本征矢量中，总可以找到一组正交矢量 $|a\rangle$ 满足完备性关系

$$\sum_a |a\rangle\langle a| = 1. \quad (1.208)$$

应用矢量 $|a\rangle$ 可以从任意态矢量 $|\Psi(t)\rangle$ 中抽取可观测量 A 的相关物理信息。为了做到这一点，我们将这一矢量按照基 $|a\rangle$ 进行展开：

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_a |a\rangle\langle a|\Psi(t)\rangle. \quad (1.209)$$

分量

$$\langle a|\Psi(t)\rangle \quad (1.210)$$

即为测量到可观测量 A 为本征值 a 的几率振幅。

波函数 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ 本身就是上述方法的一个例子。如果将波函数写为

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x}|\Psi(t)\rangle, \quad (1.211)$$

波函数就给出位置算符 $\hat{\mathbf{x}}$ 本征值为 \mathbf{x} 的几率振幅，即 $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$ 为 \mathbf{x} 空间中的几率密度。

可观测量算符(1.206)在 $|\Psi(t)\rangle$ 中的期待值定义为矩阵元

$$\langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle \equiv \int d^3x \langle\Psi(t)|\mathbf{x}\rangle A(-i\hbar\nabla, \mathbf{x}) \langle\mathbf{x}|\Psi(t)\rangle. \quad (1.212)$$

1.5.1 测不准关系

在之前的讨论中[见(1.83), (1.84)后的讨论]，我们已经看到，由于傅里叶分析的性质，位置空间中的振幅展宽与动量空间中的振幅展宽彼此成反比。如果位置空间中的波包宽度为 $\Delta\mathbf{x}$ ，可由下式确定其动量空间波函数的宽度 $\Delta\mathbf{p}$ ：

$$\Delta\mathbf{x} \Delta\mathbf{p} \sim \hbar. \quad (1.213)$$

⁸注意：对角动量 $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 确实如此。

从希尔伯特空间的角度看，这一不确定关系是算符 $\hat{\mathbf{x}}$ 和 $\hat{\mathbf{p}}$ 彼此不对易的结果，其分量满足如下的正则对易规则：

$$\begin{aligned} [\hat{p}_i, \hat{x}_j] &= -i\hbar\delta_{ij}, \\ [\hat{x}_i, \hat{x}_j] &= 0, \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] &= 0. \end{aligned} \quad (1.214)$$

一般地，如果在一个量子态中测量到可观测量 \hat{A} 总有确定的值 a ，那么这个态一定是 \hat{A} 的本征态，对应的本征值为 a ：

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle. \quad (1.215)$$

这来自展开式

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\Psi(t)\rangle, \quad (1.216)$$

其中， $|\langle a|\Psi(t)\rangle|^2$ 是测量到本征值 a 的几率。如果总是测量到特定的本征值 a ，那么这个态就必定是 $|a\rangle$ 。

给定 \hat{A} 的全部本征态 $|a\rangle$ ，我们可以提出这样的问题：在什么样的情况下，另一个可观测量 \hat{B} 在上述的每一个态中可以被测量到确定的值？这一要求意味着态 $|a\rangle$ 也是 \hat{B} 的本征态，

$$\hat{B}|a\rangle = b_a|a\rangle, \quad (1.217)$$

b_a 是依赖 a 的本征值。如果这对于所有的态 $|a\rangle$ 都成立，即

$$\hat{B}\hat{A}|a\rangle = b_a a|a\rangle = ab_a|a\rangle = \hat{A}\hat{B}|a\rangle, \quad (1.218)$$

那么算符 \hat{A} 和 \hat{B} 就一定彼此对易：

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0. \quad (1.219)$$

反过来可以看到，如果对易式为零，就意味着两个可观测量可以同时对角化，也因此可以同时有确定的值。

1.5.2 密度矩阵与维格纳函数

对于计算量子力学系统的可观测性质，纯态对应的量子力学密度算符十分重要，

$$\hat{\rho}(t) \equiv |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|, \quad (1.220)$$

相应的密度矩阵为

$$\rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; t) = \langle \mathbf{x}_1 | \Psi(t) \rangle \langle \Psi(t) | \mathbf{x}_2 \rangle. \quad (1.221)$$

任意函数 $f(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{p}})$ 的期待值可以通过求迹进行计算

$$\langle \Psi(t) | f(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{p}}) | \Psi(t) \rangle = \text{tr} [f(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{p}}) \hat{\rho}(t)] = \int d^3x \langle \Psi(t) | \mathbf{x} \rangle f(\mathbf{x}, -i\hbar \nabla) \langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle. \quad (1.222)$$

如果将 $|\Psi(t)\rangle$ 分解为哈密顿量算符 \hat{H} 的本征定态 $|E_n\rangle$ 的迭加, $|\Psi(t)\rangle = \sum_n |E_n\rangle\langle E_n|\Psi(t)\rangle$, 那么密度矩阵也有相应的展开

$$\hat{\rho}(t) \equiv \sum_{n,m} |E_n\rangle\rho_{nm}(t)\langle E_m| = \sum_{n,m} |E_n\rangle\langle E_n|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|E_m\rangle\langle E_m|. \quad (1.223)$$

维格纳证明了密度矩阵的傅里叶变换, 即维格纳函数

$$W(\mathbf{X}, \mathbf{p}; t) \equiv \int \frac{d^3\Delta x}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\mathbf{p}\Delta\mathbf{x}/\hbar} \rho(\mathbf{X} + \Delta\mathbf{x}/2, \mathbf{X} - \Delta\mathbf{x}/2; t) \quad (1.224)$$

对势 $V(\mathbf{x})$ 中的质量为 M 的单个粒子, 满足维格纳-刘维尔方程

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{X}}) W(\mathbf{X}, \mathbf{p}; t) = W_t(\mathbf{X}, \mathbf{p}; t), \quad \mathbf{v} \equiv \frac{\mathbf{p}}{M}, \quad (1.225)$$

其中

$$W_t(\mathbf{X}, \mathbf{p}; t) \equiv \frac{2}{\hbar} \int \frac{d^3q}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{X}, \mathbf{p} - \mathbf{q}; t) \int d^3\Delta\mathbf{x} V(\mathbf{X} - \Delta\mathbf{x}/2) e^{i\mathbf{q}\Delta\mathbf{x}/\hbar}. \quad (1.226)$$

在 $\hbar \rightarrow 0$ 的极限下, 将 $W(\mathbf{X}, \mathbf{p} - \mathbf{q}; t)$ 按 \mathbf{q} 的幂次、将 $V(\mathbf{X} - \Delta\mathbf{x}/2)$ 按 $\Delta\mathbf{x}$ 的幂次进行展开, 并将指数 $e^{i\mathbf{q}\Delta\mathbf{x}/\hbar}$ 前的 $\Delta\mathbf{x}$ 重新写为 $-i\hbar\nabla_{\mathbf{q}}$ 。接着进行 $\Delta\mathbf{x}$ 上的积分, 得到 $(2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\mathbf{q})$, 再进行 \mathbf{q} 上的积分, 得到粒子几率密度的经典刘维尔方程

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{X}}) W(\mathbf{X}, \mathbf{p}; t) = -F(\mathbf{X}) \nabla_{\mathbf{p}} W(\mathbf{X}, \mathbf{p}; t), \quad \mathbf{v} \equiv \frac{\mathbf{p}}{M}, \quad (1.227)$$

这里的 $F(\mathbf{X}) \equiv -\nabla_{\mathbf{X}}V(\mathbf{X})$ 是势 $V(\mathbf{X})$ 对应的力。

1.5.3 到多粒子的推广

所有的这些方法都可以推广到 N 个可区分的质点组成的系统, 这些质点有笛卡尔坐标 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ 。如果 $H(\mathbf{p}_{\nu}, \mathbf{x}_{\nu}, t)$ 为哈密顿量, 薛定谔方程变为

$$H(\hat{\mathbf{p}}_{\nu}, \hat{\mathbf{x}}_{\nu}, t)|\Psi(t)\rangle = i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle. \quad (1.228)$$

可以引入完备的局域基 $|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle$, 其性质为

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N \rangle &= \delta^{(3)}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \cdots \delta^{(3)}(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}'_N), \\ \int d^3x_1 \cdots d^3x_N |\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N| &= 1, \end{aligned} \quad (1.229)$$

进而定义

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \hat{\mathbf{p}}_{\nu} &= -i\hbar\partial_{\mathbf{x}_{\nu}} \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N |, \\ \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \hat{\mathbf{x}}_{\nu} &= \mathbf{x}_{\nu} \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N |. \end{aligned} \quad (1.230)$$

(1.228)式两边左乘左矢 $\langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N |$, 即可得到 N 粒子的薛定谔方程(1.107)。同样地, 前面发展的所有公式都可以推广到 N 体态矢量的情况。

1.6 时间演化算符

如果哈密顿量算符不显含时间，则可以对薛定谔方程(1.163)进行积分，由任意时刻 t_a 的波函数得到其它时刻 t_b 的波函数

$$|\Psi(t_b)\rangle = e^{-i(t_b-t_a)\hat{H}/\hbar} |\Psi(t_a)\rangle. \quad (1.231)$$

算符

$$\hat{U}(t_b, t_a) = e^{-i(t_b-t_a)\hat{H}/\hbar} \quad (1.232)$$

称为时间演化算符。并满足微分方程

$$i\hbar \partial_{t_b} \hat{U}(t_b, t_a) = \hat{H} \hat{U}(t_b, t_a). \quad (1.233)$$

交换 t_b 和 t_a 的次序，即可得到算符的逆：

$$\hat{U}^{-1}(t_b, t_a) \equiv e^{i(t_b-t_a)\hat{H}/\hbar} = \hat{U}(t_a, t_b). \quad (1.234)$$

作为虚数单位 i 和哈密顿量算符乘积的指数， \hat{U} 是幺正算符，满足

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}. \quad (1.235)$$

证明过程如下，

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger(t_b, t_a) &= e^{i(t_b-t_a)\hat{H}^\dagger/\hbar} \\ &= e^{i(t_b-t_a)\hat{H}/\hbar} = \hat{U}^{-1}(t_b, t_a). \end{aligned} \quad (1.236)$$

如果 $H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}, t)$ 显含时间，对薛定谔方程(1.163)的积分就会更为复杂。其解可以用迭代表示：对 $t_b > t_a$ ，时间积分等分为 $N+1$ 份，只要份数足够多，每一份的时间间隔都足够小，为 $\epsilon \equiv (t_b - t_a)/(N+1)$ ，每个分割点对应的时刻为 $t_n = t_a + n\epsilon, n = 0, \dots, N+1$ 。接着应用薛定谔方程(1.163)，将每一分割点时刻的波函数与前一时刻的波函数联系在一起：

$$\begin{aligned} |\Psi(t_a + \epsilon)\rangle &\approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_a + \epsilon} dt \hat{H}(t)\right) |\Psi(t_a)\rangle, \\ |\Psi(t_a + 2\epsilon)\rangle &\approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a + \epsilon}^{t_a + 2\epsilon} dt \hat{H}(t)\right) |\Psi(t_a + \epsilon)\rangle, \\ &\vdots \\ |\Psi(t_a + (N+1)\epsilon)\rangle &\approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a + N\epsilon}^{t_a + (N+1)\epsilon} dt \hat{H}(t)\right) |\Psi(t_a + N\epsilon)\rangle. \end{aligned} \quad (1.237)$$

将这些等式结合起来，可以抽取出时间演化算符

$$\hat{U}(t_b, t_a) \approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_N}^{t_b} dt'_{N+1} \hat{H}(t'_{N+1})\right) \times \cdots \times \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_1} dt'_1 \hat{H}(t'_1)\right). \quad (1.238)$$

将乘积展开，并取极限 $N \rightarrow \infty$ ，得到

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_b, t_a) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt'_1 \hat{H}(t'_1) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_a}^{t_b} dt'_2 \int_{t_a}^{t'_2} dt'_1 \hat{H}(t'_2) \hat{H}(t'_1) \\ &\quad + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_a}^{t_b} dt'_3 \int_{t_a}^{t'_3} dt'_2 \int_{t_a}^{t'_2} dt'_1 \hat{H}(t'_3) \hat{H}(t'_2) \hat{H}(t'_1) + \dots, \end{aligned} \quad (1.239)$$

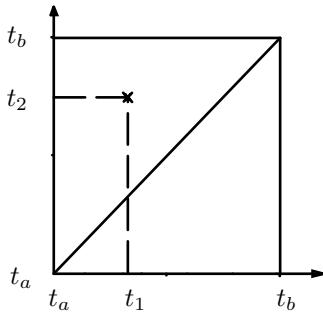


Figure 1.3 等式(1.243)中编时过程的图示。

称为纽曼-刘维尔展开或戴森级数 *Neumann-Liouville expansion*。上式一个有趣的变形称之为马格纳斯展开，将在等式(2A.25)中进行推导。

需要注意，每一个积分中的哈密顿量都是按照时间的因果性进行排列：较迟时间的算符排在较早时间算符的左边。引入编时算符，作用于算符的任意乘积

$$\hat{O}_n(t_n) \cdots \hat{O}_1(t_1), \quad (1.240)$$

可以将算符按时间先后重新排列：

$$\hat{T}(\hat{O}_n(t_n) \cdots \hat{O}_1(t_1)) \equiv \hat{O}_{i_n}(t_{i_n}) \cdots \hat{O}_{i_1}(t_{i_1}), \quad (1.241)$$

其中的 t_{i_n}, \dots, t_{i_1} 是按照因果次序重新标记了的 t_n, \dots, t_1 ，使得

$$t_{i_n} > t_{i_{n-1}} > \dots > t_{i_1}. \quad (1.242)$$

(1.241)式中的 c 数可以拿到 \hat{T} 的前面。用这样的编时算符，纽曼-刘维尔展开可以有更紧致的表示，例如(1.239)式的第三项

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_2 \int_{t_a}^{t_2} dt_1 \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_1). \quad (1.243)$$

在图1.2的 (t_1, t_2) 平面内，积分覆盖了 $t_1, t_2 \in [t_a, t_b]$ 方块区域中对角线上方的三角形。对角线下方的三角形区域上的积分为

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_2 \int_{t_2}^{t_b} dt_1 \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_1) \quad (1.244)$$

两者相比，可以看出，除了算符的次序外，两个表达式相同。而算符的次序可以用编时算符 \hat{T} 纠正。表达式

$$\hat{T} \int_{t_a}^{t_b} dt_2 \int_{t_2}^{t_b} dt_1 \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_1) \quad (1.245)$$

等于(1.243)式，证明步骤如下：注意到在对角线下的三角形区域内 $t_1 > t_2$ ，可以先将上式写为

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_2 \int_{t_2}^{t_b} dt_1 \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \quad (1.246)$$

接着交换积分次序，有

$$\int_{t_a}^{t_b} dt_1 \int_{t_a}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2). \quad (1.247)$$

做平庸的积分变量互换 $t_2 \leftrightarrow t_1$ ，上面的二重积分等于(1.243)式。由于(1.243)式中的时间变量已经按合适的次序排列，所以编时算符的作用不会改变(1.243)式。上面讨论的结论就是(1.243)式可以写为

$$\frac{1}{2} \hat{T} \int_{t_a}^{t_b} dt_2 \int_{t_a}^{t_b} dt_1 \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_1). \quad (1.248)$$

现在的积分覆盖了 t_1, t_2 平面内的整个方块区域，所以二重积分可以简写为

$$\frac{1}{2} \hat{T} \left(\int_{t_a}^{t_b} dt \hat{H}(t) \right)^2. \quad (1.249)$$

与之类似，可以将(1.239)中的第 n 阶项写为

$$\begin{aligned} & \frac{1}{n!} \hat{T} \int_{t_a}^{t_b} dt_n \int_{t_a}^{t_b} dt_{n-1} \cdots \int_{t_a}^{t_b} dt_1 \hat{H}(t_n) \hat{H}(t_{n-1}) \cdots \hat{H}(t_1) \\ &= \frac{1}{n!} \hat{T} \left[\int_{t_a}^{t_b} dt \hat{H}(t) \right]^n. \end{aligned} \quad (1.250)$$

因此，时间演化算符 $\hat{U}(t_b, t_a)$ 可以展开为级数

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_b, t_a) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{T} \int_{t_a}^{t_b} dt \hat{H}(t) + \frac{1}{2!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \hat{T} \left(\int_{t_a}^{t_b} dt \hat{H}(t) \right)^2 \\ &\quad + \dots + \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \hat{T} \left(\int_{t_a}^{t_b} dt \hat{H}(t) \right)^n + \dots. \end{aligned} \quad (1.251)$$

上式中除 \hat{T} 算符以外的部分符合指数函数的幂次展开，所以上式可以写为

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \hat{H}(t) \right\}. \quad (1.252)$$

如果 \hat{H} 不含时，则无需引入编时算符，上面的积分可以直接进行计算，重新得到前面的结果(1.232)。

$\hat{H}(t)$ 的小的变分 $\delta \hat{H}(t)$ 会改变 $\hat{U}(t_b, t_a)$ ，

$$\begin{aligned} \delta \hat{U}(t_b, t_a) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt' \hat{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t_b} dt \hat{H}(t) \right\} \delta \hat{H}(t') \hat{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t'} dt \hat{H}(t) \right\} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt' \hat{U}(t_b, t') \delta \hat{H}(t') \hat{U}(t', t_a). \end{aligned} \quad (1.253)$$

Appendix 1A中将给出这一关系的简单应用。

1.7 时间演化算符的性质

$\hat{U}(t_b, t_a)$ 有一些重要的性质:

a) 基本组合定律

如果连续进行两个时间变换, 相应的 \hat{U} 为

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{U}(t_b, t')\hat{U}(t', t_a), \quad t' \in (t_a, t_b). \quad (1.254)$$

这一组合定律使算符 \hat{U} 成为时间变化阿贝尔群的一个表示。对于不含时的哈密顿量 $\hat{U}(t_b, t_a)$ 如(1.232)式, 可以直接看出等式(1.254)成立。对于更一般的情况(1.252), 当 $t_b > t_a$ 时, 有:

$$\begin{aligned} & \hat{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t_b} \hat{H}(t) dt \right) \hat{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t'} \hat{H}(t) dt \right) \\ &= \hat{T} \left[\exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t_b} \hat{H}(t) dt \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t'} \hat{H}(t) dt \right) \right] \quad (1.255) \\ &= \hat{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \hat{H}(t) dt \right). \end{aligned}$$

b) 幺正性

表达式(1.252)给出的时间演化算符 $\hat{U}(t_b, t_a)$ 只针对因果性(或者延时性)的时间变量, 即 t_b 在 t_a 之后。尽管如此, 我们也可以对反因果性(或提前性), 即 t_b 在 t_a 之前的情况, 对 $\hat{U}(t_b, t_a)$ 进行定义。为了符合前面的组合定律(1.254), 必须有

$$\hat{U}(t_b, t_a) \equiv \hat{U}(t_a, t_b)^{-1}. \quad (1.256)$$

事实上, 考虑连续时间上的两个态

$$|\Psi(t_a)\rangle = \hat{U}(t_a, t_b)|\Psi(t_b)\rangle, \quad (1.257)$$

两边同时乘以 $\hat{U}^{-1}(t_a, t_b)$, 即可将次序颠倒:

$$|\Psi(t_b)\rangle = \hat{U}(t_a, t_b)^{-1}|\Psi(t_a)\rangle, \quad t_b < t_a. \quad (1.258)$$

等式右边的算符可以定义为由较迟时间 t_a 到较早时间 t_b 的时间演化算符 $\hat{U}(t_b, t_a)$ 。

如果哈密顿量不含时, 则时间演化算符为

$$\hat{U}(t_a, t_b) = e^{-i(t_a-t_b)\hat{H}/\hbar}, \quad t_a > t_b, \quad (1.259)$$

算符 $\hat{U}(t_b, t_a)$ 的幺正性很显然:

$$\hat{U}^\dagger(t_b, t_a) = \hat{U}(t_b, t_a)^{-1}, \quad t_b < t_a. \quad (1.260)$$

下面验证这一性质对更一般的含时哈密顿量也同样成立。薛定谔方程(1.163)的直接解表明, $t_b < t_a$ 时算符 $\hat{U}(t_b, t_a)$ 的表达式除了时间变量按照相反的次序排列, 其余与(1.252)式相同, 将其写为[与(1.252)对比]

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{\bar{T}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \hat{H}(t) dt \right\}, \quad (1.261)$$

其中 $\hat{\bar{T}}$ 代表反序编时算符 (time-antiordering operator), 其定义类似(1.241), (1.242)。这个算符满足关系式

$$[\hat{T}(\hat{O}_1(t_1)\hat{O}_2(t_2))]^\dagger = \hat{\bar{T}}(\hat{O}_2^\dagger(t_2)\hat{O}_1^\dagger(t_1)), \quad (1.262)$$

因此得出结论

$$\hat{U}^\dagger(t_b, t_a) = \hat{U}(t_a, t_b), \quad t_b > t_a. \quad (1.263)$$

结合 $\hat{U}(t_a, t_b) \equiv \hat{U}(t_b, t_a)^{-1}$, 就证明了一般情况下的幺正关系(1.260)。

c) $\hat{U}(t_b, t_a)$ 的薛定谔方程

算符 $\hat{U}(t_b, t_a)$ 决定了两个不同时刻波函数的关系

$$|\Psi(t_b)\rangle = \hat{U}(t_b, t_a)|\Psi(t_a)\rangle, \quad (1.264)$$

薛定谔方程1.228)意味着算符 $\hat{U}(t_b, t_a)$ 满足方程

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_a) = \hat{H} \hat{U}(t, t_a), \quad (1.265)$$

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_a)^{-1} = -\hat{U}(t, t_a)^{-1} \hat{H}, \quad (1.266)$$

初始条件为

$$\hat{U}(t_a, t_a) = 1. \quad (1.267)$$

1.8 量子力学的海森堡绘景

幺正时间演化算符 $\hat{U}(t, t_a)$ 可以用于给出一种不同的量子学表述, 这种表述与经典力学最为相像, 称为海森堡绘景。与薛定谔表述相比, 海森堡绘景与经典力学的联系更为紧密。将正则变量 $p_i(t)$ 和 $q_i(t)$ 替换为海森堡算符 $p_{Hi}(t)$ 和 $q_{Hi}(t)$, 很多经典力学的方程就可以用于量子力学。最初, 海森堡认为这些算符可能是矩阵, 但后来才发现这些矩阵必须是算符的泛函矩阵元, 其指标可以是部分连续的。在任意给定时刻, 只要正则对易关系(1.93)成立, 海森堡算符的经典方程也成立。此外, $q_i(t)$ 还必须是笛卡尔坐标。这种情况下, 我们总是用字母 x , 而不是 q 表示位置变量, 正如1.4节。相应的海森堡算符变为 $x_{Hi}(t)$ 。略去下标 i , 正则等时对易关系为

$$\begin{aligned} [p_H(t), x_H(t)] &= -i\hbar, \\ [p_H(t), p_H(t)] &= 0, \\ [x_H(t), x_H(t)] &= 0. \end{aligned} \quad (1.268)$$

根据海森堡的理论，如果将泊松括号替换为相应的矩阵对易式乘以 i/\hbar ，那么这些带有泊松括号的经典方程将仍然成立。回忆一下基本的泊松括号(1.24)，可见正则对易关系(1.268)是这一规则的特殊例子。哈密顿运动方程(1.23)变为海森堡方程

$$\begin{aligned}\dot{p}_H(t) &= \frac{i}{\hbar} [H_H, p_H(t)], \\ \dot{x}_H(t) &= \frac{i}{\hbar} [H_H, x_H(t)],\end{aligned}\quad (1.269)$$

其中

$$H_H \equiv H(p_H(t), x_H(t), t) \quad (1.270)$$

是海森堡绘景下的哈密顿量。类似地，(1.19)式中的可观测量函数 $O(p_i(t), x_i(t), t)$ 在海森堡绘景下为

$$O_H(t) \equiv O(p_H(t), x_H(t), t), \quad (1.271)$$

相应的运动方程(1.19)变为

$$\frac{d}{dt} O_H = \frac{i}{\hbar} [H_H, O_H] + \frac{\partial}{\partial t} O_H. \quad (1.272)$$

这些规则被称为海森堡对应原理。

时间演化算符提供了薛定谔绘景和海森堡绘景间的连系。令 \hat{O} 是薛定谔表象下的任意可观测量

$$\hat{O}(t) \equiv O(\hat{p}, \hat{x}, t). \quad (1.273)$$

如果 $|\Psi_a(t)\rangle$ 是薛定谔方程的一组完备解，其中指标 a 可以是离散或连续的，那么算符 $\hat{O}(t)$ 可以表示为其泛函矩阵元

$$O_{ab}(t) \equiv \langle \Psi_a(t) | \hat{O}(t) | \Psi_b(t) \rangle. \quad (1.274)$$

应用么正算符 $\hat{U}(t, 0)$ ，可以得到不含时的新基 $|\Psi_{Ha}\rangle$ ，

$$|\Psi_a(t)\rangle \equiv \hat{U}(t, 0) |\Psi_{Ha}\rangle. \quad (1.275)$$

同时，将正则坐标 \hat{p} 和 \hat{x} 的薛定谔算符变换为含时的正则海森堡算符 $\hat{p}_H(t)$ 和 $\hat{x}_H(t)$ ：

$$\hat{p}_H(t) \equiv \hat{U}(t, 0)^{-1} \hat{p} \hat{U}(t, 0), \quad (1.276)$$

$$\hat{x}_H(t) \equiv \hat{U}(t, 0)^{-1} \hat{x} \hat{U}(t, 0). \quad (1.277)$$

在 $t = 0$ 时刻，海森堡算符 $\hat{p}_H(t)$ 和 $\hat{x}_H(t)$ 与不含时的薛定谔算符 \hat{p} 和 \hat{x} 分别相等。任意可观测量可以变换为相应的海森堡算符

$$\begin{aligned}\hat{O}_H(t) &\equiv \hat{U}(t, t_a)^{-1} O(\hat{p}, \hat{x}, t) \hat{U}(t, t_a) \\ &\equiv O(\hat{p}_H(t), \hat{x}_H(t), t).\end{aligned}\quad (1.278)$$

将海森堡算符 $\hat{O}_H(t)$ 夹在不含时的基矢量 $|\Psi_{Ha}\rangle$ 中，即可得到海森堡矩阵 $O_H(t)_{ab}$ ：

$$O_H(t)_{ab} \equiv \langle \Psi_{Ha} | \hat{O}_H(t) | \Psi_{Hb} \rangle. \quad (1.279)$$

注意这一矩阵的时间依赖性完全由算符的时间依赖体现，

$$\frac{d}{dt} O_H(t)_{ab} \equiv \langle \Psi_{Ha} | \frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) | \Psi_{Hb} \rangle. \quad (1.280)$$

这与薛定谔绘景的表达式(1.274)恰好相反，(1.280)右边没有来自波函数时间依赖的项。考虑任意可观测量 $\hat{O}_H(t)$ 的时间导数，

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) &= \left(\frac{d}{dt} \hat{U}^{-1}(t, t_a) \right) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_a) \\ &+ \hat{U}^{-1}(t, t_a) \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{O}(t) \right) \hat{U}(t, t_a) + \hat{U}^{-1}(t, t_a) \hat{O}(t) \left(\frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_a) \right), \end{aligned}$$

略作处理，有

$$\begin{aligned} &\left[\left(\frac{d}{dt} \hat{U}^{-1}(t, t_a) \right) \hat{U}(t, t_a) \right] \hat{U}^{-1}(t, t_a) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_a) \\ &+ [\hat{U}^{-1}(t, t_a) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_a)] \hat{U}^{-1}(t, t_a) \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_a) + \hat{U}^{-1}(t, t_a) \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{O}(t) \right) \hat{U}(t, t_a). \end{aligned} \quad (1.281)$$

应用(1.265)，得到

$$\frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{U}, \hat{O}_H] + \hat{U}^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{O}(t) \right) \hat{U}. \quad (1.282)$$

将(1.278)带入，得到海森堡算符的运动方程：

$$\frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H, \hat{O}_H(t)] + \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{O} \right)_H(t). \quad (1.283)$$

插入希尔伯特空间中不含时的完备基 $|\Psi_a\rangle$ ，上式对矩阵仍然成立，并转化为海森堡运动方程。对于相空间变量 $p_H(t)$, $x_H(t)$ 本身，这些方程当然会约化为哈密顿运动方程(1.269)。

至此，我们就证明了海森堡矩阵量子力学和薛定谔量子力学的等价性，也可以看到海森堡矩阵遵循与经典可观测量相同的哈密顿方程。

1.9 相互作用绘景与微扰展开

对一些物理系统而言，哈密顿量算符可以分为两部分

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (1.284)$$

其中， \hat{H}_0 是所谓的自由哈密顿量算符，对应的薛定谔方程 $\hat{H}_0|\psi(t)\rangle = i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle$ 可以进行求解，而 \hat{V} 是相互作用势，对自由哈密顿量薛定谔方程的解产生轻微的扰动。在这种情况下，用狄拉克的相互作用绘景描述物理系统是十分有用的。去掉未受扰动薛定谔方程解的时间依赖，并定义

$$|\psi_I(t)\rangle \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi(t)\rangle. \quad (1.285)$$

这些态的时间演化完全来自相互作用势 \hat{V} 。相应的时间演化算符为

$$\hat{U}_I(t_b, t_a) \equiv e^{iH_0 t_b/\hbar} e^{-iH_0 t_a/\hbar} e^{iH t_a/\hbar} e^{-iH_0 t_a/\hbar}, \quad (1.286)$$

时间演化关系为

$$|\psi_I(t_b)\rangle = \hat{U}_I(t_b, t_a)|\psi_I(t_a)\rangle. \quad (1.287)$$

如果 $\hat{V} = 0$ ， $|\psi_I(t_b)\rangle$ 不含时，并等同于海森堡绘景下的态(1.275)。

算符 $\hat{U}_I(t_b, t_a)$ 满足运动方程

$$i\hbar\partial_{t_b}\hat{U}_I(t_b, t_a) = V_I(t_b)\hat{U}_I(t_b, t_a), \quad (1.288)$$

其中

$$\hat{V}_I(t) \equiv e^{iH_0 t/\hbar} \hat{V} e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (1.289)$$

是相互作用绘景中的势。这个运动方程可以转化成积分方程

$$\hat{U}_I(t_b, t_a) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \hat{V}_I(t) \hat{U}_I(t, t_a). \quad (1.290)$$

将等式(1.289)带入，有

$$\hat{U}_I(t_b, t_a) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} V e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{U}_I(t, t_a). \quad (1.291)$$

通过对上式的迭代，可以将算符 $\hat{U}_I(t_b, t_a)$ 按相互作用势的幂次做微扰展开：

$$\begin{aligned} \hat{U}_I(t_b, t_a) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} V e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \\ &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^t dt' e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} V e^{-i\hat{H}_0(t-t')/\hbar} V e^{-i\hat{H}_0 t'/\hbar} + \dots \end{aligned} \quad (1.292)$$

等式左边代入算符(1.286)，有

$$\begin{aligned} e^{-iH(t_b-t_a)/\hbar} &= e^{-iH_0(t_b-t_a)/\hbar} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt e^{-i\hat{H}_0(t_b-t)/\hbar} V e^{-i\hat{H}_0(t-t_a)/\hbar} \\ &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^t dt' e^{-i\hat{H}_0(t_b-t)/\hbar} V e^{-i\hat{H}_0(t-t')/\hbar} V e^{-i\hat{H}_0(t'-t_a)/\hbar} + \dots \end{aligned} \quad (1.293)$$

这一展开式看起来是积分方程的递归解

$$e^{-iH(t_b-t_a)/\hbar} = e^{-iH_0(t_b-t_a)/\hbar} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt e^{-i\hat{H}_0(t_b-t)/\hbar} V e^{-i\hat{H}(t-t_a)/\hbar}. \quad (1.294)$$

注意最低阶修正与之前的公式(1.253)一致。

1.10 时间演化振幅

在接下来的篇幅中，时间演化算符的下列矩阵元将发挥重要的作用

$$\langle \mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a \rangle \equiv \langle \mathbf{x}_b | \hat{U}(t_b, t_a) | \mathbf{x}_a \rangle. \quad (1.295)$$

这样的矩阵元也被称为时间演化振幅。泛函矩阵元 $\langle \mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a \rangle$ 也叫做系统的传播子。如果系统的哈密顿量算符不含时， $\hat{U}(t_b, t_a)$ 如等式(1.259)，传播子为

$$\langle \mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a \rangle = \langle \mathbf{x}_b | \exp[-i\hat{H}(t_b - t_a)/\hbar] | \mathbf{x}_a \rangle. \quad (1.296)$$

由于时间演化算符遵循方程(1.265)，传播子满足薛定谔方程

$$[H(-i\hbar\partial_{\mathbf{x}_b}, \mathbf{x}_b, t_b) - i\hbar\partial_{t_b}] (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = 0. \quad (1.297)$$

在非相对论量子力学中，只用到从较早时刻到较迟时刻的传播子。因此习惯性引入所谓的因果时间演化算符或延时时间演化算符:⁹

$$\hat{U}^R(t_b, t_a) \equiv \begin{cases} \hat{U}(t_b, t_a), & t_b \geq t_a, \\ 0, & t_b < t_a, \end{cases} \quad (1.298)$$

以及相应的因果时间演化振幅或延时时间演化振幅

$$\langle \mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a \rangle^R \equiv \langle \mathbf{x}_b | \hat{U}^R(t_b, t_a) | \mathbf{x}_a \rangle. \quad (1.299)$$

只有在 $t_b < t_a$ 时，上式才有别于(1.295)式，在下面的篇幅中，也仅用到 $t_b > t_a$ 的情况，所以我们常省略上标 R 。引入阶跃函数

$$\Theta(t) \equiv \begin{cases} 1 & \text{for } t > 0, \\ 0 & \text{for } t \leq 0, \end{cases} \quad (1.300)$$

时间演化算符和时间演化振幅可写为

$$U^R(t_b, t_a) \equiv \Theta(t_b - t_a) \hat{U}(t_b, t_a), \quad \langle \mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a \rangle^R \equiv \Theta(t_b - t_a) \langle \mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a \rangle. \quad (1.301)$$

此外，还有另一种阶跃函数：

$$\Theta^R(t) \equiv \begin{cases} 1 & \text{for } t \geq 0, \\ 0 & \text{for } t < 0. \end{cases} \quad (1.302)$$

仅在 $t_b = t_a$ 处不同于(1.300)。两个阶跃函数的共同特点是其导数都为狄拉克 δ 函数

$$\partial_t \Theta(t) = \delta(t). \quad (1.303)$$

如果具体应用哪个 Θ 函数并影响物理结果，就将省略上标。

延时传播子满足薛定谔方程

$$[H(-i\hbar\partial_{\mathbf{x}_b}, \mathbf{x}_b, t_b)^R - i\hbar\partial_{t_b}] (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a)^R = -i\hbar\delta(t_b - t_a)\delta^{(3)}(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a). \quad (1.304)$$

⁹将其与 18.1 节的延时格林函数作对比。

等式右边不为零，来自额外的项

$$-i\hbar [\partial_{t_b} \Theta(t_b - t_a)] \langle \mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a \rangle = -i\hbar \delta(t_b - t_a) \langle \mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a \rangle = -i\hbar \delta(t_b - t_a) \langle \mathbf{x}_b t_a | \mathbf{x}_a t_a \rangle \quad (1.305)$$

根据(1.267)，初始条件为 $\langle \mathbf{x}_b t_a | \mathbf{x}_a t_a \rangle = \langle \mathbf{x}_b | \mathbf{x}_a \rangle$ 。

如果哈密顿量不含时，传播子只依赖时间差 $t = t_b - t_a$ ，对 $t < 0$ ，延时传播子为零。具有这一性质的函数 $f(t)$ 有典型的傅里叶变换。积分

$$\tilde{f}(E) \equiv \int_0^\infty dt f(t) e^{iEt/\hbar} \quad (1.306)$$

是复能量平面上半区域内的解析函数。当通过能量积分

$$f(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} \tilde{f}(E) e^{-iEt/\hbar}. \quad (1.307)$$

进行傅里叶逆变换时，上述解析性质是产生因子 $\Theta(t)$ 的充要条件。对于 $t < 0$ 的情况，积分回路闭合为上半平面内半径无限大的半圆。由于内部不包含奇点，积分回路可以收缩为点，所以有 $f(t) = 0$ 。

阶跃函数 $\Theta(t)$ 本身就是最简单的延时函数，其傅里叶变换表达式只在复能量平面内的原点下有单个奇点

$$\Theta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{i}{E + i\eta} e^{-iEt}, \quad (1.308)$$

其中， η 是无穷小正数。积分表达式对 $t = 0$ 的情况没有定义，事实上，阶跃函数在原点处有无穷多种可能的定义。阶跃函数(1.302)和(1.300)的平均值有着特殊的作用，其在原点处的值为 $1/2$:

$$\bar{\Theta}(t) \equiv \begin{cases} 1 & \text{for } t > 0, \\ \frac{1}{2} & \text{for } t = 0, \\ 0 & \text{for } t < 0. \end{cases} \quad (1.309)$$

通常，由于阶跃函数总在积分中伴随着光滑函数 $f(t)$ 出现，所以其在原点处值的差异并不重要。这使阶跃函数成为相对于光滑测试函数 $f(t)$ 的分布。这三个分布， $\Theta_r(t)$ ， $\Theta^l(t)$ 和 $\bar{\Theta}(t)$ 通过积分

$$\Theta[f] = \int dt \Theta(t - t') f(t'), \quad (1.310)$$

定义了测试函数的同一个线性泛函，这是分布的线性空间中的一个元素。

正如等式(1.162)后的声明，路径积分将指定分布乘积上的积分，因此将在第10章对分布理论进行重要的扩展。在这一过程中，阶跃函数 $\bar{\Theta}(t - t')$ 将发挥重要的作用。

为了后面的应用，引入一个密切相关的分布

$$\epsilon(t - t') \equiv \Theta(t - t') - \Theta(t' - t) = \bar{\Theta}(t - t') - \bar{\Theta}(t' - t), \quad (1.311)$$

这是一个在原点处由 -1 跳到 1 的阶梯函数:

$$\epsilon(t - t') = \begin{cases} 1 & \text{for } t > t', \\ 0 & \text{for } t = t', \\ -1 & \text{for } t < t'. \end{cases} \quad (1.312)$$

1.11 固定能量振幅

延时时间演化振幅(1.299)的傅里叶变换为

$$(\mathbf{x}_b|\mathbf{x}_a)_E = \int_{-\infty}^{\infty} dt_b e^{iE(t_b-t_a)/\hbar} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_b t_a)^R = \int_{t_a}^{\infty} dt_b e^{iE(t_b-t_a)/\hbar} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) \quad (1.313)$$

被称为固定能量振幅。

如果哈密顿量不含时，将等式(1.296)代入，发现固定能量振幅是解算子(resolvent operator)

$$\hat{R}(E) = \frac{i\hbar}{E - \hat{H} + i\eta}, \quad (1.314)$$

的矩阵元

$$(\mathbf{x}_b|\mathbf{x}_a)_E = \langle \mathbf{x}_b | \hat{R}(E) | \mathbf{x}_a \rangle \quad (1.315)$$

解算子是延时时间演化算符(1.298)的傅里叶变换：

$$\hat{R}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_b e^{iE(t_b-t_a)/\hbar} \hat{U}^R(t_b, t_a) = \int_{t_a}^{\infty} dt_b e^{iE(t_b-t_a)/\hbar} \hat{U}(t_b, t_a). \quad (1.316)$$

假定不含时的薛定谔方程可以完全求解，即可以知道方程

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle. \quad (1.317)$$

的所有解 $|\psi_n\rangle$ 。这些解满足完备性关系

$$\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = 1, \quad (1.318)$$

将其插入等式(1.296)右边的狄拉克左矢和右矢之间，得到谱表示

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = \sum_n \psi_n(\mathbf{x}_b) \psi_n^*(\mathbf{x}_a) \exp[-iE_n(t_b - t_a)/\hbar], \quad (1.319)$$

其中

$$\psi_n(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi_n \rangle \quad (1.320)$$

是本征态 $|\psi_n\rangle$ 对应的波函数。应用傅里叶变换(1.313)，得到

$$(\mathbf{x}_b|\mathbf{x}_a)_E = \sum_n \psi_n(\mathbf{x}_b) \psi_n^*(\mathbf{x}_a) R_n(E) = \sum_n \psi_n(\mathbf{x}_b) \psi_n^*(\mathbf{x}_a) \frac{i\hbar}{E - E_n + i\eta}. \quad (1.321)$$

固定能量振幅(1.313)与时间演化振幅包含着同样多关于系统的信息，后者可以由前者通过傅里叶逆变换得到

$$(\mathbf{x}_b t_a | \mathbf{x}_a t_a) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iE(t_b-t_a)/\hbar} (\mathbf{x}_b|\mathbf{x}_a)_E. \quad (1.322)$$

(1.321)中能量上的小 $i\eta$ 移动可以看做是作用在每一个能量值 E_n 上，即将能量由实能量轴向下移动了一个无穷小量。由此，波函数的指数行为被略微压低，并在时间的无穷远处趋于0:

$$e^{-i(E_n-i\eta)t/\hbar} \rightarrow 0. \quad (1.323)$$

这种 $i\eta$ 方法确保了傅里叶变换(1.322)的因果关系。当进行傅里叶积分(1.322)时，指数 $e^{iE(t_b-t_a)/\hbar}$ 总可以使复能量平面内的积分回路闭合为无穷大半圆， $t_b < t_a$ 时，这个半圆位于上半平面； $t_b > t_a$ 时，位于下半平面。 $i\eta$ 保证了在 $t_b < t_a$ 的情况下，闭合回路内没有极点，从而使传播子为零。另一方面， $t_b > t_a$ 时，下半平面的极点通过柯西留数定理给出了传播子的谱表示(1.319)。 $i\eta$ 方法将在2.3节再次得到应用。

如果本征态不简并，(1.321)在极点处的留数直接给出本征函数的乘积(简并情况必须单独进行讨论)。对于能量有连续本征值的系统，复能量平面存在分割(cut)，可以认为这个分割由紧密分布的极点排列而成。一般地，波函数可由振幅 $(\mathbf{x}_b|\mathbf{x}_a)_E$ 在切割处的跃变(discontinuity)重新给出，

$$\text{disc} \left(\frac{i\hbar}{E - E_n} \right) \equiv \frac{i\hbar}{E - E_n + i\eta} - \frac{i\hbar}{E - E_n - i\eta} = 2\pi\hbar\delta(E - E_n). \quad (1.324)$$

这里用到了关系式¹⁰

$$\frac{1}{E - E_n \pm i\eta} = \frac{\mathcal{P}}{E - E_n} \mp i\pi\delta(E - E_n), \quad (1.325)$$

其中， \mathcal{P} 表示取积分主值。当位于对 E 积分的内部时，这一关系式成立。

将固定能量振幅(1.321) $(\mathbf{x}_b|\mathbf{x}_a)_E$ 的跃变对能量进行积分，等于在 $\langle \mathbf{x}_b |$ 和 $| \mathbf{x}_a \rangle$ 之间插入完备性关系(1.318)，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} \text{disc} (\mathbf{x}_b|\mathbf{x}_a)_E = \sum_n \psi_n(\mathbf{x}_b)\psi_n^*(\mathbf{x}_a) = \langle \mathbf{x}_b | \mathbf{x}_a \rangle = \delta^{(D)}(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a). \quad (1.326)$$

完备性关系反映了解算子的下列性质：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} \text{disc} \hat{R}(E) = \hat{1}. \quad (1.327)$$

一般地，系统可以有连续谱，这种情况下，完备性关系既包含(1.318)式，也包含谱积分，即

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| + \int d\nu |\psi_\nu\rangle\langle\psi_\nu| = 1. \quad (1.328)$$

连续谱会产生复能量平面内的分支切割，且(1.326)式包括了跃变沿此切割的积分。为简明起见，经常省略这一切割。

¹⁰常被称为Sochocki's 公式。是按 $\eta > 0$ 的幂次展开的起始项: $1/(x \pm i\eta) = \mathcal{P}/x \mp i\pi\delta(x) + \eta[\pi\delta'(x) \pm id_x\mathcal{P}/x] + \mathcal{O}(\eta^2)$ 。

1.12 自由粒子振幅

哈密顿量算符为 $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2M$ 的自由粒子，其能谱是连续的。本征函数如(1.189)式，能量为 $E(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2M$ 。在等式(1.296)中插入完备性关系，可以得到自由粒子时间演化振幅的傅里叶形式

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{p}(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a) - \frac{\mathbf{p}^2}{2M}(t_b - t_a) \right] \right\}. \quad (1.329)$$

这样的动量积分很容易处理。首先将指数上量完全平方化，即

$$\mathbf{p}(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a) - \frac{1}{2M}\mathbf{p}^2(t_b - t_a) = \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{1}{M} \frac{\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a}{t_b - t_a} \right)^2 (t_b - t_a) - \frac{M}{2} \frac{(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)^2}{t_b - t_a}. \quad (1.330)$$

接着用平移后的新积分变量 $\mathbf{p}' = \mathbf{p} - (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)/(t_b - t_a)M$ 替换原有的积分变量，振幅(1.329)变为

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = F(t_b - t_a) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)^2}{t_b - t_a} \right], \quad (1.331)$$

其中， $F(t_b - t_a)$ 是新积分变量上的积分

$$F(t_b - t_a) \equiv \int \frac{d^D p'}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \frac{\mathbf{p}'^2}{2M} (t_b - t_a) \right\}. \quad (1.332)$$

这种积分可以用菲涅尔积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(i \frac{a}{2} p^2 \right) = \frac{1}{\sqrt{|a|}} \begin{cases} \sqrt{i}, & a > 0, \\ 1/\sqrt{i}, & a < 0. \end{cases} \quad (1.333)$$

处理。这里的平方根 \sqrt{i} 代表相因子 $e^{i\pi/4}$ ，高斯积分公式为

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{\alpha}{2} p^2 \right) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}, \quad \text{Re } \alpha > 0, \quad (1.334)$$

将其中的 α 由正值向复平面的右半面做解析延拓，可以得到这样的相因子。只要 $\text{Re } \alpha > 0$ ，这样的延拓可以直接进行。在边界处，即在正负虚轴的交界，就要格外小心。在 $\alpha = \pm ia + \eta$ 处 ($a > 0$ 且 $\eta > 0$)，积分肯定收敛并给出(1.333)。将Appendix 1B式做替换 $x^2 = z$ ，容易看出对 $\eta = 0$ 的情况，积分也同样收敛。

将等式(1.334)对 α 求导，给出更一般的高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi}} p^{2n} \exp \left(-\frac{\alpha}{2} p^2 \right) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \frac{(2n-1)!!}{\alpha^n} \quad \text{Re } \alpha > 0, \quad (1.335)$$

其中， $(2n-1)!!$ 定义为乘积 $(2n-1) \cdot (2n-3) \cdots 1$ 。而对于奇次幂 p^{2n+1} ，积分为零。在菲涅尔公式(1.333)中，被积函数多一个 p^{2n} ，导致积分结果多出一个因子 $(i/a)^n$ 。

由于菲涅尔公式是高斯公式进行解析延拓的特殊形式，所以在下文中我们将一直使用高斯积分这一名称，只有当强调指数上有虚数存在时，才用菲涅尔积分这一名称。

将菲涅尔公式用于(1.332)式，有

$$F(t_b - t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar (t_b - t_a)/M}^D}, \quad (1.336)$$

所以自由有质量点粒子的完整时间演化振幅为

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar (t_b - t_a)/M}^D} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)^2}{t_b - t_a} \right]. \quad (1.337)$$

在 $t_b \rightarrow t_a$ 的极限下，等式左边变为标量积 $\langle \mathbf{x}_b | \mathbf{x}_a \rangle = \delta^{(D)}(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)$ ，这意味着 δ 函数有下面的极限公式：

$$\delta^{(D)}(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a) = \lim_{t_b - t_a \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar (t_b - t_a)/M}^D} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)^2}{t_b - t_a} \right]. \quad (1.338)$$

将等式(1.329)代入(1.313)，得到固定能量振幅的积分形式

$$(\mathbf{x}_b | \mathbf{x}_a)_E = \int_0^\infty d(t_b - t_a) \int \frac{d^D p}{(2\pi \hbar)^D} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{p}(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a) + (t_b - t_a) \left(E - \frac{\mathbf{p}^2}{2M} \right) \right] \right\}. \quad (1.339)$$

进行时间积分，有

$$(\mathbf{x}_b | \mathbf{x}_a)_E = \int \frac{d^D p}{(2\pi \hbar)^D} \exp [i\mathbf{p}(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)] \frac{i\hbar}{E - \mathbf{p}^2/2M + i\eta}, \quad (1.340)$$

其中，我们已经在积分中加入了压低因子 $e^{-\eta(t_b - t_a)}$ ，以保证大 $t_b - t_a$ 处的收敛性。为了得到更具体的结果，我们计算(1.337)式的傅里叶变换：

$$(\mathbf{x}_b | \mathbf{x}_a)_E = \int_0^\infty d(t_b - t_a) \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar (t_b - t_a)/M}^D} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[E(t_b - t_a) + \frac{M}{2} \frac{(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)^2}{t_b - t_a} \right] \right\}. \quad (1.341)$$

对 $E < 0$ 的情况，令

$$\kappa \equiv \sqrt{-2ME/\hbar^2}, \quad (1.342)$$

并借助公式¹¹

$$\int_0^\infty dt t^{\nu-1} e^{-i\gamma t + i\beta/t} = 2 \left(\frac{\beta}{\gamma} \right)^{\nu/2} e^{-i\nu\pi/2} K_{-\nu}(2\sqrt{\beta\gamma}), \quad (1.343)$$

¹¹I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Academic Press, New York, 1980, Formulas 3.471.10, 3.471.11, and 8.432.6

进行积分，其中 $K_\nu(z)$ 是修正贝塞尔函数，满足 $K_\nu(z) = K_{-\nu}(z)$ ¹² 积分的结果为

$$(\mathbf{x}_b|\mathbf{x}_a)_E = -i \frac{2M}{\hbar} \frac{\kappa^{D-2}}{(2\pi)^{D/2}} \frac{K_{D/2-1}(\kappa R)}{(\kappa R)^{D/2-1}}, \quad (1.344)$$

其中， $R \equiv |\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a|$ 。最简单的修正贝塞尔函数为¹³

$$K_{1/2}(z) = K_{-1/2}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}, \quad (1.345)$$

所以我们发现，对 $D = 1, 2, 3$ 的情况，振幅分别为

$$-i \frac{M}{\hbar} \frac{1}{\kappa} e^{-\kappa R}, \quad -i \frac{M}{\hbar} \frac{1}{\pi} K_0(\kappa R), \quad -i \frac{M}{\hbar} \frac{1}{2\pi R} e^{-\kappa R}. \quad (1.346)$$

在 $R = 0$ 处，振幅(1.344)在 $D \leq 2$ 的情况下有限；在 $R = 0$ 处，可以应用贝塞尔函数的小变量行为¹⁴

$$K_\nu(z) = K_{-\nu}(z) \approx \frac{1}{2} \Gamma(\nu) \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu} \quad \text{for } \operatorname{Re} \nu > 0, \quad (1.347)$$

进而得到

$$(\mathbf{x}|\mathbf{x})_E = -i \frac{2M}{\hbar} \frac{\kappa^{D-2}}{(4\pi)^{D/2}} \Gamma(1 - D/2). \quad (1.348)$$

这一结果可以解析延拓到 $D > 2$ 的情况，后面还将用到这种延拓(例如在4.9.4小节中)。

对 $E > 0$ 的情况，令

$$k \equiv \sqrt{2ME/\hbar^2} \quad (1.349)$$

应用公式¹⁵

$$\int_0^\infty dt t^{\nu-1} e^{i\gamma t + i\beta/t} = i\pi \left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^{\nu/2} e^{-i\nu\pi/2} H_{-\nu}^{(1)}(2\sqrt{\beta\gamma}), \quad (1.350)$$

其中， $H_\nu^{(1)}(z)$ 是汉克尔函数，并得到

$$(\mathbf{x}_b|\mathbf{x}_a)_E = \frac{M\pi}{\hbar} \frac{k^{D-2}}{(2\pi)^{D/2}} \frac{H_{D/2-1}(kR)}{(kR)^{D/2-1}}. \quad (1.351)$$

当能量由负向正进行延拓时，即将 κ 替换为 $e^{-i\pi/2}k = -ik$ ，关系式¹⁶

$$K_\nu(-iz) = \frac{\pi}{2} i e^{i\nu\pi/2} H_\nu^{(1)}(z) \quad (1.352)$$

¹²ibid., Formula 8.486.16

¹³M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York, 1965, Formula 10.2.17.

¹⁴ibid., Formula 9.6.9.

¹⁵ibid., Formulas 3.471.11 and 8.421.7.

¹⁶ibid., Formula 8.407.1.

将两个公式彼此连系在一起。

大距离的渐进行为¹⁷

$$K_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}, \quad H_\nu^{(1)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{i(z-\nu\pi/2-\pi/4)} \quad (1.353)$$

表明在 $E < 0$ 的情况下，固定能量振幅的行为类似于

$$(\mathbf{x}_b|\mathbf{x}_a)_E \approx -i \frac{M}{\hbar} \kappa^{D-2} \frac{1}{(2\pi)^{(D-1)/2}} \frac{1}{(\kappa R)^{(D-1)/2}} e^{-\kappa R/\hbar}, \quad (1.354)$$

在 $E > 0$ 的情况下，类似于

$$(\mathbf{x}_b|\mathbf{x}_a)_E \approx \frac{M}{\hbar} k^{D-2} \frac{1}{(2\pi i)^{(D-1)/2}} \frac{1}{(kR)^{(D-1)/2}} e^{ikR/\hbar}. \quad (1.355)$$

对 $D = 1$ 和 3 的情况，这些渐进表示对所有的 R 都成立。

1.13 一般拉格朗日系统的量子力学

如果系统由一组完全一般的拉格朗日坐标 q_1, \dots, q_N 描述，一般不能将量子力学系统方法直接扩展到这样的系统。只有在特殊的情况下，当 q_i ($i = 1, \dots, N$) 是 D 维欧式空间的曲线重参数化时，之前讨论的对应关系才足以将系统量子化。这时有 $N = D$ ，且将薛定谔方程中的变量 x^i 换为 q_j 才能导致正确的量子力学。将曲线坐标用希腊字母上标标记，即用 q^μ 代替 q_j 。当我们想要将所有的方程写成坐标变换下协变的形式时，这种标记很有用。在等式(1.1)中对广义坐标进行最初定义时，由于忽略了变换性质，所以这种标记并不必要。而对笛卡尔坐标，我们将采用拉丁字母作为上标或者下标。坐标变换 $x^i = x^i(q^\mu)$ 意味着导数 $\partial_\mu \equiv \partial/\partial q^\mu$ 和 $\partial_i \equiv \partial/\partial x^i$ 间有关系式：

$$\partial_\mu = e^i{}_\mu(q) \partial_i, \quad (1.356)$$

变换矩阵为

$$e^i{}_\mu(q) \equiv \partial_\mu x^i(q) \quad (1.357)$$

令 $e_i{}^\mu(q) = \partial q^\mu / \partial x^i$ 为逆矩阵(假设逆存在)，与 $e^i{}_\mu$ 一起，满足正交和完备关系

$$e^i{}_\mu e_i{}^\nu = \delta_\mu{}^\nu, \quad e^i{}_\mu e_j{}^\mu = \delta^i{}_j. \quad (1.358)$$

(1.356) 反转为

$$\partial_i = e_i{}^\mu(q) \partial_\mu \quad (1.359)$$

并给出了笛卡尔量子力学动量算符的曲线变换

$$\hat{p}_i = -i\hbar \partial_i = -i\hbar e_i{}^\mu(q) \partial_\mu. \quad (1.360)$$

¹⁷ibid., Formulas 8.451.6 and 8.451.3.

自由粒子的哈密顿量算符

$$\hat{H}_0 = \hat{T} = \frac{1}{2M} \hat{\mathbf{p}}^2 = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \quad (1.361)$$

变为

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta, \quad (1.362)$$

其中， Δ 是拉普拉斯算符（Laplacian），在曲线坐标中可以表示为

$$\begin{aligned} \Delta &= \partial_i^2 = e^{i\mu} \partial_\mu e_i^\nu \partial_\nu \\ &= e^{i\mu} e_i^\nu \partial_\mu \partial_\nu + (e^{i\mu} \partial_\mu e_i^\nu) \partial_\nu. \end{aligned} \quad (1.363)$$

在这引入度规张量

$$g_{\mu\nu}(q) \equiv e_{i\mu}(q) e^i_\nu(q), \quad (1.364)$$

其逆为

$$g^{\mu\nu}(q) = e^{i\mu}(q) e_i^\nu(q), \quad (1.365)$$

由 $g^{\mu\nu} g_{\nu\lambda} = \delta^\mu_\lambda$ 定义。仿射联络为

$$\Gamma_{\mu\nu}^\lambda(q) = -e^i_\nu(q) \partial_\mu e_i^\lambda(q) = e_i^\lambda(q) \partial_\mu e^i_\nu(q). \quad (1.366)$$

这样拉普拉斯算子可以写为

$$\Delta = g^{\mu\nu}(q) \partial_\mu \partial_\nu - \Gamma_\mu^{\mu\nu}(q) \partial_\nu, \quad (1.367)$$

其中， $\Gamma_\mu^{\lambda\nu}$ 定义为下面的收缩（contraction）

$$\Gamma_\mu^{\lambda\nu} \equiv g^{\lambda\kappa} \Gamma_{\mu\kappa}^\nu. \quad (1.368)$$

(1.364)式被称为度规张量的原因显而易见：笛卡尔坐标中无穷小的两点间距离的平方定义为

$$ds^2 \equiv d\mathbf{x}^2 \quad (1.369)$$

在曲线坐标中变为

$$ds^2 = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial q^\mu} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial q^\nu} dq^\mu dq^\nu = g_{\mu\nu}(q) dq^\mu dq^\nu. \quad (1.370)$$

无穷小的体积元 d^Dx 为

$$d^Dx = \sqrt{g} d^Dq, \quad (1.371)$$

其中

$$g(q) \equiv \det(g_{\mu\nu}(q)) \quad (1.372)$$

是度规张量的行列式。应用这一行列式，可以构造下面的量

$$\Gamma_\mu \equiv g^{-1/2} (\partial_\mu g^{1/2}) = \frac{1}{2} g^{\lambda\kappa} (\partial_\mu g_{\lambda\kappa}) \quad (1.373)$$

可以看出，这个量等于联络的一次收缩

$$\Gamma_\mu = \Gamma_{\mu\lambda}^\lambda. \quad (1.374)$$

从逆度规(1.365)出发，进一步有

$$\Gamma_\mu^{\mu\nu} = -\partial_\mu g^{\mu\nu} - \Gamma_\mu^{\nu\mu}. \quad (1.375)$$

作用在坐标变换 $x^i(q)$ 的求导 $\partial_\mu, \partial_\nu$ 彼此对易，导致 $\Gamma_{\mu\nu}^\lambda$ 的指标 $\mu\nu$ 交换对称，即 $\Gamma_{\mu\nu}^\lambda = \Gamma_{\nu\mu}^\lambda$ ，因此有 $\Gamma_\mu^{\nu\mu} = \Gamma^\nu$ 。利用这一结论，结合(1.373)式，有

$$\Gamma_\mu^{\mu\nu} = -\frac{1}{\sqrt{g}}(\partial_\mu g^{\mu\nu} \sqrt{g}), \quad (1.376)$$

利用上式，可将拉普拉斯算符 Δ 写成更紧致的形式

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{g}}\partial_\mu g^{\mu\nu} \sqrt{g}\partial_\nu. \quad (1.377)$$

这一表达式称为拉普拉斯-贝尔特拉米算符 (*Laplace-Beltrami operator*)。¹⁸

至此，我们可以看到对于欧式空间中的哈密顿量

$$H(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{x}) = \frac{1}{2M}\hat{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{x}), \quad (1.378)$$

曲线坐标下的薛定谔方程变为

$$\hat{H}\psi(q, t) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + V(q) \right] \psi(q, t) = i\hbar\partial_t\psi(q, t), \quad (1.379)$$

其中， $V(q)$ 是 $V(\mathbf{x}(q))$ 的简写。两个波函数的标量积 $\int d^Dx \psi_2^*(\mathbf{x}, t)\psi_1(\mathbf{x}, t)$ 确定了系统的跃迁振幅，现在可写为

$$\int d^Dq \sqrt{g} \psi_2^*(q, t)\psi_1(q, t). \quad (1.380)$$

将笛卡尔坐标下的拉格朗日量变换到曲线坐标下，并对变换后的拉格朗日量直接应用正则量子化形式，并不能得到相应的薛定谔方程。如笛卡尔坐标下的拉格朗日量为

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \frac{M}{2}\dot{\mathbf{x}}^2 - V(\mathbf{x}). \quad (1.381)$$

对速度的变换为

$$\dot{x}^i = e^i_\mu(q)\dot{q}^\mu, \quad (1.382)$$

可知拉格朗日量变为

$$L(q, \dot{q}) = \frac{M}{2}g_{\mu\nu}(q)\dot{q}^\mu\dot{q}^\nu - V(q). \quad (1.383)$$

¹⁸更多细节将在后面的等式(11.12)–(11.18)中给出。

精确到因子 M , 度规等于系统的黑森 (Hessian) 度规, 而黑森 (Hessian) 度规只依赖 q^μ [回顾(1.12)式]:

$$H_{\mu\nu}(q) = Mg_{\mu\nu}(q). \quad (1.384)$$

正则动量为

$$p_\mu \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\mu} = Mg_{\mu\nu}\dot{q}^\nu. \quad (1.385)$$

相应的量子力学动量算符 \hat{p}_μ 必须是厄米的, 并满足正则对易关系(1.268):

$$\begin{aligned} [\hat{p}_\mu, \hat{q}^\nu] &= -i\hbar\delta_\mu^\nu, \\ [\hat{q}^\mu, \hat{q}^\nu] &= 0, \\ [\hat{p}_\mu, \hat{p}_\nu] &= 0. \end{aligned} \quad (1.386)$$

有一个明显的解,

$$\hat{p}_\mu = -i\hbar g^{-1/4} \partial_\mu g^{1/4}, \quad \hat{q}^\mu = q^\mu. \quad (1.387)$$

对 $-i\hbar g^{-z} \partial_\mu g^z$ 任意的幂次 z , 正则对易关系都成立, 但只有当 $z = 1/4$ 时, 动量算符才是厄米的:

$$\begin{aligned} \int d^3q \sqrt{g} \Psi_2^*(q, t) [-i\hbar g^{-1/4} \partial_\mu g^{1/4} \Psi_1(q, t)] &= \int d^3q g^{1/4} \Psi_2^*(q, t) [-i\hbar \partial_\mu g^{1/4} \Psi_1(q, t)] \\ &= \int d^3q \sqrt{g} [-i\hbar g^{-1/4} \partial_\mu g^{1/4} \Psi_2(q, t)]^* \Psi_1(q, t), \end{aligned} \quad (1.388)$$

可以通过分部积分进行验证。

用(1.373)式中的量, 动量算符还可以写为

$$\hat{p}_\mu = -i\hbar(\partial_\mu + \frac{1}{2}\Gamma_\mu). \quad (1.389)$$

现在考虑拉格朗日量(1.383)对应的哈密顿量, 通过(1.385)可以将其写为

$$H = p_\mu \dot{q}^\mu - L = \frac{1}{2M} g_{\mu\nu}(q) p^\mu p^\nu + V(q). \quad (1.390)$$

如果想要将这一经典量转化为哈密顿量算符, 我们会遇到算符排序问题 (operator-ordering problem) 对应原理要求将动量 p_μ 替换为动量算符 \hat{p}_μ , 但是却并没有指定这些算符相对于 $g^{\mu\nu}(q)$ 中 q^μ 的位置。哈密顿算符的厄米性可以提供一个重要的约束, 但却不足以确定唯一的算符次序。例如, 我们可以将正则哈密顿量算符定义为

$$\hat{H}_{\text{can}} \equiv \frac{1}{2M} \hat{p}^\mu g_{\mu\nu}(q) \hat{p}^\nu + V(q), \quad (1.391)$$

其中动量算符被对称的放在逆度规的两边, 以保证厄米性。尽管厄米, 这个算符却不等于(1.379)中正确的薛定谔算符。动能项包含了正则拉普拉斯算符

$$\Delta_{\text{can}} = (\partial_\mu + \frac{1}{2}\Gamma_\mu) g^{\mu\nu}(q) (\partial_\nu + \frac{1}{2}\Gamma_\nu). \quad (1.392)$$

它与(1.379)中拉普拉斯-贝尔特拉米算符(1.377)的差值为

$$\Delta - \Delta_{\text{can}} = -\frac{1}{2}\partial_\mu(g^{\mu\nu}\Gamma_\nu) - \frac{1}{4}g^{\mu\nu}\Gamma_\nu\Gamma_\mu. \quad (1.393)$$

将 $g^{1/4}$ 和 $g^{-1/4}$ 对称地放在正则算符中合适的位置，即可得到正确的哈密顿量[5]：

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}g^{-1/4}\hat{p}_\mu g^{1/4}g^{\mu\nu}(q)g^{1/4}\hat{p}_\nu g^{-1/4} + V(q). \quad (1.394)$$

这一算符与(1.391)有着相同经典极限(1.390)。遗憾的是，对应原理并不能在将经典量替换为算符之前就为其指定排列次序。

最简单的、正则量子化规则失效的系统是平面内、用极坐标 $q^1 = r, q^2 = \varphi$ 描述的自由粒子：

$$x^1 = r \cos \varphi, \quad x^2 = r \sin \varphi. \quad (1.395)$$

无穷小距离的平方为 $ds^2 = dr^2 + r^2 d\varphi^2$ ，则度规可以表示为

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r^2 \end{pmatrix}_{\mu\nu}. \quad (1.396)$$

其行列式

$$g = r^2 \quad (1.397)$$

度规的逆为

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r^{-2} \end{pmatrix}^{\mu\nu}. \quad (1.398)$$

拉普拉斯-贝尔特拉米算符变为

$$\Delta = \frac{1}{r}\partial_r r\partial_r + \frac{1}{r^2}\partial_\varphi^2. \quad (1.399)$$

另一方面，正则拉普拉斯算符为

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{can}} &= (\partial_r + 1/2r)^2 + \frac{1}{r^2}\partial_\varphi^2 \\ &= \partial_r^2 + \frac{1}{r}\partial_r - \frac{1}{4r^2} + \frac{1}{r^2}\partial_\varphi^2. \end{aligned} \quad (1.400)$$

因此，二者的差值(1.393)为

$$\Delta_{\text{can}} - \Delta = -\frac{1}{4r^2}. \quad (1.401)$$

即使(1.400)式中的正则量子化表示 $\hat{p}^\mu g_{\mu\nu}(q) \hat{p}^\nu$ 没有明显的算符排序问题，这一差值也会出现。只有引入因子 $g^{1/4}$ 和 $g^{-1/4}$ 时，才会产生算符排序问题，于是为了得到正确的结果，就必须指定算符的排列次序。

如果拉格朗日坐标 q_i 不能恰好对欧式空间、而是对一般几何结构的点进行重参数化，那么我们不能按照上面的步骤，由笛卡尔坐标下的拉普拉斯算子通过坐标变换，推导出拉普拉斯-贝尔特拉米算符。由于正则量子化规则在曲线坐标下

不可靠，人们第一反应就是，在这样系统的量子化过程中可能存在一些困难。这就是为什么文献中总有很多建议处理这一问题的原因[6]。幸运的是，存在一大类非笛卡尔系统允许对其唯一的量子力学描述，尽管是基于完全不同出发点的描述。这些系统有着共同的性质：它们的哈密顿量可以用广义坐标下运动群的生成元表示。由于对称性的原因，不再为正则变量 p 和 q 的泊松括号强加对应原理，而是对群生成元和坐标的泊松括号强加对应原理。群生成元的泊松括号指定了群的结构，包含生成元和坐标的泊松括号指定了群在位形空间中的表示。将这些泊松括号替换为对易关系，就构成了正则量子化由笛卡尔坐标向非笛卡尔坐标的正确推广。这种方法称之为群量子化（group quantization）。而这样的替换规则将被称为群对应原理（group correspondence principle）。欧式空间的正则对易关系可以看做是群生成元（即群的李代数）间对易关系的特例。笛卡尔坐标下，运动群是欧式群，包括平移和转动。相应的生成元分别为动量和角动量。根据群对应原理，算符和坐标的泊松括号将被对易关系取代。因此在欧式空间中，群生成元和坐标的对易关系就导致了正则量子化规则，这似乎也是正则量子化之所以正确的根本原因。如果在一个系统中，其能量依赖运动群的生成元，而不是平移的生成元，例如角动量，那么在量子化过程中不再需要位置和动量的对易关系，而是需要那些生成元的对易关系。

这样系统的实例有球面上的粒子和陀螺，下面我们将讨论这些系统的量子化。

1.14 球面上的粒子

粒子沿着半径为 r 的球面运动，其坐标为

$$x^1 = r \sin \theta \cos \varphi, \quad x^2 = r \sin \theta \sin \varphi, \quad x^3 = r \cos \theta, \quad (1.402)$$

拉格朗日量为

$$L = \frac{Mr^2}{2} (\dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2). \quad (1.403)$$

正则动量为

$$p_\theta = Mr^2 \dot{\theta}, \quad p_\varphi = Mr^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}, \quad (1.404)$$

给出经典哈密顿量

$$H = \frac{1}{2Mr^2} \left(p_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} p_\varphi^2 \right). \quad (1.405)$$

根据正则量子化规则，动量将变为算符

$$\hat{p}_\theta = -i\hbar \frac{1}{\sin^{1/2} \theta} \partial_\theta \sin^{1/2} \theta, \quad \hat{p}_\varphi = -i\hbar \partial_\varphi. \quad (1.406)$$

但正如前面的讨论，将这些动量算符带入哈密顿量(1.405)，并不能给出正确的哈密顿量算符。而且，并不存在合适的变换，将球面坐标变为笛卡尔坐标¹⁹，这就使球面上的粒子无法通过笛卡尔坐标的量子化规则(1.268)：

$$[\hat{p}_i, \hat{x}^j] = -i\hbar \delta_i^j,$$

¹⁹ 尽管如此，存在某些不完整的、多值无穷小坐标变换，将弯曲空间中的无穷小距离变成平直空间中的无穷小距离。将在10.2节和Appendix 10A中引入并应用这种变换，再一次得到和这里一致的量子力学。

$$\begin{aligned} [\hat{x}^i, \hat{x}^j] &= 0, \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] &= 0. \end{aligned} \quad (1.407)$$

进行处理。这里唯一可以借助的就是球面上运动群的性质。笛卡尔坐标中，角动量

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} \quad (1.408)$$

可以唯一地量子化，变为算符

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (1.409)$$

其分量满足转动群李代数的对易关系

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \hat{L}_k \quad (i, j, k \text{ cyclic}). \quad (1.410)$$

注意，在每一个 \hat{L}_k 中， \hat{x}^i 和 \hat{p}_i 都带有不同的指标（彼此对易），所以这里并没有算符排序问题。角动量算符的一个重要性质是其在坐标 \mathbf{x} 下的同质性，这会导致当从笛卡尔坐标变换到球坐标时

$$x^1 = r \sin \theta \cos \varphi, \quad x^2 = r \sin \theta \sin \varphi, \quad x^3 = r \cos \theta, \quad (1.411)$$

角动量不依赖径向坐标，而成为角度 θ, φ 的微分算符：

$$\begin{aligned} \hat{L}_1 &= i\hbar (\sin \varphi \partial_\theta + \cot \theta \cos \varphi \partial_\varphi), \\ \hat{L}_2 &= -i\hbar (\cos \varphi \partial_\theta - \cot \theta \sin \varphi \partial_\varphi), \\ \hat{L}_3 &= -i\hbar \partial_\varphi. \end{aligned} \quad (1.412)$$

接下来用一种自然的方式将系统量子化，这里要用到角动量算符 \hat{L}_i 。将经典哈密顿量(1.405)用如下经典角动量

$$\begin{aligned} L_1 &= Mr^2 (-\sin \varphi \dot{\theta} - \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \dot{\varphi}), \\ L_2 &= Mr^2 (\cos \varphi \dot{\theta} - \sin \theta \cos \theta \sin \varphi \dot{\varphi}), \\ L_3 &= Mr^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi} \end{aligned} \quad (1.413)$$

重新表示，有

$$H = \frac{1}{2Mr^2} \mathbf{L}^2, \quad (1.414)$$

将角动量替换为算符(1.412)，结果就是哈密顿量算符：

$$\hat{H} = \frac{1}{2Mr^2} \hat{\mathbf{L}}^2 = -\frac{\hbar^2}{2Mr^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \right]. \quad (1.415)$$

旋转不变算符 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 可以用一些本征函数进行对角化，通过选择合适的本征函数，可以同时将角动量的一个分量 \hat{L}_i ，比如第三分量 \hat{L}_3 对角化，这时的本征函数就是球谐函数：

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (1.416)$$

这里的 $P_l^m(z)$ 是勒让德多项式

$$P_l^m(z) = \frac{1}{2^l l!} (1 - z^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (z^2 - 1)^l. \quad (1.417)$$

球谐函数彼此正交

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (1.418)$$

上面的函数标量积转动不变。

从群量子化中可以学到两个要点。第一，将等式(1.406)代入(1.405)得到正则量子化后的哈密顿量算符，但这却与正确的结果不相符。将因子

$$g^{-1/4} = r^{-1} \sin^{-1/2} \theta, \quad g^{1/4} = r \sin^{1/2} \theta \quad (1.419)$$

放在动量算符之间（如同等式(1.394)），才可以得到正确的哈密顿量算符。第二，如同极坐标系的情况，正确的哈密顿量算符等于

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta, \quad (1.420)$$

其中， Δ 是对应度规

$$g_{\mu\nu} = r^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sin^2 \theta \end{pmatrix}, \quad (1.421)$$

的拉普拉斯-贝尔特拉米算符

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \right]. \quad (1.422)$$

1.15 陀螺

对于陀螺，最佳的切入点同样不是经典拉格朗日量，而是用经典角动量表示的哈密顿量。在两个转动惯量相等的对称情况下，哈密顿量可以写为

$$H = \frac{1}{2I_\xi} (L_\xi^2 + L_\eta^2) + \frac{1}{2I_\zeta} L_\zeta^2, \quad (1.423)$$

其中， L_ξ, L_η, L_ζ 是轨道角动量在主体坐标轴方向的分量，而 $I_\xi, I_\eta \equiv I_\xi, I_\zeta$ 是相应的转动惯量。质点集合的经典角动量为

$$\mathbf{L} = \sum_\nu \mathbf{x}_\nu \times \mathbf{p}_\nu, \quad (1.424)$$

对全部的质点进行求和。角动量有唯一的算符形式

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_\nu \hat{\mathbf{x}}_\nu \times \hat{\mathbf{p}}_\nu, \quad (1.425)$$

\hat{L}_i 之间的对易关系如等式(1.410)。由于不改变两个质量的间距，转动和刚体的约束条件对易。如果刚体的质心放在原点，唯一的动力学自由度就是空间中的指向 (orientation)。这些指向可由旋转矩阵唯一确定，而旋转矩阵可将刚体由某个标准的指向转到实际的指向。可以这样选取标准指向，使主体坐标轴分别沿 x, y, z 方向。转动可以表示为 3×3 实正交矩阵 R_{ij} ，矩阵 R_{ij} 可以进行分解

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_3(\alpha)R_2(\beta)R_3(\gamma), \quad (1.426)$$

其中， $R_3(\alpha)$ ， $R_3(\gamma)$ 是绕 z 轴转 α ， γ 角的转动； $R_2(\beta)$ 是绕 y 轴转 β 角的转动。绕坐标轴的转动矩阵可以用指数表示

$$R_i(\delta) \equiv e^{-i\delta L_i/\hbar}, \quad (1.427)$$

其中， δ 是转动的角度， L_i 是转动生成元的 3×3 矩阵表示，矩阵元为

$$(L_i)_{jk} = -i\hbar\epsilon_{ijk}. \quad (1.428)$$

容易验证这三个生成元矩阵满足角动量算符的对易关系(1.410)。转动角 α, β, γ 被称为欧拉角。

借助 3×3 转动矩阵，可以将绕三个坐标轴的无穷小转动表示为三个欧拉角的微分算符。令 $\psi(R)$ 是陀螺的波函数，描述不同指向的几率振幅，将标准指向通过转动矩阵 $R = R(\alpha, \beta, \gamma)$ 进行转动，即可得到这些不同的指向。经过进一步的转动 $R(\alpha', \beta', \gamma')$ ，波函数变为 $\psi'(R) = \psi(R^{-1}(\alpha', \beta', \gamma')R)$ 。这一变换可以用么正的微分算符描述

$$\hat{U}(\alpha', \beta', \gamma') \equiv e^{-i\alpha' \hat{L}_3} e^{-i\beta' \hat{L}_2} e^{-i\gamma' \hat{L}_3}, \quad (1.429)$$

其中， \hat{L}_i 是生成元的微分表示。 3×3 矩阵 $R^{-1}(\alpha, \beta, \gamma)$ 有下列导数

$$\begin{aligned} -i\hbar\partial_\alpha R^{-1} &= R^{-1} L_3, \\ -i\hbar\partial_\beta R^{-1} &= R^{-1} (\cos \alpha L_2 - \sin \alpha L_1), \\ -i\hbar\partial_\gamma R^{-1} &= R^{-1} [\cos \beta L_3 + \sin \beta (\cos \alpha L_1 + \sin \alpha L_2)]. \end{aligned} \quad (1.430)$$

第一个等式是平庸的，第二个来自生成元的旋转

$$e^{-i\alpha L_3/\hbar} L_2 e^{i\alpha L_3/\hbar} = \cos \alpha L_2 - \sin \alpha L_1, \quad (1.431)$$

上式的推导需要借助于李氏展开公式

$$e^{-iA} B e^{iA} = 1 - i[A, B] + \frac{i^2}{2!}[A, [A, B]] + \dots, \quad (1.432)$$

以及 3×3 矩阵 L_i 的对易关系(1.428)。第三个等式来自转动

$$e^{-i\beta L_2/\hbar} L_3 e^{i\beta L_2/\hbar} = \cos \beta L_3 + \sin \beta L_1. \quad (1.433)$$

翻转关系式(1.430)，得到生成转动的微分算符[7]：

$$\begin{aligned} \hat{L}_1 &= i\hbar \left(\cos \alpha \cot \beta \partial_\alpha + \sin \alpha \partial_\beta - \frac{\cos \alpha}{\sin \beta} \partial_\gamma \right), \\ \hat{L}_2 &= i\hbar \left(\sin \alpha \cot \beta \partial_\alpha - \cos \alpha \partial_\beta - \frac{\sin \alpha}{\sin \beta} \partial_\gamma \right), \\ \hat{L}_3 &= -i\hbar\partial_\alpha. \end{aligned} \quad (1.434)$$

将微分算符指数化后，可以推导出

$$\begin{aligned}\hat{U}(\alpha', \beta', \gamma') R^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) \hat{U}^{-1}(\alpha', \beta', \gamma') &= R^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) R(\alpha', \beta', \gamma'), \\ \hat{U}(\alpha', \beta', \gamma') R(\alpha, \beta, \gamma) \hat{U}^{-1}(\alpha', \beta', \gamma') &= R^{-1}(\alpha', \beta', \gamma') R(\alpha, \beta, \gamma),\end{aligned}\quad (1.435)$$

使得 $\hat{U}(\alpha', \beta', \gamma') \psi(R) = \psi'(R)$ ，这正是想要的结果。

在哈密顿量(1.423)中，需要 $\hat{\mathbf{L}}$ 沿轴线的分量，这需要将 3×3 矩阵 L_i 做转动 $R(\alpha, \beta, \gamma)$ ：

$$\begin{aligned}L_\xi &= RL_1R^{-1} = \cos \gamma \cos \beta (\cos \alpha L_1 + \sin \alpha L_2) \\ &\quad + \sin \gamma (\cos \alpha L_2 - \sin \alpha L_1) - \cos \gamma \sin \beta L_3, \\ L_\eta &= RL_2R^{-1} = -\sin \gamma \cos \beta (\cos \alpha L_1 + \sin \alpha L_2) \\ &\quad + \cos \gamma (\cos \alpha L_2 - \sin \alpha L_1) + \sin \gamma \sin \beta L_3, \\ L_\zeta &= RL_3R^{-1} = \cos \beta L_3 + \sin \beta (\cos \alpha L_1 + \sin \alpha L_2),\end{aligned}\quad (1.436)$$

并在最后的表达式中做替换 $L_i \rightarrow \hat{L}_i$ 。将(1.434)代入，得到算符：

$$\begin{aligned}\hat{L}_\xi &= i\hbar \left(-\cos \gamma \cot \beta \partial_\gamma - \sin \gamma \partial_\beta + \frac{\cos \gamma}{\sin \beta} \partial_\alpha \right), \\ \hat{L}_\eta &= i\hbar \left(\sin \gamma \cot \beta \partial_\gamma - \cos \gamma \partial_\beta - \frac{\sin \gamma}{\sin \beta} \partial_\alpha \right), \\ \hat{L}_\zeta &= -i\hbar \partial_\gamma.\end{aligned}\quad (1.437)$$

注意，与等式(1.410)中算符 \hat{L}_i 的对易关系相比，这些算符的对易关系多了一个负号：²⁰

$$[\hat{L}_\xi, \hat{L}_\eta] = -i\hbar \hat{L}_\zeta, \quad \xi, \eta, \zeta = \text{cyclic}. \quad (1.438)$$

为理解这一个负号，将算符重新写为

$$\hat{L}_\xi = a_\xi^i \hat{L}_i, \quad \hat{L}_\eta = a_\eta^i \hat{L}_i, \quad \hat{L}_\zeta = a_\zeta^i \hat{L}_i, \quad (1.439)$$

其中， $a_\xi^i, a_\eta^i, a_\zeta^i$ 是轴线的分量。 $[\hat{L}_i, a_\xi^j] = i\hbar \epsilon_{ijk} a_\xi^k$ 给出这些分量在转动时的行为，可以看出这些分量为矢量算符。容易验证，正是这一性质使(1.438)与(1.410)符号相反。

现在对(1.423)中的哈密顿量应用对应原理，即将其中的经典角动量替换为算符。只应用 $\hat{L}_\xi, \hat{L}_\eta, \hat{L}_\zeta$ 之间的对易关系，即可得到能谱及波函数。能谱为

$$E_{L\Lambda} = \hbar^2 \left[\frac{1}{2I_\xi} L(L+1) + \left(\frac{1}{2I_\zeta} - \frac{1}{2I_\xi} \right) \Lambda^2 \right], \quad (1.440)$$

其中， $L(L+1), L = 0, 1, 2, \dots$ 是 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 的本征值，而 $\Lambda = -L, \dots, L$ 是 \hat{L}_ζ 的本征值。波函数为转动群的表示矩阵元。如果用欧拉角 α, β, γ 指定轴线的指向，则波函数为

$$\psi_{L\Lambda m}(\alpha, \beta, \gamma) = D_{m\Lambda}^L(-\alpha, -\beta, -\gamma). \quad (1.441)$$

²⁰当作用于不含 α 的函数时，并做替换 $\beta \rightarrow \theta$ 和 $\gamma \rightarrow \varphi$ ，这些算符与(1.412)中的算符相同，准确到 \hat{L}_1 的符号。

这里的 m' 是 \hat{L}_3 的本征值，即磁量子数，而 $D_{m\Lambda}^L(\alpha, \beta, \gamma)$ 是角动量 L 的表示矩阵。由(1.429)式，可以将其分解

$$D_{mm'}^L(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i(m\alpha+m'\gamma)} d_{mm'}^L(\beta), \quad (1.442)$$

其中

$$\begin{aligned} d_{mm'}^L(\beta) &= \left[\frac{(L+m')!(L-m')!}{(L+m)!(L-m)!} \right]^{1/2} \\ &\times \left(\cos \frac{\beta}{2} \right)^{m+m'} \left(-\sin \frac{\beta}{2} \right)^{m-m'} P_{L-m'}^{(m'-m, m'+m)}(\cos \beta). \end{aligned} \quad (1.443)$$

对于 $j = 1/2$ 的情况，上式就是绕 y 轴的转动的旋量表示

$$d_{m'm}^{1/2}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \beta/2 & -\sin \beta/2 \\ \sin \beta/2 & \cos \beta/2 \end{pmatrix}. \quad (1.444)$$

指标为 $+1/2, -1/2$ 。生成元 \hat{L}_i 的自旋 $1/2$ 的表示矩阵，即著名的泡利自旋矩阵为

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.445)$$

满足对易关系(1.410)，将(1.429)中的表示矩阵替换为泡利矩阵，即可由(1.442)得到完整的旋量表示函数：

$$D^{1/2}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\alpha\sigma_3/2} e^{-i\beta\sigma_2/2} e^{-i\gamma\sigma_3/2}. \quad (1.446)$$

其中，第一项和第三项产生(1.442)中的相因子。将 $e^{-i\beta\sigma^2/2}$ 做幂次展开，借助等式 $(\sigma^2)^{2n} = 1$ 和 $(\sigma^2)^{2n+1} = \sigma^2$ ，可以得到函数 $d_{m'm}^{1/2}(\beta)$ ：

$$e^{-i\beta\sigma^2/2} = \cos \beta/2 - i \sin \beta/2 \sigma^2, \quad (1.447)$$

与(1.444)式相等。

对 $j = 1$ 的情况，表示函数(1.443)构成矢量表示

$$d_{m'm}^1(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{pmatrix}. \quad (1.448)$$

指标为 $+1, 0, -1$ 。借助矩阵元 $\langle i | 1m \rangle = \epsilon^i(m)$ ，将态 $|1m\rangle$ 映射到球单位矢量 $\epsilon(0) = \hat{z}$ ， $\epsilon(\pm 1) = \mp(\hat{x} \pm i\hat{y})/2$ ，可以将矢量表示变换为普通的转动矩阵 $R_{ij}(\beta)$ 。因此有 $R(\beta)\epsilon(m) = \sum_{m'=-1}^1 \epsilon(m') d_{m'm}^1(\beta)$ 。

将生成元 \hat{L}_i 的自旋为1表示矩阵代入(1.429)，同样可以得到表示矩阵 $D^1(\alpha, \beta, \gamma)$ 。在笛卡尔坐标下，表示矩阵为 $(\hat{L}_i)_{jk} = -i\epsilon_{ijk}$ ，其中 ϵ_{ijk} 是完全反对称张量，并规定 $\epsilon_{123} = 1$ 。在球坐标下，表示矩阵变为 $(\hat{L}_i)_{mm'} = \langle m | i \rangle (\hat{L}_i)_{ij} \langle j | m' \rangle = \epsilon_i^*(m) (\hat{L}_i)_{ij} \epsilon_j(m')$ 。指数 $(e^{-i\beta\hat{L}_2})_{mm'}$ 等于(1.448)式。

函数 $P_l^{(\alpha, \beta)}(z)$ 是雅可比多项式[8], 可以用超几何函数表示为

$$P_l^{(\alpha, \beta)} \equiv \frac{(-1)^l}{l!} \frac{\Gamma(l + \beta + 1)}{\Gamma(\beta + 1)} F(-l, l + 1 + \alpha + \beta; 1 + \beta; (1 + z)/2), \quad (1.449)$$

其中

$$F(a, b; c; z) \equiv 1 + \frac{ab}{c}z + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots . \quad (1.450)$$

函数 $d_{mm'}^L(\beta)$ 满足微分方程

$$\left(-\frac{d^2}{d\beta^2} - \cot \beta \frac{d}{d\beta} + \frac{m^2 + m'^2 - 2mm' \cos \beta}{\sin^2 \beta} \right) d_{mm'}^L(\beta) = L(L+1)d_{mm'}^L(\beta). \quad (1.451)$$

两个波函数标量积的积分必须在转动不变的积分测度内进行计算:

$$\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \equiv \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\alpha d\beta \sin \beta d\gamma \psi_2^*(\alpha, \beta, \gamma) \psi_1(\alpha, \beta, \gamma). \quad (1.452)$$

方程(1.451)的本征函数(1.442)满足正交关系

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\alpha d\beta \sin \beta d\gamma D_{m'_1 m_1}^{L_1 *}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m'_2 m_2}^{L_2}(\alpha, \beta, \gamma) \\ &= \delta_{m'_1 m'_2} \delta_{m_1 m_2} \delta_{L_1 L_2} \frac{8\pi^2}{2L_1 + 1}. \end{aligned} \quad (1.453)$$

让我们对比以下两种方法: 一是正确的量子化步骤, 主要通过群生成元的对易关系进行; 二是从经典拉格朗日量出发的正则量子化方法。拉格朗日量用欧拉角表示为

$$L = \frac{1}{2} [I_\xi (\omega_\xi^2 + \omega_\eta^2) + I_\zeta \omega_\zeta^2], \quad (1.454)$$

其中 $\omega_\xi, \omega_\eta, \omega_\zeta$ 是沿陀螺主轴测量的角速度。静止坐标系内的角速度分量 $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ 可以由关系式

$$\omega_k L_k = i \dot{R} R^{-1} \quad (1.455)$$

得到:

$$\begin{aligned} \omega_1 &= -\dot{\beta} \sin \alpha + \dot{\gamma} \sin \beta \cos \alpha, \\ \omega_2 &= \dot{\beta} \cos \alpha + \dot{\gamma} \sin \beta \sin \alpha, \\ \omega_3 &= \dot{\gamma} \cos \beta + \dot{\alpha}. \end{aligned} \quad (1.456)$$

经过转动(1.436), 将静止坐标系转为陀螺固定坐标系, 角速度变为

$$\begin{aligned} \omega_\xi &= \dot{\beta} \sin \gamma - \dot{\alpha} \sin \beta \cos \gamma, \\ \omega_\eta &= \dot{\beta} \cos \gamma + \dot{\alpha} \sin \beta \sin \gamma, \\ \omega_\zeta &= \dot{\alpha} \cos \beta + \dot{\gamma}. \end{aligned} \quad (1.457)$$

很明显，拉格朗日量为

$$L = \frac{1}{2}[I_\xi(\dot{\beta}^2 + \dot{\alpha}^2 \sin^2 \beta) + I_\zeta(\dot{\alpha} \cos \beta + \dot{\gamma})^2]. \quad (1.458)$$

将 α, β, γ 视为拉格朗日坐标 $q^\mu, \mu = 1, 2, 3,$ 拉格朗日量可以写为如(1.383)的形式，相应的度规[回顾(1.12)和(1.384)]:

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} I_\xi \sin^2 \beta + I_\zeta \cos^2 \beta & 0 & I_\zeta \cos \beta \\ 0 & I_\xi & 0 \\ I_\zeta \cos \beta & 0 & I_\zeta \end{pmatrix}, \quad (1.459)$$

其行列式为

$$g = I_\xi^2 I_\zeta \sin^2 \beta. \quad (1.460)$$

因此精确到一个平庸的常数因子，标量积(1.380)中的测度 $\int d^3q \sqrt{g}$ 与转动不变的测度(1.452)一致。顺带说一下， $I_\xi \neq I_\eta \neq I_\zeta$ 不对称的陀螺情况也是如此，只是 $g = I_\xi I_\eta I_\zeta \sin^2 \beta$ ，而度规 $g_{\mu\nu}$ 将更为复杂(见Appendix 1C)。

由(1.383)，与拉格朗日量(1.454)相连系的正则动量为

$$\begin{aligned} p_\alpha &= \partial L / \partial \dot{\alpha} = I_\xi \dot{\alpha} \sin^2 \beta + I_\zeta \cos \beta (\dot{\alpha} \cos \beta + \dot{\gamma}), \\ p_\beta &= \partial L / \partial \dot{\beta} = I_\xi \dot{\beta}, \\ p_\gamma &= \partial L / \partial \dot{\gamma} = I_\zeta (\dot{\alpha} \cos \beta + \dot{\gamma}). \end{aligned} \quad (1.461)$$

对度规求逆，有

$$g^{\mu\nu} = \frac{1}{I_\xi \sin^2 \beta} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\cos \beta \\ 0 & \sin^2 \beta & 0 \\ -\cos \beta & 0 & \cos^2 \beta + I_\xi \sin^2 \beta / I_\zeta \end{pmatrix}^{\mu\nu}, \quad (1.462)$$

于是，经典哈密顿量可以写为

$$H = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{I_\xi} p_\beta^2 + \left(\frac{\cos^2 \beta}{I_\xi \sin^2 \beta} + \frac{1}{I_\zeta} \right) p_\gamma^2 + \frac{1}{I_\xi \sin^2 \beta} p_\alpha^2 - \frac{2 \cos \beta}{I_\xi \sin^2 \beta} p_\alpha p_\gamma \right]. \quad (1.463)$$

这一哈密顿量没有明显的排序问题，因此可能会将动量直接替换为相应的厄米算符

$$\begin{aligned} \hat{p}_\alpha &= -i\hbar \partial_\alpha, \\ \hat{p}_\beta &= -i\hbar (\sin \beta)^{-1/2} \partial_\beta (\sin \beta)^{1/2} = -i\hbar (\partial_\beta + \frac{1}{2} \cot \beta), \\ \hat{p}_\gamma &= -i\hbar \partial_\gamma. \end{aligned} \quad (1.464)$$

将这些算符代入(1.463)，得出正则哈密顿量算符

$$\hat{H}_{\text{can}} = \hat{H} + \hat{H}_{\text{discr}}, \quad (1.465)$$

其中

$$\begin{aligned}\hat{H} \equiv & -\frac{\hbar^2}{2I_\xi} \left[\partial_\beta^2 + \cot\beta\partial_\beta + \left(\frac{I_\xi}{I_\zeta} + \cot^2\beta \right) \partial_\gamma^2 \right. \\ & \left. + \frac{1}{\sin^2\beta} \partial_\alpha^2 - \frac{2\cos\beta}{\sin^2\beta} \partial_\alpha\partial_\gamma \right] \end{aligned}\quad (1.466)$$

且有

$$\hat{H}_{\text{discr}} \equiv \frac{1}{2}(\partial_\beta \cot\beta) + \frac{1}{4} \cot^2\beta = \frac{1}{4\sin^2\beta} - \frac{3}{4}. \quad (1.467)$$

第一项 \hat{H} 与前面推导的正确的量子力学算符一致。确实，将陀螺固定坐标系中的角动量(1.437)代入哈密顿量(1.423)中，即可得到 \hat{H} 。 \hat{H}_{discr} 是正则哈密顿量算符与正确结果的差值。即使没有明显的算符排序问题，这个差值也依然存在，正如极坐标系的情况(1.400)。将经典哈密顿量中的 p_β^2 替换为算符 $g^{-1/4}\hat{p}_\beta g^{1/2}\hat{p}_\beta g^{-1/4}$ ，也可以得到正确的哈密顿量算符，这种处理方法与极坐标系中的情况(1.394)类似。

与球面上粒子的二维系统一样，可以看到，当正则量子化失效时，对称陀螺的哈密顿量算符可以由拉普拉斯-贝尔特拉米算符(1.377)正确地给出，当然这一过程需要代入度规(1.459)式和逆度规(1.462)式。尽管很繁琐，但仍然可以直接验证这种方法对不对称的陀螺也依然适用[Appendix 1C给出了相当复杂的度规，见等式(1C.2)和(1C.4)]。这是一个重要的非平庸的结果，原因在于，对于陀螺，不能将其重参数化到带曲线坐标的欧式空间，从而得到拉格朗日量。这一结果表明，替换

$$g_{\mu\nu}(q)p^\mu p^\nu \rightarrow -\hbar^2\Delta \quad (1.468)$$

可以在任意非欧空间中得到正确的哈密顿量算符²¹。

什么才是 α, β, γ 空间的典型非欧性质？正如我们将在第10章看到的，相关的量是曲率标量 R 。在(10.42)中，我们将找到其准确的定义。对于非对称的陀螺，有(见Appendix 1C)

$$R = \frac{(I_\xi + I_\eta + I_\zeta)^2 - 2(I_\xi^2 + I_\eta^2 + I_\zeta^2)}{2I_\xi I_\eta I_\zeta}. \quad (1.469)$$

因此，正如球面上的粒子，陀螺 对应在常数曲率空间中的一个运动粒子。在这样的空间中，也可以从对称的变量中推导对应原理。 α, β, γ 空间可以作为四维空间中的球面（在第八章中将有详细的讨论），从这一角度看，就很容易理解这样的几何问题了。

在谈及广义相对论时，将遇到物理上感兴趣的一个重要非欧空间。能产生引力的物质被假定在带有任意局域曲率的空间中运动。这一理论较新的发展可以对挠率不为零的空间进行研究。在这样的一般情况下，群量子化规则也不再适用，而对应原理总是一个有争议的话题[见(1.401)后的参考文献]，我们将在后面解决这一问题。在第10章和第8章，我们将展现一个新的量子等效原理，这一原理基于简单几何原理在路径积分中的应用，同时这一原理也将指定一条在任意坐标下，由经

²¹如果空间有曲率而无挠率，这是正确的。如果出现了挠率，在第10章和第8将给出正确的结果。

典到量子力学的自然的、也是唯一的过度。²² 位形空间可能带有曲率以及某类挠率(梯度挠率)。一些讨论表明我们的原理是正确的。对于上述系统，其哈密顿量可完全用运动群的生成元表示，新的量子等效原理将给出与群量子规则一致的结果。

1.16 散射

量子现象的大多数观测都是通过基本粒子的散射得到的。

1.16.1 散射矩阵

粒子在集中于原点附近的非零势中运动，其动量为 \mathbf{p}_a ，能量为 $E = E_a = \mathbf{p}_a^2/2M$ 。经过很长时间，将发现这一粒子远离势，且动量为 \mathbf{p}_b ，而能量并未改变： $E = E_b = \mathbf{p}_b^2/2M$ 。这样过程的几率振幅由动量表象下的时间演化振幅给出

$$\langle \mathbf{p}_b | \mathbf{p}_a t_a \rangle \equiv \langle \mathbf{p}_b | e^{-i\hat{H}(t_b-t_a)/\hbar} | \mathbf{p}_a \rangle, \quad (1.470)$$

其中，必须取极限 $t_b \rightarrow \infty$ 和 $t_a \rightarrow -\infty$ 。在碰撞的很久之前和很久以后，这一振幅以频率 $\omega = E/\hbar$ 振动，频率由自由粒子的能量 E 确定。为了得到不含时极限，我们将(1.470)中的振荡移除，并通过极限

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle \equiv \lim_{t_b-t_a \rightarrow \infty} e^{i(E_b t_b - E_a t_a)/\hbar} \langle \mathbf{p}_b | e^{-i\hat{H}(t_b-t_a)/\hbar} | \mathbf{p}_a \rangle. \quad (1.471)$$

定义散射矩阵(S 矩阵)。大部分入射粒子根本没有被散射，所以这一振幅必须含有领头项：

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle = \langle \mathbf{p}_b | \mathbf{p}_a \rangle + \langle \mathbf{p}_b | \hat{S}' | \mathbf{p}_a \rangle', \quad (1.472)$$

其中

$$\langle \mathbf{p}_b | \mathbf{p}_a \rangle = \langle \mathbf{p}_b | e^{-i\hat{H}(t_b-t_a)/\hbar} | \mathbf{p}_a \rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a) \quad (1.473)$$

表明了态的归一化[回顾(1.186)]。通常从(1.471)中将领头项减除，以获得真正的散射振幅。而且，由于势散射中能量守恒，余下的振幅应包含一个 δ 函数以保证能量守恒，将 δ 函数提出，可以得到所谓的 T 矩阵

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle \equiv (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b) - 2\pi\hbar i \delta(E_b - E_a) \langle \mathbf{p}_b | \hat{T} | \mathbf{p}_a \rangle. \quad (1.474)$$

由定义式(1.471)和 \hat{H} 的厄米性，散射矩阵为幺正矩阵。这个性质表达了这样的物理事实：在某个时刻重新出现粒子的几率之和为1(由于吸收和发射过程的存在，量子场论的情形将更为复杂)。

以离散态 $|\mathbf{p}^m\rangle$ 为基，幺正性可以表示为

$$\sum_{\mathbf{m}'} \langle \mathbf{p}^m | \hat{S}^\dagger | \mathbf{p}^{m'} \rangle \langle \mathbf{p}^{m'} | \hat{S} | \mathbf{p}^{m''} \rangle = \sum_{\mathbf{m}'} \langle \mathbf{p}^m | \hat{S} | \mathbf{p}^{m'} \rangle \langle \mathbf{p}^{m'} | \hat{S}^\dagger | \mathbf{p}^{m''} \rangle = 1. \quad (1.475)$$

²²H. Kleinert, Mod. Phys. Lett. A 4, 2329 (1989) (<http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/199>); Phys. Lett. B 236, 315 (1990) (*ibid.*<http://202>).

回顾离散态 $|\mathbf{p}^m\rangle$ 和其连续极限 $|\mathbf{p}\rangle$ 的关系式，可以看到

$$\langle \mathbf{p}_b^m | \hat{S} | \mathbf{p}_a^m \rangle \approx \frac{1}{L^3} \langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle, \quad (1.476)$$

其中 L^3 是空间体积， \mathbf{p}_b^m 和 \mathbf{p}_a^m 是最接近 \mathbf{p}_b 和 \mathbf{p}_a 的离散动量。在连续基 $|\mathbf{p}\rangle$ 下，幺正性关系为

$$\int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \langle \mathbf{p}_b | \hat{S}^\dagger | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{S}^\dagger | \mathbf{p}_a \rangle = 1. \quad (1.477)$$

1.16.2 截面

$\langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle$ 的模平方给出了动量为 \mathbf{p}_a 的初态散射到动量为 \mathbf{p}_a 的末态的几率 $P_{\mathbf{p}_b \rightarrow \mathbf{p}_a}$ 。忽略未散射的粒子，有

$$P_{\mathbf{p}_b \rightarrow \mathbf{p}_a} = \frac{1}{L^6} 2\pi\hbar\delta(0) 2\pi\hbar\delta(E_b - E_a) |\langle \mathbf{p}_b | \hat{T} | \mathbf{p}_a \rangle|^2. \quad (1.478)$$

将散射过程想象为有限总时间 T 内的平面波，零能处的因子 $\delta(0)$ 将给出有限的结果，即 $2\pi\hbar\delta(0) = \int dt e^{iEt/\hbar}|_{E=0} = T$ ，几率将正比与时间 T ：

$$P_{\mathbf{p}_b \rightarrow \mathbf{p}_a} = \frac{1}{L^6} T 2\pi\hbar\delta(E_b - E_a) |\langle \mathbf{p}_b | \hat{T} | \mathbf{p}_a \rangle|^2. \quad (1.479)$$

通过对全部离散的末态动量求和，或者对几率进行末态动量相空间上的积分，就可得到单位时间内发生散射的总几率

$$\frac{dP}{dt} = \frac{1}{L^6} \int \frac{d^3 p_b L^3}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi\hbar\delta(E_b - E_a) |\langle \mathbf{p}_b | \hat{T} | \mathbf{p}_a \rangle|^2. \quad (1.480)$$

动量积分可以分解为末态能量和末态固体角上的积分。对于非相对论粒子，此分解如下：

$$\int \frac{d^3 p_b}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{M}{(2\pi\hbar)^3} \int d\Omega \int_0^\infty dE_b p_b, \quad (1.481)$$

$d\Omega = d\phi_b d\cos\theta_b$ 是粒子散射到其中的固体角元。能量积分移除了(1.480)式中的 δ 函数，并使得 p_b 等于 p_a 。

微分散射截面 $d\sigma/d\Omega$ 定义为单位时间内，单位流密度的单个入射粒子散射到固体角 $d\Omega$ 内的几率。由(1.480)，微分截面可以写为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\dot{P}}{d\Omega} \frac{1}{j} = \frac{1}{L^3} \frac{Mp}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi\hbar |T_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a}|^2 \frac{1}{j}, \quad (1.482)$$

为简明起见，上式中已经令

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{T} | \mathbf{p}_a \rangle \equiv T_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a}, \quad (1.483)$$

在体积 L^3 内，单个粒子的流密度由速度 $v = p/M$ 给出

$$j = \frac{1}{L^3} \frac{p}{M}, \quad (1.484)$$

所以微分截面变为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{M^2}{(2\pi\hbar)^2} |T_{\mathbf{p}_b\mathbf{p}_a}|^2. \quad (1.485)$$

如果散射粒子的运动是相对论性的，就需要将(1.481)中，动量积分内部的不变质量 M 替换为 $E = \sqrt{p^2 + M^2}$ ，其中 $p = |\mathbf{p}|$ 。这样，动量积分可写为

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\Omega \int_0^\infty dp p^2 \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\Omega \int_0^\infty dEE p. \end{aligned} \quad (1.486)$$

相对论的情况下，初始流密度不再正比于 p/M ，而是正比于相对论的速度 $v = p/E$ ，使得

$$j = \frac{1}{L^3} \frac{p}{E}. \quad (1.487)$$

因此散射截面变为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{E^2}{(2\pi\hbar)^2} |T_{\mathbf{p}_b\mathbf{p}_a}|^2. \quad (1.488)$$

1.16.3 波恩近似

在相互作用强度的最低阶，(1.471)中的算符 \hat{S} 为

$$\hat{S} \approx 1 - i\hat{V}/\hbar. \quad (1.489)$$

对不含时的散射势，这意味着有

$$T_{\mathbf{p}_b\mathbf{p}_a} \approx V_{\mathbf{p}_b\mathbf{p}_a}/\hbar, \quad (1.490)$$

其中

$$V_{\mathbf{p}_b\mathbf{p}_a} \equiv \langle \mathbf{p}_b | \hat{V} | \mathbf{p}_a \rangle = \int d^3x e^{i(\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a)\mathbf{x}/\hbar} V(\mathbf{x}) = \tilde{V}(\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a) \quad (1.491)$$

只是动量转移 $\mathbf{q} \equiv \mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a$ 的函数。这时，(1.488)式简化为所谓的波恩近似 (Born 1926)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{E^2}{(2\pi\hbar)^2 \hbar^2} |V_{\mathbf{p}_b\mathbf{p}_a}|^2. \quad (1.492)$$

其模平方等于微分截面的振幅通常用 $f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a}$ 表示，即

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a}|^2. \quad (1.493)$$

与(1.492)式相比，有

$$f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a} \equiv -\frac{M}{2\pi\hbar} R_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a}, \quad (1.494)$$

这里我们选择的符号与朗道和Lifshitz的教科书[9]一致。

1.16.4 分波展开和光程近似

散射振幅常借助于勒让德多项式 $P_l(z) \equiv P_l^0(z)$ [见(1.417)]进行分波展开

$$f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a} = \frac{\hbar}{2ip} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\partial_l(p)} - 1) \quad (1.495)$$

其中 $p \equiv |\mathbf{p}| = |\mathbf{p}_b| = |\mathbf{p}_a|$, θ 是散射角，定义为 $\cos \theta \equiv \mathbf{p}_a \mathbf{p}_b / |\mathbf{p}_b| |\mathbf{p}_a|$ 。动量转移 $\mathbf{q} = \mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a$ 的大小可以用 θ 表示为 $|\mathbf{q}| = 2p \sin(\theta/2)$.

对于小 θ ，可应用勒让德多项式的渐进条件²³

$$P_l^{-m}(\cos \theta) \approx \frac{1}{l^m} J_m(l\theta), \quad (1.496)$$

将(1.495)式近似地写成积分形式

$$f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a}^{\text{ei}} = \frac{p}{i\hbar} \int db b J_0(qb) \left\{ \exp \left[2i\delta_{pb/\hbar}(p) \right] - 1 \right\}, \quad (1.497)$$

其中， $b \equiv l\hbar/p$ 是散射过程所谓的碰撞参数 (*impact parameter*)，这就是散射振幅的光程近似 (*eikonal approximation*)。例如，库伦散射中 $V(r) = Ze^2/r$ ，且(2.749)式给出

$$\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{P}}^{\text{ei}}[\mathbf{v}] = -\frac{Ze^2 M}{|\mathbf{P}|} \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{1}{\sqrt{b^2 + z^2}}. \quad (1.498)$$

积分对数发散，在实际的物理过程中，势在某个距离 R 处被相反的电荷屏蔽，所以积分上限为 R ，有

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{b}, \mathbf{P}}^{\text{ei}}[\mathbf{v}] &= -\frac{Ze^2 M}{|\mathbf{P}|} \frac{1}{\hbar} \int_b^R dr \frac{1}{\sqrt{r^2 - b^2}} = -\frac{Ze^2 M}{|\mathbf{P}|} \frac{1}{\hbar} \log \frac{R + \sqrt{R^2 - b^2}}{b} \\ &\approx -2 \frac{Ze^2 M}{|\mathbf{P}|} \frac{1}{\hbar} \log \frac{2R}{b}. \end{aligned} \quad (1.499)$$

²³M. Abramowitz and I. Stegun, op. cit., Formula 9.1.71.

这意味着

$$\exp(\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{P}}^{\text{ei}}) \approx \left(\frac{b}{2R}\right)^{2i\gamma}, \quad (1.500)$$

其中

$$\gamma \equiv \frac{Ze^2 M}{|\mathbf{P}|} \frac{1}{\hbar} \quad (1.501)$$

由于 $e^2 = \hbar c \alpha$, 而 α 是无量纲的精细结构常数,²⁴

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = 1/137.035\,997\,9\dots \quad (1.502)$$

所以 γ 也无量纲。现在可以进行(1.497)中碰撞参数的积分, 有

$$f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a}^{\text{ei}} \approx \frac{\hbar}{2ip} \frac{1}{\sin^{2+2i\gamma}(\theta/2)} \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)} e^{-2i\gamma \log(2pR/\hbar)}. \quad (1.503)$$

上式最后一项的相因子解释了有限的屏蔽长度, 除去这一因子, 上式是库伦散射的精确量子力学振幅。当

$$i\gamma_n \equiv \frac{Ze^2 M \hbar}{p_n} = -n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.504)$$

时, 振幅在动量 $p = p_n$ 处有极点, 对应能量

$$E^{(n)} = -\frac{p_n^2}{2M} = -\frac{MZ^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{2n^2}, \quad (1.505)$$

这就是众所周知的类氢原子的能量值, 原子核带电量为 Ze 。上式前部的因素 $E_H \equiv e^2/a_H = Me^4/\hbar^2 = 4.359 \times 10^{-11}$ erg = 27.210 eV, 是里德伯格能量 (Rydberg energy) 的二倍 (参见903页)。

1.16.5 从时间演化振幅得到的散射振幅

存在一个启发性公式, 可将散射振幅表示为时间演化振幅的极限。首先, 我们将能量的 δ 函数写成某一函数的大时间极限

$$\delta(E_b - E_a) = \frac{M}{p_b} \delta(p_b - p_a) = \frac{M}{p_b} \lim_{t_b \rightarrow \infty} \left(\frac{t_b}{2\pi\hbar M/i} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{t_b}{2M} (p_b - p_a)^2 \right], \quad (1.506)$$

其中, $p_b = |\mathbf{p}_b|$ 。将上式代入等式(1.474), 并令 $p_b = p_a$, 对应弹性散射, δ 将被移除, 且散射振幅有如下表示

$$f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a} = \frac{p_b}{M} \frac{\sqrt{2\pi\hbar M/i}}{(2\pi\hbar)^3} \lim_{t_b \rightarrow \infty} \frac{1}{t_b^{1/2}} e^{iE_b(t_b-t_a)/\hbar} [(\mathbf{p}_b t_b | \mathbf{p}_a t_a) - \langle \mathbf{p}_b | \mathbf{p}_a \rangle]. \quad (1.507)$$

²⁴本书将采用电磁单位制, 电场 $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ 的能量密度为 $\mathcal{H} = \mathbf{E}^2/8\pi + \rho\phi$, 其中 ρ 是电荷密度, 所以有 $\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$ 和 $e^2 = \hbar c \alpha$ 。精细常数可以通过量子霍尔效应准确测量, , 见 M.E. Cage et al., IEEE Trans. Instrum. Meas. 38, 284 (1989)。磁场满足安培定律 $\nabla \times \mathbf{B} = 4\pi\mathbf{j}$, 其中 \mathbf{j} 是流密度。

对 δ 函数这样的处理方法显然不令人满意。在2.22节，将给出路径积分框架下的一个令人满意的处理方法。在现阶段，我们仍可继续，但需要注意之后的算符运算。借助时间演化算符(2.5)可以将极限(1.471)写为：

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle &\equiv \lim_{t_b - t_a \rightarrow \infty} e^{i(E_b t_b - E_a t_a)/\hbar} \langle \mathbf{p}_b | t_b | \mathbf{p}_a | t_a \rangle \\ &= \lim_{t_b, -t_a \rightarrow \infty} \langle \mathbf{p}_b | \hat{U}_I(t_b, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle,\end{aligned}\quad (1.508)$$

其中 $\hat{U}_I(t_b, t_a)$ 是狄拉克相互作用绘景(1.286)下的时间演化算符。

1.16.6 李普曼-施温格方程

由定义式(1.286)可以看出，算符 $\hat{U}_I(t_b, t_a)$ 与普通的时间演化算符 $\hat{U}(t, t_a)$ 一样，也满足同样的分解定律：

$$\hat{U}_I(t, t_a) = \hat{U}_I(t, t_b) \hat{U}_I(t_b, t_a). \quad (1.509)$$

现在我们注意到

$$e^{-iH_0 t/\hbar} \hat{U}_I(t, t_a) = e^{-iH t/\hbar} \hat{U}_I(0, t_a) = \hat{U}_I(0, t_a - t) e^{-iH_0 t/\hbar}, \quad (1.510)$$

所以在极限 $t_a \rightarrow -\infty$ 下，有

$$e^{-iH_0 t/\hbar} \hat{U}_I(t, t_a) = e^{-iH t/\hbar} \hat{U}_I(0, t_a) \longrightarrow \hat{U}_I(0, t_a) e^{-iH_0 t/\hbar}, \quad (1.511)$$

因此有

$$\lim_{t_a \rightarrow -\infty} \hat{U}_I(t_b, t_a) = \lim_{t_a \rightarrow -\infty} e^{iH_0 t_b/\hbar} e^{-iH t_b/\hbar} \hat{U}_I(0, t_a) = \lim_{t_a \rightarrow -\infty} e^{iH_0 t_b/\hbar} \hat{U}_I(0, t_a) e^{-iH_0 t_b/\hbar}, \quad (1.512)$$

这允许我们将散射矩阵(1.508)重新写为

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle \equiv \lim_{t_b, -t_a \rightarrow \infty} e^{i(E_b - E_a)t_b/\hbar} \langle \mathbf{p}_b | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle. \quad (1.513)$$

注意与(1.471)相反，初态的时间演化现在只沿着负时间轴，而不是整个时间轴。

对等式(1.291)取自由粒子态 $\langle \mathbf{p}_b |$ 和 $| \mathbf{p}_b \rangle$ 之间的矩阵元，并应用等式(1.291)和(1.511)，我们得到，在 $t_b = 0$ 时

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_b \rangle = \langle \mathbf{p}_b | \mathbf{p}_b \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt e^{i(E_b - E_a - i\eta)t/\hbar} \langle \mathbf{p}_b | \hat{V} \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_b \rangle. \quad (1.514)$$

插入了小的压低因子 $e^{\eta t/\hbar}$ 以保证在 $t = -\infty$ 处的收敛性。对于不含时的势，可以进行积分，有

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_b \rangle = \langle \mathbf{p}_b | \mathbf{p}_b \rangle - \frac{1}{E_b - E_a - i\eta} \langle \mathbf{p}_b | \hat{V} \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_b \rangle. \quad (1.515)$$

这就是著名的李普曼-许温格方程 (*Lippmann-Schwinger equation*)。将这个方程代入(1.513)式，得到散射矩阵的方程

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle = \lim_{t_b, -t_a \rightarrow \infty} e^{i(E_b - E_a)t_b} \left[\langle \mathbf{p}_b | \mathbf{p}_a \rangle - \frac{1}{E_b - E_a - i\eta} \langle \mathbf{p}_b | \hat{V} \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_b \rangle \right]. \quad (1.516)$$

只有当动量 \mathbf{p}_a 和 \mathbf{p}_b 相等时，括号内的第一项才不为零，这时能量仍保持不变，即 $E_b = E_a$ ，所以这时括号前面的因子（前因子）可以设定为1。前因子在第二项前面的时候，随着时间 t_b 的增加快速振荡，使 E_b 的任意有限函数为零，这一结果来自黎曼-勒贝格引理。尽管如此，第二项在 $E_b = E_a$ 处有一个极点，这时要更加小心地趋于极限。前因子有性质

$$\lim_{t_b \rightarrow \infty} \frac{e^{i(E_b - E_a)t_b/\hbar}}{E_b - E_a - i\eta} = \begin{cases} 0, & E_b \neq E_a, \\ i/\eta, & E_b = E_a. \end{cases} \quad (1.517)$$

容易看出这一性质定义了能量的 δ 函数：

$$\lim_{t_b \rightarrow \infty} \frac{e^{i(E_b - E_a)t_b/\hbar}}{E_b - E_a - i\eta} = 2\pi i \delta(E_b - E_a). \quad (1.518)$$

将左边和光滑函数 $f(E_b)$ 一起积分，并令

$$E_b \equiv E_a + \xi/t_b. \quad (1.519)$$

那么， E_b 积分可以重新写为

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{e^{i\xi}}{\xi + i\eta} f(E_a + \xi/t_a). \quad (1.520)$$

在大 t_a 极限下，函数 $f(E_a)$ 可以从积分中提出，积分回路可以在复能量平面的上半部分闭合，产生 $2\pi i$ 。因此可以由(1.516)得到公式(1.474)，其中 T 矩阵为

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{T} | \mathbf{p}_a \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \mathbf{p}_b | \hat{V} \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_b \rangle. \quad (1.521)$$

对于势 \hat{V} 很小的情况，我们做近似 $\hat{U}_I(0, t_a) \approx 1$ ，可以得到波恩近似(1.490)。

李普曼-施温格方程可以重新改写成 T 矩阵的积分方程。将原来的方程(1.515)左乘矩阵 $\langle \mathbf{p}_b | \hat{V} | \mathbf{p}_a \rangle = V_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a}$ ，得到

$$T_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a} = V_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a} - \int \frac{d^3 p_c}{(2\pi\hbar)^3} V_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_c} \frac{1}{E_c - E_a - i\eta} T_{\mathbf{p}_c \mathbf{p}_a}. \quad (1.522)$$

为了从 T 矩阵(1.521)抽取物理信息，分析相互作用态 $\hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle$ 在 \mathbf{x} 空间中的行为十分有用。从等式(1.511)可以看出，这个态是完整哈密顿量 \hat{H} 的本征态，对应初始能量 E_a 。将这个态左乘 $\langle \mathbf{x} |$ ，并在其中插入动量本征态完备集，有

$$\langle \mathbf{x} | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle.$$

应用等式(1.515), 上式变为

$$\langle \mathbf{x} | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}_a \rangle + \int d^3x' \int \frac{d^3p_b}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\mathbf{p}_b(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar}}{(E_a - \mathbf{p}_b^2/2M + i\eta)} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle. \quad (1.523)$$

函数

$$(\mathbf{x} | \mathbf{x}')_{E_a} = \int \frac{d^3p_b}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\mathbf{p}_b(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} \frac{i\hbar}{E_a - \mathbf{p}^2/2M + i\eta} \quad (1.524)$$

是自由粒子的固定能量振幅(1.340), 在三维空间下, 可以写为[见(1.355)]

$$(\mathbf{x} | \mathbf{x}')_{E_a} = -\frac{2Mi}{\hbar} \frac{e^{ip_a|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|/\hbar}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}, \quad p_a = \sqrt{2ME_a}. \quad (1.525)$$

为了得到散射振幅, 考虑远离散射中心, 即大距离 $|\mathbf{x}|$ 处的波函数(1.523)。假设 $V(\mathbf{x}')$ 只对小的 \mathbf{x}' 才不等于零, 做近似 $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \approx r - \hat{\mathbf{x}}\mathbf{x}'$, 其中 $\hat{\mathbf{x}}$ 是 \mathbf{x} 方向的单位矢量, 这时(1.523)式变为

$$\langle \mathbf{x} | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle \approx e^{i\mathbf{p}_a \mathbf{x}/\hbar} - \frac{e^{ip_ar}}{4\pi r} \int d^4x' e^{-ip_a \hat{\mathbf{x}} \mathbf{x}'} \frac{2M}{\hbar^2} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle. \quad (1.526)$$

在 $t_a \rightarrow -\infty$ 的极限下, 乘以球面波 $e^{ip_ar/\hbar}/r$ 的因子就是散射振幅 $f(\hat{\mathbf{x}})_{\mathbf{p}_a}$, 其模平方给出微分截面。对于到末动量 \mathbf{p}_b 的散射, 出射粒子在远离散射中心的 $\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{p}}_b$ 方向被探测到。由于能量守恒, 令 $p_a \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{p}_b$, 可以得到公式

$$f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a} = \lim_{t_a \rightarrow -\infty} -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int d^4x_b e^{-i\mathbf{p}_b \mathbf{x}_b} V(\mathbf{x}_b) \langle \mathbf{x}_b | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle. \quad (1.527)$$

通过在 \mathbf{x} 空间中研究相互作用态 $\hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle$, 我们避开了表示能量守恒的奇异性 δ 函数。

现在可以进行散射振幅公式(1.507)的推导。我们注意到在 $t_a \rightarrow -\infty$ 的极限下, 可以通过时间演化振幅 $(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a)$ 得到振幅 $\langle \mathbf{x}_b | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_b | \hat{U}_I(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle &= \langle \mathbf{x}_b | \hat{U}(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle e^{-iE_a t_a/\hbar} \\ &= \lim_{t_a \rightarrow -\infty} \left(\frac{-2\pi i \hbar t_a}{M} \right)^{3/2} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) e^{i(\mathbf{p}_a \mathbf{x}_a - p_a^2 t_a / 2M)/\hbar} \Big|_{\mathbf{x}_a = \mathbf{p}_a t_a / M}. \end{aligned} \quad (1.528)$$

这直接来自于傅里叶变换

$$\langle \mathbf{x}_b | \hat{U}(0, t_a) | \mathbf{p}_a \rangle e^{-iE_a t_a/\hbar} = \int d^3x_a (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) e^{i(\mathbf{p}_a \mathbf{x}_a - p_a^2 t_a / 2M)/\hbar}, \quad (1.529)$$

等式右边变为

$$\left(\frac{-t_a}{M} \right)^3 \int d^3p (\mathbf{x}_b 0 | \mathbf{p} t_a t_a) e^{i(\mathbf{p}_a \mathbf{p} - p_a^2) t_a / 2M\hbar}. \quad (1.530)$$

现在，对大的 $-t_a$ ，动量积分被挤压为 $\mathbf{p} = \mathbf{p}_a$ ，且得到(1.528)。 δ 函数合适的极限公式为

$$\delta^{(D)}(\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a) = \lim_{t_a \rightarrow -\infty} \frac{(-t_a)^{D/2}}{\sqrt{2\pi i \hbar M}^D} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \frac{t_a}{2M} (\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a)^2 \right\} \quad (1.531)$$

可以由等式(1.338)做变量替换得到。它在 $D = 1$ 的情况下形式，已经由前面的等式(1.506)给出，当然要做变量替换 $t_b \rightarrow -t_a$ 。等式右边的指数乘上了因子 $e^{i(p_b^2 - p_a^2)^2/2M\hbar}$ ，当等式两边不为零时，这一因子为1，所以可以变为 $e^{-i(\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{p} - p_a^2)t_a/2M\hbar}$ 。用这种方法，我们得到了 δ 函数的一个表示，应用这个表示，可以将傅里叶积分(1.530)变为(1.528)。等式(1.528)右边的相因子 $e^{i(\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{x}_a - p_a^2 t_a/2M)/\hbar}$ ，在方程中的极限下等于1，但为了方便，等式(??)中仍保留了这一因子。

通过抽取出射球面波 $e^{ip_ar/\hbar}/r$ 的系数，可以从 \mathbf{x} 空间中 $\mathbf{x}_a = \mathbf{p}_a t_a/M$ 处的时间演化振幅 $(\mathbf{x}_b 0 | \mathbf{x}_a t_a)$ 中进行散射振幅的抽取，对于这样的过程，等式(1.528)是一个可靠的切入点。

作为交叉检验，我们将单粒子振幅(1.337)代入(1.528)式，并得到自由未扰动的波函数 $e^{i\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{x}}$ ，这正是等式(1.523)中表示未散射粒子的第一项。

1.17 经典和量子统计

假定一个物理系统中粒子数目 N 恒定不变，其哈密顿量不明显含时。如果将其与温度为 T 的热储层接触，并达到平衡，可以通过下面的规则得到它的热力学性质：在经典力学的层面，相空间的每一个体积元

$$\frac{dp dq}{h} = \frac{dp dq}{2\pi\hbar} \quad (1.532)$$

被正比于波尔兹曼因子

$$e^{-H(p,q)/k_B T}, \quad (1.533)$$

的几率占据，其中 k_B 是波尔兹曼常数，

$$k_B = 1.3806221(59) \times 10^{-16} \text{ erg/Kelvin}. \quad (1.534)$$

括号里的数字是它之前两位的实验不确定性。 $1/k_B T$ 的量纲与能量相反，通常用 β 表示，称之为逆温度(*inverse temperature*)。

对波尔兹曼因子进行相空间积分，²⁵

$$Z_{\text{cl}}(T) \equiv \int \frac{dp dq}{2\pi\hbar} e^{-H(p,q)/k_B T}, \quad (1.535)$$

被称为经典配分函数。包含了系统的全部经典热力学信息。当然，对于一般的哈密顿系统，有很多自由度，相空间积分为 $\prod_n \int dp_n dq_n / 2\pi\hbar$ 。读者也许奇怪，为什么一个包含普朗克量子 \hbar 的量被称为经典的？原因是，当计算任意热力学平均值时，最终结果中将没有 \hbar 存在。在经典统计学中，它仅仅提供一个不相关的归一化因子，使得 Z 无量纲。

²⁵In the sequel we shall always work at a fixed volume V and therefore suppress the argument V everywhere.

1.17.1 正则系综

量子力学中，哈密顿量被算符 \hat{H} 取代，相空间上的积分被希尔伯特空间的迹取代。这导致了量子统计配分函数

$$Z(T) \equiv \text{Tr} \left(e^{-\hat{H}/k_B T} \right) \equiv \text{Tr} \left(e^{-H(\hat{p}, \hat{x})/k_B T} \right), \quad (1.536)$$

其中 $\text{Tr} \hat{O}$ 代表算符 \hat{O} 的迹。如果 \hat{H} 是 N 粒子的薛定谔哈密顿量，则量子统计系统被称为正则系综。(1.536)右边包含笛卡尔坐标的位置算符 \hat{x} ，而不是 \hat{q} ，以确保系统可以正则量子化。这种情况下，如陀螺，求迹公式仍然成立，但是希尔伯特空间由角动量算符的表示函数张开。在更一般的拉格朗日系统中，量子化的方法是不同的，将在第10章和第8中进行讲述。

在这里我们注意到：量子配分函数通过一种很简单的方式与量子力学的时间演化算符相联系。为了强调这一联系，对不含时的哈密顿量，我们定义时间演化算符的迹为量子力学配分函数：

$$Z_{QM}(t_b - t_a) \equiv \text{Tr} \left(\hat{U}(t_b, t_a) \right) = \text{Tr} \left(e^{-i(t_b - t_a)\hat{H}/\hbar} \right). \quad (1.537)$$

很明显，将时间间隔 $t_b - t_a$ 延拓到负的虚值，

$$t_b - t_a = -\frac{i\hbar}{k_B T} \equiv -i\hbar\beta. \quad (1.538)$$

即可通过量子力学配分函数得到量子统计配分函数。这一简单的关系表明，时间演化算符的迹包含了量子系统中，关于热力学平衡性质的全部信息。

1.17.2 巨正则系综

对于多体系统，常研究其与粒子库（particle reservoir）联系的平衡性质，粒子库可用化学势 μ 描述。对这样的系统，定义了巨正则量子统计配分函数

$$Z_G(T, \mu) = \text{Tr} \left(e^{-(\hat{H} - \mu\hat{N})/k_B T} \right). \quad (1.539)$$

其中， \hat{N} 是粒子数算符，确定系综中处于每个态的粒子数。指数上的算符组合，

$$\hat{H}_G = \hat{H} - \mu\hat{N}, \quad (1.540)$$

被称为巨正则哈密顿量。

对于固定的粒子数 N ，给定配分函数 $Z(T)$ ，自由能定义为

$$F(T) = -k_B T \log Z(T). \quad (1.541)$$

在化学势固定的情况下，其巨正则形式为

$$F_G(T, \mu) = -k_B T \log Z_G(T, \mu). \quad (1.542)$$

平均能或内能定义为

$$E = \text{Tr} \left(\hat{H} e^{-\hat{H}/k_B T} \right) / \text{Tr} \left(e^{-\hat{H}/k_B T} \right). \quad (1.543)$$

对配分函数 $Z(T)$ 做温度导数，可以得到

$$E = Z^{-1}k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} Z(T) = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \log Z(T). \quad (1.544)$$

也可用自由能(1.541)表示，有

$$E = T^2 \frac{\partial}{\partial T} (-F(T)/T) = \left(1 - T \frac{\partial}{\partial T}\right) F(T). \quad (1.545)$$

对于巨正则系综，引入平均粒子数，定义为

$$N = \text{Tr} \left(\hat{N} e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/k_B T} \right) / \text{Tr} \left(e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/k_B T} \right). \quad (1.546)$$

还可以从巨正则配分函数导出

$$N = Z_G^{-1}(T, \mu) k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} Z_G(T, \mu) = k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \log Z_G(T, \mu), \quad (1.547)$$

或者用巨正则自由能表示为

$$N = -\frac{\partial}{\partial \mu} F_G(T, \mu). \quad (1.548)$$

巨正则系统的平均能量

$$E = \text{Tr} \left(\hat{H} e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/k_B T} \right) / \text{Tr} \left(e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/k_B T} \right), \quad (1.549)$$

与(1.544)和(1.545)作类比，可以通过以下求导获得巨正则系统的平均能量：

$$\begin{aligned} E - \mu N &= Z_G^{-1}(T, \mu) k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} Z_G(T, \mu) \\ &= \left(1 - T \frac{\partial}{\partial T}\right) F_G(T, \mu). \end{aligned} \quad (1.550)$$

对于粒子数目很大的情况，密度是随能量快速增长的函数。例如，对于 N 个自由粒子的系统，能量上限为 E 的态的数目为

$$N(E) = \sum_{\mathbf{p}_i} \Theta(E - \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i^2 / 2M), \quad (1.551)$$

求和对全部的离散动量 \mathbf{p}_i 进行。对于 V 很大的情况，求和可以转换为积分²⁶

$$N(E) = V^N \prod_{i=1}^N \left[\int \frac{d^3 p_i}{(2\pi\hbar)^3} \right] \Theta(E - \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i^2 / 2M), \quad (1.552)$$

²⁶Remember, however, the exception noted in the footnote to Eq. (1.184) for systems possessing a condensate.

这正是 $[V/(2\pi\hbar)^3]^N$ 乘以半径为 $\sqrt{2ME}$ 的 $3N$ 维球的体积 Ω_{3N} :

$$\begin{aligned} N(E) &= \left[\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right]^N \Omega_{3N} \\ &\equiv \left[\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right]^N \frac{(2\pi ME)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3}{2}N + 1)}. \end{aligned} \quad (1.553)$$

回忆 D 维单位球的体积公式:

$$\Omega_D = \pi^{D/2}/\Gamma(D/2 + 1). \quad (1.554)$$

以及表面积公式[推导见(8.116)和(8.117)]

$$S_D = 2\pi^{D/2}/\Gamma(D/2). \quad (1.555)$$

上式来自如下积分²⁷

$$S_D = \int d^D p \delta(p - 1) = \int d^D p 2\delta(p^2 - 1) = \int d^D p \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda}{\pi} e^{i\lambda(p^2 - 1)} \quad (1.556)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda}{\pi} \left(\frac{\pi}{-i\lambda} \right)^{D/2} e^{-i\lambda} = \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)} \quad (1.557)$$

所以, 每能量的粒子数 $\rho = \partial N / \partial E$ 为

$$\rho(E) = \left[\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right]^N 2\pi M \frac{(2\pi ME)^{3N/2-1}}{\Gamma(\frac{3}{2}N)}. \quad (1.558)$$

它随着能量的大幂次 $E^{3N/2}$ 增长。尽管如此, 由于波尔兹曼因子 $e^{-E/k_B T}$ 的指数压低, 对配分函数(1.579)的积分仍然收敛。 $\rho(e)$ 和 $e^{-e/k_B T}$ 相乘得到的函数在平均能量 E 处有尖锐的峰值。峰值的位置依赖温度 T 。例如自由 N 粒子系统,

$$\rho(E)e^{-E/k_B T} \sim e^{(3N/2-1)\log E - E/k_B T}. \quad (1.559)$$

这一函数在下列位置取峰值

$$E(T) = k_B T \left(\frac{3N}{2} - 1 \right) \approx k_B T \frac{3N}{2}. \quad (1.560)$$

将(1.559)按 $\delta E = E - E(T)$ 展开, 可以得到峰的宽度:

$$\exp \left\{ \frac{3N}{2} \log E(T) - \frac{E(T)}{k_B T} - \frac{1}{2E^2(T)} \frac{3N}{2} (\delta E)^2 + \dots \right\}. \quad (1.561)$$

可以看出, 与 $E(T) \approx k_B T 3N/2$ 处相比, 只要 δE 达到 $E(T)/\sqrt{N}$ 的量级, 指数就会衰减两倍。导数也处于 $1/\sqrt{N}$ 的相对量级, 即峰很锐。当 N 很大时, 在 $E(T)$ 处、宽为 $E(T)/\sqrt{N}$ 的峰可以被理想化为 δ 函数,

$$\rho(E)e^{-E/k_B T} \approx \delta(E - E(T))N(T)e^{-E(T)/k_B T}. \quad (1.562)$$

²⁷I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, op. cit., Formula 3.382.7.

在温度 T 处，系统中有很多态， $N(T)$ 给出了这些态的总数目。

熵可以 $S(T)$ 通过 $N(T)$ 进行定义

$$N(T) = e^{S(T)/k_B}. \quad (1.563)$$

将上式和(1.562)代入(1.579)，可以得到大粒子数极限：

$$Z(T) = e^{-[E(T)-TS(T)]/k_B T}. \quad (1.564)$$

应用(1.541)，自由能可以表示为

$$F(T) = E(T) - TS(T). \quad (1.565)$$

与(1.545)相比较，我们发现可以由自由能直接得到熵，

$$S(T) = -\frac{\partial}{\partial T} F(T). \quad (1.566)$$

类似地，对巨正则系综有

$$Z_G(T, \mu) = \int dE dn \rho(E, n) e^{-(E-\mu n)/k_B T}, \quad (1.567)$$

其中

$$\rho(E, n) e^{-(E-\mu n)/k_B T} \quad (1.568)$$

在 $E = E(T, \mu)$, $n = N(T, \mu)$ 处有峰值，且可以近似地写为

$$\begin{aligned} \rho(E, n) e^{-(E-\mu n)/k_B T} &\approx \delta(E - E(T, \mu)) \delta(n - N(T, \mu)) \\ &\times e^{S(T, \mu)/k_B} e^{-[E(T, \mu) - \mu N(T, \mu)]/k_B T}. \end{aligned} \quad (1.569)$$

将上式代回(1.567)式，发现对 N 很大的情况，有

$$Z_G(T, \mu) = e^{-[E(T, \mu) - \mu N(T, \mu) - TS(T, \mu)]/k_B T}. \quad (1.570)$$

对巨正则自由能(1.542)，这意味着存在关系式

$$F_G(T, \mu) = E(T, \mu) - \mu N(T, \mu) - TS(T, \mu). \quad (1.571)$$

与(1.550)相比较，可以直接由巨正则自由能的导数得到熵

$$S(T, \mu) = -\frac{\partial}{\partial T} F_G(T, \mu). \quad (1.572)$$

上述方程中的正则自由能和熵依赖于系统的粒子数 N 和体积 V ，即它们有函数形式 $F(T, N, V)$ 和 $S(T, N, V)$ 。

在巨正则量的变量中，粒子数 N 被化学势 μ 取代。

在巨正则能量 $F_G(T, \mu, V)$ 的变量中，体积 V 是唯一一个随着系统增长的变量。因此， $F_G(T, \mu, V)$ 必定直接正比于 V 。比例系数定义为系统的压强 p ：

$$F_G(T, \mu, V) \equiv -p(T, \mu, V)V. \quad (1.573)$$

在三个变量的无穷小改变下, $F_G(T, \mu, V)$ 的变化为

$$dF_G(T, \mu, V) = -SdT - Nd\mu - pdV. \quad (1.574)$$

在体积不变的情况下, 改变(1.571), 即可得到上式中的前两项。当改变体积时, 定义式(1.573)给出了最后一项。

将(1.573)代入(1.571), 得到欧拉关系:

$$E = TS + \mu N - pV. \quad (1.575)$$

能量有 S, N, V 作为自然变量。等效地, 可以写出

$$F = -\mu N - pV, \quad (1.576)$$

这里的 T, N, V 是自然变量。

1.18 态的密度和Tracelog

在很多热力学计算中, 一个基本的量就是态密度。为了给它一个定义, 将正则配分函数

$$Z(T) = \text{Tr} \left(e^{-\hat{H}/k_B T} \right) \quad (1.577)$$

表示为对哈密顿量所有本征态 $|n\rangle$ 的波尔兹曼因子的求和, 即

$$Z(T) = \sum_n e^{-E_n/k_B T}. \quad (1.578)$$

也可以写成积分:

$$Z(T) = \int dE \rho(E) e^{-E/k_B T}. \quad (1.579)$$

物理量

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n) \quad (1.580)$$

给出了系统在能量间隔 $(E, E + dE)$ 中的态密度。态密度可以写成态密度算符 $\hat{\rho}(E)$ 的迹:

$$\rho(E) = \text{Tr} \hat{\rho}(E) \equiv \text{Tr} \delta(E - \hat{H}). \quad (1.581)$$

很明显, 态密度是正则配分函数(1.577)的傅里叶变换:

$$\rho(E) = \int_{-i\infty}^{\infty} \frac{d\beta}{2\pi i} e^{\beta E} \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right) = \int_{-i\infty}^{\infty} \frac{d\beta}{2\pi i} e^{\beta E} Z(1/k_B \beta). \quad (1.582)$$

积分式

$$N(E) = \int^E dE' \rho(E') \quad (1.583)$$

是能量上限为 E 的态的总数, 积分可以从基态能量以下的任意位置开始。函数 $N(E)$ 是阶跃函数(1.309)之和:

$$N(E) = \sum_n \Theta(E - E_n). \quad (1.584)$$

只有阶跃函数在原点的值为1/2，上述方程才是正确的。后面我们将看到，如果只采用单边形式的阶跃函数(1.302)，方程式错误的。事实上，如果将积分进行至能量的某个能级 E_n ，结果为

$$N(E_n) = (n + 1/2). \quad (1.585)$$

与 $\rho(E)$ 联系的一个重要的量就是算符 $\hat{H} - E$ 的对数的迹，简称对数迹

$$\text{Tr} \log(\hat{H} - E) = \sum_n \log(E_n - E). \quad (1.586)$$

可以用态密度(1.581)将其表示为

$$\text{Tr} \log(\hat{H} - E) = \text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \delta(E' - \hat{H}) \log(E' - E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \rho(E') \log(E' - E). \quad (1.587)$$

哈密顿量算符的对数迹可以看做是算符 ζ 函数的极限：

$$\hat{\zeta}_{\hat{H}}(\nu) = \text{Tr } \hat{H}^{-\nu}, \quad (1.588)$$

其迹为广义 ζ 函数

$$\zeta_{\hat{H}}(\nu) \equiv \text{Tr} [\hat{\zeta}_{\hat{H}}(\nu)] = \text{Tr} (\hat{H}^{-\nu}) = \sum_n E_n^{-\nu}. \quad (1.589)$$

对线性分布的能谱 $E_n = n, n = 1, 2, 3 \dots$ ，上式约化为黎曼 ζ 函数(2.519)。

由广义 ζ 函数，可以通过求导获得对数迹，

$$\text{Tr} \log \hat{H} = -\partial_{\nu} \zeta_{\hat{H}}(\nu)|_{\nu=0}. \quad (1.590)$$

对数迹(1.586)对 E 求导，得到解算子(resolvent)(1.314)的迹：

$$\partial_E \text{Tr} \log(\hat{H} - E) = \text{Tr} \frac{1}{E - \hat{H}} = \sum_n \frac{1}{E - E_n} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n R_n(E) = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \hat{R}(E). \quad (1.591)$$

回顾等式(1.325)，可以发现这个量在实 E 轴上方的小虚部给出了态密度

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} \partial_E \text{Tr} \log(\hat{H} - E - i\eta) = \sum_n \delta(E - E_n) = \rho(E). \quad (1.592)$$

进而进行能量的积分，得到等式(1.583)中的态数目函数 $N(E)$ ：

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} \log(E - \hat{H}) = \sum_n \Theta(E - E_n) = N(E). \quad (1.593)$$

Appendix 1A 简单时间演化算符

考虑自旋为1/2的粒子在磁场 \mathbf{B} 的、最简单非平庸时间演化算符。约化哈密顿量算符为 $\hat{H}_0 = -\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2$ ，在取自然单位 $\hbar = 1$ 是，时间演化算符为

$$e^{-i\hat{H}_0(t_b - t_a)} = e^{i(t_b - t_a)\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2}. \quad (1A.1)$$

如(1.293)式对上式进行展开, 应用 $(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma})^{2n} = B^{2n}$ 和 $(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma})^{2n+1} = B^{2n}(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma})$, 得到

$$e^{-i\hat{H}_0(t_b-t_a)} = \cos B(t_b-t_a)/2 + i\hat{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin B(t_b-t_a)/2, \quad (1A.2)$$

其中, $\hat{\mathbf{B}} \equiv \mathbf{B}/|\mathbf{B}|$ 。现在假定磁场不是常数, 而是带有小的含时变分 $\delta\mathbf{B}(t)$ 。从 (1.253) 得到[或(1.293)中的最低阶展开项]

$$\delta e^{-i\hat{H}_0(t_b-t_a)} = \int_{t_a}^{t_b} dt e^{-i\hat{H}_0(t_b-t)} \delta\mathbf{B}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} e^{-i\hat{H}_0(t-t_a)}. \quad (1A.3)$$

应用(1A.2), 上式右边的被积函数变为

$$\left[\cos B(t_b-t)/2 + i\hat{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin B(t_b-t)/2 \right] \delta\mathbf{B}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} \left[\cos B(t-t_a)/2 + i\hat{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin B(t-t_a)/2 \right]. \quad (1A.4)$$

借助公式[回忆(1.445)]

$$\sigma^i \sigma^j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} \sigma^k \quad (1A.5)$$

可以进行化简, 得到

$$\hat{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \delta\mathbf{B}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \hat{\mathbf{B}} \cdot \delta\mathbf{B}(t) + i[\hat{\mathbf{B}} \times \delta\mathbf{B}(t)] \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \delta\mathbf{B}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \hat{\mathbf{B}} \cdot \delta\mathbf{B}(t) - i[\hat{\mathbf{B}} \times \delta\mathbf{B}(t)] \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1A.6)$$

以及

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \delta\mathbf{B}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\sigma} &= \left[\hat{\mathbf{B}} \cdot \delta\mathbf{B}(t) \right] \hat{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\sigma} + i[\hat{\mathbf{B}} \times \delta\mathbf{B}(t)] \cdot \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= i[\hat{\mathbf{B}} \times \delta\mathbf{B}(t)] \cdot \hat{\mathbf{B}} + \left\{ [\hat{\mathbf{B}} \cdot \delta\mathbf{B}(t)] \hat{\mathbf{B}} - [\hat{\mathbf{B}} \times \delta\mathbf{B}(t)] \times \hat{\mathbf{B}} \right\} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \quad (1A.7)$$

等式右边第一项为零, 由于 $\hat{\mathbf{B}}^2 = 1$, 第二项等于 $\delta\mathbf{B}$ 。因此(1A.4)式可以写为:

$$\begin{aligned} &\cos B(t_b-t)/2 \cos B(t-t_a)/2 \delta\mathbf{B}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &+ i \sin B(t_b-t)/2 \cos B(t-t_a)/2 \{ \hat{\mathbf{B}} \cdot \delta\mathbf{B}(t) + i[\hat{\mathbf{B}} \times \delta\mathbf{B}(t)] \cdot \boldsymbol{\sigma} \} \\ &+ i \cos B(t_b-t)/2 \sin B(t-t_a)/2 \{ \hat{\mathbf{B}} \cdot \delta\mathbf{B}(t) - i[\hat{\mathbf{B}} \times \delta\mathbf{B}(t)] \cdot \boldsymbol{\sigma} \} \\ &+ \sin B(t_b-t)/2 \sin B(t-t_a)/2 \delta\mathbf{B}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{aligned} \quad (1A.8)$$

进一步运算给出

$$\left\{ \cos B[(t_b+t_a)/2-t] \delta\mathbf{B}(t) - \sin B[(t_b+t_a)/2-t] [\hat{\mathbf{B}} \times \delta\mathbf{B}(t)] \right\} \cdot \boldsymbol{\sigma} + i \sin B(t_b-t_a)/2 \hat{\mathbf{B}} \cdot \delta\mathbf{B}(t). \quad (1A.9)$$

将其从 t_a 积分至 t_b 即可得到变分(1A.3)。

Appendix 1B 菲涅尔积分的收敛性

通过与高斯积分的关系, 我们将证明菲涅尔积分(1.333)的收敛性。在图1.4中积分区域内, 被积函数 e^{-z^2} 解析, 根据柯西定理, 沿闭合回路的三部分积分之和为零:

$$\oint dz e^{-z^2} = \int_0^A dz e^{-z^2} + \int_A^B dz e^{-z^2} + \int_B^O dz e^{-z^2} = 0. \quad (1B.1)$$

令 R 为圆弧的半径。接着, 对三个积分中的变量 z 做代换:

$$\begin{aligned} 0A: \quad z &= p, & dz &= dp, & z^2 &= p^2 \\ B0: \quad z &= pe^{i\pi/4}, & dz &= dp e^{i\pi/4}, & z^2 &= ip^2 \\ AB: \quad z &= R e^{i\varphi}, & dz &= i R dp, & z^2 &= p^2, \end{aligned}$$

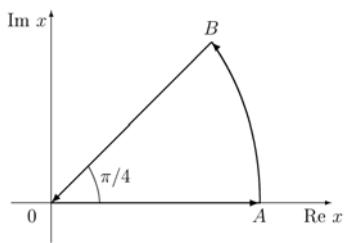


Figure 1.4 柯西积分的三角形闭合回路

得到等式

$$\int_0^R dp e^{-p^2} + e^{i\pi/4} \int_R^0 dp e^{-ip^2} + \int_0^{\pi/4} d\varphi iR e^{-R^2(\cos 2\varphi + i \sin 2\varphi) + i\varphi} = 0. \quad (1B.2)$$

在 $R \rightarrow \infty$ 的情况下，第一个积分迅速收敛为 $\sqrt{\pi}/2$ 。在这一极限下，最后一个积分为零。为了验证这个结论，首先估计其绝对值：

$$\left| \int_0^{\pi/4} d\varphi iR e^{-R^2(\cos 2\varphi + i \sin 2\varphi) + i\varphi} \right| < R \int_0^{\pi/4} d\varphi e^{-R^2 \cos 2\varphi}. \quad (1B.3)$$

除了 φ 角接近 $\pi/4$ 的区域，不等式右边迅速按指数衰减为零。在 $\alpha \in (\pi/4 - \epsilon, \pi/4)$ (小 $\epsilon > 0$) 的危险区域内，肯定有 $\sin 2\varphi > \sin 2\alpha$ ，所以

$$R \int_{\alpha}^{\pi/4} d\varphi e^{-R^2 \cos 2\varphi} < R \int_{\alpha}^{\pi/4} d\varphi \frac{\sin 2\varphi}{\sin 2\alpha} e^{-R^2 \cos 2\varphi}. \quad (1B.4)$$

右边的积分给出

$$\alpha R e^{-R^2 \cos 2\alpha} + \frac{1}{R \sin 2\alpha} \left[e^{-R^2 \cos 2\varphi} \right]_{\varphi=\alpha}^{\varphi=\pi/4}, \quad (1B.5)$$

在大 R 极限下，按 $1/R$ 趋于零。因此，从 (1B.2) 得到公式 $\int_{\infty}^0 dp e^{-ip^2} = -e^{-i\pi/4} \sqrt{\pi}/2$ ，或者

$$\int_{\infty}^{\infty} dp e^{-ip^2} = e^{-i\pi/4} \sqrt{\pi}, \quad (1B.6)$$

通过替换 $p \rightarrow p\sqrt{a/2}$ ，上式可以转化为菲涅尔积分公式 (1.333)。

Appendix 1C 不对称陀螺

不对称陀螺有三个不同的转动惯量，其拉格朗日量为

$$L = \frac{1}{2} [I_{\xi} \omega_{\xi}^2 + I_{\eta} \omega_{\eta}^2 + I_{\zeta} \omega_{\zeta}^2]. \quad (1C.1)$$

有黑森度规 [回顾 (1.12) 和 (1.384)]

$$\begin{aligned} g_{11} &= I_{\xi} \sin^2 \beta + I_{\zeta} \cos^2 \beta - (I_{\xi} - I_{\eta}) \sin^2 \beta \sin^2 \gamma, \\ g_{21} &= -(I_{\xi} - I_{\eta}) \sin \beta \sin \gamma \cos \gamma, \\ g_{31} &= I_{\zeta} \cos \beta, \\ g_{22} &= I_{\eta} + (I_{\xi} - I_{\eta}) \sin^2 \gamma, \\ g_{32} &= 0, \\ g_{33} &= I_{\zeta}, \end{aligned} \quad (1C.2)$$

而不再是(1.459)。行列式为

$$g = I_\xi I_\eta I_\zeta \sin^2 \beta, \quad (1C.3)$$

其逆度规分量为

$$\begin{aligned} g^{11} &= \frac{1}{g} \{I_\eta + (I_\xi - I_\eta) \sin^2 \gamma\} I_\zeta, \\ g^{21} &= \frac{1}{g} \sin \beta \sin \gamma \cos \gamma (I_\xi - I_\eta) I_\zeta, \\ g^{31} &= \frac{1}{g} \{\cos \beta [-\sin^2 \gamma (I_\xi - I_\eta) - I_\eta]\} I_\zeta, \\ g^{22} &= \frac{1}{g} \{\sin^2 \beta [I_\xi - \sin^2 \gamma (I_\xi - I_\eta)]\} I_\zeta, \\ g^{32} &= \frac{1}{g} \{\sin \beta \cos \beta \sin \gamma \cos \gamma (I_\eta - I_\xi)\} I_\zeta, \\ g^{33} &= \frac{1}{g} \{\sin^2 \beta I_\xi I_\eta + \cos^2 \beta I_\eta I_\zeta + \cos^2 \beta \sin^2 \gamma (I_\xi - I_\eta) I_\zeta\}. \end{aligned} \quad (1C.4)$$

可以算出 (1.70)式中定义的克里斯托弗符号:

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}_{11}^1 &= [\cos \beta \cos \gamma \sin \gamma (I_\eta^2 - I_\eta I_\zeta - I_\xi^2 + I_\xi I_\zeta)] / I_\xi I_\eta, \\ \bar{\Gamma}_{21}^1 &= \{\cos \beta [\sin^2 \gamma (I_\xi^2 - I_\eta^2 - (I_\xi - I_\eta) I_\zeta) \\ &\quad + I_\eta (I_\xi + I_\eta - I_\zeta)]\} / 2 \sin \beta I_\xi I_\eta, \\ \bar{\Gamma}_{31}^1 &= \{\cos \gamma \sin \gamma [I_\eta^2 - I_\xi^2 + (I_\xi - I_\eta) I_\zeta]\} / 2 I_\xi I_\eta, \\ \bar{\Gamma}_{22}^1 &= 0, \\ \bar{\Gamma}_{32}^1 &= [\sin^2 \gamma (I_\xi^2 - I_\eta^2 - (I_\xi - I_\eta) I_\zeta) - I_\eta (I_\xi - I_\eta + I_\zeta)] / 2 \sin \beta I_\xi I_\eta, \\ \bar{\Gamma}_{33}^1 &= 0, \\ \bar{\Gamma}_{11}^2 &= \{\cos \beta \sin \beta [\sin^2 \gamma (I_\xi^2 - I_\eta^2 - I_\zeta (I_\xi - I_\eta)) - I_\xi (I_\xi - I_\zeta)]\} / I_\xi I_\eta, \\ \bar{\Gamma}_{21}^2 &= \{\cos \beta \cos \gamma \sin \gamma [I_\xi^2 - I_\eta^2 - I_\zeta (I_\xi - I_\eta)]\} / 2 I_\xi I_\eta, \\ \bar{\Gamma}_{31}^2 &= \{\sin \beta [\sin^2 \gamma (I_\xi^2 - I_\eta^2 - I_\zeta (I_\xi - I_\eta)) - I_\xi (I_\xi - I_\eta - I_\zeta)]\} / 2 I_\xi I_\eta, \\ \bar{\Gamma}_{22}^2 &= 0, \\ \bar{\Gamma}_{32}^2 &= [\cos \gamma \sin \gamma (I_\xi^2 - I_\eta^2 - I_\zeta (I_\xi - I_\eta))] / 2 I_\xi I_\eta, \\ \bar{\Gamma}_{33}^2 &= 0, \\ \bar{\Gamma}_{11}^3 &= \{\cos \gamma \sin \gamma [\sin^2 \beta (I_\xi I_\eta (I_\xi - I_\eta) - I_\zeta (I_\xi^2 - I_\eta^2) + I_\zeta^2 (I_\xi - I_\eta)) \\ &\quad + (I_\xi^2 - I_\eta^2) I_\zeta - I_\zeta^2 (I_\xi - I_\eta)]\} / I_\xi I_\eta I_\zeta, \\ \bar{\Gamma}_{21}^3 &= \{\sin^2 \beta [\sin^2 \gamma (2 I_\xi I_\eta (I_\eta - I_\xi) + I_\zeta (I_\xi^2 - I_\eta^2) - I_\zeta^2 (I_\xi - I_\eta)) \\ &\quad + I_\xi I_\eta (I_\xi - I_\eta) + I_\eta I_\zeta (I_\eta - I_\zeta)] - \sin^2 \gamma ((I_\xi^2 - I_\eta^2) I_\zeta - I_\zeta^2 (I_\xi - I_\eta)) \\ &\quad - I_\eta I_\zeta (I_\xi + I_\eta - I_\zeta)\} / 2 \sin \beta I_\xi I_\eta I_\zeta, \\ \bar{\Gamma}_{31}^3 &= [\cos \beta \cos \gamma \sin \gamma (I_\xi^2 - I_\eta^2 - I_\zeta (I_\xi - I_\eta))] / 2 I_\xi I_\eta, \\ \bar{\Gamma}_{22}^3 &= \cos \gamma \sin \gamma (I_\eta - I_\xi) / I_\zeta, \\ \bar{\Gamma}_{32}^3 &= \{\cos \beta [\sin^2 \gamma (I_\eta^2 - I_\xi^2 + (I_\xi - I_\eta) I_\zeta) + I_\eta (I_\xi - I_\eta + I_\zeta)]\} / 2 \sin \beta I_\eta I_\xi, \\ \bar{\Gamma}_{33}^3 &= 0. \end{aligned} \quad (1C.5)$$

其余的分量又对称性质 $\bar{\Gamma}_{\mu\nu}^\lambda = \bar{\Gamma}_{\nu\mu}^\lambda$ 给出。由克里斯托弗符号, 可以得出里奇张量 (Ricci tensor),

$$\bar{R}_{11} = \{\sin^2 \beta [\sin^2 \gamma (I_\eta^3 - I_\xi^3 - (I_\xi I_\eta - I_\zeta^2) (I_\xi - I_\eta))$$

$$\begin{aligned}
& + ((I_\xi + I_\zeta)^2 - I_\eta^2)(I_\xi - I_\zeta)] + I_\zeta^3 - I_\zeta(I_\xi - I_\eta)^2 \} / 2I_\xi I_\eta I_\zeta, \\
\bar{R}_{21} & = \{\sin \beta \sin \gamma \cos \gamma [I_\eta^3 - I_\xi^3 + (I_\xi I_\eta - I_\zeta^2)(I_\eta - I_\xi)]\} / 2I_\xi I_\eta I_\zeta, \\
\bar{R}_{31} & = -\{\cos \beta [(I_\xi - I_\eta)^2 - I_\zeta^2]\} / 2I_\xi I_\eta, \\
\bar{R}_{22} & = \{\sin^2 \gamma [I_\xi^3 - I_\eta^3 + (I_\xi I_\eta - I_\zeta^2)(I_\xi - I_\eta)] + I_\eta^3 - (I_\xi - I_\zeta)^2 I_\eta\} / 2I_\xi I_\eta I_\zeta, \\
\bar{R}_{32} & = 0, \\
\bar{R}_{33} & = -[(I_\xi - I_\eta)^2 - I_\zeta^2] / 2I_\xi I_\eta. \tag{1C.6}
\end{aligned}$$

其定义将在等式(10.41)中给出。里奇张量与 $g^{\mu\nu}$ 收缩可以得到标量曲率

$$\bar{R} = [2(I_\xi I_\eta + I_\eta I_\zeta + I_\zeta I_\xi) - I_\xi^2 - I_\eta^2 - I_\zeta^2] / 2I_\xi I_\eta I_\zeta. \tag{1C.7}$$

由于目前考虑的是没有挠率的空间，克里斯托弗符号 $\bar{\Gamma}_{\mu\nu}^\lambda$ 等于完整的仿射联络 $\Gamma_{\mu\nu}^\lambda$ ；同样，分别由 $\bar{\Gamma}_{\mu\nu}^\lambda$ 和 $\Gamma_{\mu\nu}^\lambda$ 得到的 \bar{R} 和 R 也彼此相等。

Notes and References

如果想知道更多细节，我们推荐如下标准的教科书：

- I. Newton, *Mathematische Prinzipien der Naturlehre*, Wiss. Buchgesellschaft, Darmstadt, 1963;
- J.L. Lagrange, *Analytische Mechanik*, Springer, Berlin, 1887;
- G. Hamel, *Theoretische Mechanik*, Springer, Berlin, 1949;
- A. Sommerfeld, *Mechanik*, Harri Deutsch, Frankfurt, 1977;
- W. Weizel, *Lehrbuch der Theoretischen Physik*, Springer, Berlin, 1963;
- H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, 1950;
- L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Mechanics*, Pergamon, London, 1965;
- R. Abraham and J.E. Marsden, *Foundations of Mechanics*, Benjamin, New York, 1967;
- C.L. Siegel and J.K. Moser, *Lectures on Celestial Mechanics*, Springer, Berlin, 1971;
- P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Clarendon, Oxford, 1958;
- L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Pergamon, London, 1965;
- A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Vols. I and II, North-Holland, Amsterdam, 1961;
- L.I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd ed., McGraw-Hill, New York, 1968;
- E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 2nd ed., Wiley, New York, 1970;
- L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Pergamon, London, 1958;
- E.M. Lifshitz and L.P. Pitaevski, *Statistical Physics*, Vol. 2, Pergamon, London, 1987.

本章中的特别引用涉及到以下出版物

- [1] For an elementary introduction see the book
H.B. Callen, *Classical Thermodynamics*, John Wiley and Sons, New York, 1960. More details are also found later in Eqs. (4.56) and (4.57).
- [2] The integrability conditions are named after the mathematician of complex analysis H.A. Schwarz, a student of K. Weierstrass, who taught at the Humboldt-University of Berlin from 1892–1921.
- [3] L. Schwartz, *Théorie des distributions*, Vols.I-II, Hermann & Cie, Paris, 1950-51;
I.M. Gelfand and G.E. Shilov, *Generalized functions*, Vols.I-II, Academic Press, New York-London, 1964-68.
- [4] An exception occurs in the theory of Bose-Einstein condensation where the single state $\mathbf{p} = 0$ requires a separate treatment since it collects a large number of particles in what is called a *Bose-Einstein condensate*. See p. 169 in the above-cited textbook by L.D. Landau and E.M. Lifshitz on *Statistical Mechanics*. Bose-Einstein condensation will be discussed in Sections 7.2.1 and 7.2.4.

- [5] This was first observed by
B. Podolsky, Phys. Rev. **32**, 812 (1928).
- [6] B.S. DeWitt, Rev. Mod. Phys. **29**, 377 (1957);
K.S. Cheng, J.Math. Phys. **13**, 1723 (1972);
H. Kamo and T. Kawai, Prog. Theor. Phys. **50**, 680, (1973);
T. Kawai, Found. Phys. **5**, 143 (1975);
H. Dekker, Physica A **103**, 586 (1980);
G.M. Gavazzi, Nuovo Cimento **101A**, 241 (1981).
See also the alternative approach by
N.M.J. Woodhouse, *Geometric Quantization*, Oxford University Press, Oxford, 1992.
- [7] C. van Winter, Physica **20**, 274 (1954).
- [8] For detailed properties of the representation matrices of the rotation group, see
A.R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton University Press,
1960.
- [9] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Pergamon, London, 1965.

*A dancing shape, an image gay,
 To haunt, to startle, and waylay.*
 JOHN MILTON, Phantom of Delight (1804)

2

路径积分——基本性质和简单解

量子力学和量子统计的算符形式对理解有些量子现象并不总是那么明晰。还存在另外一种被称为路径积分的等价形式，在这种形式中，算符被无穷多重积分所代替。由于薛定谔方程是一微分方程，每一时刻量子态的性质由此前无穷小时刻时的性质所决定；与之不同，在由路径积分得到量子力学振幅采取的是整体的方式，涉及体系在每一时刻的性质。

2.1 振幅随时间演化的路径积分表示

量子力学的路径积分方法是由费曼于1942年发展起来的¹。在其最初的理论形式中，路径积分用来描述点粒子在笛卡尔坐标系中的运动，得到了粒子定域态之间时间演化算符的跃迁振幅(参见1.7节)

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \langle x_b | \hat{U}(t_b, t_a) | x_a \rangle, \quad t_b > t_a. \quad (2.1)$$

为简单起见，我们首先假定空间是一维的，后面将推广到D维笛卡尔坐标情形。要引入弯曲坐标 (curvilinear coordinates) 还需要做些说明。在第 10–11 章将进一步给出向非平庸几何空间的推广，彼时曲率 (curvature) 和扰率 (torsion) 的概念将会出现。

2.1.1 时间演化振幅的分割

我们将主要讨论有因果关系，或推迟的时间演化振幅[见方程(1.299)]。它包含所有相关的量子力学信息，还有能量复平面的解析性质[见方程(1.306)后的评述]。这也是为什么从现在起，我们总是采取时间参数因果次序 $t_b > t_a$ 的原因。

费曼发现，由于时间演化算符满足基本的叠加定律 (composition law) (见1.7节)，振幅(2.1)可以被分割为许多，比如说 $N+1$ 个，时间演化算符。每个这样的演化算符作用于无穷小的时间间隔 $\epsilon \equiv t_n - t_{n-1} = (t_b - t_a)/(N+1) > 0$ 之中：

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \langle x_b | \hat{U}(t_b, t_N) \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \cdots \hat{U}(t_n, t_{n-1}) \cdots \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_a) | x_a \rangle. \quad (2.2)$$

¹有关于此的历史沿革，参阅本章末的注释和文献

当在每一对 \hat{U} 算符间插入一组完备集,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_n |x_n\rangle\langle x_n| = 1, \quad n = 1, \dots, N, \quad (2.3)$$

振幅就变成了 N 重积分的叠加,

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} (x_n t_n | x_{n-1} t_{n-1}). \quad (2.4)$$

在此我们认定 $x_b \equiv x_{N+1}$, $x_a \equiv x_0$, $t_b \equiv t_{N+1}$, $t_a \equiv t_0$. 符号 $\Pi[\dots]$ 表示括号中量的乘积。被积函数是关于无穷小时间间隔

$$(x_n t_n | x_{n-1} t_{n-1}) = \langle x_n | e^{-i\epsilon \hat{H}(t_n)/\hbar} | x_{n-1} \rangle \quad (2.5)$$

中振幅的乘积。其中哈密顿量算符

$$\hat{H}(t) \equiv H(\hat{p}, \hat{x}, t). \quad (2.6)$$

当假设哈密顿量具有标准的形式, 亦即为动能与势能的和,

$$H(p, x, t) = T(p, t) + V(x, t) \quad (2.7)$$

时, 进一步地发展就变得很简明了。对于足够小的间隔, 时间演化算符

$$e^{-i\epsilon \hat{H}/\hbar} = e^{-i\epsilon (\hat{T} + \hat{V})/\hbar} \quad (2.8)$$

按照贝克尔-坎贝尔-豪斯朵夫(Baker-Campbell-Hausdorff formula)公式可以被因子化为如下形式(证明在附录Appendix 2A)

$$e^{-i\epsilon (\hat{T} + \hat{V})/\hbar} = e^{-i\epsilon \hat{V}/\hbar} e^{-i\epsilon \hat{T}/\hbar} e^{-i\epsilon^2 \hat{X}/\hbar^2}. \quad (2.9)$$

在此, 算符 \hat{X} 具有如下展开形式

$$\hat{X} \equiv \frac{i}{2} [\hat{V}, \hat{T}] - \frac{\epsilon}{\hbar} \left(\frac{1}{6} [\hat{V}, [\hat{V}, \hat{T}]] - \frac{1}{3} [[\hat{V}, \hat{T}], \hat{T}] \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (2.10)$$

省略掉的部分对应 $\epsilon^4, \epsilon^5, \dots$ 等高幂项, 包含 \hat{V} 和 \hat{T} 的高阶对易子。如果我们暂时忽略掉 \hat{X} 中的 ϵ^2 压低项, 我们可以算出算符 $e^{-i\epsilon \hat{H}/\hbar}$ 的定域矩阵元有如下简洁的形式:

$$\begin{aligned} \langle x_n | e^{-i\epsilon H(\hat{p}, \hat{x}, t_n)/\hbar} | x_{n-1} \rangle &\approx \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x_n | e^{-i\epsilon V(\hat{x}, t_n)/\hbar} | x \rangle \langle x | e^{-i\epsilon T(\hat{p}, t_n)/\hbar} | x_{n-1} \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x_n | e^{-i\epsilon V(\hat{x}, t_n)/\hbar} | x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{ip_n(x-x_{n-1})/\hbar} e^{-i\epsilon T(p_n, t_n)/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

可以算出定域矩阵元

$$\langle x_n | e^{-i\epsilon V(\hat{x}, t_n)/\hbar} | x \rangle = \delta(x_n - x) e^{-i\epsilon V(x_n, t_n)/\hbar}, \quad (2.12)$$

则(2.11)变为

$$\begin{aligned} \langle x_n | e^{-i\epsilon H(\hat{p}, \hat{x}, t_n)/\hbar} | x_{n-1} \rangle &\approx \\ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \{ ip_n(x_n - x_{n-1})/\hbar - i\epsilon[T(p_n, t_n) + V(x_n, t_n)]/\hbar \}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

将上式带回(2.4), 我们就可得到包含多重积分的费曼路径积分公式,

$$(x_b t_b | x_a t_a) \approx \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}^N \right). \quad (2.14)$$

其中, \mathcal{A}^N 为求和

$$\mathcal{A}^N = \sum_{n=1}^{N+1} [p_n(x_n - x_{n-1}) - \epsilon H(p_n, x_n, t_n)]. \quad (2.15)$$

2.1.2 零哈密顿量路径积分

需要指出, 路径积分(2.14)在零哈密顿量时会通过一系列标量积分给出理论的希尔伯特(Hilbert)空间结构:

$$(x_b t_b | x_a t_a) \approx \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] e^{i \sum_{n=1}^{N+1} p_n(x_n - x_{n-1})/\hbar}. \quad (2.16)$$

它等价于

$$\begin{aligned} (x_b t_b | x_a t_a) &\approx \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \langle x_n | x_{n-1} \rangle = \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \delta(x_n - x_{n-1}) \\ &= \delta(x_b - x_a). \end{aligned} \quad (2.17)$$

在连续极限下, 变为

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} e^{i \int dt p(t) \dot{x}(t)/\hbar} = \langle x_b | x_a \rangle = \delta(x_b - x_a). \quad (2.18)$$

在算符表达式(2.2)中, 对零哈密顿量情形, 等式右边的时间演化算符 $\hat{U}(t_n, t_{n-1})$ 均为单位元1。

至此我们可以发现, 在(2.16)式动量积分乘积内的被积变量 p_n 可以由积分式外的导数 $\hat{p}_n \equiv -i\hbar\partial_{x_n}$ 产生。在2.1.4小结我们将会讨论时间分割的连续极限, 亦即分割区间 ϵ 趋近于零的情形。在此极限下, 分离变量 x_n 和 p_n 将变为时间 t 的连续函数 $x(t)$ 与 $p(t)$, 并且 $p(t) = -i\hbar\partial_{x(t)}$ 与 $x(t)$ 满足对易关系:

$$[\hat{p}(t), x(t)] = -i\hbar, \quad (2.19)$$

即海森堡正则等时对易关系。

这个发现奠定了由路径积分(2.14)导出薛定谔振幅的时间演化方程的基础。

2.1.3 薛定谔振幅时间演化方程

我们把(2.14)中积分乘积的最末时间间隔作为因子分离出来, 这样我们就能够得到如下递推公式

$$(x_b t_b | x_a t_a) \approx \int_{-\infty}^{\infty} dx_N (x_b t_b | x_N t_N) (x_N t_N | x_a t_a), \quad (2.20)$$

其中

$$(x_b t_b | x_N t_N) \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_b}{2\pi\hbar} e^{(i/\hbar)[p_b(x_b - x_N) - \epsilon H(p_b, x_b, t_b)]}. \quad (2.21)$$

在积分号内的动量 p_b 可以由积分外微分算符 $\hat{p}_b \equiv -i\hbar\partial_{x_b}$ 生成. 这点对 p_b 的任意函数均成立, 因此哈密顿量也可以移到动量积分号外面, 得到

$$(x_b t_b | x_N t_N) \approx e^{-i\epsilon H(-i\hbar\partial_{x_b}, x_b, t_b)/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_b}{2\pi\hbar} e^{ip_b(x_b - x_N)/\hbar} = e^{-i\epsilon H(-i\hbar\partial_{x_b}, x_b, t_b)/\hbar} \delta(x_b - x_N). \quad (2.22)$$

把此式带回到(2.20) 中, 我们有

$$(x_b t_b | x_a t_a) \approx e^{-i\epsilon H(-i\hbar\partial_{x_b}, x_b, t_b)/\hbar} (x_b t_b - \epsilon | x_a t_a), \quad (2.23)$$

或

$$\frac{1}{\epsilon} [(x_b t_b + \epsilon | x_a t_a) - (x_b t_b | x_a t_a)] \approx \frac{1}{\epsilon} [e^{-i\epsilon H(-i\hbar\partial_{x_b}, x_b, t_b + \epsilon)/\hbar} - 1] (x_b t_b | x_a t_a). \quad (2.24)$$

在 $\epsilon \rightarrow 0$ 极限情形下, 它们将变为时间演化振幅的微分方程

$$i\hbar\partial_{t_b} (x_b t_b | x_a t_a) = H(-i\hbar\partial_{x_b}, x_b, t_b) (x_b t_b | x_a t_a), \quad (2.25)$$

这正是算符形式量子力学的薛定谔方程(1.297)。

2.1.4 时间分割演化振幅的收敛性

在此需要对由时间分割的表达式(2.14) 在连续极限下过渡到量子力学振幅的收敛性问题做些说明。在取连续极限时, 时间分割大小 $\epsilon = (t_b - t_a)/(N + 1) \rightarrow 0$ 趋于零, 同时分割数 N 趋于 ∞ 。这个收敛性可以在一般的动能下得到证明。对于标准的动能 $T = p^2/2M$ 仅仅当势 $V(x, t)$ 是足够光滑时, 这个收敛能够得到证明. 对于与时间无关的势, 我们给出一个被称作 *Trotter product formula* 的结果, 形式如下:

$$e^{-i(t_b - t_a)\hat{H}/\hbar} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{-i\epsilon\hat{V}/\hbar} e^{-i\epsilon\hat{T}/\hbar} \right)^{N+1}. \quad (2.26)$$

如果 T 和 V 是常数的话, 这显然在平庸意义下是正确的。如果它们是算符, 我们利用等式(2.9) 来重新写等式(2.26)的左边, 得到

$$e^{-i(t_b - t_a)\hat{H}/\hbar} \equiv \left(e^{-i\epsilon(\hat{T} + \hat{V})/\hbar} \right)^{N+1} \equiv \left(e^{-i\epsilon\hat{V}/\hbar} e^{-i\epsilon\hat{T}/\hbar} e^{-i\epsilon^2\hat{X}/\hbar^2} \right)^{N+1}.$$

特罗特 (Trotter) 公式告诉我们，与 ϵ^2 成比例的对易项 \hat{X} 在 $N \rightarrow \infty$ 的极限下是没有贡献的。使这一论述得到保证的数学条件需要泛函分析，由于太过专业化就不在这里给出了(具体细节请看这一章后面引用的相关文献)。对我们来说只需要知道特罗特公式对有下限的算符和绝大多数物理上感兴趣的势成立就够了。它不能用来推导费曼之时间分割的路径积分形式(2.14)，即便是在已知公式成立的体系中也不行。需特别注意，短时间振幅可能会有别于(2.13)。例如，取一个库伦吸引势 $V(x) \propto -1/|x|$ ，该势下特罗特公式已经被证明是正确的。然而，即使对于两个时间间隔，费曼时间间隔公式也是发散的。这一点将在 12 章详细讨论。类似的问题将在其他物理相关的势上发现，例如 $V(x) \propto l(l+D-2)\hbar^2/|x|^2$ (离心势垒) 与 $V(\theta) \propto m^2\hbar^2/\sin^2\theta$ (靠近球极的角势垒)。在所有的这些情况下， \hat{X} 展开形式(2.10)内的对易子变得越来越奇异。事实上，我们将看到即使是对一个无穷小的 ϵ 这个展开形式也不能收敛。所有的原子系统包含如此形式的势，所以费曼公式(2.14)不能用来计算给出跃迁振幅的近似值。必须要找到新的路径积分公式，这一任务将在 12 章完成。幸运的是，将更一般的公式通过一些变换最终简化成在一个辅助空间里带有束缚势的费曼型公式，这一过程是可能实现的。因此，以上采用的能得出如此形式势下的费曼公式的方法对于本书以后的深入是足够的。这之后，该方法作为以后所有量子力学计算的独立的出发点。

到后来，在所有时间间隔公式例如在公式(2.14)中的符号 \approx ，表示等号将会在连续极限 $N \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0$ 的情况下出现，势有上面说过的类型奇点的情况例外。在作用量里，连续极限没有什么精妙可言。在(2.15)中，求和式 \mathcal{A}^N 成为如下积分形式

$$\mathcal{A}[p, x] = \int_{t_a}^{t_b} dt [p(t)\dot{x}(t) - H(p(t), x(t), t)] \quad (2.27)$$

这是在相当普遍的情况下得到的。这个表达式被认为是在相位空间下对于路径 $x(t), p(t)$ 的经典正则作用。因为位移变量 x_{N+1} 和 x_0 被分别固定在末态值和初始值下 x_b 和 x_a ，因此路径满足边界条件 $x(t_b) = x_b, x(t_a) = x_a$ 。

在相同的限制下，公式(2.14)中的无穷多个积分的乘积被称为路径积分。受限制的积分可以写成如下形式

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \equiv \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}'x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar}. \quad (2.28)$$

通过定义可知，在这个结果中的 p_n 积分要比 x_n 的积分多一重。因为 x_0 和 x_{N+1} 是固定的并且 x_n 的积分是对于 $n = 1, \dots, N$ 下的，每一对 (x_n, x_{n+1}) 是在 p_n 的积分在 $n = 1, \dots, N+1$ 下完成的。此种情况由泛函积分 $\mathcal{D}'x$ 上的撇号来标示。在此定义下，该振幅可简写为

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}'x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} e^{i\mathcal{A}[p,x]/\hbar}. \quad (2.29)$$

路径积分有一个简单的直观解释：所有路径下的积分对应着一个物理系统演化中可能的所有经历的求和。指数 $e^{i\mathcal{A}[p,x]/\hbar}$ 是统计力学中波尔兹曼因子 $e^{-E/k_B T}$ 的量子对应。与指数概率不同，一个纯的相位因子用来指定一个可能的经历：从 x_a, t_a 到 x_b, t_b 的整个振幅可以通过把所有这些经历的相位因子相加的方式来得到，

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \sum_{\substack{\text{经历的所有过程} \\ (x_a, t_a) \sim (x_b, t_b)}} e^{i\mathcal{A}[p,x]/\hbar}, \quad (2.30)$$

求和包括了相位空间下所有的路径，这些路径的端点是固定在 x 空间下的 $x_b x_a$ 。

2.1.5 动量空间下的时间演化振幅

以上发现的在 x 和 p 下泛函积分的不对称性是保持端点在位移空间下的结果。按照一条共轭的方式行进保持初始和最终的动量 p_b 和 p_a 是固定的，这是有可能的。可以采取之前的步骤，在希尔伯特动量空间表象下得到相对应的时间演化振幅，从时间演化算符的矩阵元开始

$$(p_b t_b | p_a t_a) \equiv \langle p_b | \hat{U}(t_b, t_a) | p_a \rangle. \quad (2.31)$$

时间间隔按照(2.2)–(2.4)下进行，将所有的 x 用 p 来代替，但完备关系(2.3)要用以下的公式来代替

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} |p\rangle \langle p| = 1, \quad (2.32)$$

相对应的态的正交形式也有所不同[与(1.186)相比较]

$$\langle p_b | p_a \rangle = 2\pi\hbar\delta(p_b - p_a). \quad (2.33)$$

在得到积分结果的过程中，积分测度有相反的不对称性： x_n 的积分比 p_n 的积分多一重。间隔下的路径积分可以写作

$$\begin{aligned} (p_b t_b | p_a t_a) &\approx \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \prod_{n=0}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N [-x_n(p_{n+1} - p_n) - \epsilon H(p_n, x_n, t_n)] \right\}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

这个振幅和 x 空间下振幅(2.14)的关系很简单：将(2.14)中第一个关于 p_1 和最后一个关于 p_{N+1} 的积分从乘积中取出，把它们重命名为 p_a 和 p_b ，并且按如下方式重新排列求和式 $\sum_{n=1}^{N+1} p_n(x_n - x_{n-1})$

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{N+1} p_n(x_n - x_{n-1}) &= p_{N+1}(x_{N+1} - x_N) + p_N(x_N - x_{N-1}) + \dots \\ &\quad \dots + p_2(x_2 - x_1) + p_1(x_1 - x_0) \\ &= p_{N+1}x_{N+1} - p_1x_0 \\ &\quad -(p_{N+1} - p_N)x_N - (p_N - p_{N-1})x_{N-1} - \dots - (p_2 - p_1)x_1 \\ &= p_{N+1}x_{N+1} - p_1x_0 - \sum_{n=1}^N (p_{n+1} - p_n)x_n, \end{aligned} \quad (2.35)$$

剩下的积分乘积看起来与等式 (2.34)相似，除了最低的指数 n 要比等式 (2.34)中的大一个单位。在极限 $N \rightarrow \infty$ 这是没有影响的，并且我们得到傅里叶变换

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int \frac{dp_b}{2\pi\hbar} e^{ip_b x_b / \hbar} \int \frac{dp_a}{2\pi\hbar} e^{-ip_a x_a / \hbar} (p_b t_b | p_a t_a). \quad (2.36)$$

逆向关系式为

$$(p_b t_b | p_a t_a) = \int dx_b e^{-ip_b x_b / \hbar} \int dx_a e^{ip_a x_a / \hbar} (x_b t_b | x_a t_a). \quad (2.37)$$

在连续极限下, 振幅(2.34)在路径积分下可以写作 path integral

$$(p_b t_b | p_a t_a) = \int_{p(t_a)=p_a}^{p(t_b)=p_b} \frac{\mathcal{D}'p}{2\pi\hbar} \int \mathcal{D}x e^{i\bar{\mathcal{A}}[p,x]/\hbar}, \quad (2.38)$$

这里我们给出

$$\bar{\mathcal{A}}[p, x] = \int_{t_a}^{t_b} dt [-\dot{p}(t)x(t) - H(p(t), x(t), t)] = \mathcal{A}[p, x] - p_b x_b + p_a x_a. \quad (2.39)$$

2.1.6 量子力学下的配分函数

当通过求迹来定义量子力学的配分函数时, 路径积分在 x 和 p 下出现对称性(回顾 1.17 节)

$$Z_{QM}(t_b, t_a) = \text{Tr} \left(e^{-i(t_b-t_a)\hat{H}/\hbar} \right) \quad (2.40)$$

在定域的基础上, 求迹变成对振幅的积分($x_b t_b | x_a t_a$) 并且有 $x_b = x_a$:

$$Z_{QM}(t_b, t_a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_a (x_a t_b | x_a t_a). \quad (2.41)$$

另外的在 $x_{N+1} \equiv x_0$ 上的求迹积分使得对 Z_{QM} 的路径积分在 p_n 和 x_n 上是对称的:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_{N+1} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] = \prod_{n=1}^{N+1} \left[\iint_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n dp_n}{2\pi\hbar} \right]. \quad (2.42)$$

在连续极限下, 等式的右边可以写成

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[\iint_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n dp_n}{2\pi\hbar} \right] \equiv \oint \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar}, \quad (2.43)$$

并且测度有以下联系

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_a \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_a} \mathcal{D}'x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \equiv \oint \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar}. \quad (2.44)$$

符号 \oint 表示周期边界条件 $x(t_a) = x(t_b)$. 在动量表象下我们同样可以给出

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_a}{2\pi\hbar} \int_{p(t_a)=p_a}^{p(t_b)=p_a} \frac{\mathcal{D}'p}{2\pi\hbar} \int \mathcal{D}x \equiv \oint \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \int \mathcal{D}x, \quad (2.45)$$

此时周期边界条件为 $p(t_a) = p(t_b)$, 等式的右边是相同的。因此路径积分给出量子力学的配分函数

$$Z_{QM}(t_b, t_a) = \oint \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} e^{i\mathcal{A}[p,x]/\hbar} = \oint \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \int \mathcal{D}x e^{i\bar{\mathcal{A}}[p,x]/\hbar}. \quad (2.46)$$

在右边的指数项，作用量 $\bar{\mathcal{A}}[p, x]$ 能由 $\mathcal{A}[p, x]$ 来替换，因为根据周期边界条件在(2.39)中额外的项可以去掉。在时间间隔表示中，等式可以通过对求和式(2.35)进行重新排列来得到，如下所示：

$$\sum_{n=1}^{N+1} p_n(x_n - x_{n-1}) \Big|_{x_{N+1}=x_0} = - \sum_{n=0}^N (p_{n+1} - p_n)x_n \Big|_{p_{N+1}=p_0}. \quad (2.47)$$

在配分函数的路径积分表现形式(2.46)下出现量子力学的规则，而量子力学作为对经典统计力学的自然归纳是由普朗克阐述的。通过这些规则，相空间下每一个体积元 $dx dp/h$ 被指数概率 $e^{-E/k_B T}$ 所占据。在量子力学的路径积分形式下，在路径相空间下的每一个体积元路径相空间 $\prod_n dx(t_n)dp(t_n)/h$ 与一个纯态相位因子 $e^{i\mathcal{A}[p,x]/\hbar}$ 相联。在这里我们可以看到对应原理的体现，该原理描述了由经典力学向量子力学的转变。路径积分形式要比以前的关于量子力学的描述看起来更加的自然，因为以前的描述需要将所有的经典的相位空间下的变量 p, x 用算符来替换，这一规则起初是很难理解的。

2.1.7 费曼位形空间路径积分

实际上，在费曼最初的论文里并没有给出以上相空间表述下的路径积分公式。因为在(2.7)中的动能通常有 $T(p, t) = p^2/2M$ 的形式，他将注意力集中在哈密顿量上

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(x, t), \quad (2.48)$$

此时时间间隔作用量(2.15)变为

$$\mathcal{A}^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left[p_n(x_n - x_{n-1}) - \epsilon \frac{p_n^2}{2M} - \epsilon V(x_n, t_n) \right]. \quad (2.49)$$

将上式写成平方和的形式

$$\mathcal{A}^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left[-\frac{\epsilon}{2M} \left(p_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} M \right)^2 + \frac{M}{2} \epsilon \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 - \epsilon V(x_n, t_n) \right]. \quad (2.50)$$

The momentum integrals in (2.14) may then be performed using the Fresnel integral formula

(2.14)中的动量积分就可以利用菲涅耳(Fresnel)积分公式(1.333)来完成，得出

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{\epsilon}{2M} \left(p_n - M \frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}}, \quad (2.51)$$

我们得到替代后的形式

$$(x_b t_b | x_a t_a) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \right] \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}^N \right), \quad (2.52)$$

Figure 2.1 之字形路径表示一个在时刻 t_a 从 x_a 点出发，历经所有可能的路线在时刻 t_b 到达 x_b 点。时间轴由右向左与等式中的算符顺序有相同的方向 (2.2).

在这里 \mathcal{A}^N 是求和

$$\mathcal{A}^N = \epsilon \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_n, t_n) \right], \quad (2.53)$$

并且有 $x_{N+1} = x_b$ 和 $x_0 = x_a$ 。在这里积分遍及位形空间里的所有路径而不是相空间位形空间。量子力学下的粒子从一给定的初始点 x_a 开始，历经所有可能的路径到达给定的某一终点 x_b ，这些积分就解释了这一事实。每一条路径的振幅是 $\exp(i\mathcal{A}^N/\hbar)$ 。如图Fig. 2.1 所示给出路径积分的几何说明。

在连续极限下，求和式(2.53)趋于拉格朗日形式下的作用量：

$$\mathcal{A}[x] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(x, \dot{x}) = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) \right]. \quad (2.54)$$

注意：这个作用量是 $x(t)$ 在时间意义上的定域泛函，如同等式 (1.26) 定义的一样。²

对于时间间隔费曼路径积分，我们能证实薛定谔方程：如同在(2.20)一样，分离出最后的间隔片，如下所示：

$$\begin{aligned} (x_b t_b | x_a t_a) &\approx \int_{-\infty}^{\infty} dx_N (x_b t_b | x_N t_N) (x_N t_N | x_a t_a) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta x (x_b t_b | x_b - \Delta x t_b - \epsilon) (x_b - \Delta x t_b - \epsilon | x_a t_a), \end{aligned} \quad (2.55)$$

²如果泛函 $F[x]$ 能写成 $\int dt f(x(t), \dot{x}(t))$ 的积分形式，则称之为是定域的；如果它有 $\int dt f(x(t))$ 的形式，则称之为超定域 (*ultra-local*)。

这里有

$$(x_b t_b | x_b - \Delta x t_b - \epsilon) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \exp \left\{ \epsilon \frac{i}{\hbar} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\Delta x}{\epsilon} \right)^2 - V(x_b, t_b) \right] \right\}. \quad (2.56)$$

现在我们将积分式(2.55)中的振幅用泰勒 (Taylor) 级数展开

$$(x_b - \Delta x t_b - \epsilon | x_a t_a) = \left[1 - \Delta x \partial_{x_b} + \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \partial_{x_b}^2 + \dots \right] (x_b, t_b - \epsilon | x_a t_a). \quad (2.57)$$

将此式插入(2.55)中， Δx 的奇数次幂无贡献。对于偶数次幂，我们利用公式(1.335)的菲涅尔形式和 Δx 的奇数次幂为零来完成积分，对于 Δx 的偶数次幂我们有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Delta x}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} (\Delta x)^{2n} \exp \left\{ \epsilon \frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \left(\frac{\Delta x}{\epsilon} \right)^2 \right\} = \left(i \frac{\hbar\epsilon}{M} \right)^n \quad (2.58)$$

所以在(2.55)式中的积分变为

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \left[1 + \epsilon \frac{i\hbar}{2M} \partial_{x_b}^2 + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right] \left[1 - \epsilon \frac{i}{\hbar} V(x_b, t_b) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right] (x_b, t_b - \epsilon | x_a t_a). \quad (2.59)$$

在 $\epsilon \rightarrow 0$ 的极限下，此式给出薛定谔方程。(2.23).

在连续极限下我们将振幅(2.52)写成一个路径积分

$$(x_b t_b | x_a t_a) \equiv \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x e^{i\mathcal{A}[x]/\hbar}. \quad (2.60)$$

这是费曼用来描述量子力学振幅(2.1)的最初的公式。它包含了在位形空间上对所有路径的求和，并且有一个带着作用量 $\mathcal{A}[x]$ 形式的相位因子。

在表达式(2.29), (2.38), (2.44), (2.45)中，我们用相同的测度符号 $\mathcal{D}x$ 来表示位形空间下的路径和与此完全不同的在相空间下的路径。应该不会带来混淆。注意在相空间公式(2.14)下的额外的 dp_n 积分产生了(2.52) 中一个额外的因素 $1/\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}$ ，这在 dx_n 积分下是不会得到的。

利用费曼振幅可以计算量子力学的配分函数(2.41)作为一个在位形空间上的路径积分

$$Z_{QM} = \oint \mathcal{D}x e^{i\mathcal{A}[x]/\hbar} \quad (2.61)$$

如在(2.43), (2.44)式中一样，符号 $\oint \mathcal{D}x$ 表示这些路径有相同的端点 $x(t_a) = x(t_b)$ ，并且路径积分在连续极限下是积分的乘积

$$\oint \mathcal{D}x \approx \prod_{n=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi i\hbar\epsilon/M}}. \quad (2.62)$$

与(2.52) 和(2.60)不同，上式没有额外的 $1/\sqrt{2\pi i\hbar\epsilon/M}$ 因子，这是因为对于初始(=最终)位置 $x_b = x_a$ 的积分表示的是量子力学中的求迹。这里，与(2.46)一样，用相同的符号 $\oint \mathcal{D}x$ 来标记不会带来混淆，因为(2.46)一般伴随着一个 $\int \mathcal{D}p$ 的积分。

为了一般性，我们可以指出不必要等距离的分隔时间轴。在连续极限 $N \rightarrow \infty$ 下，正则路径积分 (2.14) 与无穷小间距的选择是无关的

$$\epsilon_n = t_n - t_{n-1}. \quad (2.63)$$

在以下的方式下，位形空间公式包括不同的间距 ϵ_n ：当完成 p_n 的积分，我们得到一个(2.52) 型的公式，将每一个 ϵ 用 ϵ_n 来代替，即

$$(x_b t_b | x_a t_a) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar\epsilon_b/M}} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi i\hbar\epsilon_n/M}} \right] \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\epsilon_n} - \epsilon_n V(x_n, t_n) \right] \right\}. \quad (2.64)$$

在结束这节之前，一个要点值得注意：不通过费曼时间分隔步骤，对时间演化振幅(2.29)定义路径积分无疑是可能的，如同薛定谔微分方程的解[见等式. (1.304)]:

$$[\hat{H}(-i\hbar\partial_x, x) - i\hbar\partial_t](x t | x_a t_a) = -i\hbar\delta(t - t_a)\delta(x - x_a). \quad (2.65)$$

如果通过求解与时无关的薛定谔方程 $\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$ 得到一组波函数 $\psi_n(x)$ 是正交完备集，那么这个解可由谱表示(1.319)给出

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \Theta(t_b - t_a) \sum_n \psi_n(x_b) \psi_n^*(x_a) e^{-iE_n(t_b - t_a)/\hbar}, \quad (2.66)$$

这里的 $\Theta(t)$ 是赫维赛德函数 (Heaviside function) (1.300)。然而，这个定义违反了费曼路径积分方法的目的，因为费曼路径积分是从整体all-time涨落的观点来理解一个量子系统。目的是从整体定义的时间演化振幅中找到所有的性质，特别是薛定谔波函数。³ 整体法通常比薛定谔方法更加复杂，我们也将会在第8章和12–14章看到，此方法包含由有限时间间隔导致的新颖的精妙之处。然而，此法至少有四个重要的优点。首先，在理论上是吸引人的，因为它不用算符来阐述量子理论，而是通过与热力学涨落的类比来描述量子涨落(我们不久将在这章看到这一点)。其次，它顺利的将量子力学与经典力学联系起来(我们将在第4章中展示)。再次，此方法提供了新的变分步骤来近似的研究复杂的量子力学和量子统计系统(见第5章)。最后，它给出一种自然的几何方法，在包含彼时曲率和扰率的空间下来研究粒子的动力学。(见10–11章)。由于算符次序问题使得算符方法失败了，而此法能够导致提出不寻常的正确的描述，这种描述是针对一个粒子在包含彼时曲率和扰率的空间下的量子动力学。从这里可能得到在普遍空间下薛定谔理论不寻常的延伸，并且在以后的实验下检验它的预言。⁴

³许多声称已经求解一个系统路径积分的书刊违背了这一规则，因为都毫不怀疑的利用薛定谔方程，尽管以看起来相当复杂的路径积分标记来掩饰。

⁴H. Kleinert, Mod. Phys. Lett. A 4, 2329 (1989) (<http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/199>); Phys. Lett. B 236, 315 (1990) (*ibid.* <http://202>).

2.2 自由粒子的精确解

为了很好的利用费曼路径积分公式进行实际的研究，我们详细的考虑自由粒子这种最简单的情况，给出其正则形式

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}'x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left(p\dot{x} - \frac{p^2}{2M} \right) \right], \quad (2.67)$$

并且给出其纯位形形式：

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} \dot{x}^2 \right]. \quad (2.68)$$

因为通过观察等式的左手边我们知道积分极限是明显的，所以从今以后我们省略掉积分极限，除非需要特别说明。

2.2.1 直接解

在位形形式下能最容易的解决这个问题。利用公式 (2.52), (2.53) 并且我们令 $V(x) = 0$ ，就能计算出时间间隔表达式的积分形式。由此得到的高斯积分可以利用公式(1.333)容易的计算出来

从这个公式里我们能得到简单的规则

$$\begin{aligned} & \int dx' \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar A \epsilon / M}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(x'' - x')^2}{A \epsilon} \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar B \epsilon / M}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(x' - x)^2}{B \epsilon} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar (A + B) \epsilon / M}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(x'' - x)^2}{(A + B) \epsilon} \right], \end{aligned} \quad (2.69)$$

这样就能直接得到自由粒子的振幅

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar (N + 1) \epsilon / M}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{(N + 1) \epsilon} \right]. \quad (2.70)$$

插入 $(N + 1)\epsilon = t_b - t_a$ 之后，得到

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar (t_b - t_a) / M}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a} \right]. \quad (2.71)$$

注意自由粒子的振幅与时间间隔的数目 $N + 1$ 无关。当然，振幅(2.71)与薛定谔结果(1.337) 在 $D = 1$ 时是一致的。

对于与时间有关的质量 $M(t) = Mg(t)$ ，计算表明路径积分(2.67) 和(2.68) 具有简单可解的形式：

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}'x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left(p\dot{x} - \frac{p^2}{2Mg(t)} \right) \right], \quad (2.72)$$

并且在纯位形形式下:

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x \sqrt{g} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} g(t) \dot{x}^2(t) \right]. \quad (2.73)$$

在这里, 积分 $\int \mathcal{D}x \sqrt{g}$ 的测度代表乘积的连续极限[对比(2.52)]:

$$\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x \sqrt{g} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/Mg(t_b)}} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/Mg(t_n)}} \right]. \quad (2.74)$$

因子 $g(t_n)$ 进入积分式(2.69)的每一处含有 M 的地方, 以前的时间间隔参数 ϵ 现在变成 $\epsilon_n = \epsilon/g(t_n)$, 我们用以下的振幅代替(2.71)

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar M^{-1} \int_{t_a}^{t_b} g^{-1}(t)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{\int_{t_a}^{t_b} g^{-1}(t)} \right]. \quad (2.75)$$

该式的傅里叶表示为

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ip(x_b - x_a) - \frac{p^2}{2M} \int_{t_a}^{t_b} g^{-1}(t) \right] \right\}. \quad (2.76)$$

2.2.2 围绕经典路径的涨落

存在另一种方法来计算振幅, 比面前简单的情况更多的使用, 并且在适当的总结下发现对于特定的一类非平凡的路径积分该方法是很有用的处理方式。此方法以对应经典路径的所有路径为基础, 也就是说, 所有的路径都被分成经典路径

$$x_{\text{cl}}(t) = x_a + \frac{x_b - x_a}{t_b - t_a} (t - t_a), \quad (2.77)$$

自由粒子将按一下运动方程进行运动

$$\ddot{x}_{\text{cl}}(t) = 0, \quad (2.78)$$

加上偏差 $\delta x(t)$:

$$x(t) = x_{\text{cl}}(t) + \delta x(t). \quad (2.79)$$

因为起点和终点固定在 x_a, x_b , 相应的, 偏差在端点处消失:

$$\delta x(t_a) = \delta x(t_b) = 0. \quad (2.80)$$

偏差 $\delta x(t)$ 是作为粒子轨道的量子涨落。在数学上, 边界条件(2.80)是指狄利克雷 (Dirichlet) 边界条件。将分解式(2.79)插入作用量中后, 我们发现: 因为对于经典路径有运动方程(2.78)来描述, 作用量拆成两项的求和形式, 一项是经典的平方项, 另一项是纯涨落平方项

$$\begin{aligned}
& \frac{M}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \dot{x}_{\text{cl}}^2(t) + 2\dot{x}_{\text{cl}}(t)\delta\dot{x}(t) + [\delta\dot{x}(t)]^2 \right\} \\
&= \frac{M}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \dot{x}_{\text{cl}}^2 + M\dot{x}\delta x \Big|_{t_a}^{t_b} - M \int_{t_a}^{t_b} dt \ddot{x}_{\text{cl}}\delta x + \frac{M}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt (\delta\dot{x})^2 \\
&= \frac{M}{2} \left[\int_{t_a}^{t_b} dt \dot{x}_{\text{cl}}^2 + \int_{t_a}^{t_b} dt (\delta\dot{x})^2 \right].
\end{aligned}$$

未出现混合项是由于经典路径极值性质的一般结果,

$$\delta\mathcal{A} \Big|_{x(t)=x_{\text{cl}}(t)} = 0. \quad (2.81)$$

上式表明在经典作用量附近的二次涨落展开 (*fluctuation expansion*)

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} \equiv \mathcal{A}[x_{\text{cl}}] \quad (2.82)$$

在 $\delta x(t)$ 中没有线性项, 也就是说, 具有如下形式

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_{\text{cl}} + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^{t_b} dt' \frac{\delta^2 \mathcal{A}}{\delta x(t) \delta x(t')} \delta x(t) \delta x(t') \Big|_{x(t)=x_{\text{cl}}(t)} + \dots . \quad (2.83)$$

因为作用量是两项的和, 所以振幅可以分解成经典振幅 $e^{i\mathcal{A}_{\text{cl}}/\hbar}$ 和涨落因子 $F_0(t_b - t_a)$ 的乘积,

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int \mathcal{D}x e^{i\mathcal{A}[x]/\hbar} = e^{i\mathcal{A}_{\text{cl}}/\hbar} F_0(t_b, t_a). \quad (2.84)$$

对于自由粒子有经典的作用量

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} \dot{x}_{\text{cl}}^2, \quad (2.85)$$

涨落因子 $F_0(t_b - t_a)$ 是通过路径积分给出

$$F_0(t_b - t_a) = \int \mathcal{D}\delta x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} (\delta\dot{x})^2 \right]. \quad (2.86)$$

由于在端点处 $\delta x(t)$ 消失, 所以此时涨落因子不依赖于 x_b, x_a , 仅依赖于初始时间和终止时间 t_b, t_a 。时间平移不变性进一步的将这种依赖性降低到时间差 $t_b - t_a$ 上。 $F_0(t_b - t_a)$ 的下标0 表征涨落因子的自由粒子特性。将(2.77) 插入(2.85), 我们立即得到

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \frac{M}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}. \quad (2.87)$$

另一方面, 涨落因子需要计算多重积分

$$F_0^N(t_b - t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\delta x_n}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \right] \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}_{\text{fl}}^N \right), \quad (2.88)$$

这里 $\mathcal{A}_{\text{fl}}^N$ 是时间间隔涨落作用量

$$\mathcal{A}_{\text{fl}}^N = \frac{M}{2}\epsilon \sum_{n=1}^{N+1} \left(\frac{\delta x_n - \delta x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2. \quad (2.89)$$

最后，我们必须取连续极限

$$N \rightarrow \infty, \quad \epsilon = (t_b - t_a)/(N + 1) \rightarrow 0.$$

2.2.3 涨落因子

这节的其余部分将计算涨落因子(2.88)。在此之前，我们将给出处理时间间隔表达式的一般技巧。由于涨落变量 δx 经常出现，我们省略所有的 δ 只用变量 x 来表示以此进行简化。

可以利用微分算符 ∇ 和它的共轭 $\bar{\nabla}$ 来处理在分隔时间轴上求和，两个算符的定义如下

$$\nabla x(t) \equiv \frac{1}{\epsilon}[x(t + \epsilon) - x(t)], \quad \bar{\nabla} x(t) \equiv \frac{1}{\epsilon}[x(t) - x(t - \epsilon)]. \quad (2.90)$$

以上两个算符有不同的时间导数形式 ∂_t ，并且在连续极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 下如果都作用在可微分的方程上，则简化为：

$$\nabla, \bar{\nabla} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \partial_t, \quad (2.91)$$

由于具有 $N + 1$ 段的离散时间轴构成一个一维的格点结构，所以微分算符 $\nabla, \bar{\nabla}$ 也被称作格点导数 (*lattice derivatives*)。

对于在离散时间 t_n 的坐标点我们给出

$$\begin{aligned} \nabla x_n &= \frac{1}{\epsilon}(x_{n+1} - x_n), \quad N \geq n \geq 0, \\ \bar{\nabla} x_n &= \frac{1}{\epsilon}(x_n - x_{n-1}), \quad N + 1 \geq n \geq 1. \end{aligned} \quad (2.92)$$

时间间隔作用量(2.89)能用 ∇x_n 或者 $\bar{\nabla} x_n$ 这样的项表示出来(用 x_n 代替 δx_n)

$$\mathcal{A}_{\text{fl}}^N = \frac{M}{2}\epsilon \sum_{n=0}^N (\nabla x_n)^2 = \frac{M}{2}\epsilon \sum_{n=1}^{N+1} (\bar{\nabla} x_n)^2. \quad (2.93)$$

在这样的标记下，极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 是很明显的：求和式 $\epsilon \sum_n$ 变成积分 $\int_{t_a}^{t_b} dt$ ，而 $(\nabla x_n)^2$ 和 $(\bar{\nabla} x_n)^2$ 趋向于 \dot{x}^2 ，所以

$$\mathcal{A}_{\text{fl}}^N \rightarrow \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} \dot{x}^2. \quad (2.94)$$

这样，时间间隔作用量成为拉格朗日作用量。

格点导数具有和普通导数类似的性质。仅仅需要我们仔细的区分 ∇ 和 $\bar{\nabla}$ 。例如，与分部积分类似，格点导数也可以分部求和。已知分部积分的规则为

$$\int_{t_a}^{t_b} dt g(t) \dot{f}(t) = g(t) f(t) \Big|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} dt \dot{g}(t) f(t). \quad (2.95)$$

在格点上，给出对应的函数关系 $f(t) \rightarrow x_n$ 和 $g(t) \rightarrow p_n$:

$$\epsilon \sum_{n=1}^{N+1} p_n \bar{\nabla} x_n = p_n x_n \Big|_0^{N+1} - \epsilon \sum_{n=0}^N (\nabla p_n) x_n. \quad (2.96)$$

这是直接符合(2.35)式的。

对于函数在端点处消失，也就是说，对于 $x_{N+1} = x_0 = 0$ ，我们能省略表面项并且移动等式右边的求和范围，这样得到简单的公式[也可见等式(2.47)]

$$\sum_{n=1}^{N+1} p_n \bar{\nabla} x_n = - \sum_{n=0}^N (\nabla p_n) x_n = - \sum_{n=1}^{N+1} (\nabla p_n) x_n. \quad (2.97)$$

如果 $p(t)$ 和 $x(t)$ 在时间间隔 $t_b - t_a$ 下是周期性的，即： $p_0 = p_{N+1}$, $x_0 = x_{N+1}$ ，将保持以上的性质。在这种情况下，将等式右边的求和移动一个单位得到看起来更对称的公式

$$\sum_{n=1}^{N+1} p_n \bar{\nabla} x_n = - \sum_{n=1}^{N+1} (\nabla p_n) x_n. \quad (2.98)$$

在时间间隔作用量(2.89)里，量子涨落 x_n ($\hat{=} \delta x_n$) 在端点处消失，所以利用(2.97)来进行改写

$$\sum_{n=1}^{N+1} (\bar{\nabla} x_n)^2 = - \sum_{n=1}^N x_n \nabla \bar{\nabla} x_n. \quad (2.99)$$

在作用量(2.93)的 ∇x_n 形式下，从右向左的运用公式(2.97)，并且利用在端点处 x_0 和 x_{N+1} 量子涨落的消失，同样的，得到：

$$\sum_{n=0}^N (\nabla x_n)^2 = - \sum_{n=1}^{N+1} x_n \bar{\nabla} \nabla x_n = - \sum_{n=1}^N x_n \bar{\nabla} \nabla x_n. \quad (2.100)$$

(2.99) 和 (2.100) 两式的右边能以矩阵的形式给出

$$\begin{aligned} - \sum_{n=1}^N x_n \nabla \bar{\nabla} x_n &\equiv - \sum_{n,n'=1}^N x_n (\nabla \bar{\nabla})_{nn'} x_{n'}, \\ - \sum_{n=1}^N x_n \bar{\nabla} \nabla x_n &\equiv - \sum_{n,n'=1}^N x_n (\bar{\nabla} \nabla)_{nn'} x_{n'}, \end{aligned} \quad (2.101)$$

对应着相同的 $N \times N$ 矩阵

$$\nabla \bar{\nabla} \equiv \bar{\nabla} \nabla \equiv \frac{1}{\epsilon^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}. \quad (2.102)$$

这明显是二次时间导数 ∂_t^2 的格点形式，而且在连续极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 下将退化掉。我们称之为格点拉普拉斯算符 (*lattice Laplacian*)。

格点导数和普通导数的还有一个共同的性质，都可以通过转化到傅里叶分量来对角化。当进行如下分解

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} x(\omega), \quad (2.103)$$

并且运用格点导数 ∇ ，我们发现

$$\begin{aligned} \nabla x(t_n) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{\epsilon} (e^{-i\omega(t_n+\epsilon)} - e^{-i\omega t_n}) x(\omega) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t_n} \frac{1}{\epsilon} (e^{-i\omega\epsilon} - 1) x(\omega). \end{aligned} \quad (2.104)$$

因此，在傅里叶分量上， ∇ 具有本证值

$$\frac{1}{\epsilon} (e^{-i\omega\epsilon} - 1). \quad (2.105)$$

在连续极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 下，变成普通时间导数 ∂_t 的本证值，也就是， $-i$ 乘以傅里叶分量的频率 ω 。为了提醒这点，我们将用 Ω 表示 $i\nabla$ 的本证值，于是有

$$(i\nabla x)(\omega) = \Omega x(\omega) \equiv \frac{i}{\epsilon} (e^{-i\omega\epsilon} - 1) x(\omega). \quad (2.106)$$

同样的，对于共轭的格点导数，我们给出

$$(i\bar{\nabla} x)(\omega) = \bar{\Omega} x(\omega) \equiv -\frac{i}{\epsilon} (e^{i\omega\epsilon} - 1) x(\omega), \quad (2.107)$$

这是 $\bar{\Omega}$ 是 Ω 的复共轭，也就是， $\bar{\Omega} \equiv \Omega^*$ 。因而，负的格点拉普拉斯算符 $-\nabla\bar{\nabla} \equiv -\bar{\nabla}\nabla$ 的本证值是非负实数：

$$\frac{i}{\epsilon} (e^{-i\omega\epsilon} - 1) \frac{i}{\epsilon} (1 - e^{i\omega\epsilon}) = \frac{1}{\epsilon^2} [2 - 2\cos(\omega\epsilon)] \geq 0. \quad (2.108)$$

当然， Ω 和 $\bar{\Omega}$ 有相同的连续极限 ω 。

将量子涨落 $x(t)$ [$\hat{=} \delta x(t)$] 分解成它们对应的傅里叶分量形式时，并不是所有的本证函数都出现。因为 $x(t)$ 在初始时间 $t = t_a$ 消失，分解式能被限制为正弦函数，我们可以按如下形式展开

$$x(t) = \int_0^{\infty} d\omega \sin \omega(t - t_a) x(\omega). \quad (2.109)$$

通过限制频率 ω 为离散值可以确保在最终时间 $t = t_b$ 时 $x(t)$ 消失

$$\nu_m = \frac{\pi m}{t_b - t_a} = \frac{\pi m}{(N+1)\epsilon}. \quad (2.110)$$

这样，我们处理傅里叶（Fourier）级数

$$x(t) = \sum_{m=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{(t_b - t_a)}} \sin \nu_m(t - t_a) x(\nu_m), \quad (2.111)$$

在此，傅里叶分量 $x(\nu_m)$ 是实数。因为对于有限的 ϵ ，级数必须标表明 $x(t)$ 只是在离散点 $x(t_n)$, $n = 0, \dots, N+1$ 上，这就产生了又一个限制条件。因此，进行求和时只加到 $m = N$ 就足够了，展开 $x(t_n)$ ，得到

$$x(t_n) = \sum_{m=1}^N \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin \nu_m(t_n - t_a) x(\nu_m), \quad (2.112)$$

为了方便已经从傅里叶分量中去掉因子 $\sqrt{\epsilon}$ 。展开式函数是正交的，

$$\frac{2}{N+1} \sum_{n=1}^N \sin \nu_m(t_n - t_a) \sin \nu_{m'}(t_n - t_a) = \delta_{mm'}, \quad (2.113)$$

并且得到：

$$\frac{2}{N+1} \sum_{m=1}^N \sin \nu_m(t_n - t_a) \sin \nu_m(t_{n'} - t_a) = \delta_{nn'} \quad (2.114)$$

(这里 $0 < m, m' < N+1$)。以如下形式改写(2.113)式的左边，正交关系式保持不变

$$\frac{2}{N+1} \frac{1}{2} \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{N+1} \left\{ \exp \left[\frac{i\pi(m-m')}{N+1} n \right] - \exp \left[\frac{i\pi(m+m')}{N+1} n \right] \right\}, \quad (2.115)$$

在每一端扩展一无关紧要的项不影响求和式。因为上式是几何型，所以可以立刻算出。对于 $m = m'$ 求和式相加得 1，当 $m \neq m'$ 时，变成

$$\frac{2}{N+1} \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[\frac{1 - e^{i\pi(m-m')} e^{i\pi(m-m)/(N+1)}}{1 - e^{i\pi(m-m)/(N+1)}} - (m' \rightarrow -m') \right]. \quad (2.116)$$

对于 $m - m' \neq 0$ 的偶数，中括号里的第一项等于 1；而对于奇数的 $m - m'$ 这一项是虚数[因为 $(1 + e^{i\alpha})/(1 - e^{i\alpha})$ 等于 $(1 + e^{i\alpha})(1 - e^{-i\alpha})/|1 - e^{i\alpha}|^2$ ，有虚数分子 $e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}$]。对于第二项，相同的情况也会分别出现，只是此时对应的是 $m + m' \neq 0$ 偶数还是奇数。因为 $m - m'$ 和 $m + m'$ 要么都是偶数，要么都是奇数，当 $m \neq m'$ 时(2.113)的右边消失[记住在展开式(2.112)中 $m, m' \in [0, N+1]$ ，因此在(2.116)中也是如此]。同样的，可以证明完备性关系式(2.114)。

现在将展开式(2.112) 插入时间间隔涨落作用量(2.89)，利用正交关系式(2.113) 得到

$$\mathcal{A}_{\text{fl}}^N = \frac{M}{2} \epsilon \sum_{n=0}^N (\bar{\nabla} x_n)^2 = \frac{M}{2} \epsilon \sum_{m=1}^{N+1} x(\nu_m) \Omega_m \bar{\Omega}_m x(\nu_m). \quad (2.117)$$

这样，作用量分解成包括一系列离散本征值的独立二次项的求和

$$\Omega_m \bar{\Omega}_m = \frac{1}{\epsilon^2} [2 - 2 \cos(\nu_m \epsilon)] = \frac{1}{\epsilon^2} \left[2 - 2 \cos \left(\frac{\pi m}{N+1} \right) \right], \quad (2.118)$$

并且涨落因子(2.88) 变成

$$\begin{aligned} F_0^N(t_b - t_a) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \right] \\ &\times \prod_{m=1}^N \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \epsilon \Omega_m \bar{\Omega}_m [x(\nu_m)]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.119)$$

在积分之前，我们必须将记分测度由定域变量 x_n 变换为傅里叶分量 $x(\nu_m)$ 。由于正交关系式(2.113)，变换式有单位行列式，因此

$$\prod_{n=1}^N dx_n = \prod_{m=1}^N dx(\nu_m). \quad (2.120)$$

利用上式，并根据菲涅耳公式(1.333)，将等式 (2.119) 积分得到

$$F_0^N(t_b - t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \prod_{m=1}^N \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m}}. \quad (2.121)$$

利用一下的公式来计算乘积⁵

$$\prod_{m=1}^N \left(1 + x^2 - 2x \cos \frac{m\pi}{N+1} \right) = \frac{x^{2(N+1)} - 1}{x^2 - 1}. \quad (2.122)$$

取极限 $x \rightarrow 1$ ，给出

$$\prod_{m=1}^N \epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m = \prod_{m=1}^N 2 \left(1 - \cos \frac{m\pi}{N+1} \right) = N+1. \quad (2.123)$$

因此，自由粒子的时间间隔涨落因子的简单形式为

$$F_0^N(t_b - t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar(N+1)\epsilon/M}}, \quad (2.124)$$

或者，用带有 $t_b - t_a$ 的形式来表示

$$F_0(t_b - t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar(t_b - t_a)/M}}. \quad (2.125)$$

因为最终结果与时间间隔的数目是无关的，所以我们可以像振幅(2.71)那样把上标 N 去掉。

⁵I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *op. cit.*, Formula 1.396.2.

我们注意到涨落因子的量纲是 $1/\text{长度}$ 。事实上，我们可以引入一个与时间间隔 $t_b - t_a$ 有关的长度标量，

$$l(t_b - t_a) \equiv \sqrt{2\pi\hbar(t_b - t_a)/M}, \quad (2.126)$$

因此，可以给出

$$F_0(t_b - t_a) = \frac{1}{\sqrt{i}l(t_b - t_a)}. \quad (2.127)$$

利用(2.125)和(2.87)，自由粒子全时演化振幅(2.84)再次给出(2.71)的形式

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar (t_b - t_a)/M}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a} \right]. \quad (2.128)$$

这个结果可以简单的推广到在 D 维笛卡尔空间下(Cartesian space)运动的点粒子。如果 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_D)$ 表示空间坐标，作用量为

$$\mathcal{A}[\mathbf{x}] = \frac{M}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \dot{\mathbf{x}}^2. \quad (2.129)$$

因为是在坐标 \mathbf{x} 下的二次项，作用量就是每个分量下的作用量的和。因此，振幅可以因式分解而且发现

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar (t_b - t_a)/M}^D} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)^2}{t_b - t_a} \right], \quad (2.130)$$

与 D 维下量子力学的结果(1.337)是一致的。

提出一种替代的计算方法来表示(2.121)中的本证值的乘积，这是有益的，因为可以不用傅里叶分量并且在整个位形空间下使用。我们发现乘积

$$\prod_{m=1}^N \epsilon^2 \Omega_m \overline{\Omega}_m \quad (2.131)$$

是对角 $N \times N$ 矩阵 $-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}$ 的行列式。这是因为对于任意一个矩阵，其行列式是本证值的乘积。因此，乘积(2.131)被称作自由粒子的涨落行列式(*fluctuation determinant*)，记作

$$\prod_{m=1}^N \epsilon^2 \Omega_m \overline{\Omega}_m \equiv \det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}). \quad (2.132)$$

由以上标记，涨落因子(2.121)可以写作

$$F_0^N(t_b - t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar i \epsilon / M}} [\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla})]^{-1/2}. \quad (2.133)$$

现在我们发现可以通过归纳法由明确的 $N \times N$ 矩阵(2.102)找到 $\epsilon^2 \bar{\nabla} \nabla$ 的行列式:
对于 $N = 1$ 我们直接看出

$$\det_{N=1}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) = |2| = 2. \quad (2.134)$$

对于 $N = 2$, 行列式是

$$\det_{N=2}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) = \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} = 3. \quad (2.135)$$

对应着第一行, 我们计算矩阵的行列式可以得到一个递归关系式:

$$\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) = 2 \det_{N-1}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) - \det_{N-2}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}). \quad (2.136)$$

加上初始条件(2.134), 我们解得

$$\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) = N + 1, \quad (2.137)$$

与以前的结果(2.123)是一致的。

我们也可以在动量空间下算出时间演化振幅。按照规则(2.37), 初始位移和最终位移的傅里叶变换给出

$$\begin{aligned} (\mathbf{p}_b t_b | \mathbf{p}_a t_a) &= \int d^D x_b e^{-i \mathbf{p}_b \mathbf{x}_b / \hbar} \int d^D x_a e^{i \mathbf{p}_a \mathbf{x}_a / \hbar} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) \\ &= (2\pi)^D \delta^{(D)}(\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a) e^{-i \mathbf{p}_b^2 (t_b - t_a) / 2M\hbar}. \end{aligned} \quad (2.138)$$

2.2.4 自由粒子振幅的有限分割性质

时间分割自由粒子的时间演化振幅与用来计算的时间分割片的数目 N 无关。之前我们在讨论涨落因子(2.124)已经指出了。在经典作用量这个例子下, 我们可以研究此时这个无关性的来源。运动微分方程是

$$-\bar{\nabla} \nabla x(t) = 0 \quad (2.139)$$

求解可得与连续极限下相同的线性方程

$$x(t) = At + B, \quad (2.140)$$

利用初始条件, 给出

$$x_{\text{cl}}(t_n) = x_a + (x_b - x_a) \frac{n}{N+1}. \quad (2.141)$$

通过在格点上分部求和[见(2.96)], 可以计算出涨落时间间隔作用量。

利用微分方程 $\bar{\nabla} \nabla x_{\text{cl}} = 0$, 我们发现

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\text{cl}} &= \epsilon \sum_{n=1}^{N+1} \frac{M}{2} (\bar{\nabla} x_{\text{cl}})^2 \\ &= \frac{M}{2} \left(x_{\text{cl}} \nabla x_{\text{cl}} \Big|_{n=0}^{N+1} - \epsilon \sum_{n=0}^N x_{\text{cl}} \nabla \bar{\nabla} x_{\text{cl}} \right) \\ &= \frac{M}{2} x_{\text{cl}} \nabla x_{\text{cl}} \Big|_{n=0}^{N+1} = \frac{M}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}. \end{aligned} \quad (2.142)$$

这与任意数目的时间分隔片的连续作用量是一致的。

在量子力学的算符阐述下，自由粒子振幅的 ϵ 无关性是由于没有势 $V(x)$ ，特罗特公式(2.26)的两边对于任意的 N 都是一致的。

2.3 谐振子的精确解

按照类似的方式可以解决另一个问题，那就是线性谐振子的时间演化振幅

$$\begin{aligned} (x_b t_b | x_a t_a) &= \int \mathcal{D}'x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\mathcal{A}[p, x]\right\} \\ &= \int \mathcal{D}x \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\mathcal{A}[x]\right\}, \end{aligned} \quad (2.143)$$

有正则作用量

$$\mathcal{A}[p, x] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left(p\dot{x} - \frac{1}{2M}p^2 - \frac{M\omega^2}{2}x^2 \right), \quad (2.144)$$

并且有拉格朗日作用量

$$\mathcal{A}[x] = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2}(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2). \quad (2.145)$$

2.3.1 围绕经典路径的涨落

和以前一样，我们继续进行拉格朗日路径积分，从作用量的时间分割形式开始

$$\mathcal{A}^N = \epsilon \frac{M}{2} \sum_{n=1}^{N+1} [(\nabla x_n)^2 - \omega^2 x_n^2]. \quad (2.146)$$

路径积分再次成为高斯计分的乘积，这些高斯积分是可以依次计算出来的。然而，与自由粒子的情况不同，现在直接的求解是相当复杂的；我们将在Appendix 2B给出。

利用涨落展开式，将路径分成一个经典路径加上涨落 $\delta x(t)$ ，这样的话就会简单的多。,

涨落展开式利用作用量是关于 $x = x_{\text{cl}} + \delta x$ 的平方式，并且可以分解成经典部分和涨落部分的求和。其中，经典部分是

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2}(\dot{x}_{\text{cl}}^2 - \omega^2 x_{\text{cl}}^2), \quad (2.147)$$

涨落部分是

$$\mathcal{A}_{\text{fl}} = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2}[(\delta\dot{x})^2 - \omega^2(\delta x)^2], \quad (2.148)$$

并且带有边界条件

$$\delta x(t_a) = \delta x(t_b) = 0. \quad (2.149)$$

由于经典作用量的极值特性，因此没有混合项。运动方程是

$$\ddot{x}_{\text{cl}} = -\omega^2 x_{\text{cl}}. \quad (2.150)$$

这样的话，如同自由粒子一样，总的时间演化振幅分成一个经典的和一个涨落的因素：

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int \mathcal{D}x e^{i\mathcal{A}[x]/\hbar} = e^{i\mathcal{A}_{\text{cl}}/\hbar} F_\omega(t_b - t_a). \quad (2.151)$$

F_ω 的下标表明谐振子的频率。

显然，联系初始点和最终点的经典轨道是

$$x_{\text{cl}}(t) = \frac{x_b \sin \omega(t - t_a) + x_a \sin \omega(t_b - t)}{\sin \omega(t_b - t_a)}. \quad (2.152)$$

注意：当 $t_b - t_a$ 不等于 π/ω 的整数倍时上面的方程才有意义，从今往后，我们一般假定如此。⁶

通过分部积分，我们能将经典作用量 \mathcal{A}_{cl} 写成

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} [x_{\text{cl}}(-\ddot{x}_{\text{cl}} - \omega^2 x_{\text{cl}})] + \frac{M}{2} x_{\text{cl}} \dot{x}_{\text{cl}} \Big|_{t_a}^{t_b}. \quad (2.153)$$

由于运动方程(2.150)，上式的第一项消失，因此我们得到简单的表达式

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \frac{M}{2} [x_{\text{cl}}(t_b) \dot{x}_{\text{cl}}(t_b) - x_{\text{cl}}(t_a) \dot{x}_{\text{cl}}(t_a)]. \quad (2.154)$$

因为

$$\dot{x}_{\text{cl}}(t_a) = \frac{\omega}{\sin \omega(t_b - t_a)} [x_b - x_a \cos \omega(t_b - t_a)], \quad (2.155)$$

$$\dot{x}_{\text{cl}}(t_b) = \frac{\omega}{\sin \omega(t_b - t_a)} [x_b \cos \omega(t_b - t_a) - x_a], \quad (2.156)$$

我们可以将经典作用量写成

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \frac{M\omega}{2 \sin \omega(t_b - t_a)} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega(t_b - t_a) - 2x_b x_a]. \quad (2.157)$$

2.3.2 涨落因子

现在我们转向涨落因子。利用格点算符 $-\nabla \bar{\nabla} - \omega^2$ 的矩阵表示，我们计算多重积分

$$\begin{aligned} F_\omega^N(t_b, t_a) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\delta x_n}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \epsilon \sum_{n,n'=1}^N \delta x_n [-\nabla \bar{\nabla} - \omega^2]_{nn'} \delta x_{n'} \right\}. \end{aligned} \quad (2.158)$$

⁶For subtleties in the immediate neighborhood of the singularities which are known as *caustic phenomena*, see Notes and References at the end of the chapter, as well as Section 4.8.

当转到路径的傅里叶分量时，积分可以按照自由粒子表达式(2.119)相同的方式进行分解W。唯一的不同在于现在涨落算符的本证值变为

$$\Omega_m \bar{\Omega}_m - \omega^2 = \frac{1}{\epsilon^2} [2 - 2 \cos(\nu_m \epsilon)] - \omega^2 \quad (2.159)$$

而不是 $\Omega_m \bar{\Omega}_m$ 。对于在本证值都是正的时间点 t_b, t_a （下面将明确说明），从菲涅耳公式(1.333)的前面部分我们直接得到

$$F_\omega^N(t_b, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \prod_{m=1}^N \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m - \epsilon^2 \omega^2}}. \quad (2.160)$$

通过引入一个辅助频率 $\tilde{\omega}$ 可以得到这些本证值的乘积，这个辅助频率 $\tilde{\omega}$ 满足

$$\sin \frac{\epsilon \tilde{\omega}}{2} \equiv \frac{\epsilon \omega}{2}. \quad (2.161)$$

因此我们如下分解乘积

$$\begin{aligned} \prod_{m=1}^N [\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m - \epsilon^2 \omega^2] &= \prod_{m=1}^N [\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m] \prod_{m=1}^N \left[\frac{\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m - \epsilon^2 \omega^2}{\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m} \right] \\ &= \prod_{m=1}^N [\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m] \left[\prod_{m=1}^N \left(1 - \frac{\sin^2 \frac{\epsilon \tilde{\omega}}{2}}{\sin^2 \frac{m\pi}{2(N+1)}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.162)$$

由(2.123)可得第一个因子等于 $(N + 1)$ 。第二个因子是本证值之比的乘积，可以由基本公式得到⁷

$$\prod_{m=1}^N \left(1 - \frac{\sin^2 x}{\sin^2 \frac{m\pi}{2(N+1)}} \right) = \frac{1}{\sin 2x} \frac{\sin[2(N+1)x]}{(N+1)}. \quad (2.163)$$

因为 $x = \tilde{\omega}\epsilon/2$ ，我们得出涨落行列式

$$\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} - \epsilon^2 \omega^2) = \prod_{m=1}^N [\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m - \epsilon^2 \omega^2] = \frac{\sin \tilde{\omega}(t_b - t_a)}{\sin \epsilon \tilde{\omega}}, \quad (2.164)$$

并且给出涨落因子

$$F_\omega^N(t_b, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \sqrt{\frac{\sin \tilde{\omega}\epsilon}{\epsilon \sin \tilde{\omega}(t_b - t_a)}}, \quad t_b - t_a < \pi/\tilde{\omega}, \quad (2.165)$$

这里，就像之前我们在等式(1.333)约定的那样， \sqrt{i} 代表 $e^{i\pi/4}$ ，并且 $t_b - t_a$ 总是大于0。

⁷I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, op. cit., Formula 1.391.1.

2.3.3 The $i\eta$ -Prescription and Maslov-Morse Index

(2.165)的结果最初仅对于如下情况是正确的

$$t_b - t_a < \pi/\tilde{\omega}. \quad (2.166)$$

在这个时间间隔下，涨落行列式(2.164)的本证值都是正的，并且菲涅耳公式(1.333)的较高描述(upper version)应用于(2.158)中的每一个积分[我们在推导(2.160)时假定如此]。如果 $t_b - t_a$ 变得比 $\pi/\tilde{\omega}$ 大，最小的本证值 $\Omega_1 \bar{\Omega}_1 - \omega^2$ 变成负的，并且计算在相关联的傅里叶分量上的积分时需要与菲涅耳公式(1.333)的较低情况(lower case)一致。由此产生的振幅带有一个额外的相位因子 $e^{-i\pi/2}$ 并且是正确的，直到 $t_b - t_a$ 变得比 $2\pi/\tilde{\omega}$ 大，因为此时第二个本证值变成负的，会引入另一个相位因子 $e^{-i\pi/2}$ 。

如果我们在谐振子频率 ω 加上一个无穷小的负虚部，将所有的 ω 都替换成 $\omega - i\eta$ ，其中无穷小量 $\eta > 0$ ，那么所有的相位因子就会自然的出现。这就是所谓的 $i\eta$ -规定(*iη-prescription*)。物理上，意味着在谐振子上加上一个无穷小的衰减项，这样振幅就会表现的如同 $e^{-i\omega t - \eta t}$ 一样历经很长时间后变为0(而不是非物理上的非衰落项，因为非衰落项会在一段时间后发散)。现在，每一个 $t_b - t_a$ 超过 $\pi/\tilde{\omega}$ 整数倍的时刻，(2.165)中 $\sin \tilde{\omega}(t_b - t_a)$ 的平方根以一种特定的方式超过一个奇点，这样就保证了适当的相位。⁸有了这样一个 $i\eta$ -规定，限制 $t_b - t_a$ 在值域(2.166)将是多余的。然而，用这种方式在展现涨落因子(2.165)中的相位因子是很有用的，对于 $t_b - t_a > \pi/\tilde{\omega}$ 的情况，我们可以给出

$$F_\omega^N(t_b, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar/M}} \sqrt{\frac{\sin \tilde{\omega}\epsilon}{\epsilon |\sin \tilde{\omega}(t_b - t_a)|}} e^{-i\nu\pi/2}, \quad (2.167)$$

这里 ν 是沿着轨道在分母上出现0的数目。这个数被称作 *Maslov-Morse* 指标(*Maslov-Morse index*)⁹。

2.3.4 连续极限(Continuum Limit)

现在我们考虑连续极限， $\epsilon \rightarrow 0$ 。这样，辅助频率 $\tilde{\omega}$ 趋向 ω 并且涨落行列式变成

$$\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} - \epsilon^2 \omega^2) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\sin \omega(t_b - t_a)}{\omega\epsilon}. \quad (2.168)$$

涨落因子 $F_\omega^N(t_b - t_a)$ 变为

$$F_\omega(t_b - t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar/M}} \sqrt{\frac{\omega}{\sin \omega(t_b - t_a)}}, \quad (2.169)$$

⁸在平方根中，我们可以等价的假定 $t_b - t_a$ 带有一个小的负虚部。对于涨落因子相位的更详细的讨论可以参照本章末尾的Notes and References。

⁹V.P. Maslov and M.V. Fedoriuk, *Semi-Classical Approximations in Quantum Mechanics*, Reidel, Boston, 1981.

如上一样，对于 $t_b - t_a > \pi/\omega$ 的情况有相位。

在极限 $\omega \rightarrow 0$ 下，当然，两个涨落因子都与自由粒子的结果(2.125)一致。

在连续极限下，(2.162)中的本证值的比值也可以用如下简单的方法计算得到。我们直接将极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 带入每一个因子中，给出

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m - \epsilon^2 \omega^2}{\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m} &= 1 - \frac{\epsilon^2 \omega^2}{2 - 2 \cos(\nu_m \epsilon)} \\ &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 1 - \frac{\omega^2 (t_b - t_a)^2}{\pi^2 m^2}. \end{aligned} \quad (2.170)$$

当 N 趋向于无穷大时，我们需要计算这些因子的一个无穷乘积。利用著名的正弦函数无穷乘积公式¹⁰

$$\sin x = x \prod_{m=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{m^2 \pi^2} \right), \quad (2.171)$$

令 $x = \omega(t_b - t_a)$ ，我们发现，

$$\prod_m \frac{\Omega_m \bar{\Omega}_m}{\Omega_m \bar{\Omega}_m - \omega^2} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{m=1}^{\infty} \frac{\nu_m^2}{\nu_m^2 - \omega^2} = \frac{\omega(t_b - t_a)}{\sin \omega(t_b - t_a)}, \quad (2.172)$$

再次得到在连续极限下的涨落因子(2.169)。

涨落因子乘上经典振幅，在连续极限下线性谐振子的时间演化振幅为

$$\begin{aligned} (x_b t_b | x_a t_a) &= \int \mathcal{D}x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar / M}} \sqrt{\frac{\omega}{\sin \omega(t_b - t_a)}} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \frac{M\omega}{\sin \omega(t_b - t_a)} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega(t_b - t_a) - 2x_b x_a] \right\}. \end{aligned} \quad (2.173)$$

结果能很容易的推广到维数为 D 的情况，这时，作用量为

$$\mathcal{A} = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} (\dot{\mathbf{x}}^2 - \omega^2 \mathbf{x}^2). \quad (2.174)$$

因为是 \mathbf{x} 的平方式，作用量是每一个分量的作用量的求和，使得振幅是可以分解的：

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) &= \prod_{i=1}^D (x_b^i t_b | x_a^i t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar / M}^D} \sqrt{\frac{\omega}{\sin \omega(t_b - t_a)}}^D \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \frac{M\omega}{\sin \omega(t_b - t_a)} [(\mathbf{x}_b^2 + \mathbf{x}_a^2) \cos \omega(t_b - t_a) - 2\mathbf{x}_b \cdot \mathbf{x}_a] \right\}, \end{aligned} \quad (2.175)$$

这里，当 $t_b - t_a > \pi/\omega$ 时，利用与一维情况[见等式 (1.543)]相同的方式来确定第二个平方根的相位。

¹⁰I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, op. cit., Formula 1.431.1.

2.3.5 有用的涨落公式

在本证值的比值(2.172)下进行连续极限下，我们实际上是计算了微分算符泛函行列式的比值，认识到这一点是值得的

$$\frac{\det(-\partial_t^2 - \omega^2)}{\det(-\partial_t^2)}. \quad (2.176)$$

的确，对于实涨落在端点出消失的空间下， $-\partial_t^2$ 的本证值是

$$\nu_m^2 = \left(\frac{\pi m}{t_b - t_a} \right)^2, \quad (2.177)$$

因此比值(2.176) 等于一个乘积式

$$\frac{\det(-\partial_t^2 - \omega^2)}{\det(-\partial_t^2)} = \prod_{m=1}^{\infty} \frac{\nu_m^2 - \omega^2}{\nu_m^2}, \quad (2.178)$$

这与(2.172)是相同的。然而，这个发现不应当让我们相信整个
涨落因子

$$F_\omega(t_b - t_a) = \int \mathcal{D}\delta x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} [(\delta \dot{x})^2 - \omega^2 (\delta x)^2] \right\} \quad (2.179)$$

能够通过连续行列式计算出来

$$F_\omega(t_b, t_a) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \frac{1}{\sqrt{\det(-\partial_t^2 - \omega^2)}} \quad (\text{错误的}). \quad (2.180)$$

在 $\det(-\partial_t^2 - \omega^2)$ 中本证值的乘积是强烈发散的

$$\begin{aligned} \det(-\partial_t^2 - \omega^2) &= \prod_{m=1}^{\infty} (\nu_m^2 - \omega^2) \\ &= \prod_{m=1}^{\infty} (\nu_m^2) \prod_{m=1}^{\infty} \left[\frac{\nu_m^2 - \omega^2}{\nu_m^2} \right] = \prod_{m=1}^{\infty} \left[\frac{\pi^2 m^2}{(t_b - t_a)^2} \right] \times \frac{\sin \omega(t_b - t_a)}{\omega(t_b - t_a)}. \end{aligned} \quad (2.181)$$

只有不同 ω 的行列式 $-\nabla\bar{\nabla} - \omega^2$ 的比值 才可以被它们的微分极限所替代。这样才能消去在(2.181)中出现的一般的发散因子。

让我们来看看强发散的来源。格点上的本证值和它们的近似都是从小的 m 开始

$$\Omega_m \bar{\Omega}_m \approx \nu_m^2 \approx \frac{\pi^2 m^2}{(t_b - t_a)^2}. \quad (2.182)$$

对于大的 $m \leq N$ ，格点上的本证值在 $\Omega_m \bar{\Omega}_m \rightarrow 2/\epsilon^2$ 达到饱和，同时 ν_m^2 保持关于 m 的平方增长，这样就导致了发散。

对于谐振子涨落因子正确的时间间隔公式可以由以下的方程总结出来：

$$\begin{aligned} F_\omega^N(t_b - t_a) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{d\delta x_n}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2\epsilon} \delta x^T (-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} - \epsilon^2 \omega^2) \delta x \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \frac{1}{\sqrt{\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} - \epsilon^2 \omega^2)}}, \end{aligned} \quad (2.183)$$

这里，第一个表达式中的指数以矩阵符号写出，其中 x^T 表示矢量 x 的转置， x_n 是 x 的分量。取出自由粒子行列式 $\det_N(-\epsilon^2 \nabla \nabla)$ ，公式(2.137)，给出比值公式

$$F_\omega^N(t_b - t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t_b - t_a)/M}} \left[\frac{\det_N(-\epsilon^2 \nabla \nabla - \epsilon^2 \omega^2)}{\det_N(-\epsilon^2 \nabla \nabla)} \right]^{-1/2}, \quad (2.184)$$

这样得到

$$F_\omega^N(t_b - t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t_b - t_a)/M}} \sqrt{\frac{\sin \tilde{\omega} \epsilon}{\epsilon \sin \tilde{\omega}(t_b - t_a)}}, \quad (2.185)$$

其中 $\tilde{\omega}$ 与等式 (2.161)中的一致。如果我们只对连续极限有兴趣，可以让(2.184)右边的 ϵ 趋于0并且求解

$$\begin{aligned} F_\omega(t_b - t_a) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t_b - t_a)/M}} \left[\frac{\det(-\partial_t^2 - \omega^2)}{\det(-\partial_t^2)} \right]^{-1/2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t_b - t_a)/M}} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\frac{\nu_m^2 - \omega^2}{\nu_m^2} \right]^{-1/2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t_b - t_a)/M}} \sqrt{\frac{\omega(t_b - t_a)}{\sin \omega(t_b - t_a)}}. \end{aligned} \quad (2.186)$$

这里我们也可以在动量空间里计算演化振幅。(2.175)中的初始位移和最终位移的傅里叶变换[与(2.138)相同]给出

$$\begin{aligned} (\mathbf{p}_b t_b | \mathbf{p}_a t_a) &= \int d^D x_b e^{-i\mathbf{p}_b \mathbf{x}_b / \hbar} \int d^D x_a e^{i\mathbf{p}_a \mathbf{x}_a / \hbar} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^D}{\sqrt{2\pi i\hbar}^D} \frac{1}{\sqrt{M\omega \sin \omega(t_b - t_a)^D}} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2M\omega \sin \omega(t_b - t_a)} [(\mathbf{p}_b^2 + \mathbf{p}_a^2) \cos \omega(t_b - t_a) - 2\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a] \right\}. \end{aligned} \quad (2.187)$$

极限 $\omega \rightarrow 0$ 下简化成自由粒子表达式(2.138)，并不像在 \mathbf{x} 空间下的振幅(2.175)那么直接。展开指数

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2M\omega \sin \omega(t_b - t_a)} [(\mathbf{p}_b^2 + \mathbf{p}_a^2) \cos \omega(t_b - t_a) - 2\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a^2] \\ &= \frac{1}{2M\omega^2(t_b - t_a)} \left\{ (\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a)^2 - \frac{1}{2}(\mathbf{p}_b^2 + \mathbf{p}_a^2)[\omega(t_b - t_a)]^2 + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (2.188)$$

并且趋向极限 $\omega \rightarrow 0$ ，(2.187)的领头项

$$\frac{(2\pi)^D}{\sqrt{2\pi i\omega^2(t_b - t_a)\hbar M}^D} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2M\omega^2(t_b - t_a)} (\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a)^2 \right\} \quad (2.189)$$

趋于 $(2\pi\hbar)^D \delta^{(D)}(\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a)$ [回顾(1.531)]，同时(2.188)中的第二项给出一个因子 $e^{-i\mathbf{p}^2(t_b - t_a)/2M\hbar}$ ，因此我们再次得到(2.138)。

2.3.6 有限时间格点上的谐振子振幅

我们计算有限数目的时间分割片下的精确时间演化振幅。与2.2.4 节中的自由粒子不同，谐振子的振幅不等于在连续极限下的情况，而是依赖 ϵ 的。我们将学习在连续极限下路径积分的一些典型的收敛特性。因为最初在(2.167)中涨落因子是在有限 ϵ 下计算得到的，我们只需要针对有限 ϵ 找

到经典作用量。为了保持对任意有限 ϵ 的时间反转不变性，我们处理的作用量与之前(2.146)中的有细微的不同，主要是对分割的势能项，此时我们利用

$$\mathcal{A}^N = \epsilon \frac{M}{2} \sum_{n=1}^{N+1} [(\bar{\nabla}x_n)^2 - \omega^2(x_n^2 + x_{n-1}^2)/2], \quad (2.190)$$

或者，写成另一种形式

$$\mathcal{A}^N = \epsilon \frac{M}{2} \sum_{n=0}^N [(\nabla x_n)^2 - \omega^2(x_{n+1}^2 + x_n^2)/2]. \quad (2.191)$$

不同处在于原先的时间分割作用量(2.146)中的势能 $\omega^2 x_n^2$ 被更加对称的形式 $\omega^2(x_n^2 + x_{n-1}^2)/2$ 所替代。梯度项是相同的，经过分部求和，可以另写为

$$\epsilon \sum_{n=1}^{N+1} (\bar{\nabla}x_n)^2 = \epsilon \sum_{n=0}^N (\nabla x_n)^2 = [x_b \bar{\nabla}x_b - x_a \nabla x_a] - \epsilon \sum_{n=1}^N x_n \nabla \bar{\nabla}x_n. \quad (2.192)$$

由此可以得到时间分割作用量为

$$\mathcal{A}^N = \frac{M}{2} (x_b \bar{\nabla}x_b - x_a \nabla x_a) - \epsilon \frac{M}{4} \omega^2 (x_b^2 + x_a^2) - \epsilon \frac{M}{2} \sum_{n=1}^N x_n (\nabla \bar{\nabla} + \omega^2) x_n. \quad (2.193)$$

因为在固定端点 x_a 和 x_b 处进行 \mathcal{A}^N 的变分，涨落因子和(2.158)中的是相同的。在分割时间轴上的运动方程是

$$(\nabla \bar{\nabla} + \omega^2) x_{\text{cl}}(t) = 0. \quad (2.194)$$

这里可以理解成时间变量只能取分离的格点值 t_n 。利用初始值和最终值分别为 x_a 和 x_b ，可以得到这个微分方程的解

$$x_{\text{cl}}(t) = \frac{1}{\sin \tilde{\omega}(t_b - t_a)} [x_b \sin \tilde{\omega}(t - t_a) + x_a \sin \tilde{\omega}(t_b - t)], \quad (2.195)$$

这里， $\tilde{\omega}$ 是(2.161)中引入的辅助频率。为了计算格点上的经典作用量，将(2.195) 插到(2.193)中。通过一系列三角计算，并且将 $\epsilon^2 \omega^2$ 替换成 $4 \sin^2(\tilde{\omega}\epsilon/2)$ ，作用量重新整理写成接近连续极限下的表达式形式(2.157)：

$$\mathcal{A}_{\text{cl}}^N = \frac{M}{2\epsilon} \frac{\sin \tilde{\omega}\epsilon}{\sin \tilde{\omega}(t_b - t_a)} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \tilde{\omega}(t_b - t_a) - 2x_b x_a]. \quad (2.196)$$

时间分割轴上整个时间演化振幅为

$$(x_b t_b | x_a t_a) = e^{i\mathcal{A}_{\text{cl}}^N/\hbar} F_{\omega}^N(t_b - t_a), \quad (2.197)$$

分割作用量由(2.196)给出，分割的涨落因子由(2.167)得到。

2.4 Gelfand-Yaglom Formula

在应用中，我们会碰到具有微小变化的振子涨落问题：作用量是谐振的，但频率不再是常数振子频率 ω^2 ，而变成依赖时间的频率 $\Omega^2(t)$ 。相关联的涨落因子现在变成

$$F(t_b, t_a) = \int \mathcal{D}\delta x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}\right), \quad (2.198)$$

作用量是

$$\mathcal{A} = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} [(\delta \dot{x})^2 - \Omega^2(t)(\delta x)^2]. \quad (2.199)$$

因为 $\Omega(t)$ 不是关于时间平移不变的，所以此时涨落因子一般依赖于初始时间和最终时间。比值公式(2.184)也适用于更一般的情况，也就是

$$F^N(t_b, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t_b - t_a)/M}} \left[\frac{\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} - \epsilon^2 \Omega^2)}{\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla})} \right]^{-1/2}. \quad (2.200)$$

这里 $\Omega^2(t)$ 代表对角矩阵

$$\Omega^2(t) = \begin{pmatrix} \Omega_N^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \Omega_1^2 \end{pmatrix}, \quad (2.201)$$

该矩阵的矩阵元为 $\Omega_n^2 = \Omega^2(t_n)$ 。

2.4.1 涨落行列式的递归计算

一般的，即使在连续极限下，矩阵 $-\nabla \bar{\nabla} - \Omega^2(t)$ 的本证值的全集是很难找到的。然而，我们可以得到一个强大的微分方程，用它来找涨落行列式的本证值，而不用知道行列式所有的本证值。这个方法源于Gelfand 和Yaglom。¹¹

我们用 D_N 来表示 $N \times N$ 涨落矩阵的行列式，也就是

$$D_N \equiv \det_N (-\epsilon^2 \bar{\nabla} \nabla - \epsilon^2 \Omega^2) \quad (2.202)$$

$$\equiv \begin{vmatrix} 2 - \epsilon^2 \Omega_N^2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 - \epsilon^2 \Omega_{N-1}^2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 - \epsilon^2 \Omega_2^2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 - \epsilon^2 \Omega_1^2 \end{vmatrix}.$$

按照第一列展开，我们得到递归式

$$D_N = (2 - \epsilon^2 \Omega_N^2) D_{N-1} - D_{N-2}, \quad (2.203)$$

可以改写为

$$\epsilon^2 \left[\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{D_N - D_{N-1}}{\epsilon} - \frac{D_{N-1} - D_{N-2}}{\epsilon} \right) + \Omega_N^2 D_{N-1} \right] = 0. \quad (2.204)$$

因为方程对于所有的 N 都是适用的，因此表示行列式 D_N 满足微分方程

¹¹I.M. Gelfand and A.M. Yaglom, J. Math. Phys. 1, 48 (1960).

$$(\nabla \bar{\nabla} + \Omega_{N+1}^2) D_N = 0. \quad (2.205)$$

在此标记法下，算符 $-\nabla \bar{\nabla}$ 可以理解成是作用在维数标记为 N 的行列式上。行列式 D_N 可以看成是在分割时间轴上计算得到的函数 $D(t)$ 的离散值。等式(2.205)被称作Gelfand-Yaglom公式。这样，作为 N 的函数的行列式是经典运动微分方程的解，并且对于给定 N 后的结果可以通过最终值 $D_N = D(t_{N+1})$ 得到。初始条件是

$$\begin{aligned} D_1 &= (2 - \epsilon^2 \Omega_1^2), \\ D_2 &= (2 - \epsilon^2 \Omega_1^2)(2 - \epsilon^2 \Omega_2^2) - 1. \end{aligned} \quad (2.206)$$

2.4.2 例子

为了阐明Gelfand-Yaglom公式的强大之处，我们考虑已知的情况，当 $\Omega^2(t) \equiv \omega^2$ 是个常数时，由Gelfand-Yaglom公式，可得

$$(\nabla \bar{\nabla} + \omega^2) D_N = 0. \quad (2.207)$$

这个方程的解是 $\sin(N\tilde{\omega}\epsilon)$ 和 $\cos(N\tilde{\omega}\epsilon)$ 的线性组合，其中 $\tilde{\omega}$ 由(2.161)给出。满足正确边界条件的解明显是

$$D_N = \frac{\sin(N+1)\epsilon\tilde{\omega}}{\sin\epsilon\tilde{\omega}}. \quad (2.208)$$

最小的两个元素是

$$\begin{aligned} D_1 &= 2 \cos \epsilon\tilde{\omega}, \\ D_2 &= 4 \cos^2 \epsilon\tilde{\omega} - 1, \end{aligned} \quad (2.209)$$

这与(2.206)是相同的，因为 $\epsilon^2 \Omega^2 \equiv \epsilon^2 \omega^2 = 2(1 - \cos \tilde{\omega}\epsilon)$ 。

在连续极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 下Gelfand-Yaglom公式变得特别容易来处理。然后，考虑归一化函数

$$D_{\text{ren}}(t_N) = \epsilon D_N, \quad (2.210)$$

初始条件 $D_1 = 2$ 和 $D_2 = 3$ 可以重新表示为

$$(\epsilon D)_1 = D_{\text{ren}}(t_a) = 0, \quad (2.211)$$

$$\frac{\epsilon D_2 - \epsilon D_1}{\epsilon} = (\nabla \epsilon D)_1 \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \dot{D}_{\text{ren}}(t_a) = 1. \quad (2.212)$$

关于 D_N 的微分方程变成关于 $D_{\text{ren}}(t)$ 的微分方程：

$$[\partial_t^2 + \Omega^2(t)] D_{\text{ren}}(t) = 0. \quad (2.213)$$

Fig. 2.2描述了这种情况。行列式 D_N 等于 $1/\epsilon$ 乘以函数 $D_{\text{ren}}(t)$ 在 t_b 时的值。这个值通过求解微分方程得到，其中方程是从时刻 t_a 开始并且具有0值和单位斜度。

作为一个例子，再次考虑具有固定频率 ω 的谐振子。在连续极限下，求解运动方程可得

$$D_{\text{ren}}(t) = \frac{1}{\omega} \sin \omega(t - t_a), \quad (2.214)$$

该式满足初始条件(2.212)。这样，对于小的 ϵ ，我们发现涨落行列式变成

$$\det(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} - \epsilon^2 \omega^2) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \frac{\sin \omega(t_b - t_a)}{\omega}, \quad (2.215)$$

与之前(2.208)的结果一致。对于自由粒子，解是 $D_{\text{ren}}(t) = t - t_a$ ，我们直接得到行列式 $\det(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) = (t_b - t_a)/\epsilon$ 。

对于依赖时间的频率 $\Omega(t)$ ，Gelfand-Yaglom初始值问题(2.211)，(2.212)，和(2.213)的解析解只有对特殊类的函数 $\Omega(t)$ 才能够求解得到。事实上，(2.213)具有自由粒子在势 $\Omega^2(t)$ 下薛定谔方程的形式，对于这类的势，是能够求解薛定谔方程，这一点是众所周知的。

Figure 2.2 0初始值和单位初始斜度的运动方程的解。在终点时刻这个解等于 ϵ 乘以离散涨落行列式 $D_N = D(t_b)$ 。

2.4.3 在未分割的时间轴上的计算

一般来说，表示解的最明确的方法就是从齐次微分方程的任意两个独立的解 $\xi(t)$ 和 $\eta(t)$ 中进行 $D_{\text{ren}}=\epsilon D_N$ 的线性组合

$$[\partial_t^2 + \Omega^2(t)]x(t) = 0. \quad (2.216)$$

通过线性组合得到(2.213)的解

$$D_{\text{ren}}(t) = \alpha\xi(t) + \beta\eta(t). \quad (2.217)$$

系数由初始条件(2.212)确定，给出

$$\begin{aligned} \alpha\xi(t_a) + \beta\eta(t_a) &= 0, \\ \alpha\dot{\xi}(t_a) + \beta\dot{\eta}(t_a) &= 1, \end{aligned} \quad (2.218)$$

因此有

$$D_{\text{ren}}(t) = \frac{\xi(t)\eta(t_a) - \xi(t_a)\eta(t)}{\dot{\xi}(t_a)\eta(t_a) - \xi(t_a)\dot{\eta}(t_a)}. \quad (2.219)$$

分母上就是的这两个解在初始点 t_a 上与时间无关的朗斯基行列式 (*Wronski determinant*)

$$W \equiv \xi(t) \overleftrightarrow{\partial}_t \eta(t) \equiv \xi(t)\dot{\eta}(t) - \dot{\xi}(t)\eta(t) \quad (2.220)$$

等式右边是与时间 t 无关的。

朗斯基行列式是在二阶微分方程理论中很重要的一个量。对于所有的施图姆-刘维尔型 (Sturm-Liouville) 方程，朗斯基行列式都有定义

$$\frac{d}{dt} \left[a(t) \frac{dy(t)}{dt} \right] + b(t)y(t) = 0, \quad (2.221)$$

对这类方程，朗斯基行列式正比于 $1/a(t)$ 。朗斯基行列式用来为这些方程构造格林函数 (Green function)¹²

¹²关于它在经典电动力学中的典型应用，见J.D. Jackson, 经典电动力学, John Wiley & Sons, New York, 1975, Section 3.11.

利用朗斯基行列式，等式 (2.219) 有一般形式

$$D_{\text{ren}}(t) = -\frac{1}{W} [\xi(t)\eta(t_a) - \xi(t_a)\eta(t)]. \quad (2.222)$$

令 $t = t_b$, 给出想得到的行列式

$$D_{\text{ren}} = -\frac{1}{W} [\xi(t_b)\eta(t_a) - \xi(t_a)\eta(t_b)]. \quad (2.223)$$

注意：通过计算在 t_a 时的方程

$$\tilde{D}_{\text{ren}}(t) = -\frac{1}{W} [\xi(t_b)\eta(t) - \xi(t)\eta(t_b)] \quad (2.224)$$

也可以得到相同的函数行列式。同样也是满足齐次微分方程(2.213)的，但是初始条件变成

$$\tilde{D}_{\text{ren}}(t_b) = 0, \quad \dot{\tilde{D}}_{\text{ren}}(t_b) = -1. \quad (2.225)$$

用 $D_a(t)$ 和 $D_b(t)$ 来标记 $D_{\text{ren}}(t)$ 和 $\tilde{D}_{\text{ren}}(t)$ ，总结它们各自的对称性质，并且指出在哪些端点满足 Gelfand-Yaglom 边界条件，如下：

$$[\partial_t^2 + \Omega^2(t)]D_a(t) = 0; \quad D_a(t_a) = 0, \quad \dot{D}_a(t_a) = 1, \quad (2.226)$$

$$[\partial_t^2 + \Omega^2(t)]D_b(t) = 0; \quad D_b(t_b) = 0, \quad \dot{D}_b(t_b) = -1, \quad (2.227)$$

从其中任一个中可以得到行列式

$$D_{\text{ren}} = D_a(t_b) = D_b(t_a). \quad (2.228)$$

与我们在方程(2.222) 和(2.224) 中看到的不同，两个函数在相反的端点处的时间导数一般是不关联的。只对频率 $\Omega(t)$ 有时间反演不变性，有

$$\dot{D}_a(t_b) = -\dot{D}_b(t_a), \quad \text{for } \Omega(t) = \Omega(-t). \quad (2.229)$$

对于任意的 $\Omega(t)$ ，我们能得到关系式

$$\dot{D}_a(t_b) + \dot{D}_b(t_a) = -2 \int_{t_a}^{t_b} dt \Omega(t) \dot{\Omega}(t) D_a(t) D_b(t). \quad (2.230)$$

作为这些公式的一个应用，我们再次考虑线性振子，两个独立的解是

$$\xi(t) = \cos \omega t, \quad \eta(t) = \sin \omega t. \quad (2.231)$$

因此有

$$W = \omega, \quad (2.232)$$

涨落行列式变成

$$D_{\text{ren}} = -\frac{1}{\omega} (\cos \omega t_b \sin \omega t_a - \cos \omega t_a \sin \omega t_b) = \frac{1}{\omega} \sin \omega (t_b - t_a). \quad (2.233)$$

2.4.4 达朗贝尔构造 (D'Alembert's Construction)

构造方程(2.226)和(2.227)的解只需要知道齐次微分方程(2.216)的一个解, 记作 $\xi(t)$ 。利用达朗贝尔公式能找到第二个线性无关的解 $\eta(t)$

$$\eta(t) = w \xi(t) \int^t \frac{dt'}{\xi^2(t')}, \quad (2.234)$$

这里, w 是常数。求微分, 给出

$$\dot{\eta} = \frac{\dot{\xi}\eta}{\xi} + \frac{w}{\xi}, \quad \ddot{\eta} = \frac{\ddot{\xi}\eta}{\xi}. \quad (2.235)$$

第二个方程表示同 $\xi(t)$ 一样, $\eta(t)$ 也是齐次微分方程(2.216)的解。由第一个方程我们发现两个函数的朗斯基行列式等于 w :

$$W = \xi(t)\dot{\eta}(t) - \dot{\xi}(t)\eta(t) = w. \quad (2.236)$$

将解(2.234)代入公式(2.222) 和(2.224), 我们得到Gelfand-Yaglom函数的明确表达式其中是以齐次微分方程(2.216)的一个任意解的形式给出的:

$$D_{\text{ren}}(t) = D_a(t) = \xi(t)\xi(t_a) \int_{t_a}^t \frac{dt'}{\xi^2(t')}, \quad \tilde{D}_{\text{ren}}(t) = D_b(t) = \xi(t_b)\xi(t) \int_t^{t_b} \frac{dt'}{\xi^2(t')}. \quad (2.237)$$

则所求的函数行列式为

$$D_{\text{ren}} = \xi(t_b)\xi(t_a) \int_{t_a}^{t_b} \frac{dt'}{\xi^2(t')}. \quad (2.238)$$

2.4.5 另一个简单的公式

对于函数行列式还有另一个有用的公式。为此, 我们求解在时刻 t_a 任意初始位移 x_a 和初速度 \dot{x}_a 下的齐次微分方程(2.216)。结果可以由如下的 $D_a(t)$ 和 $D_b(t)$ 的线性组合给出:

$$x(x_a, \dot{x}_a; t) = \frac{1}{D_b(t_a)} \left[D_b(t) - D_a(t) \dot{D}_b(t_a) \right] x_a + D_a(t) \dot{x}_a. \quad (2.239)$$

然后我们看出Gelfand-Yaglom 函数 $D_{\text{ren}}(t) = D_a(t)$ 可以通过求偏微分得到

$$D_{\text{ren}}(t) = \frac{\partial x(x_a, \dot{x}_a; t)}{\partial \dot{x}_a}. \quad (2.240)$$

这个函数显然满足(2.211) 与(2.212)中的Gelfand-Yaglom 初始条件 $D_{\text{ren}}(t_a) = 0$ 和 $\dot{D}_{\text{ren}}(t_a) = 1$, 这是因为函数 $x(x_a, \dot{x}_a; t)$ 中的 x_a 和 \dot{x}_a 独立的, 即有 $\partial x_a / \partial \dot{x}_a = 0$ 并且 $\partial \dot{x}_a / \partial \dot{x}_a = 1$.

由以下公式给出涨落行列式 $D_{\text{ren}} = D_a(t_b)$

$$D_{\text{ren}} = \frac{\partial x_b}{\partial \dot{x}_a}, \quad (2.241)$$

这里 x_b 是函数 $x(x_a, \dot{x}_a; t_b)$ 的简写。显然, 偏微分 $D_b(t) = -\partial x(t) / \partial \dot{x}_b$ 满足类似的方程(2.227), 这里 $x(t)$ 用最终位移 x_b 和速度 \dot{x}_b 来表示, 即有 $x(t) = x(x_b, \dot{x}_b; t)$

$$x(x_b, \dot{x}_b; t) = \frac{1}{D_a(t_b)} \left[D_a(t) + D_b(t) \dot{D}_a(t_b) \right] x_b - D_b(t) \dot{x}_b, \quad (2.242)$$

因此我们得到替代的公式

$$D_{\text{ren}} = -\frac{\partial x_a}{\partial \dot{x}_b}. \quad (2.243)$$

这些结果能推广到形如 $-\partial_t^2 \delta_{ij} - \Omega_{ij}^2(t)$ 的微分算符的函数行列式，这里的时间相关的频率是一个 $D \times D$ 维矩阵 $\Omega_{ij}^2(t)$, ($i, j = 1, \dots, D$)。这样，相关的Gelfand-Yaglom函数 $D_a(t)$ 变成一个矩阵 $D_{ij}(t)$, 满足初始条件 $D_{ij}(t_a) = 0$, $\dot{D}_{ij}(t_b) = \delta_{ij}$, 所求的函数行列式 D_{ren} 等于普通的行列式 $D_{ij}(t_b)$:

$$D_{\text{ren}} = \text{Det}[-\partial_t^2 \delta_{ij} - \Omega_{ij}^2(t)] = \det D_{ij}(t_b). \quad (2.244)$$

显然，偏微分矩阵 $D_{ij}(t) = \partial x^i(t)/\partial \dot{x}_a^j$ 满足齐次微分方程和初始条件，因此 $D_{ij}(t)$ 的明确的表示变成如下形式，是以经典运动方程 $[-\partial_t^2 \delta_{ij} - \Omega_{ij}^2(t)] x_j(t) = 0$ 的一般解的形式给出的

$$D_{\text{ren}} = \det \frac{\partial x_b^i}{\partial \dot{x}_a^j} = \det \left(-\frac{\partial x_a^i}{\partial \dot{x}_b^j} \right). \quad (2.245)$$

通过构造齐次微分方程(2.216)的解可以找到另外两个关于函数行列式的公式，其中，方程(2.216)在 t_a 和 t_b 分别经过初始点 x_a 和 终点 x_b ，于是有：

$$x(x_b, x_a; t) = \frac{D_b(t)}{D_b(t_a)} x_a + \frac{D_a(t)}{D_a(t_b)} x_b. \quad (2.246)$$

因此，通过偏微分可以得到Gelfand-Yaglom 函数 $D_a(t)$ 和 $D_b(t)$

$$\frac{D_a(t)}{D_a(t_b)} = \frac{\partial x(x_b, x_a; t)}{\partial x_b}, \quad \frac{D_b(t)}{D_b(t_a)} = \frac{\partial x(x_b, x_a; t)}{\partial x_a}. \quad (2.247)$$

在端点出，方程 (2.246) 给出

$$\dot{x}_a = \frac{\dot{D}_b(t_a)}{D_b(t_a)} x_a + \frac{1}{D_a(t_b)} x_b, \quad (2.248)$$

$$\dot{x}_b = -\frac{1}{D_b(t_a)} x_a + \frac{\dot{D}_a(t_b)}{D_a(t_b)} x_b, \quad (2.249)$$

因此，涨落行列式 $D_{\text{ren}} = D_a(t_b) = D_b(t_a)$ 可以有以下公式给出

$$D_{\text{ren}} = \left(\frac{\partial \dot{x}_a}{\partial x_b} \right)^{-1} = - \left(\frac{\partial \dot{x}_b}{\partial x_a} \right)^{-1}, \quad (2.250)$$

这里， \dot{x}_a 和 \dot{x}_b 是不相关的变量 x_a 和 x_b 的函数。这个等式和之前的(2.241), (2.243)都是偏微分如下数学特性的直接结果

$$\left. \frac{\partial x_b}{\partial \dot{x}_a} \right|_{x_a} = \left(\left. \frac{\partial \dot{x}_a}{\partial x_b} \right|_{x_a} \right)^{-1}. \quad (2.251)$$

需要强调的是本章中计算的所有函数行列式应用于具有固定端点的路径的涨落因子。在数学上，这一性质被称作狄利克雷边界条件 (Dirichlet boundary conditions)。在量子统计里，对于带有周期边界条件的涨落，我们还需要这样的行列式，此时我们还需要修改Gelfand-Yaglom 方法。

我们将在 2.11 节看到所做的修改导致格点导数产生相当大的复杂性，从而值得去寻找对于两个函数行列式更简单的导数。3.27节将在连续公式下给出这一简单的导数。

一般的，我们不能解析求解带有时间依赖的频率 $\Omega(t)$ 的齐次微分方程(2.216)。这和一个点粒子在一维势 $\Omega^2(t)$ 下作一维运动所遵守的薛定谔方程具有相同的形式，并且只有在少数种类的势下有已知闭合式的解。然而，幸运的是，函数行列式通常是在时间无关势下经典解附近出现(见 4.3节)。如果一个经典解解析已知的话，那么我们自然而然的得到齐次微分方程(2.216)的一个解。我们将在 17.4节和 17.11节讨论一些重要的例子。

2.4.6 推广到 D 维

以上的公式显然可以推广到涨落作用量(2.199)在 D 维的情况

$$\mathcal{A} = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} [(\delta \dot{\mathbf{x}})^2 - \delta \mathbf{x}^T \boldsymbol{\Omega}^2(t) \delta \mathbf{x}], \quad (2.252)$$

这里 $\boldsymbol{\Omega}^2(t)$ 是一个 $D \times D$ 矩阵，其矩阵元为 $\Omega_{ij}^2(t)$ 。涨落因子(2.200) 可以推广成

$$F^N(t_b, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t_b - t_a)/M}^D} \left[\frac{\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} - \epsilon^2 \boldsymbol{\Omega}^2)}{\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla})} \right]^{-1/2}. \quad (2.253)$$

涨落行列式可以通过Gelfand-Yaglom构造来给出，就是从下面这个含有矩阵 $\mathbf{D}_a(t)$ 和 $\mathbf{D}_b(t)$ 的公式得到的

$$D_{\text{ren}} = \det \mathbf{D}_a(t_b) = \det \mathbf{D}_b(t_a), \quad (2.254)$$

并且此公式满足对应于(2.226) 和(2.227) 的经典运动方程和初始条件：

$$[\partial_t^2 + \boldsymbol{\Omega}^2(t)] \mathbf{D}_a(t) = 0; \quad \mathbf{D}_a(t_a) = 0, \quad \dot{\mathbf{D}}_a(t_a) = \mathbf{1}, \quad (2.255)$$

$$[\partial_t^2 + \boldsymbol{\Omega}^2(t)] \mathbf{D}_b(t) = 0; \quad \mathbf{D}_b(t_b) = 0, \quad \dot{\mathbf{D}}_b(t_b) = -\mathbf{1}, \quad (2.256)$$

这里， $\mathbf{1}$ 是 D 维单位矩阵。我们可以重复上一节所有的步骤，从而给出公式(2.250)在 D 维下的推广：

$$D_{\text{ren}} = \left(\det \frac{\partial \dot{x}_a^i}{\partial x_b^j} \right)^{-1} = \left[\det \left(-\frac{\partial \dot{x}_b^i}{\partial x_a^j} \right) \right]^{-1}. \quad (2.257)$$

2.5 具有时间相关频率的谐振子

上一节得到的结果使我们可以精确求解具有任意时间相关频率 $\Omega(t)$ 的谐振子的路径积分。我们首先将在坐标空间下完成，然后再在动量空间下计算。

2.5.1 坐标空间

考虑路径积分

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}[x] \right\}, \quad (2.258)$$

其中拉格朗日作用量为

$$\mathcal{A}[x] = \frac{M}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\dot{x}^2(t) - \Omega^2(t) x^2(t) \right], \quad (2.259)$$

是谐振的，并且具有时间相关的频率。如同在等式 (2.14)中一样，结果可以写成涨落因子乘以一个含有经典作用量的指数：

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int \mathcal{D}x e^{i \mathcal{A}[x]/\hbar} = F_\Omega(t_b, t_a) e^{i \mathcal{A}_{\text{cl}}/\hbar}. \quad (2.260)$$

从上一节的讨论中，通过类比(2.169)并且回顾(2.241)，我们知道涨落因子是

$$F_\Omega(t_b, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar/M}} \frac{1}{\sqrt{D_a(t_b)}}. \quad (2.261)$$

根据公式(2.241)和(2.250)，行列式 $D_a(t_b) = D_{\text{ren}}$ 可以表示成偏微分的形式：

$$F_\Omega(t_b, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar/M}} \left(\frac{\partial x_b}{\partial \dot{x}_a} \right)^{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar/M}} \left(\frac{\partial \dot{x}_a}{\partial x_b} \right)^{1/2}, \quad (2.262)$$

这里，第一个偏微分由函数 $x(x_a, \dot{x}_a; t)$ 来计算，第二个是由 $\dot{x}(x_b, x_a; t)$ 来求得。等价的，我们可以利用(2.243) 和等式 (2.250)的右边部分，从而给出

$$F_\Omega(t_b, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar/M}} \left(-\frac{\partial x_a}{\partial \dot{x}_b} \right)^{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar/M}} \left(-\frac{\partial \dot{x}_b}{\partial x_a} \right)^{1/2}. \quad (2.263)$$

接下来要计算经典作用量 \mathcal{A}_{cl} ，可以利用等式 (2.153) 至(2.157)相同的方法来完成。通过部分积分，我们有

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \frac{M}{2} (x_b \dot{x}_b - x_a \dot{x}_a). \quad (2.264)$$

充分利用在端点 x_b 和 x_a 处 \dot{x}_b 和 \dot{x}_a 线性相关性，我们重写可以得到

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \frac{M}{2} \left(x_b \frac{\partial \dot{x}_b}{\partial x_b} x_b - x_a \frac{\partial \dot{x}_a}{\partial x_a} x_a + x_b \frac{\partial \dot{x}_b}{\partial x_a} x_a - x_a \frac{\partial \dot{x}_a}{\partial x_b} x_b \right). \quad (2.265)$$

从(2.248) 和(2.249)中代入偏微分并且利用 $D_a(t_b)$ 和 $D_b(t_a)$ 的等式，我们得到经典作用量

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \frac{M}{2D_a(t_b)} [x_b^2 \dot{D}_a(t_b) - x_a^2 \dot{D}_b(t_a) - 2x_b x_a]. \quad (2.266)$$

注意：对于涨落行列式 D_{ren} 有另一个简单的公式：

$$D_{\text{ren}} = D_a(t_b) = D_b(t_a) = -M \left(\frac{\partial^2}{\partial x_b \partial x_a} \mathcal{A}_{\text{cl}} \right)^{-1}. \quad (2.267)$$

对于具有时间相关频率 ω 的谐振子，由于时间反演不变性，等式 (2.233)的Gelfand-Yaglom函数 $D_a(t)$ 具有性质(2.229)，并且(2.266)再次给出已知的结果(2.157)。

含有偏微分的表达式可以推广到 D 维的情况下：我们只需要将偏微分 $\partial x_b / \partial \dot{x}_a$, $\partial \dot{x}_b / \partial \dot{x}_a, \dots$ 替换成对应的 $D \times D$ 矩阵，并且将作用量写成写成相关的二次型。

涨落因子(2.262)在 D 维情况下为

$$F_\Omega(t_b, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar/M}^D} \left[\det \frac{\partial x_b^i}{\partial \dot{x}_a^j} \right]^{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar/M}^D} \left[\det \frac{\partial \dot{x}_a^i}{\partial x_b^j} \right]^{1/2}. \quad (2.268)$$

对于涨落因子的所有公式最初只对足够短的时间 $t_b - t_a$ 成立。对于较大时间，公式中带有之前(2.167)中确定的相位因子，完全定义表达式可以写成

$$F_\Omega(t_b, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar/M}^D} \left| \det \frac{\partial x_b^i}{\partial \dot{x}_a^j} \right|^{-1/2} e^{-i\nu\pi/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar/M}^D} \left| \det \frac{\partial \dot{x}_a^i}{\partial x_b^j} \right|^{1/2} e^{-i\nu\pi/2}, \quad (2.269)$$

这里， ν 是马斯洛-莫尔斯指标(Maslov-Morse index)。在一维的情况下，它是轨道的转向点，在多维的情况下，它表示的是沿着轨道在行列式 $\det \partial x_b^i / \partial \dot{x}_a^j$ 中的等于0的数目，前提是由于矩阵 $\partial x_b^i / \partial \dot{x}_a^j$ 的秩由于一个单元的减少而减少，因而产生了0。如果是多个单元的减少产生的话， ν 相应的增加。在这里， ν 也被称作轨道的莫尔斯指标(Morse index)。

函数行列式的零点也被称作共轭点 (conjugate points)。它们是一维系统下转向点的推广。 \mathbf{x} 空间下行列式消失的面称作焦散线 (caustics)。共轭点就处于轨道切触焦散线的位置。¹³

注意：对于无限短的时间，所有的涨落因子和经典作用量与自由粒子时的情形是一致的。显然，对于时间无关的谐振子在极限 $t_b \rightarrow t_a$ 下，振幅(2.175)简化为自由粒子时的公式 (2.130)。因为在无穷小时间下时间相关频率是常数，因此同样的结果在这里也是成立的。在无穷小时间下如下形式展开运动方程的解

$$\mathbf{x}_b \approx (t_b - t_a) \dot{\mathbf{x}}_a + \mathbf{x}_a, \quad \mathbf{x}_a \approx -(t_b - t_a) \dot{\mathbf{x}}_b + \mathbf{x}_b, \quad (2.270)$$

我们立即有

$$\frac{\partial x_b^i}{\partial \dot{x}_a^j} = \delta_{ij}(t_b - t_a), \quad \frac{\partial x_a^i}{\partial \dot{x}_b^j} = -\delta_{ij}(t_b - t_a). \quad (2.271)$$

同样的，展开式

$$\dot{\mathbf{x}}_b \approx \dot{\mathbf{x}}_a \approx \frac{\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a}{t_b - t_a} \quad (2.272)$$

给出

$$\frac{\partial \dot{x}_b^i}{\partial x_a^j} = -\delta_{ij} \frac{1}{t_b - t_a}, \quad \frac{\partial \dot{x}_a^i}{\partial x_b^j} = \delta_{ij} \frac{1}{t_b - t_a}. \quad (2.273)$$

将展开式(2.271) 或(2.272) 代入(2.264) (在 D 维下)，作用量近似简化为自由粒子的作用量

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} \approx \frac{M}{2} \frac{(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)^2}{t_b - t_a}. \quad (2.274)$$

2.5.2 动量空间

我们也可以在动量空间下得到时间演化振幅。为此，我们经典作用量(2.265)写成二次方形式

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \frac{M}{2} (\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a) A \begin{pmatrix} \mathbf{x}_b \\ \mathbf{x}_a \end{pmatrix} \quad (2.275)$$

¹³See M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer, Berlin, 1990.

其中有矩阵

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial \dot{x}_b}{\partial x_b} & \frac{\partial \dot{x}_b}{\partial x_a} \\ -\frac{\partial \dot{x}_a}{\partial x_b} & -\frac{\partial \dot{x}_a}{\partial x_a} \end{pmatrix}. \quad (2.276)$$

矩阵的逆是

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_b}{\partial \dot{x}_b} & -\frac{\partial x_b}{\partial \dot{x}_a} \\ \frac{\partial x_a}{\partial \dot{x}_b} & -\frac{\partial x_a}{\partial \dot{x}_a} \end{pmatrix}. \quad (2.277)$$

从齐次微分方程2.216)的解可以计算出 x_b 和 x_a 的偏微分，并且是以初速度 \dot{x}_b 和末速度 \dot{x}_a 的形式给出的：

$$\begin{aligned} x(\dot{x}_b, \dot{x}_a; t) &= \frac{1}{\dot{D}_a(t_b)\dot{D}_b(t_a) + 1} \\ &\times \left\{ \left[D_a(t) + D_b(t)\dot{D}_a(t_b) \right] \dot{x}_a + \left[-D_b(t) + D_a(t)\dot{D}_b(t_a) \right] \dot{x}_b \right\}, \end{aligned} \quad (2.278)$$

从而给出

$$x_a = \frac{1}{\dot{D}_a(t_b)\dot{D}_b(t_a) + 1} \left[D_b(t_a)\dot{D}_a(t_a)\dot{x}_b - D_b(t_a)\dot{x}_b \right], \quad (2.279)$$

$$x_b = \frac{1}{\dot{D}_a(t_b)\dot{D}_b(t_a) + 1} \left[D_a(t_b)\dot{x}_a + D_a(t_b)\dot{D}_b(t_a)\dot{x}_b \right], \quad (2.280)$$

因此

$$A^{-1} = \frac{D_a(t_b)}{\dot{D}_a(t_b)\dot{D}_b(t_a) + 1} \begin{pmatrix} \dot{D}_b(t_a) & -1 \\ -1 & -\dot{D}_a(t_b) \end{pmatrix}. \quad (2.281)$$

A 的行列式是雅可比行列式 (Jacobian)

$$\det A = -\frac{\partial(\dot{x}_b, \dot{x}_a)}{\partial(x_b, x_a)} = -\frac{\dot{D}_a(t_b)\dot{D}_b(t_a) + 1}{D_a(t_b)D_b(t_a)}. \quad (2.282)$$

现在我们可以进行时间演化算符的傅里叶变换，通过完成平方式的计算，得到

$$\begin{aligned} (p_b t_b | p_a t_a) &= \int dx_b e^{-ip_b x_b / \hbar} \int dx_a e^{ip_a x_a / \hbar} (x_b t_b | x_a t_a) \\ &= \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{iM}} \sqrt{\frac{D_a(t_b)}{\dot{D}_a(t_b)\dot{D}_b(t_a) + 1}} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2M} \frac{D_a(t_b)}{\dot{D}_a(t_b)\dot{D}_b(t_a) + 1} \left[-\dot{D}_b(t_a)p_b^2 + \dot{D}_a(t_b)p_a^2 - 2p_b p_a \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.283)$$

在这里代入 $D_a(t_b) = \sin \omega(t_b - t_a)/\omega$ 和 $\dot{D}_a(t_b) = \cos \omega(t_b - t_a)$ ，于是我们再次得到振子的结果(2.187)。

在 D 维下，经典作用量具有和(2.275)相同的平方形式

$$\mathcal{A}_{cl} = \frac{M}{2} (\mathbf{x}_b^T, \mathbf{x}_a^T) \mathbf{A} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_b \\ \mathbf{x}_a \end{pmatrix} \quad (2.284)$$

相应的, (2.276)中矩阵 \mathbf{A} 中的偏微分用所对应的的 $D \times D$ 矩阵来代替。矩阵 \mathbf{A} 的逆(2.277)的推广形式是如下 $2D \times 2D$ 的矩阵, 即

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \dot{\mathbf{x}}_b}{\partial \mathbf{x}_b} & \frac{\partial \dot{\mathbf{x}}_b}{\partial \mathbf{x}_a} \\ -\frac{\partial \dot{\mathbf{x}}_a}{\partial \mathbf{x}_b} & -\frac{\partial \dot{\mathbf{x}}_a}{\partial \mathbf{x}_a} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{x}_b}{\partial \dot{\mathbf{x}}_b} & -\frac{\partial \mathbf{x}_b}{\partial \dot{\mathbf{x}}_a} \\ \frac{\partial \mathbf{x}_a}{\partial \dot{\mathbf{x}}_b} & -\frac{\partial \mathbf{x}_a}{\partial \dot{\mathbf{x}}_a} \end{pmatrix}. \quad (2.285)$$

这样的一个分块矩阵

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (2.286)$$

我们计算其行列式时可以利用三角分解

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ c & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & a^{-1}b \\ 0 & d - ca^{-1}b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & b \\ 0 & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a - bd^{-1}c & 0 \\ d^{-1}c & 1 \end{pmatrix} \quad (2.287)$$

有如下两种可能的方式

$$\det \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \det a \cdot \det (d - ca^{-1}b) = \det (a - bd^{-1}c) \cdot \det d, \quad (2.288)$$

由 $\det a$ 或者 $\det b$ 是非零来决定是上面的哪一种方式。在第一种情况下, \mathbf{A} 的逆为

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -a^{-1}bx \\ 0 & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^{-1} & 0 \\ -ca^{-1} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^{-1} + a^{-1}bxa^{-1} - a^{-1}bx \\ -xca^{-1} & x \end{pmatrix}, \quad x \equiv (d - ca^{-1}b)^{-1}. \quad (2.289)$$

因此, 动量空间下的振幅是

$$\begin{aligned} (\mathbf{p}_b t_b | \mathbf{p}_a t_a) &= \int dx_b e^{-i\mathbf{p}_b \mathbf{x}_b / \hbar} \int dx_a e^{i\mathbf{p}_a \mathbf{x}_a / \hbar} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) \\ &= \frac{2\pi}{\sqrt{2\pi i \hbar M}} \frac{1}{\sqrt{D_{\text{ren}} \det \mathbf{A}}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2M} \left[(\mathbf{p}_b^T, \mathbf{p}_a^T) \mathbf{A}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{p}_b \\ \mathbf{p}_a \end{pmatrix} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.290)$$

同样的, 在动量空间下, 取无穷小时间 $t_b - t_a$ 的极限则振幅(2.290)简化为等式Eq. (2.138)中自由粒子的情况: 对于时间无关谐振子, 在等式(2.189)中已给出证明, 而对于时间相关的 $\Omega(t)$ 在小的 $t_b - t_a \rightarrow 0$ 极限下变得与时间不相关了。

2.6 自由粒子和振子波函数

在等式(1.331)中我们把自由粒子的时间演化振幅(2.71)表示成傅里叶积分的形式

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)} e^{ip(x_b - x_a)/\hbar} e^{-ip^2(t_b - t_a)/2M\hbar}. \quad (2.291)$$

这个表达式包含系统所有定态的信息。为了找到这些态, 我们必须对振幅进行谱分析。通过回顾1.7节, 一个任意的时间无关的系统的振幅具有谱表示的形式

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x_b) \psi_n^*(x_a) e^{-iE_n(t_b - t_a)/\hbar}, \quad (2.292)$$

这里, E_n 是定态的本证值, $\psi_n(x)$ 是定态的波函数。对于自由粒子的情况, 谱是连续的, 对谱求和实际上就是积分。比较(2.292) 和(2.291) 我们发现傅里叶分解本身就是谱表示。如果对 n 的求和可以写成对动量的积分, 我们能确定波函数为

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx}. \quad (2.293)$$

对于谐振子的时间演化算符

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar \sin [\omega(t_b - t_a)] / M\omega}} \times \exp \left\{ \frac{iM\omega}{2\hbar \sin [\omega(t_b - t_a)]} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega(t_b - t_a) - 2x_b x_a] \right\}, \quad (2.294)$$

这个求解过程并不能直接得到。这里我们必须利用梅勒 (Mehler) 提出的关于埃尔米特多项式 (*Hermite polynomials*) (见Appendix 2C) $H_n(x)$ 的求和公式:¹⁴

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{1-a^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2(1-a^2)} [(x^2 + x'^2)(1+a^2) - 4xx'a] \right\} \\ &= \exp(-x^2/2 - x'^2/2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{2^n n!} H_n(x) H_n(x'), \end{aligned} \quad (2.295)$$

有

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 4x^2 - 2, \dots, \quad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}. \quad (2.296)$$

令

$$x \equiv \sqrt{M\omega/\hbar} x_b, \quad x' \equiv \sqrt{M\omega/\hbar} x_a, \quad a \equiv e^{-i\omega(t_b - t_a)}, \quad (2.297)$$

所以有

$$\frac{a}{1-a^2} = \frac{1}{2i \sin [\omega(t_b - t_a)]}, \quad \frac{1+a^2}{1-a^2} = \frac{1+e^{-2i\omega(t_b - t_a)}}{1-e^{-2i\omega(t_b - t_a)}} = \frac{\cos [\omega(t_b - t_a)]}{i \sin [\omega(t_b - t_a)]}$$

我们得到谱表示形式

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x_b) \psi_n(x_a) e^{-i(n+1/2)\omega(t_b - t_a)}. \quad (2.298)$$

从这里, 我们可以推断谐振子的能量本证值是

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2) \quad (2.299)$$

¹⁴See P.M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York, Vol. I, p. 781 (1953).

并且波函数是

$$\psi_n(x) = N_n \lambda_\omega^{-1/2} e^{-x^2/2\lambda_\omega^2} H_n(x/\lambda_\omega). \quad (2.300)$$

这里, λ_ω 是振子的自然长度标度 (natural length scale)

$$\lambda_\omega \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}, \quad (2.301)$$

N_n 是归一化常数

$$N_n = (1/2^n n! \sqrt{\pi})^{1/2}. \quad (2.302)$$

容易验证, 波函数满足正交关系式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n(x) \psi_{n'}(x)^* = \delta_{nn'}, \quad (2.303)$$

其中要用到著名的埃尔米特多项式 (Hermite polynomials) 的正交关系¹⁵

$$\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_{n'}(x) = \delta_{n,n'}. \quad (2.304)$$

2.7 一般的时间相关谐作用量

具有时间相关频率的谐振子也可以推广到具有时间相关的质量, 于是作用量(2.305)变成

$$\mathcal{A}[x] = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} [g(t) \dot{x}^2(t) - \Omega^2(t) x^2(t)], \quad (2.305)$$

$g(t)$ 是与维数无关但与时间相关的因子的。这个因子改变了路径积分的测度, 从而使得时间演化振幅不再由(2.258) 计算得到。为了得到正确的测度, 我们必须回到正则路径积分(2.29)上, 现在变成

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}'x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} e^{i\mathcal{A}[p,x]/\hbar}, \quad (2.306)$$

正则作用量为

$$\mathcal{A}[p, x] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[p \dot{x} - \frac{p^2}{2Mg(t)} - \frac{M}{2} \Omega^2(t) x^2(t) \right]. \quad (2.307)$$

同等式 (2.49)–(2.51)一样, 我们积掉这个路径积分分割形式下的动量变量, 给出

$$(x_b t_b | x_a t_a) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/Mg(t_{N+1})}} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/Mg(t_n)}} \right] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}^N\right). \quad (2.308)$$

在连续极限下, 路径积分可以写为

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int \mathcal{D}x \sqrt{g} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}[x]\right\}, \quad (2.309)$$

其中含有(2.305)形式下的作用量。

经典轨道求解运动方程

$$[-\partial_t g(t) \partial_t - \Omega^2(t)] x(t) = 0, \quad (2.310)$$

¹⁵I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *op. cit.*, Formula 7.374.1.

作如下变换

$$\tilde{x}(t) = \sqrt{g(t)}x(t), \quad \tilde{\Omega}^2(t) = \frac{1}{g(t)} \left[\Omega^2(t) + \frac{\dot{g}^2(t)}{4g(t)} - \frac{\ddot{g}(t)}{2} \right], \quad (2.311)$$

可以简化为以前的形式

$$\sqrt{g(t)} \left[-\partial_t^2 - \tilde{\Omega}^2(t) \right] \tilde{x}(t) = 0. \quad (2.312)$$

因此，路径积分的结果是

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int \mathcal{D}x \sqrt{g} e^{i\mathcal{A}[x]/\hbar} = F(x_b, t_b; x_a, t_a) e^{i\mathcal{A}_{\text{cl}}/\hbar}, \quad (2.313)$$

其中，涨落因子为[对比(2.261)]

$$F(x_b, t_b; x_a, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar/M}} \frac{1}{\sqrt{D_a(t_b)}}, \quad (2.314)$$

$D_a(t_b)$ 可以通过公式(2.262)–(2.267)的推广得到。经典作用量是

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \frac{M}{2} (g_b x_b \dot{x}_b - g_a x_a \dot{x}_a), \quad (2.315)$$

这里 $g_b \equiv g(t_b)$, $g_a \equiv g(t_a)$ 。运动方程的解可以通过修改后Gelfand-Yaglom 函数(2.226)和(2.227)的形式来表示，并且具有如下的性质

$$[\partial_t g(t) \partial_t + \Omega^2(t)] D_a(t) = 0; \quad D_a(t_a) = 0, \quad \dot{D}_a(t_a) = 1/g_a, \quad (2.316)$$

$$[\partial_t g(t) \partial_t + \Omega^2(t)] D_b(t) = 0; \quad D_b(t_b) = 0, \quad \dot{D}_b(t_b) = -1/g_b, \quad (2.317)$$

同等式(2.246)一样：

$$x(x_b, x_a; t) = \frac{D_b(t)}{D_b(t_a)} x_a + \frac{D_a(t)}{D_a(t_b)} x_b. \quad (2.318)$$

因此我们可以将经典作用量(2.315)写为如下形式

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \frac{M}{2D_a(t_b)} \left[g_b x_b^2 \dot{D}_a(t_b) - g_a x_a^2 \dot{D}_b(t_a) - 2x_b x_a \right]. \quad (2.319)$$

类似在等式(2.267)中，我们可以得到

$$D_{\text{ren}} = D_a(t_b) = D_b(t_a) = -M \left(\frac{\partial^2 \mathcal{A}_{\text{cl}}}{\partial x_b \partial x_a} \right)^{-1}, \quad (2.320)$$

因此涨落因子变为

$$F(x_b, t_b; x_a, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar}} \sqrt{-\frac{\partial^2 \mathcal{A}_{\text{cl}}}{\partial x_b \partial x_a}}. \quad (2.321)$$

例如，对于具有时间相关质量项的自由粒子，有

$$D_a(t) = \int_{t_a}^t dt' g^{-1}(t'), \quad D_b(t) = \int_t^{t_b} dt' g^{-1}(t'), \quad D_{\text{ren}} = D_a(t_b) = D_b(t_a) = \int_{t_a}^{t_b} dt' g^{-1}(t'), \quad (2.322)$$

并且经典作用量是

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \frac{M}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{D_a(t_b)}. \quad (2.323)$$

结果可以很容易的推广到对于任意的谐作用量

$$\mathcal{A} = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} [g(t)\dot{x}^2 + 2b(t)x\dot{x} - \Omega^2(t)x^2], \quad (2.324)$$

利用欧拉-拉格朗日方程 (Euler-Lagrange equation) [见(1.8)], 可以得到

$$[\partial_t g(t)\partial_t + \dot{b}(t) + \Omega^2(t)]x = 0. \quad (2.325)$$

路径积分(2.313)的解再次得到, 具有涨落因子(2.321), 这里, \mathcal{A}_{cl} 是沿着连接端点的经典路径的作用量。

采用 2.4.6 小节的步骤可以进一步推广到 D 维的情况, 这就使得方程(2.316)–(2.318)变成矩阵方程。

2.8 路径积分和量子统计

路径积分的方法 对于理解一个系统的热平衡性质也是很有用的。我们假定系统具有时间无关的哈密顿量, 并且与一个温度为 T 的水箱接触。1.7节已给出解释, 大部分热力学量可以利用量子统计配分函数来确定

$$Z = \text{Tr} \left(e^{-\hat{H}/k_B T} \right) = \sum_n e^{-E_n/k_B T}. \quad (2.326)$$

这可以看作是量子力学配分函数的解析连续 (analytic continuation)

$$Z_{\text{QM}} = \text{Tr} \left(e^{-i(t_b-t_a)\hat{H}/\hbar} \right) \quad (2.327)$$

是关于时间

$$t_b - t_a = -\frac{i\hbar}{k_B T} \equiv -i\hbar\beta. \quad (2.328)$$

在定域粒子基 $|x\rangle$ 下, 粒子力学求迹相当于关于对所有位移求积分, 从而通过对 $x_b = x_a$ 作时间演化振幅的积分得到量子统计配分函数, 并且在解析的延续时间下计算:

$$Z \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx z(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x | e^{-\beta\hat{H}} | x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x t_b | x t_a) |_{t_b-t_a=-i\hbar\beta}. \quad (2.329)$$

对角元

$$z(x) \equiv \langle x | e^{-\beta\hat{H}} | x \rangle = (x t_b | x t_a) |_{t_b-t_a=-i\hbar\beta} \quad (2.330)$$

作为配分函数密度 (*partition function density*)。对于谐振子, 这个量有明确的形式[回顾(2.173)]

$$z_{\omega}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar/M}} \sqrt{\frac{\omega}{\sinh \hbar\beta\omega}} \exp \left\{ -\frac{M\omega}{\hbar} \tanh \frac{\hbar\beta\omega}{2} x^2 \right\}. \quad (2.331)$$

将波尔兹曼因子 $e^{-\beta \hat{H}}$ 分成 $N+1$ 个 $e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar}$ 因子的乘积，其中 $\epsilon = \hbar/k_B T(N+1)$ ，如同(2.40), (2.46)中对应的量子力学配分函数那样，我们能够得到 Z 的路径积分形式：

$$Z \equiv \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \times \langle x_{N+1} | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | x_N \rangle \langle x_N | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | x_{N-1} \rangle \times \dots \times \langle x_2 | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | x_{N+1} \rangle. \quad (2.332)$$

和量子力学情况下一样，矩阵元 $\langle x_n | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | x_{n-1} \rangle$ 重新表达成如下形式

$$\langle x_n | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | x_{n-1} \rangle \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{ip_n(x_n - x_{n-1})/\hbar - \epsilon H(p_n, x_n)/\hbar}, \quad (2.333)$$

唯一的不同就是现在的形式下在哈密顿量前面没有虚部因子 i 。因此，乘积式(2.332)可以写成

$$Z \approx \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_e^N \right), \quad (2.334)$$

这里 \mathcal{A}_e^N 表示求和式

$$\mathcal{A}_e^N = \sum_{n=1}^{N+1} [-ip_n(x_n - x_{n-1}) + \epsilon H(p_n, x_n)]. \quad (2.335)$$

在连续极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 下，求和变成积分

$$\mathcal{A}_e[p, x] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau [-ip(\tau)\dot{x}(\tau) + H(p(\tau), x(\tau))], \quad (2.336)$$

于是，配分函数以路径积分的形式给出

$$Z = \int \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} e^{-\mathcal{A}_e[p, x]/\hbar}. \quad (2.337)$$

在这个表达式里， $p(\tau), x(\tau)$ 可以看作是沿着虚时间轴 $\tau = it$ 跑动的路径。表达式 $\mathcal{A}_e[p, x]$ 和经典力学正则作用量(20.230)很类似。因为它控制着量子统计路径积分，所以称其为量子统计作用量 (*quantum-statistical action*) 或是欧几里得作用量 (*Euclidean action*)，用下标 e 来标记。这个名称提及到这样的一个事实，那就是一个 D 维欧氏空间扩展一维虚时间轴 $\tau = it$ 和 $D+1$ 维欧氏空间有一样的几何性质。例如，闵科夫斯基时空下一个四矢量的平方长度是 $dx^2 = -(cdt)^2 + (d\mathbf{x})^2$ 。延续到虚实空间下，这个长度变成 $dx^2 = (cd\tau)^2 + (d\mathbf{x})^2$ ，这就是四矢量 $(c\tau, \mathbf{x})$ 在欧氏四维空间下的平方长度。

欧氏作用量(2.337)的被积函数是欧几里得拉格朗日量 (*Euclidean Lagrangian*) L_e 。这个量可以通过欧几里得勒让德变换 (*Euclidean Legendre transform*) 来与哈密顿量联系[对比(1.9)]

$$H = L_e + i \frac{\partial L_e}{\partial \dot{x}} \dot{x} = L_e + ip\dot{x} \quad (2.338)$$

在这里消去 \dot{x} 因为有 $p = \partial L_e / \partial \dot{x}$ [对比(1.10)]。

如同量子力学配分函数(2.46)的路径积分，在量子统计表达式(2.337)中，积分式 $\oint \mathcal{D}x \int \mathcal{D}p / 2\pi\hbar$ 的测度自然的关于所有的 p 和 x 对称：

$$\oint \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} = \oint \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \int \mathcal{D}x = \prod_{n=1}^{N+1} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n dp_n}{2\pi\hbar}. \quad (2.339)$$

当然，这个对称性是由于迹的积分是关于所有初始位移等于最终位移下的。

大多数与等式(2.46)有关的评论在当前的情况下也是适用的。以上的路径积分(2.337)是经典统计力学规则的自然扩展。根据这些，相位空间下的每一个单元 $dx dp / h$ 被相等的统计权重所占据，并且具有概率因子 $e^{-E/k_B T}$ 。在量子统计里，所有粒子的路径最终在路径相位空间(*path phase space*) $\prod_n dx(\tau_n) dp(\tau_n) / h(\tau_n \equiv n\epsilon)$ 下关于单元涨落，每一个路径含有一个概率因子 $e^{-A_e/\hbar}$ 并且还包含着系统的欧氏作用量。

2.9 密度矩阵

配分函数没有确定所有的定域热力学量。重要的定域信息存在于时间演化振幅 $\langle x_b | e^{-\hat{H}/k_B T} | x_a \rangle$ 的热类似物里。例如，考虑这个振幅的对角元， Z^{-1} 是归一化因子：

$$\rho(x_a) \equiv Z^{-1} \langle x_a | e^{-\hat{H}/k_B T} | x_a \rangle. \quad (2.340)$$

它们确定一个量子统计系统的粒子密度的热平均值。由于(2.332)，因子 Z^{-1} 使得关于 ρ 的空间积分等于单位1：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) = 1. \quad (2.341)$$

将哈密顿算符 \hat{H} 的本证函数 $\psi_n(x)$ 的完备集插入(2.340)中，我们得到谱分解

$$\rho(x_a) = \sum_n |\psi_n(x_a)|^2 e^{-\beta E_n} / \sum_n e^{-\beta E_n}. \quad (2.342)$$

因为 $|\psi_n(x_a)|^2$ 是系统在本证态 $|n\rangle$ 的概率分布，并且比值 $e^{-\beta E_n} / \sum_n e^{-\beta E_n}$ 是系统在态 $|n\rangle$ 下的归一化的概率，所以 $\rho(x_a)$ 这个量表示空间下归一化的平均粒子密度，是关于温度的函数。

注意 $\rho(x_a)$ 的限制性质。在极限 $T \rightarrow 0$ 下，只有最低能态保留着，并且 $\rho(x_a)$ 趋向于基态的粒子分布

$$\rho(x_a) \xrightarrow{T \rightarrow 0} |\psi_0(x_a)|^2. \quad (2.343)$$

在高温相反的极限下，预计量子效应变得不相关，并且配分函数应当趋于经典表达式(1.535)，该表达式是关于波尔兹曼分布的相位空间的积分

$$Z \xrightarrow{T \rightarrow \infty} Z_{\text{cl}} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-H(p,x)/k_B T}. \quad (2.344)$$

因此，我们期望 $\rho(x)$ 在大 T 极限下等于经典粒子分布 (*classical particle distribution*)

$$\rho(x) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \rho_{\text{cl}}(x) = Z_{\text{cl}}^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-H(p,x)/k_B T}. \quad (2.345)$$

在路径积分方法中，我们将在 2.13 节里更加详细的讨论这个极限。在这里，我们粗略的作如下讨论：当在大 T 夏进行最初的时间分割路径积分(2.332)时，即小的 $\tau_b - \tau_a = \hbar/k_B T$ 下，我们可以只保留一个时间分割片，因此可以写为

$$Z \approx \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx \right] \langle x | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | x \rangle, \quad (2.346)$$

其中有

$$\langle x | e^{-\epsilon \hat{H}} | x \rangle \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{-\epsilon H(p_n, x)/\hbar}. \quad (2.347)$$

通过替代 $\epsilon = \tau_b - \tau_a$ 后，可以直接给出(2.345)。从物理上说，高温下路径没有（虚）时间进行涨落，并且只需要考虑积分乘积式里的一项。

如果 $H(p, x)$ 具有标准形式

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2M} + V(x), \quad (2.348)$$

动量积分是 the momentum integral is 在 p 下的高斯型积分，可以利用以下公式来完成

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-ap^2/2\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar a}}. \quad (2.349)$$

对于经典配分函数，这就导致纯 x 的积分

$$Z_{\text{cl}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar^2/M k_B T}} e^{-V(x)/k_B T} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{l_e(\hbar\beta)} e^{-\beta V(x)}. \quad (2.350)$$

在第二个表达式中，我们引入长度

$$l_e(\hbar\beta) \equiv \sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}. \quad (2.351)$$

这是之前在(2.126)引入的特征长度 $l(t_b - t_a)$ 的热（或欧氏）类似物。我们称它为与温度 $T = 1/k_B\beta$ 相关的德布罗意波长 (*de Broglie wavelength*)，或者，简称，热德布罗意波长 (*thermal de Broglie wavelength*)。

忽略(2.350)中的 x 积分给出大 T 极限下的 $\rho(x)$, 所以经典粒子的分布为

$$\rho(x) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \rho_{\text{cl}}(x) = Z_{\text{cl}}^{-1} \frac{1}{l_e(\hbar\beta)} e^{-\bar{V}(x)}. \quad (2.352)$$

对于自由粒子, (2.350)中关于 x 的积分是发散的。如果我们假定 x 轴的长度很大但是有限的, 等于 L , 则配分函数等于

$$Z_{\text{cl}} = \frac{L}{l_e(\hbar\beta)}. \quad (2.353)$$

在 D 维情况下, 变成

$$Z_{\text{cl}} = \frac{V_D}{l_e^D(\hbar\beta)}, \quad (2.354)$$

这里, V_D 是 D 维系统的体积。对于具有 $M\omega^2 x^2/2$ 势的谐振子, (2.350)中关于 x 的积分是有限的, 在 D 维推广下给出

$$Z_{\text{cl}} = \frac{l_\omega^D}{l^D(\hbar\beta)}, \quad (2.355)$$

这里

$$l_\omega \equiv \sqrt{\frac{2\pi}{\beta M\omega^2}} \quad (2.356)$$

表示由谐振子频率确定的经典长度标度。它与等式(2.301)中的量子力学的 λ_ω 有如下关系

$$l_\omega l_e(\hbar\beta) = 2\pi \lambda_\omega^2. \quad (2.357)$$

这样, 通过由谐振子的配分函数转到自由粒子的配分函数, 我们得到记忆规则 (*mnemonic rule*), 我们必须进行简单的替换

$$l_\omega \xrightarrow[\omega \rightarrow 0]{} L, \quad (2.358)$$

或者

$$\frac{1}{\omega} \xrightarrow[\omega \rightarrow 0]{} \sqrt{\frac{\beta M}{2\pi}} L. \quad (2.359)$$

当然, 关于实的时间形式如下

$$\frac{1}{\omega} \xrightarrow[\omega \rightarrow 0]{} \sqrt{\frac{(t_b - t_a)M}{2\pi\hbar}} L. \quad (2.360)$$

我们可以写出 $\rho(x)$ 的路径积分形式。忽略(2.337)中关于 $x_b \equiv x_a$ 的最终的迹积分, 并且用因子 Z^{-1} 来归一化, 所以得到

$$\begin{aligned} \rho(x_a) &= Z^{-1} \int_{x(0)=x_a}^{x(\hbar\beta)=x_b} \mathcal{D}'x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} e^{-\mathcal{A}_e[p,x]/\hbar} \\ &= Z^{-1} \int_{x(0)=x_a}^{x(\hbar\beta)=x_b} \mathcal{D}x e^{-\mathcal{A}_e[x]/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.361)$$

一个任意的厄米算符 \hat{O} 的热平衡期望值是

$$\langle \hat{O} \rangle_T \equiv Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{O} | n \rangle. \quad (2.362)$$

在定域基 $|x\rangle$ 下，变成

$$\langle \hat{O} \rangle_T = Z^{-1} \iint_{-\infty}^{\infty} dx_b dx_a \langle x_b | e^{-\beta \hat{H}} | x_a \rangle \langle x_a | \hat{O} | x_b \rangle. \quad (2.363)$$

位移算符 \hat{x} 的一个任意的函数具有期望值

$$\langle f(\hat{x}) \rangle_T = Z^{-1} \iint_{-\infty}^{\infty} dx_b dx_a \langle x_b | e^{-\beta \hat{H}} | x_a \rangle \delta(x_b - x_a) f(x_a) = \int dx \rho(x) f(x). \quad (2.364)$$

粒子密度 $\rho(x_a)$ 确定定域观测量的热平均。

如果 f 也依赖于动量算符 \hat{p} ，那么非对角矩阵元 $\langle x_b | e^{-\beta \hat{H}} | x_a \rangle$ 也是需要的。它们包含在等式(1.221)为纯量子系统引入的密度矩阵中，现在是在温度为 T 的热系综里：

$$\rho(x_b, x_a) \equiv Z^{-1} \langle x_b | e^{-\beta \hat{H}} | x_a \rangle, \quad (2.365)$$

其对角值和上面的粒子密度 $\rho(x_a)$ 相同。

将量子力学和量子统计尽可能密切的类比，并且沿着虚的时间轴引入时间平移算符，这是很有用的。

$$\hat{U}_e(\tau_b, \tau_a) \equiv e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}/\hbar}, \quad \tau_b > \tau_a, \quad (2.366)$$

确定它的定域矩阵元作为虚的 (*imaginary*) 或者欧氏 (*Euclidean*) 时间演化振幅

$$(x_b \tau_b | x_a \tau_a) \equiv \langle x_b | \hat{U}_e(\tau_b, \tau_a) | x_a \rangle, \quad \tau_b > \tau_a. \quad (2.367)$$

如同在实的时间的情况下，我们只考虑因果时间顺序 $\tau_b > \tau_a$ 。否则，配分函数和密度矩阵在能量达到无穷的系统下将不存在。给出虚时间振幅，我们可以通过作关于对角元的积分来找到配分函数

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x \hbar \beta | x 0), \quad (2.368)$$

密度矩阵是

$$\rho(x_b, x_a) = Z^{-1} (x_b \hbar \beta | x_a 0). \quad (2.369)$$

为了一般性，我们有时也要考虑与时间有关的哈密顿量和相关振幅的虚时间演化算符。通过算符的时间分割定域矩阵元来得到演化算符

$$\hat{U}(\tau_b, \tau_a) = T_\tau \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \hat{H}(-i\tau) \right]. \quad (2.370)$$

这里， T_τ 是沿着虚时间轴的编时算符。

必须强调：算符(2.370)在描述热力学现象的有效性限制在对非常微弱的依赖物理时间 t 的哈密顿算符 $\hat{H}(t)$ 上。系统必须在所有的时间点上保持接近平衡。这就是被称作为线性响应理论 (*linear response theory*) 有效性的范围(更多细节见第18章)。

虚时间演化振幅(2.367)具有路径积分表示，可以通过如下方式得到，丢掉(2.334)中最后的积分并且放宽条件 $x_b = x_a$:

$$(x_b \tau_b | x_a \tau_a) \approx \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \exp \left(-\mathcal{A}_e^N / \hbar \right). \quad (2.371)$$

时间分割欧氏作用量为

$$\mathcal{A}_e^N = \sum_{n=1}^{N+1} [-ip_n(x_n - x_{n-1}) + \epsilon H(p_n, x_n, \tau_n)] \quad (2.372)$$

(我们已经在 H 的 τ -讨论下忽略了因子 $-i$)。在连续极限下，写成路径积分为

$$(x_b \tau_b | x_a \tau_a) = \int \mathcal{D}'x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_e[p, x] \right\} \quad (2.373)$$

[通过类比(2.337)]。对于一个具有(2.7)标准形式的哈密顿量，

$$H(p, x, \tau) = \frac{p^2}{2M} + V(x, \tau),$$

具有平滑的势 $V(x, \tau)$ ，动量可以积掉，就像在(2.51)中一样，并且纯 x 空间下的路径积分(2.52)的欧氏形式给出(2.53):

$$\begin{aligned} (x_b \tau_b | x_a \tau_a) &= \int \mathcal{D}x \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} (\partial_\tau x)^2 + V(x, \tau) \right] \right\} \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\beta/M}} \right] \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \epsilon \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 + V(x_n, \tau_n) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.374)$$

由此，我们计算量子统计配分函数

$$\begin{aligned} Z &= \int_{-\infty}^{\infty} dx (x \hbar\beta | x 0) \\ &= \int dx \int_{x(0)=x}^{x(\hbar\beta)=x} \mathcal{D}x e^{-\mathcal{A}_e[x]/\hbar} = \oint \mathcal{D}x e^{-\mathcal{A}_e[x]/\hbar}, \end{aligned} \quad (2.375)$$

这里， $\mathcal{A}_e[x]$ 是拉格朗日作用量的欧氏形式

$$\mathcal{A}_e[x] = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \left[\frac{M}{2} x'^2 + V(x, \tau) \right]. \quad (2.376)$$

撇号表示对虚时间求微分。就像(2.61中的量子力学配分函数，路径积分 $\oint \mathcal{D}x$ 现在表示

$$\oint \mathcal{D}x \approx \prod_{n=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}}. \quad (2.377)$$

比起等式(2.374)，它没有额外的 $1/\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}$ 因子，这是由于对外部的 x 作迹积分。

通过扩展 $x(\tau)$ 到傅里叶级数可以容易的保证条件 $x(\hbar\beta) = x(0)$

$$x(\tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{N+1}} e^{-i\omega_m \tau} x_m, \quad (2.378)$$

其中有松原频率 (Matsubara frequencies)

$$\omega_m \equiv 2\pi m k_B T / \hbar = \frac{2\pi m}{\hbar\beta}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots. \quad (2.379)$$

当在整个 τ 轴上视为函数考虑时，在任意的 τ 点路径是以 $\hbar\beta$ 为周期的，即

$$x(\tau) = x(\tau + \hbar\beta). \quad (2.380)$$

因此，对于量子统计配分函数的路径积分包含所有的以 $\hbar\beta$ 为周期的路径。在时间分割路径积分(2.374)下，坐标 $x(\tau)$ 只在离散的时间点 $\tau_n = n\epsilon$ 上需要。相对的，(2.378)中对 m 的求和限制在从 $m = -N/2$ 到 $N/2$ 这是对于偶数的 N ，对于奇数的 N ，求和限制在从 $-(N-1)/2$ 到 $(N+1)/2$ (见Fig. 2.3)。为了有一个实的 $x(\tau_n)$ ，我们必须要求

$$x_m = x_{-m}^* \pmod{N+1}. \quad (2.381)$$

注意：现在路径 $x(\tau)$ 展开式的松原频率 (Matsubara frequencies) 是量子涨落(2.110)中频率 ν_m 的两倍(将 $t_b - t_a$ 解析延续到 $-i\hbar/k_B T$ 之后)。然而，它们有相同的总数，因为都遍及正整数和负整数。一个例外是零频率 $\omega_m = 0$ ，是包含在这里的，相比之下，(2.110)中的频率 ν_m 是只在正的 $m = 1, 2, 3, \dots$ 下有取值。描述带有任意的非零端点 $x_b = x_a = x$ (包含在轨迹里) 的路径是必需的。

2.10 谐振子的量子统计

谐振子是一个解决量子统计路径积分的很好的例子。 τ -轴在 $\tau_n = n\epsilon$ 被分割，其中有 $\epsilon \equiv \hbar\beta/(N+1)$ ($n = 0, \dots, N+1$)，配分函数由极限 $N \rightarrow \infty$ 下的积分乘积式给出

$$Z_\omega^N = \prod_{n=0}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \right] \exp(-\mathcal{A}_e^N/\hbar), \quad (2.382)$$

这里， \mathcal{A}_e^N 是时间分割欧氏振子作用量 (time-sliced Euclidean oscillator action)

$$\mathcal{A}_e^N = \frac{M}{2\epsilon} \sum_{n=1}^{N+1} x_n (-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 \omega^2) x_n. \quad (2.383)$$

Figure 2.3 对于偶数和奇数的 N 下，作用量(2.383)中涨落矩阵的本证值(2.385)的图示。

积掉 x_n 后，我们立刻得到

$$Z_\omega^N = \frac{1}{\sqrt{\det_{N+1}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 \omega^2)}}. \quad (2.384)$$

我们通过本证值的乘积来计算涨落行列式，这些本证值使得分割作用量(2.383)中的矩阵 $-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 \omega^2$ 对角化。它们是

$$\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m + \epsilon^2 \omega^2 = 2 - 2 \cos \omega_m \epsilon + \epsilon^2 \omega^2, \quad (2.385)$$

其中， ω_m 是松原频率 (Matsubara frequencies)。对于 $\omega = 0$ 时，Fig. 2.3描绘了本证值的分布。当转到傅里叶分量 x_m 后，作用量(2.383)变成对角的。为了实现这个目的，我们将实部 $\text{Re } x_m$ 和虚部 $\text{Im } x_m$ 排列成一个行矢量

$$(\text{Re } x_1, \text{Im } x_1; \text{Re } x_2, \text{Im } x_2; \dots; \text{Re } x_n, \text{Im } x_n; \dots),$$

并且发现它通过以下的一个变换矩阵与时间分割位移 $x_n = x(\tau_n)$ 产生联系

$$\begin{aligned} T_{mn} x_n &= (T_m)_n x_n \\ &= \sqrt{\frac{2}{N+1}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \cos \frac{m}{N+1} 2\pi \cdot 1, \sin \frac{m}{N+1} 2\pi \cdot 1, \right. \\ &\quad \cos \frac{m}{N+1} 2\pi \cdot 2, \sin \frac{m}{N+1} 2\pi \cdot 2, \dots \\ &\quad \dots, \cos \frac{m}{N+1} 2\pi \cdot n, \sin \frac{m}{N+1} 2\pi \cdot n, \dots \left. \right)_n x_n. \end{aligned} \quad (2.386)$$

对于每一行，指标为 $m = 0, \dots, N$ ，当 N 是偶数时，列指标 n 是从0到 $N/2$ 的，当 N 是奇数时，列指标 n 是从0到 $(N+1)/2$ 。在奇数的情况下，由于 $n = (N+1)/2$ 所有最后一列 $\sin \frac{m}{N+1} 2\pi \cdot n$ 消失，必须要丢掉，这样的话，在 N 为奇数和偶数这两种情况下， T_{mn} 中列的数目都是 $N+1$ ，并且就应该是这样的。对于奇数的 N ， T_{mn} 的倒数第二列的结果交替等于 ± 1 。这样，对于一个适当的归一化，必须要乘上一个额外的归一化因子 $1/\sqrt{2}$ ，就像第一列中的元素那样。与(2.115)和(2.116)类似的讨论表明所得的矩阵是对角的。这样，我们能使分割作用量(2.383)对角化，如下所示

$$\mathcal{A}_e^N = \frac{M}{2} \epsilon \begin{cases} \left[\omega^2 x_0^2 + 2 \sum_{m=1}^{N/2} (\Omega_m \bar{\Omega}_m + \omega^2) |x_m|^2 \right] & \text{for } N = \text{偶数}, \\ \left[\omega^2 x_0^2 + (\Omega_{(N+1)/2} \bar{\Omega}_{(N+1)/2} + \omega^2) x_{N+1}^2 \right. \\ \left. + 2 \sum_{m=1}^{(N-1)/2} (\Omega_m \bar{\Omega}_m + \omega^2) |x_m|^2 \right] & \text{for } N = \text{奇数}. \end{cases} \quad (2.387)$$

由于 T_{mn} 的正交性，测度 $\prod_n \int_{-\infty}^{\infty} dx(\tau_n)$ 可以简单的变换为

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \prod_{m=1}^{N/2} \int_{-\infty}^{\infty} d \operatorname{Re} x_m \int_{-\infty}^{\infty} d \operatorname{Im} x_m \quad \text{for } N = \text{偶数},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx_{(N+1)/2} \prod_{m=1}^{(N-1)/2} \int_{-\infty}^{\infty} d \operatorname{Re} x_m \int_{-\infty}^{\infty} d \operatorname{Im} x_m \quad \text{for } N = \text{奇数}. \quad (2.388)$$

利用高斯积分，我们得到配分函数

$$Z_{\omega}^N = [\det_{N+1}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 \omega^2)]^{-1/2} = \left[\prod_{m=0}^N (\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m + \epsilon^2 \omega^2) \right]^{-1/2}$$

$$= \left\{ \prod_{m=0}^N [2(1 - \cos \omega_m \epsilon) + \epsilon^2 \omega^2] \right\}^{-1/2} = \left[\prod_{m=0}^N \left(4 \sin^2 \frac{\omega_m \epsilon}{2} + \epsilon^2 \omega^2 \right) \right]^{-1/2}. \quad (2.389)$$

由于本证值在替换 $n \rightarrow n + N + 1$ 下的周期性，对于偶数和奇数下的 N 结果都变成唯一的乘积表达式。

与实时间振幅的涨落因子(2.160)相反，配分函数(2.389)只包含正本证模的平方根，作为高斯积分的唯一结果。和菲涅耳积分式(1.333)一样，没有相位差。

为了计算乘积，我们知道

$$\sin^2 \frac{\omega_m \epsilon}{2} = \left(1 + \cos \frac{\omega_m \epsilon}{2} \right) \left(1 - \cos \frac{\omega_m \epsilon}{2} \right), \quad (2.390)$$

第一个因子的结果是

$$1 + \cos \frac{\omega_m \epsilon}{2} \equiv 1 + \cos \frac{\pi m}{N+1} \quad (2.391)$$

其中， $m = 1, \dots, N$ ，第二个因子的结果是

$$1 - \cos \frac{\omega_m \epsilon}{2} = 1 - \cos \frac{\pi m}{N+1} \equiv 1 + \cos \pi \frac{N+1-m}{N+1}, \quad (2.392)$$

这个两个结果的一系列取值是相同的，只是刚好是关于 m 反序。这样，分离出 $m=0$ 的项，我们改写(2.389)得到以下形式

$$Z_{\omega}^N = \frac{1}{\epsilon \omega} \left[\prod_{m=1}^N 2 \left(1 - \cos \frac{\omega_m \epsilon}{2} \right) \right]^{-1} \left[\prod_{m=1}^N \left(1 + \frac{\epsilon^2 \omega^2}{4 \sin^2 \frac{\omega_m \epsilon}{2}} \right) \right]^{-1/2}. \quad (2.393)$$

等式右边第一个因子是自由粒子行列式 $\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) = N+1$ 的量子力学涨落行列式[见(2.123)]，因此无论 N 是偶数还是奇数，我们得到

$$Z_{\omega}^N = \frac{k_B T}{\hbar \omega} \left[\prod_{m=1}^N \left(1 + \frac{\epsilon^2 \omega^2}{4 \sin^2 \frac{\omega_m \epsilon}{2}} \right) \right]^{-1/2}. \quad (2.394)$$

计算剩下的乘积项，我们必须再次按 N 是偶数还是奇数来分开讨论。对于偶数的 N ，每一个本证值出现两次(见Fig. 2.3)，我们得到

$$Z_{\omega}^N = \frac{k_B T}{\hbar \omega} \left[\prod_{m=1}^{N/2} \left(1 + \frac{\epsilon^2 \omega^2}{4 \sin^2 \frac{m \pi}{N+1}} \right) \right]^{-1}. \quad (2.395)$$

对于奇数的 N , 带有 $m = (N + 1)/2$ 的项只出现一次, 必须要单独处理, 因此

$$Z_\omega^N = \frac{k_B T}{\hbar\omega} \left[\left(1 + \frac{\epsilon^2 \omega^2}{4} \right)^{1/2} \prod_{m=1}^{(N-1)/2} \left(1 + \frac{\epsilon^2 \omega^2}{4 \sin^2 \frac{\pi m}{N+1}} \right) \right]^{-1}. \quad (2.396)$$

我们引入参数 $\tilde{\omega}_e$, 是(2.161)的欧氏类似物 (Euclidean analog), 通过以下等式引入

$$\sin i \frac{\tilde{\omega}_e \epsilon}{2} \equiv i \frac{\omega \epsilon}{2}, \quad \sinh \frac{\tilde{\omega}_e \epsilon}{2} \equiv \frac{\omega \epsilon}{2}. \quad (2.397)$$

在奇数情况下, 乘积公式¹⁶

$$\prod_{m=1}^{(N-1)/2} \left[1 - \frac{\sin^2 x}{\sin^2 \frac{m\pi}{(N+1)}} \right] = \frac{2}{\sin 2x} \frac{\sin[(N+1)x]}{(N+1)} \quad (2.398)$$

[与(2.163)类似]给出以下的公式, 其中有 $x = \tilde{\omega}_e \epsilon / 2$,

$$Z_\omega^N = \frac{k_B T}{\hbar\omega} \left[\frac{1}{\sinh(\tilde{\omega}_e \epsilon / 2)} \frac{\sinh[(N+1)\tilde{\omega}_e \epsilon / 2]}{N+1} \right]^{-1}. \quad (2.399)$$

在偶数情况下, 公式¹⁷

$$\prod_{m=1}^{N/2} \left[1 - \frac{\sin^2 x}{\sin^2 \frac{m\pi}{(N+1)}} \right] = \frac{1}{\sin x} \frac{\sin[(N+1)x]}{(N+1)}, \quad (2.400)$$

再次给出与等式(2.399)相同的结果。代入等式(2.397), 从而我们得到在分割虚时间轴 (sliced imaginary time axis) 上的配分函数:

$$Z_\omega^N = \frac{1}{2 \sinh(\hbar \tilde{\omega}_e \beta / 2)}. \quad (2.401)$$

配分函数可以展成如下的级数

$$Z_\omega^N = e^{-\hbar \tilde{\omega}_e / 2k_B T} + e^{-3\hbar \tilde{\omega}_e / 2k_B T} + e^{-5\hbar \tilde{\omega}_e / 2k_B T} + \dots. \quad (2.402)$$

通过与一般的谱展开式(2.326)比较, 我们给出系统的能量本征值:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \tilde{\omega}_e. \quad (2.403)$$

它们展现典型的线性增大的振子序列, 其中有

$$\tilde{\omega}_e = \frac{2}{\epsilon} \operatorname{arsinh} \frac{\omega \epsilon}{2} \quad (2.404)$$

是分隔时间轴上的频率, 并且 $\hbar \tilde{\omega}_e / 2$ 是零点能。

在连续极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 下, 时间分割配分函数 Z_ω^N 变成通常的振子配分函数

$$Z_\omega = \frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)}. \quad (2.405)$$

显然, 在 D 维下, 由于作用量在 \mathbf{x} 的每一个分量下的相加性, 这个结果变为 $[2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)]^{-D}$ 。

¹⁶I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, op. cit., Formula 1.391.1.

¹⁷ibid., formula 1.391.3.

注意：等式(2.394)中乘积的连续极限也可以逐个因子的考虑。于是 Z_ω 变为

$$Z_\omega = \frac{k_B T}{\hbar \omega} \left[\prod_{m=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\omega^2}{\omega_m^2} \right) \right]^{-1}. \quad (2.406)$$

根据公式(2.171)，乘积 $\prod_{m=1}^{\infty} \left(1 + \frac{x^2}{m^2 \pi^2} \right)$ 迅速的收敛于 $\sinh x/x$ ，由 $x = \hbar \omega \beta / 2$ ，我们发现

$$Z_\omega = \frac{k_B T}{\hbar \omega} \frac{\hbar \omega / 2k_B T}{\sinh(\hbar \omega / 2k_B T)} = \frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)}. \quad (2.407)$$

像在等式(2.181)之后的讨论一样，因为(2.394) 中的乘积只还有频率的比值，所以可以在每个因子中取连续极限。

和量子力学下的情况一样，得到连续极限的过程可以在方程的序列下总结出来，其中这些方程能得到微分算符的比值

$$\begin{aligned} Z_\omega^N &= [\det_{N+1}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 \omega^2)]^{-1/2} \\ &= [\det'_{N+1}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla})]^{-1/2} \left[\frac{\det_{N+1}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 \omega^2)}{\det'_{N+1}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla})} \right]^{-1/2} \\ &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{k_B T}{\hbar} \left[\frac{\det(-\partial_\tau^2 + \omega^2)}{\det'(-\partial_\tau^2)} \right]^{-1/2} = \frac{k_B T}{\hbar \omega} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\frac{\omega_m^2 + \omega^2}{\omega_m^2} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (2.408)$$

在 $\omega = 0$ 的行列式中，为了得到有限的表达式，要排除等于零的松原频率。加撇号来表明这一点。微分算符 $-\partial_\tau^2$ 作用在是函数上，并且这些函数是在 $\tau \rightarrow \tau + \hbar \beta$ 替换下的周期函数。记住 $-\partial_\tau^2$ 的每一个本征值都出现两次，除了零频率 $\omega_0 = 0$ 只出现一次。

最后我们指出，这一节的结果也可以直接由量子力学的振幅(2.173)得到[或者利用离散时间的形式(2.197)]，通过将时间差 $t_b - t_a$ 解析延续到虚数值 $-i(\tau_b - \tau_a)$ ：

$$\begin{aligned} (x_b \tau_b | x_a \tau_a) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar/M}} \sqrt{\frac{\omega}{\sinh \omega(\tau_b - \tau_a)}} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar} \frac{M\omega}{\sinh \omega(\tau_b - \tau_a)} [(x_b^2 + x_a^2) \cosh \omega(\tau_b - \tau_a) - 2x_b x_a] \right\}. \end{aligned} \quad (2.409)$$

令 $x = x_b = x_a$ 并且作 x 的积分，我们得到[比较(2.331)]

$$\begin{aligned} Z_\omega &= \int_{-\infty}^{\infty} dx (x \tau_b | x \tau_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar(\tau_b - \tau_a)/M}} \sqrt{\frac{\omega(\tau_b - \tau_a)}{\sinh[\omega(\tau_b - \tau_a)]}} \\ &\times \frac{\sqrt{2\pi\hbar \sinh[\omega(\tau_b - \tau_a)]/\omega M}}{2 \sinh[\omega(\tau_b - \tau_a)/2]} = \frac{1}{2 \sinh[\omega(\tau_b - \tau_a)/2]}. \end{aligned} \quad (2.410)$$

上面的关系式 $\tau_b - \tau_a = \hbar \beta$ ，我们重新得到配分函数(2.405)。对离散时间的形式(2.197)作类似的处理可以得到(2.401)。我们在实周期函数空间下直接进行独立计算的目的是展示周期性路径的频率结构，并且理解与所对应的具有固定端点的量子力学路径的不同。我们也想展示如何处理随之产生的乘积表达式。

对于在聚合物理下的应用(见第15章)，我们还需要带有开放端点(open ends)的所有路径涨落的配分函数

$$\begin{aligned} Z_\omega^{\text{open}} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_b \int_{-\infty}^{\infty} dx_a (x_b \tau_b | x_a \tau_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar(\tau_b - \tau_a)/M}} \sqrt{\frac{\omega(\tau_b - \tau_a)}{\sinh[\omega(\tau_b - \tau_a)]}} \frac{2\pi\hbar}{M\omega} \\ &= \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{M\omega}} \frac{1}{\sqrt{\sinh[\omega(\tau_b - \tau_a)]}}. \end{aligned} \quad (2.411)$$

前因子是等式(2.301)中长度标度 λ_ω 的 $\sqrt{2\pi}$ 倍。

2.11 与时间相关的谐势

对于具有与时间相关的频率 $\Omega(\tau)$ 并且在 $\tau \rightarrow \tau + \hbar\beta$ 下是周期性的情况，我们很有必要去计算其热涨落行列式。同2.3.6节一样，我们考虑振幅

$$\begin{aligned} (x_b \tau_b | x_a \tau_a) &= \int \mathcal{D}'x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} e^{-\int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau [-ip\dot{x} + p^2/2M + M\Omega^2(\tau)x^2/2]/\hbar} \\ &= \int \mathcal{D}x e^{-\int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau [M\dot{x}^2 + \Omega^2(\tau)x^2]/2\hbar}. \end{aligned} \quad (2.412)$$

时间分割涨落因子 (time-sliced fluctuation factor) 是[比较(2.200)]

$$F^N(\tau_a - \tau_b) = \det_{N+1}[-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon \Omega^2(\tau)]^{-1/2}, \quad (2.413)$$

具有连续极限

$$F(\tau_a - \tau_b) = \frac{k_B T}{\hbar} \left[\frac{\det(-\partial_\tau^2 + \Omega^2(\tau))}{\det'(-\partial_\tau^2)} \right]^{-1/2}. \quad (2.414)$$

实际上，对于热情况，利用振子的结果来归一化涨落因子是更合适的，而不是自由粒子的结果，并且利用公式

$$F(\tau_b, \tau_a) = \frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)} \left[\frac{\det(-\partial_\tau^2 + \Omega^2(\tau))}{\det(-\partial_\tau^2 + \omega^2)} \right]^{-1/2}. \quad (2.415)$$

这样的优势是分母上的行列式没有零本证值，如果有零本证值则需要在(2.408)中的特殊处理；算符 $-\partial_\tau^2 + \omega^2$ 是正定的。

同量子力学的情况一样，对于一般的 $\Omega(\tau)$ 是不知道本证值谱的。然而，通过类比Gelfand-Yaglom公式(2.207)和初始条件(2.212)，有可能为整个行列式找到一个微分方程尽管现在的推导过程要繁琐的更多。额外的困难在于周期边界条件，由于该条件将非零元素-1引入矩阵 $-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}$ 的右上角和左下角[比较2.102)]：

$$-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (2.416)$$

为了更好的理解与之前结果的关系，我们将用 $-\alpha$ 代替角元素-1，作为比较，最后我们可以令 $-\alpha$ 等于零。将一个依赖时间的频率矩阵加到 $-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}$ 上，然后我们考虑涨落矩阵

$$-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 \Omega^2 = \begin{pmatrix} 2 + \epsilon^2 \Omega_{N+1}^2 & -1 & 0 & \dots & 0 & -\alpha \\ -1 & 2 + \epsilon^2 \Omega_N^2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & \vdots \\ -\alpha & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 + \epsilon^2 \Omega_1^2 \end{pmatrix}. \quad (2.417)$$

我们用 \tilde{D}_{N+1} 表示这个 $(N+1) \times (N+1)$ 矩阵的行列式。沿着第一列展开这个行列式，我们发现满足方程

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{N+1} &= (2 + \epsilon^2 \Omega_{N+1}^2) \\ &\times \det_N \begin{pmatrix} 2 + \epsilon^2 \Omega_N^2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 + \epsilon^2 \Omega_1^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.418)$$

$$\begin{aligned}
& + \det_N \left(\begin{array}{ccccccc}
-1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -\alpha \\
-1 & 2 + \epsilon^2 \Omega_{N-1}^2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
0 & -1 & 2 + \epsilon^2 \Omega_{N-2}^2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\
\vdots & & & & & & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 + \epsilon^2 \Omega_1^2
\end{array} \right) \\
& + (-1)^{N+1} \alpha \det_N \left(\begin{array}{ccccccc}
-1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -\alpha \\
2 + \epsilon^2 \Omega_N^2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
-1 & 2 + \epsilon^2 \Omega_{N-1}^2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & & & & & & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \dots & 2 + \epsilon^2 \Omega_2^2 & -1 &
\end{array} \right).
\end{aligned}$$

第一个行列式在之前的等式(2.202)出现过(只是当时出现的是 $-\epsilon^2 \Omega^2$ 而不是 $\epsilon^2 \Omega^2$)。在那里用 D_N 来标记, 满足微分方程

$$(-\epsilon^2 \bar{\nabla} \nabla + \epsilon^2 \Omega_{N+1}^2) D_N = 0, \quad (2.419)$$

有初始条件

$$\begin{aligned}
D_1 &= 2 + \epsilon^2 \Omega_1^2, \\
D_2 &= (2 + \epsilon^2 \Omega_1^2)(2 + \epsilon^2 \Omega_2^2) - 1.
\end{aligned} \quad (2.420)$$

(2.418)中的第二个行列式可以按其第一列来展开, 给出

$$-D_{N-1} - \alpha. \quad (2.421)$$

第三个行列式更复杂, 当沿着第一列展开式, 我们有

$$(-1)^N [1 + (2 + \epsilon^2 \Omega_N^2) H_{N-1} - H_{N-2}], \quad (2.422)$$

有 $(N-1) \times (N-1)$ 行列式

$$H_{N-1} \equiv (-1)^{N-1} \times \det_{N-1} \left(\begin{array}{ccccccc}
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -\alpha \\
2 + \epsilon^2 \Omega_{N-1}^2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
-1 & 2 + \epsilon^2 \Omega_{N-2}^2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & & & & & & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 + \epsilon^2 \Omega_2^2 & -1
\end{array} \right). \quad (2.423)$$

沿着第一列我们展开这个行列式, 我们发现和 D_N 一样, H_N 满足相同的微分方程:

$$(-\epsilon^2 \bar{\nabla} \nabla + \epsilon^2 \Omega_{N+1}^2) H_N = 0. \quad (2.424)$$

然而, 对于 H_N 的初始条件是不同的:

$$H_2 = \begin{vmatrix} 0 & -\alpha \\ 2 + \epsilon^2 \Omega_2^2 & -1 \end{vmatrix} = \alpha(2 + \epsilon^2 \Omega_2^2), \quad (2.425)$$

$$\begin{aligned}
H_3 &= - \begin{vmatrix} 0 & 0 & -\alpha \\ 2 + \epsilon^2 \Omega_3^2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 + \epsilon^2 \Omega_2^2 & -1 \end{vmatrix} \\
&= \alpha [(2 + \epsilon^2 \Omega_2^2)(2 + \epsilon^2 \Omega_3^2) - 1].
\end{aligned} \quad (2.426)$$

如果我们由 Ω_N^2 移动一个格点单元升到 Ω_{N+1}^2 , 就会发现 H_N 事实上等于 αD_{N-1} 。用上标+表明这一点, 即我们可以写成

$$H_N = \alpha D_{N-1}^+. \quad (2.427)$$

这样, 我们得到方程

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{N+1} &= (2 + \epsilon^2 \Omega_N^2) D_N - D_{N-1} - \alpha \\ &\quad - \alpha [1 + (2 + \epsilon^2 \Omega_N^2) \alpha D_{N-2}^+ - \alpha D_{N-3}^+]. \end{aligned} \quad (2.428)$$

利用关于 D_N 和 D_N^+ 的微分方程, 上式可以写成简洁的形式

$$\tilde{D}_{N+1} = D_{N+1} - \alpha^2 D_{N-1}^+ - 2\alpha. \quad (2.429)$$

对于 $\alpha = 0$ 的量子力学涨落, 上式简化为之前2.3.6节的结果。对于 $\alpha = 1$ 的周期涨落, 结果是

$$\tilde{D}_{N+1} = D_{N+1} - D_{N-1}^+ - 2. \quad (2.430)$$

在连续极限下, $D_{N+1} - D_{N-1}^+$ 趋于 $2\dot{D}_{\text{ren}}$, 这里 $D_{\text{ren}}(\tau) = D_a(t)$ 是Gelfand-Yaglom函数的虚时间形式, 该函数在2.4节中被用来解决齐次微分方程(2.213), 并且有初始条件(2.211)和(2.212), 或者等式(2.226)。现在, 相对应的性质为:

$$[-\partial_\tau^2 + \Omega^2(\tau)] D_{\text{ren}}(\tau) = 0, \quad D_{\text{ren}}(0) = 0, \quad \dot{D}_{\text{ren}}(0) = 1. \quad (2.431)$$

在 $D_{\text{ren}}(\tau)$ 中, 行列式由类Gelfand-Yaglom (Gelfand-Yaglom-like) 公式

$$\det(-\epsilon^2 \bar{\nabla} \nabla + \epsilon \Omega^2)_T \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 2[\dot{D}_{\text{ren}}(\hbar\beta) - 1], \quad (2.432)$$

配分函数为

$$Z_\Omega = \frac{1}{\sqrt{2[\dot{D}_{\text{ren}}(\hbar\beta) - 1]}}. \quad (2.433)$$

可以回到之前等式(2.260)的振幅($x_b t_b | x_a t_a$)来检查这个结果, 延续到虚时间 $t = i\tau$, 令 $x_b = x_a = x$ 并作所有关于 x 的积分。结果为

$$Z_\Omega = \frac{1}{2\sqrt{\dot{D}_a(t_b) - 1}}, \quad t_b = i\hbar\beta, \quad (2.434)$$

与(2.433)一致。

取谐振子作为例子, 此时(2.431)的解是

$$D_{\text{ren}}(\tau) = \frac{1}{\omega} \sinh \omega \tau \quad (2.435)$$

[(2.214)的解析延续]。于是

$$2[\dot{D}_{\text{ren}}(\tau) - 1] = 2(\cosh \beta \hbar \omega - 1) = 4 \sinh^2(\beta \hbar \omega / 2), \quad (2.436)$$

并且我们得到正确的配分函数:

$$\begin{aligned} Z_\omega &= \left\{ 2[\dot{D}_{\text{ren}}(\tau) - 1] \right\}^{-1/2} \Big|_{\tau=\hbar\beta} \\ &= \frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)}. \end{aligned} \quad (2.437)$$

在分割的虚时间轴上, 不变频率 $\Omega^2 \equiv \omega^2$ 的情况可以按如下方式解决。从等式(2.208)中我们取一般的Gelfand-Yaglom 函数 D_N , 并且延续到欧氏频率 $\tilde{\omega}_e$, 给出虚时间形式

$$D_N = \frac{\sinh(N+1)\tilde{\omega}_e\epsilon}{\sinh\tilde{\omega}_e\epsilon}. \quad (2.438)$$

然后我们利用公式(2.430), 对于常数 $\Omega^2 \equiv \omega^2$, 有 $D_{N-1}^+ = D_{N-1}$, 该公式可以简化。计算得到

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{N+1} &= \frac{1}{\sinh\tilde{\omega}_e\epsilon} [\sinh(N+2)\tilde{\omega}_e\epsilon - \sinh N\tilde{\omega}_e\epsilon] - 2 \\ &= 2[\cosh(N+1)\tilde{\omega}_e\epsilon - 1] = 4\sinh^2[(N+1)\tilde{\omega}_e\epsilon/2]. \end{aligned} \quad (2.439)$$

将此式代入等式(2.384)中, 给出配分函数

$$Z_\omega = \frac{1}{\sqrt{\tilde{D}_{N+1}}} = \frac{1}{2\sinh(\hbar\tilde{\omega}_e\beta/2)}, \quad (2.440)$$

与(2.401)一致。

2.12 傅里叶空间下的泛函测度

对于量子统计路径积分存在一种在一些应用上很有帮助的替代性定义(例如在2.13节以及第5章)。极限下的乘积公式(2.408)表明在连续时间轴上利用路径的傅里叶分量可以定义一个路径积分, 从而代替在分割时间轴上对所有路径的之字形构型求和的方法。如同在(2.378)中, 只是具有略微不同的归一化系数, 我们按如下展开这些路径

$$x(\tau) = x_0 + \eta(\tau) \equiv x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m e^{i\omega_m \tau} + c.c.), \quad x_0 = \text{real}, \quad x_{-m} \equiv x_m^*. \quad (2.441)$$

注意到对依赖时间的涨落 $\eta(\tau)$ 作时间积分为零, $\int_0^{\hbar/k_B T} d\tau \eta(\tau) = 0$, 这样零频率分量 x_0 是涨落路径的的时间平均:

$$x_0 = \bar{x} \equiv \frac{k_B T}{\hbar} \int_0^{\hbar/k_B T} d\tau x(\tau). \quad (2.442)$$

相比之下, (2.378)式在分割时间轴上成立的并且遵从 m 求和范围的限制, 现在的求和没有限制, 是取遍所有的松原频率 ($\omega_m = 2\pi m k_B T / \hbar = 2\pi m / \hbar\beta$)。在 x_m 下, 线性振子的欧氏作用量是

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_e &= \frac{M}{2} \int_0^{\hbar/k_B T} d\tau (\dot{x}^2 + \omega^2 x^2) \\ &= \frac{M\hbar}{k_B T} \left[\frac{\omega^2}{2} x_0^2 + \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \omega^2) |x_m|^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.443)$$

在等式(2.386)中时间分割路径的积分变量变换到傅里叶分量 x_m 上。积分乘积 $\prod_n \int_{-\infty}^{\infty} dx(\tau_n)$ 变成关于 x_m 实部和虚部的积分乘积(2.388)。在连续极限下, 结果是

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \prod_{m=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d \operatorname{Re} x_m \int_{-\infty}^{\infty} d \operatorname{Im} x_m. \quad (2.444)$$

将带有频率求和式2.443)的指数 $e^{-\mathcal{A}_e/\hbar}$ 放到被积函数里, 高斯积分的乘积成为本证值倒数, 即 $(\omega_m^2 + \omega^2)^{-1}$ 的乘积, 其中 $m = 1, \dots, \infty$, 具有一些无限因子。这可以通过与谐配分函数已知的连续结果(2.408)作比较来确定。这种无限性是在等式(2.181)中遇到的类型, 并且必须从测度(2.444)中分出去。从如下的傅里叶空间中的积分测度得到正确的结果(2.406)

$$\oint \mathcal{D}x \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{l_e(\hbar\beta)} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\operatorname{Re} x_m d\operatorname{Im} x_m}{\pi k_B T / M \omega_m^2} \right]. \quad (2.445)$$

在等式(2.181)之后讨论的关于因子 $(\omega_m^2 + \omega^2)^{-1}$ 乘积的发散可以通过测度中的 ω_m^2 因子来消去。为右边的测度引入一个(short-hand)标记是很方便的, 写作

$$\oint \mathcal{D}x \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{l_e(\hbar\beta)} \oint \mathcal{D}'x. \quad (2.446)$$

对 x_0 积分的分母上是长度标度 $l_e(\hbar\beta)$, 是与等式(2.351)中定义的 β 相联系的
于是我们计算

$$\begin{aligned} Z_\omega^{x_0} \equiv \oint \mathcal{D}'x e^{-\mathcal{A}_e/\hbar} &= \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\operatorname{Re} x_m d\operatorname{Im} x_m}{\pi k_B T / M \omega_m^2} \right] e^{-M\hbar[\omega^2 x_0^2/2 + \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \omega^2)|x_m|^2]/k_B T} \\ &= e^{-M\omega^2 x_0^2/2k_B T} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\frac{\omega_m^2 + \omega^2}{\omega_m^2} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (2.447)$$

关于零频率分量 x_0 的最终积分给出配分函数

$$Z_\omega = \oint \mathcal{D}x e^{-\mathcal{A}_e/\hbar} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{l_e(\hbar\beta)} Z_\omega^{x_0} = \frac{k_B T}{\hbar\omega} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\frac{\omega_m^2 + \omega^2}{\omega_m^2} \right]^{-1}, \quad (2.448)$$

同(2.408)的结果一样。

从等式(2.414)中可以显然得知对于更一般的振幅(2.412)可以利用相同的测度。因为路径积分测度中动能项占主导地位[(2.181)之后讨论的发散只来自动能项], 因此可以简单的证明, 相同的测度对于具有标准动能项的任何系统都是适用的。

对于等式(2.411)中开放端点的配分函数, 也有可能找到路径的傅里叶分解和相关的积分测度。我们首先考虑满足诺依曼边界条件的所以路径的略微简化集合

$$\dot{x}(\tau_a) = v_a = 0, \quad \dot{x}(\tau_b) = v_b = 0. \quad (2.449)$$

它们具有傅里叶展开式

$$x(\tau) = x_0 + \eta(\tau) = x_0 + \sum_{n=1}^{\infty} x_n \cos \nu_n(\tau - \tau_a), \quad \nu_n = n\pi/\beta. \quad (2.450)$$

频率 ν_n 是对于狄利克雷边界条件的频率的欧几里得形式。我们利用如下作用量的傅里叶分解, 通过类比之前的周期性的情况可以计算这样路径下的配分函数

$$\mathcal{A}_e = \frac{M}{2} \int_0^{\hbar/k_B T} d\tau (\dot{x}^2 + \omega^2 x^2) = \frac{M\hbar}{k_B T} \left[\frac{\omega^2}{2} x_0^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (\nu_n^2 + \omega^2) x_n^2 \right], \quad (2.451)$$

并且测度是

$$\begin{aligned}\oint \mathcal{D}x &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{l_e(\hbar\beta)} \prod_{n=1}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\pi k_B T / 2M\nu_n^2} \right] \\ &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{l_e(\hbar\beta)} \oint \mathcal{D}'x.\end{aligned}\quad (2.452)$$

和在(2.447)一样，现在我们在固定的 x_0 上作关于所以涨落的路径积分：

$$\begin{aligned}Z_{\omega}^{N,x_0} &\equiv \oint \mathcal{D}'x e^{-\mathcal{A}_e/\hbar} = \prod_{n=1}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\pi k_B T / 2M\nu_n^2} \right] e^{-M\hbar[\omega^2 x_0^2/2 + \sum_{n=1}^{\infty} (\nu_n^2 + \omega^2)|x_n|^2]/k_B T} \\ &= e^{-M\omega^2 x_0^2 / 2k_B T} \prod_{n=1}^{\infty} \left[\frac{\nu_n^2 + \omega^2}{\nu_n^2} \right]^{-1}.\end{aligned}\quad (2.453)$$

利用乘积公式(2.181)，变为

$$Z_{\omega}^{N,x_0} = \sqrt{\frac{\omega\hbar\beta}{\sinh\omega\hbar\beta}} \exp\left(-\beta\frac{M}{2}\omega^2 x_0^2\right). \quad (2.454)$$

关于零频率分量 x_0 的最终积分给出配分函数

$$Z_{\omega}^N = \frac{1}{l_e(\hbar\beta)} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{M\omega}} \frac{1}{\sqrt{\sinh\omega\hbar\beta}}. \quad (2.455)$$

我们已经在前因子 $1/l_e(\hbar\beta)$ 中用等式(2.351)的长度标度 $1/l_e(\hbar\beta)$ 代替了分母。除了这个前因子，诺依曼配分函数和(2.411)中开放端点的配分函数 Z_{ω}^{open} 是刚好一致的。

这种带有一个无关紧要因子的巧合性的原因是什么？即使满足诺依曼边界条件的路径不包含所有带有开放端点的路径。而且，在定义方程(2.411)中关于端点的积分没有使得端点速度而是动量变为零。的确，回顾(2.187)中动量空间下的时间演化算符，我们立即可以看出等式(2.411)中的具有开放端点的配分函数 Z_{ω}^{open} 和具有零动量端点的虚时间振幅是相同的：

$$Z_{\omega}^{\text{open}} = (p_b \hbar\beta | p_a 0) \Big|_{p_b=p_a=0}. \quad (2.456)$$

这样，在动量空间下，具有任意开放端点的所以路径的求和等于满足狄利克雷边界条件的所有路径的求和。只在经典上，端点动量为零表示端点速度为零。从(??)节的相位空间下时间分割路径积分的讨论中我们得到涨落路径满足 $M\dot{x} \neq p$ 。(2.51)类型的高斯指数控制着差额涨落 (fluctuations of the difference)。这解释了在 Z_{ω}^{open} 和 Z_{ω}^N 之间的无关因子。 $M\dot{x}$ 和 p 的差异只出现在端点处最后的短时间间隔下。但在短时间下，势不会影响(2.51)中的涨落。这就是在端点的涨落对配分函数 Z_{ω}^N 只贡献了一个无关紧要的整体因子 $l_e(\hbar\beta)$ 的原因。

2.13 经典极限

上一节的另一个测度比以前更令人信服的表明在高温极限下，任一个量子统计配分函数的路径积分表示简化为等式(2.344)中给出的经典配分函数。我们从拉格朗日公式(2.374)开始着手。代入傅里叶分解(2.441)，动能项变为

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{M}{2} \dot{x}^2 = \frac{M\hbar}{k_B T} \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2, \quad (2.457)$$

配分函数为

$$Z = \oint \mathcal{D}x \exp \left[-\frac{M}{k_B T} \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar/k_B T} d\tau V(x_0 + \sum_{m=-\infty}' x_m e^{-i\omega_m \tau}) \right]. \quad (2.458)$$

带撇的求和符号表示没有 $m = 0$ 的项。测度是所有傅里叶分量积分的乘积(2.445)

现在我们研究在高温的情况下， $m \neq 0$ 的松原频率如 $2\pi m k_B T / \hbar$ 一般发散。因此产生的结果是对于 $x_{m \neq 0}$ 涨落的波尔兹曼因子在 $x_m = 0$ 附近有峰值。 x_m 的平均大小是 $\sqrt{k_B T / M} / \omega_m = \hbar / 2\pi m \sqrt{M k_B T}$ 。如果势 $V(x_0 + \sum_{m=-\infty}' x_m e^{-i\omega_m \tau})$ 是自变量的平滑的函数，我们可以近似的表示成 $V(x_0)$ 加上包含 x_m 更高次方的项。对于高温，高次方项的平均值是很小的，能够被忽略。领头项 $V(x_0)$ 是与时间无关的。因此我们在高温极限下得到

$$Z \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \oint \mathcal{D}x \exp \left[-\frac{M}{k_B T} \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2 - \frac{1}{k_B T} V(x_0) \right]. \quad (2.459)$$

等式右边是关于傅里叶分量 x_m 的平方式。在积分测度(2.445)下，我们作关于 x_m 的积分，得到

$$Z \xrightarrow{T \rightarrow \infty} Z_{\text{cl}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{l_e(\hbar\beta)} e^{-V(x_0)/k_B T}. \quad (2.460)$$

这与经典配分函数(2.350)一致。

推导过程展现了一个对于经典极限正确性的重要先决条件：只在足够平滑的势下是成立的。我们将在第8章看到对于一些奇异势，例如 $-1/|x|$ (库仑势)， $1/|x|^2$ (离心势垒)， $1/\sin^2 \theta$ (角势垒)，不满足这个条件并且经典极限不再由(2.460)给出。在确定的 $\rho(x)$ 处的粒子分布 没有这个问题。它总是趋向于经典极限(2.352)：

$$\rho(x) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} Z_{\text{cl}}^{-1} e^{-V(x)/k_B T}. \quad (2.461)$$

收敛性在 x 下是不一致的，这就是极限一般没有延续到积分(2.460)的原因。在第12章中很重的一点就是得到新的有充分根据的路径积分公式来处理奇异势。首先，我们将忽略这些巧妙的处理方法，继续常规的讨论平滑势的情况。

2.14 在分割时间轴上利用泊松公式的计算技巧

在以前的小节里，我们利用列表(tabulated)的乘积公式，例如(2.122), (2.163), (2.171), (2.398), (2.400) 来找在有限分隔时间轴上的涨落行列式。由于最近对

量子场论的格点模型感兴趣，因此拥有一套高效率的计算方法来得到这些乘积公式（和相关的求和）是很有用的。作为一个典型的例子，考虑谐振子的配分函数，这个谐振子的频率是 ω ，并且在时间轴上分成 $N+1$ 份，其中每份的厚度是 ϵ ，

$$Z = \prod_{m=0}^N [2(1 - \cos \omega_m \epsilon) + \epsilon^2 \omega^2]^{-1/2}, \quad (2.462)$$

乘积式取遍所有的松原频率 $\omega_m = 2\pi m k_B T / \hbar$ 。与处理这个乘积式相比，我们考虑自由能更加有益。

$$F = -k_B T \log Z = \frac{1}{2} k_B T \sum_{m=0}^N \log[2(1 - \cos \omega_m \epsilon) + \epsilon^2 \omega^2]. \quad (2.463)$$

现在我们利用泊松求和公式(1.205)发现，求和可以改写为如下的一个求和与积分的组合：

$$F = \frac{1}{2} k_B T (N+1) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda n(N+1)} \log[2(1 - \cos \lambda) + \epsilon^2 \omega^2]. \quad (2.464)$$

关于 n 的求和使得 λ 为 $2\pi/(N+1) = \omega_m \epsilon$ 的整数倍，这正好是我们所想要的。

现在我们计算(2.464)中的积分：

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda n(N+1)} \log[2(1 - \cos \lambda) + \epsilon^2 \omega^2]. \quad (2.465)$$

为此，我们以极限的形式改写一个任意自变量的对数

$$\log a = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[- \int_{\delta}^{\infty} \frac{d\tau}{\tau} e^{-\tau a/2} \right] + \log(2\delta) + \gamma, \quad (2.466)$$

这里

$$\gamma \equiv -\Gamma'(1)/\Gamma(1) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \log N \right) \approx 0.5773156649\dots \quad (2.467)$$

是欧拉-马斯凯罗尼常数 (Euler-Mascheroni constant)。函数

$$E_1(x) = \int_x^{\infty} \frac{dt}{t} e^{-t} \quad (2.468)$$

被称为指数积分 (*exponential integral*)，有小 x 的展开式¹⁸

$$E_1(x) = -\gamma - \log x - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-x)^k}{kk!}. \quad (2.469)$$

利用对数的表示形式(2.466)，自由能可以改写为

$$F = \frac{1}{2\epsilon} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lim_{\delta \rightarrow 0} \left\{ - \int_{\delta}^{\infty} \frac{d\tau}{\tau} \int_0^{2\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda n(N+1) - \tau[2(1 - \cos \lambda) + \epsilon^2 \omega^2]/2} - \delta_{n0} [\log(2\delta) + \gamma] \right\}. \quad (2.470)$$

¹⁸I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, op. cit., Formula 8.214.2.

现在作关于 λ 的积分, ¹⁹ 给出一个修正的贝塞尔函数 $I_{n(N+1)}(\tau)$:

$$F = \frac{1}{2\epsilon} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lim_{\delta \rightarrow 0} \left\{ - \int_{\delta}^{\infty} \frac{d\tau}{\tau} I_{n(N+1)}(\tau) e^{-\tau(2+\epsilon^2\omega^2)/2} - \delta_{n0} [\log(2\delta) + \gamma] \right\}. \quad (2.471)$$

由于 $\epsilon^2\omega^2 \equiv m^2$, 我们作上式的微分, 得到

$$\frac{\partial F}{\partial m^2} = \frac{1}{4\epsilon} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} d\tau I_{n(N+1)}(\tau) e^{-\tau(2+m^2)/2} \quad (2.472)$$

并且利用对于 $\operatorname{Re} \nu > -1$, $\operatorname{Re} \alpha > \operatorname{Re} \mu$ 有效的公式, 作 τ 的积分

$$\int_0^{\infty} d\tau I_{\nu}(\mu\tau) e^{-\tau\alpha} = \mu^{\nu} \frac{(\alpha - \sqrt{\alpha^2 - \mu^2})^{-\nu}}{\sqrt{\alpha^2 - \mu^2}} = \mu^{-\nu} \frac{(\alpha - \sqrt{\alpha^2 - \mu^2})^{\nu}}{\sqrt{\alpha^2 - \mu^2}}, \quad (2.473)$$

得到

$$\frac{\partial F}{\partial m^2} = \frac{1}{2\epsilon} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{(m^2 + 2)^2 - 4}} \left[\frac{m^2 + 2 - \sqrt{(m^2 + 2)^2 - 4}}{2} \right]^{|n|(N+1)}. \quad (2.474)$$

由此, 我们利用关于 $m^2 + 1$ 的积分得到 F $m^2 + 1$ 。求和式下 $n = 0$ 的项给出

$$\log[(m^2 + 2 + \sqrt{(m^2 + 2)^2 - 4})/2] + \text{const} \quad (2.475)$$

并且, $n \neq 0$ 的项:

$$-\frac{1}{|n|(N+1)} [(m^2 + 2 + \sqrt{(m^2 + 2)^2 - 4})/2]^{-|n|(N+1)} + \text{const}, \quad (2.476)$$

这里, 积分常数可以依赖于 $n(N+1)$. 在(2.471)中通过转到极限 $m^2 \rightarrow \infty$ 上来调节这些常数。在那里, 积分是由贝塞尔函数的 τ 来决定

$$I_{\alpha}(z) \sim \frac{1}{|\alpha|!} \left(\frac{z}{2} \right)^{\alpha} [1 + O(z^2)], \quad (2.477)$$

并且(2.471)中第一项变为

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{(|n|(N+1))!} \int_{\delta}^{\infty} \frac{d\tau}{\tau} \left(\frac{\tau}{2} \right)^{|n|(N+1)} e^{-\tau m^2/2} \\ & \approx \begin{cases} \log m^2 + \gamma + \log(2\delta) & n = 0 \\ -(m^2)^{-|n|(N+1)}/|n|(N+1) & n \neq 0 \end{cases}. \end{aligned} \quad (2.478)$$

另一方面, 在(2.475)和(2.476)中, 极限 $m^2 \rightarrow \infty$ 分别给出 $\log m^2 + \text{const}$ 和 $-(m^2)^{-|n|(N+1)}/|n|(N+1) + \text{const}$ 。因此积分常数必须为零。所以, 我们可以写下具有 $N+1$ 个时间步的自由能, 如下

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{2\beta} \sum_{m=0}^N \log[2(1 - \cos(\omega_m \epsilon)) + \epsilon^2 \omega^2] \\ &= \frac{1}{2\epsilon} \left\{ \log \left[\left(\epsilon^2 \omega^2 + 2 + \sqrt{(\epsilon^2 \omega^2 + 2)^2 - 4} \right) / 2 \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{2}{N+1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left[\left(\epsilon^2 \omega^2 + 2 + \sqrt{(\epsilon^2 \omega^2 + 2)^2 - 4} \right) / 2 \right]^{-|n|(N+1)} \right\}. \end{aligned} \quad (2.479)$$

¹⁹I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *op. cit.*, Formulas 8.411.1 and 8.406.1.

这里，引入如下参数是很方便的

$$\epsilon\tilde{\omega}_e \equiv \log \left\{ \left[\epsilon^2\omega^2 + 2 + \sqrt{(\epsilon^2\omega^2 + 2)^2 - 4} \right] / 2 \right\}, \quad (2.480)$$

其中满足

$$\cosh(\epsilon\tilde{\omega}_e) = (\epsilon^2\omega^2 + 2)/2, \quad \sinh(\epsilon\tilde{\omega}_e) = \sqrt{(\epsilon^2\omega^2 + 2)^2 - 4}/2, \quad (2.481)$$

或者

$$\sinh(\epsilon\tilde{\omega}_e/2) = \epsilon\omega/2.$$

这样，这与在(2.397)中引入的参数是一致的，并且可以将自由能(2.479)简化为

$$\begin{aligned} F &= \frac{\hbar}{2} \left[\tilde{\omega}_e - \frac{2}{\epsilon(N+1)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{-\epsilon\tilde{\omega}_e n(N+1)} \right] \\ &= \frac{1}{2} [\hbar\tilde{\omega}_e + 2k_B T \log(1 - e^{-\beta\hbar\tilde{\omega}_e})] \\ &= \frac{1}{\beta} \log [2 \sinh(\beta\hbar\tilde{\omega}_e/2)], \end{aligned} \quad (2.482)$$

在连续极限下是

$$F \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\beta} \log [2 \sinh(\beta\hbar\omega/2)] = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{\beta} \log(1 - e^{-\beta\hbar\omega}). \quad (2.483)$$

2.15 谐路径积分根据解析正规化的场理论定义

上一节发展的关于谐振子量子配分函数的计算技巧可以用来定义谐路径积分，该方法既不需要像最初费曼表达式(2.64)那样分割时间，也不需要像2.12节中在傅里叶分量下的积分测度的精确说明。配分函数的路径积分

$$Z_\omega = \oint \mathcal{D}x e^{-\int_0^{\hbar\beta} M[\dot{x}^2(\tau) + \omega^2 x^2(\tau)]/2} = \oint \mathcal{D}x e^{-\int_0^{\hbar\beta} Mx(\tau)[- \partial_\tau^2 + \omega^2]x(\tau)/2} \quad (2.484)$$

经计算得到

$$Z_\omega = \frac{1}{\sqrt{\text{Det}(-\partial_\tau^2 + \omega^2)}} = e^{-\frac{1}{2}\text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2)}. \quad (2.485)$$

因为算符的行列式是其所有本征值的乘积，我们可以再次写为如下形式

$$Z_\omega = \prod_{\omega'} \frac{1}{\sqrt{\omega'^2 + \omega^2}}. \quad (2.486)$$

乘积式取遍随 ω'^2 增长的量的无穷集合，因此一定是发散的。通过改写 Z_ω ，我们可以得到发散的求和，如下

$$Z_\omega \equiv e^{-F_\omega/k_B T} = e^{-\frac{1}{2} \sum_{\omega'} \log(\omega'^2 + \omega^2)}. \quad (2.487)$$

这个表达式有两点令人不满意的性质。首先，它需要一个对一系列连续频率正规求和的适当定义。第二，(dimensionful)自变量 $\omega_m^2 + \omega^2$ 的对数必须变成一个有意义的表达式。如果我们用 $\log[(\omega'^2 + \omega^2)/\omega^2]$ 替换上式的对数，则格点问题将不存

在。这将要求正规求和 $\sum_{\omega'} \log \omega'^2$ 为零。我们将在下面的等式(2.512)中看到这的确是解析正规化非常好的性质之一。

在有限温度下，沿着虚时间轴的周期边界条件使得微分算符 $-\partial_\tau^2 + \omega^2$ 谱中的频率 ω' 是离散的，并且在(2.487)式指数上的求和变成对所有松原频率 $\omega_m = 2\pi k_B T/\hbar$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$)的求和：

$$Z_\omega = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \log(\omega_m^2 + \omega^2) \right]. \quad (2.488)$$

对于自由能 $F_\omega \equiv (1/\beta) \log Z_\omega$ ，因此有

$$F_\omega = \frac{1}{2\beta} \text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) \Big|_{\text{per}} = \frac{1}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \log(\omega_m^2 + \omega^2). \quad (2.489)$$

这里，下标per强调周期边界条件在 τ 时间间隔 $(0, \hbar\beta)$ 下。

2.15.1 频率求和的零温度计算

在极限 $T \rightarrow 0$ 下，(2.489)中的求和变成一个积分，自由能变为

$$F_\omega \equiv \frac{1}{2\beta} \text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) \Big|_{\pm\infty} = \frac{\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \log(\omega'^2 + \omega^2), \quad (2.490)$$

这里，下标 $\pm\infty$ 表明在 $\tau = \pm\infty$ 时本证函数的边界条件消失。这样，在低温下，我们将等式(2.487)的指数中频率求和替换为

$$\sum_{\omega'} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \hbar\beta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi}. \quad (2.491)$$

这一点是之前96页引用的，在相位空间下基于普朗克规则用来解释路径积分的测度。根据这些规则可知，能量和时间的相空间下的体积元具有测度 $\int dt dE/h = \int dt d\omega/2\pi$ 。如果被积函数与时间无关，时间积分给出一个整体因子，对于统计力学的虚时间间隔 $(0, \hbar\beta)$ ，这个因子等于 $\hbar\beta = \hbar/k_B T$ ，这样就解释了求和式(2.491)的积分形式。

(2.490)右边的积分在 ω' 很大时是发散的，被称作紫外发散 (*ultraviolet divergence*) (UV-发散)，这提到了紫外线含有高频率的事实。

现在很重要的发现是可以利用被称作解析正规化 (*analytic regularization*) 的数学技巧将发散积分(2.490)变成有限的。²⁰ 这是基于将对数 $\log(\omega'^2 + \omega^2)$ 改写为如下导数形式：

$$\log(\omega'^2 + \omega^2) = - \frac{d}{d\epsilon} (\omega'^2 + \omega^2)^{-\epsilon} \Big|_{\epsilon=0}. \quad (2.492)$$

²⁰G. 't Hooft and M. Veltman, Nucl. Phys. B 44, 189 (1972). 目前，解析正规化是在不破坏规范不变性的前提下重整化非阿贝尔规范理论的唯一方法。See also the review by G. Leibbrandt, Rev. Mod. Phys. 74, 843 (1975).

等价的，我们可以从函数的 $\epsilon \rightarrow 0$ 极限下得到对数形式

$$l_{\text{MS}}(\epsilon) = -\frac{1}{\epsilon}(\omega'^2 + \omega^2)^{-\epsilon} + \frac{1}{\epsilon}. \quad (2.493)$$

去掉极点项 $1/\epsilon$ 一般被称为最小减除 (*minimal subtraction*)。用下标MS来标记这个过程，我们可以写成

$$l_{\text{MS}}(\epsilon) = -\frac{1}{\epsilon}(\omega'^2 + \omega^2)^{-\epsilon} \Big|_{\text{MS}, \epsilon \rightarrow 0}. \quad (2.494)$$

利用公式(2.492)，自由能(2.490)的对数的迹有如下形式

$$\frac{1}{\hbar\beta} \text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) = -\frac{d}{d\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} (\omega'^2 + \omega^2)^{-\epsilon} \Big|_{\epsilon=0}. \quad (2.495)$$

现在我们为 $a^{-\epsilon}$ 建立有用的积分表示，是对(2.466)的概括，这是源于施温格 (Schwinger)。利用 Γ 函数的定义积分表示

$$\int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \tau^\mu e^{-\tau\omega^2} = \omega^{-\mu/2} \Gamma(\mu), \quad (2.496)$$

因此概括式为

$$a^{-\epsilon} = \frac{1}{\Gamma(\epsilon)} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \tau^\epsilon e^{-\tau a}. \quad (2.497)$$

因此我们可以重新表达(2.495)，如下

$$\frac{1}{\hbar\beta} \text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) = -\frac{d}{d\epsilon} \frac{1}{\Gamma(\epsilon)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \tau^\epsilon e^{-\tau(\omega'^2 + \omega^2)} \Big|_{\epsilon=0}. \quad (2.498)$$

只要 ϵ 大于零，时间间隔 τ 绝对的收敛，这样我们能互换 τ 和 ω' 的积分，得到

$$\frac{1}{\hbar\beta} \text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) = -\frac{d}{d\epsilon} \frac{1}{\Gamma(\epsilon)} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \tau^\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} e^{-\tau(\omega'^2 + \omega^2)} \Big|_{\epsilon=0}. \quad (2.499)$$

我们可以利用公式(1.334)作关于 ω' 的高斯积分，于是得到

$$\frac{1}{\hbar\beta} \text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) = -\frac{d}{d\epsilon} \frac{1}{\Gamma(\epsilon)} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \tau^\epsilon \frac{1}{2\sqrt{\tau\pi}} e^{-\tau\omega^2} \Big|_{\epsilon=0}. \quad (2.500)$$

对于小 ϵ ，时间间隔 τ 在原点是发散的。然而，它可以由积分的解析延续来定义，是从绝对收敛的 $\epsilon > 1/2$ 开始，到 $\epsilon = 0$ 。这个延续必须在 $\epsilon = 1/2$ 的极点。幸运的是，这种延续是平凡的，因为积分可以表示为 Γ 函数的形式，并且 Γ 函数的解析性质是已知的利用积分公式(2.496)，我们得到

$$\frac{1}{\hbar\beta} \text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \omega^{1-2\epsilon} \frac{d}{d\epsilon} \frac{1}{\Gamma(\epsilon)} \Gamma(\epsilon - 1/2) \Big|_{\epsilon=0}. \quad (2.501)$$

等式的右边必须从 $\epsilon > 1/2$ 解析的延续到 $\epsilon = 0$ 。这可以利用 Γ 函数的定义特性 $\Gamma(x) = \Gamma(1+x)/x$ 很简单的完成，其中由 Γ 函数的定义特性我们知道 $\Gamma(-1/2) = -2\Gamma(1/2) = -2\sqrt{\pi}$ ，并且 $1/\Gamma(\epsilon) \approx \epsilon/\Gamma(1+\epsilon) \approx \epsilon$ 。通过解析正规化，对 ϵ 的导数给出低温下谐振子的自由能：

$$\frac{1}{\hbar\beta} \text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \log(\omega'^2 + \omega^2) = \omega, \quad (2.502)$$

这样，振子在零温度下的自由能变为

$$F_\omega = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (2.503)$$

这正好与从(2.405)中路径积分的格点定义，或者从具有傅里叶测度(2.445)的路径积分(3.805)中得到的结果一致。

有以上的方法，我们通常利用公式来表示在 $\epsilon = 0$ 时等式(2.497)的导数：

$$\log a = - \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} e^{-\tau a}. \quad (2.504)$$

这与利用最小减除得到的正确形式是不同的，可以在解析正规化的所以计算下使用。它的适用性是基于在替代的正确表达式下丢掉对 $1/\epsilon$ 的频率积分的可能性。

$$\frac{1}{\hbar\beta} \text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) = -\frac{1}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left[\frac{1}{\epsilon} (\omega'^2 + \omega^2)^{-\epsilon} - \frac{1}{\epsilon} \right]_{\epsilon \rightarrow 0}. \quad (2.505)$$

事实上，在解析正规化下，我们可以令所有的关于频率任意次方的积分等于零：

$$\int_0^\infty d\omega' (\omega')^\alpha = 0 \quad \text{for all } \alpha. \quad (2.506)$$

这被称作威尔特曼规则 (*Veltman's rule*)。²¹ 它是频率积分的一个特殊的极限，是等式(2.495)中积分的推广：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{(\omega'^2)^\gamma}{(\omega'^2 + \omega^2)^\epsilon} = \frac{\Gamma(\gamma + 1/2)}{2\pi\Gamma(\epsilon)} (\omega^2)^{\gamma+1/2-\epsilon}. \quad (2.507)$$

通过改写方程的左边，我们得到

$$\frac{1}{\Gamma(\epsilon)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} (\omega'^2)^\gamma \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \tau^\epsilon e^{-\tau(\omega'^2 + \omega^2)}. \quad (2.508)$$

对 ω' 的积分可以如下进行：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} (\omega'^2)^\gamma e^{-\tau(\omega'^2 + \omega^2)} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega'^2}{\omega'^2} (\omega'^2)^{\gamma+1/2} e^{-\tau(\omega'^2 + \omega^2)} = \frac{\tau^{-\gamma-1/2}}{2\pi} \Gamma(\gamma + 1/2), \quad (2.509)$$

²¹See the textbook H. Kleinert and V. Schulte-Frohlinde, *Critical Properties of ϕ^4 -Theories*, World Scientific, Singapore, 2001 (<http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/b8>).

给出在(2.508)中的 τ 积分

$$\int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \tau^{\epsilon-\gamma-1/2} e^{-\tau\omega^2} = (\omega^2)^{\gamma+1/2+\epsilon}, \quad (2.510)$$

这样得到公式(2.507)。从这里在极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 下威尔特曼规则(2.506)是直接符合的，因为在右边 $1/\Gamma(\epsilon) \rightarrow 0$ 。这表示(2.505)中去掉 $1/\epsilon$ 项没有任何影响。

利用威尔特曼规则(2.506)，关于幂次的所有积分都为零，这一性质最初是在发展弱电相互作用有限量子场理论的过程中假定的。已经证明对于二级相变的临界指数计算也是很有用的。²¹

威尔特曼规则一个很重要的结果就是使配分函数(2.487)和自由能(2.489)中带量纲的(dimensionful)自变量的对数成为有意义的量。首先，因为 $\int d(\omega'/2\pi) \log \omega^2 = 0$ ，我们可以在不影响等式的前提下将(2.490)中的对数自变量除以 ω^2 ，从而使它们没有量纲。在有限温度下，我们利用一个特性，即：对一个不依赖 ω_m 的量 c 的求和与积分相等

$$k_B T \sum_{m=-\infty}^{\infty} c = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_m}{2\pi} c \quad (2.511)$$

也能证明

$$k_B T \sum_{m=-\infty}^{\infty} \log \omega^2 = 0, \quad (2.512)$$

这样，作为威尔特曼规则的一个结果，我们在所有温度下对常数 $\log \omega^2$ 的松原频率求和式为零。由于这个原因，自由能(2.489)中的对数自变量也可以除以 ω^2 ，而不带来任何变化，这样也变成了无量纲的量。

2.15.2 频率求和的有限温度计算

在有限温度下，自由能含有额外的项，该项由松原求和与频率积分的差组成

$$\Delta F_\omega = \frac{k_B T}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \log \left(\frac{\omega_m^2}{\omega^2} + 1 \right) - \frac{\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_m}{2\pi} \log \left(\frac{\omega_m^2}{\omega^2} + 1 \right), \quad (2.513)$$

这里我们使用上一小节末尾讨论的无量纲的对数。求和式分成两部分，一个是相减并且明显收敛的表达式

$$\Delta_1 F_\omega = k_B T \sum_{m=1}^{\infty} \left[\log \left(\frac{\omega_m^2}{\omega^2} + 1 \right) - \log \frac{\omega_m^2}{\omega^2} \right] = k_B T \sum_{m=1}^{\infty} \log \left(1 + \frac{\omega^2}{\omega_m^2} \right), \quad (2.514)$$

一个是发散的求和

$$\Delta_2 F_\omega = k_B T \sum_{m=1}^{\infty} \log \frac{\omega_m^2}{\omega^2}. \quad (2.515)$$

收敛部分计算起来很简单。取等式(2.406)中乘积的对数并且回顾(2.407)，我们发现

$$\prod_{m=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\omega^2}{\omega_m^2}\right) = \frac{\sinh(\beta\hbar\omega/2)}{\beta\hbar\omega/2}, \quad (2.516)$$

因此

$$\Delta F_1 = \frac{1}{\beta} \log \frac{\sinh(\beta\hbar\omega/2)}{\beta\hbar\omega/2}. \quad (2.517)$$

对于发散部分(2.515)我们可以利用解析正规化来计算，如下：我们改写

$$\sum_{m=1}^{\infty} \log \frac{\omega_m^2}{\omega^2} = - \left[2 \frac{d}{d\epsilon} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{\omega_m}{\omega} \right)^{-\epsilon} \right]_{\epsilon \rightarrow 0} = - \left[2 \frac{d}{d\epsilon} \left(\frac{2\pi}{\beta\hbar\omega} \right)^{-\epsilon} \sum_{m=1}^{\infty} m^{-\epsilon} \right]_{\epsilon \rightarrow 0}, \quad (2.518)$$

用黎曼 ζ 函数 (Riemann's zeta function) 来表示对 $m^{-\epsilon}$ 的求和

$$\zeta(z) = \sum_{m=1}^{\infty} m^{-z}. \quad (2.519)$$

这个求和式对于 $z > 1$ 具有很好的定义，并且可以解析延拓到整个复 z 平面。这个函数唯一的奇点在 $z = 1$ ，也就是在 $\zeta(z) \approx 1/z$ 的邻域。在原点处， $\zeta(z)$ 是正则的，并且满足²²

$$\zeta(0) = -1/2, \quad \zeta'(0) = -\frac{1}{2} \log 2\pi, \quad (2.520)$$

这样我们可以近似

$$\zeta(z) \approx -\frac{1}{2}(2\pi)^z, \quad z \approx 0. \quad (2.521)$$

因此我们发现

$$\sum_{m=1}^{\infty} \log \frac{\omega_m^2}{\omega^2} = - \left[2 \frac{d}{d\epsilon} \left(\frac{2\pi}{\beta\hbar\omega} \right)^{-\epsilon} \zeta(\epsilon) \right]_{\epsilon \rightarrow 0} = \frac{d}{d\epsilon} (\beta\hbar\omega)^{\epsilon} \Big|_{\epsilon \rightarrow 0} = \log \hbar\omega \beta. \quad (2.522)$$

这样就确定了等式(2.515)中的 $\Delta_2 F_\omega$ 。

联合(2.517)，并且还有来自积分(2.513)的贡献 $-\hbar\omega/2$ ，因此，自由能有限温度部分(2.489)变为

$$\Delta F_\omega = \frac{1}{\beta} \log(1 - e^{-\hbar\beta\omega}). \quad (2.523)$$

联合零温度自由能(2.503)，给出维数正规化求和公式

$$\begin{aligned} F_\omega &= \frac{1}{2\beta} \text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) = \frac{1}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \log(\omega_m^2 + \omega^2) = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{\beta} \log(1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}) \\ &= \frac{1}{\beta} \log \left(2 \sinh \frac{\hbar\omega\beta}{2} \right), \end{aligned} \quad (2.524)$$

²²I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *op. cit.*, Formula 9.541.4.

这与所有温度下适当规范化的自由能(2.483)是一致的。

注意到等式(2.520)中 ζ 函数 $\zeta(0) = -1/2$ 的性质能导致再次得到我们之前的结论(2.512)，就是一个常数 c 的求和等于零：

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} c = \sum_{m=-\infty}^{-1} c + c + \sum_{m=1}^{\infty} c = 0, \quad (2.525)$$

因为

$$\sum_{m=1}^{\infty} 1 = \sum_{m=-\infty}^{-\infty} 1 = \zeta(0) = -1/2. \quad (2.526)$$

就像之前提到的，这使得我们可以在等式(2.524)的求和式里从对数中除以 ω^2 ，改写这个求和式为

$$\frac{1}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \log \left(\frac{\omega_m^2}{\omega^2} + 1 \right) = \frac{1}{\beta} \sum_{m=1}^{\infty} \log \left(\frac{\omega_m^2}{\omega^2} + 1 \right) \quad (2.527)$$

2.15.3 量子力学的谐振子

这一方法可以直接进行类似的量子力学的讨论。从自由粒子的涨落因子(2.86)开始，一般写为

$$F_0(\Delta t) = \int \mathcal{D}\delta x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} \delta x(-\partial_t^2) \delta x \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i \Delta t / M}}, \quad (2.528)$$

这里 $\Delta t \equiv t_b - t_a$ [回顾(2.125)]。谐振子的路径积分具有涨落因子[对比(2.186)]

$$F_\omega(\Delta t) = F_0(\Delta t) \left[\frac{\text{Det}(-\partial_t^2 - \omega^2)}{\text{Det}(-\partial_t^2)} \right]^{-1/2}. \quad (2.529)$$

行列式的比值具有傅里叶分解式

$$\frac{\text{Det}(-\partial_t^2 - \omega^2)}{\text{Det}(-\partial_t^2)} = \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} [\log(\nu_n^2 - \omega^2) - \log \nu_n^2] \right\}, \quad (2.530)$$

这里 $\nu_n = n\pi/\Delta t$ [回顾(2.110)]，并且在等式(2.186)中计算得到

$$\frac{\text{Det}(-\partial_t^2 - \omega^2)}{\text{Det}(-\partial_t^2)} = \frac{\sin \omega \Delta t}{\omega \Delta t}. \quad (2.531)$$

利用(2.527) 和(2.524)可以重新得到这个结果。我们用 $2\Delta t$ 替换 β ，并且再次利用 $\sum_n 1 = \zeta(0) = -1/2$ ，于是得到

$$\begin{aligned} \text{Det}(-\partial_t^2 - \omega^2) &= \sum_{n=1}^{\infty} \log(\nu_n^2 + \omega^2) \Big|_{\omega \rightarrow i\omega} = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\log \left(\frac{\nu_n^2}{\omega^2} + 1 \right) + \log \omega^2 \right]_{\omega \rightarrow i\omega} \\ &= \left[\sum_{n=1}^{\infty} \log \left(\frac{\nu_n^2}{\omega^2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \log \omega^2 \right]_{\omega \rightarrow i\omega} = \log \left(2 \frac{\sin \omega \Delta t}{\omega} \right). \end{aligned} \quad (2.532)$$

对于 $\omega = 0$, 由此式可以重新得到公式(2.522)。将此式和(2.532)代入(2.530), 于是我们重新得到结果(2.531)。这样我们发现振幅为

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \frac{1}{\sqrt{\pi i/M}} \text{Det}^{-1/2}(-\partial_t^2 - \omega^2) e^{i\mathcal{A}_{\text{cl}}/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{\pi i/M}} \sqrt{\frac{\omega}{2 \sin \omega \Delta t}} e^{i\mathcal{A}_{\text{cl}}/\hbar}, \quad (2.533)$$

与(2.173)一致。

2.15.4 一阶微分算法的对数迹

自由能(2.490)中的对数迹可以分成两项

$$\text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) = \text{Tr} \log(\partial_\tau + \omega) + \text{Tr} \log(-\partial_\tau + \omega). \quad (2.534)$$

因为由(2.502)知上式的左边等于 $\beta \hbar \omega$, 并且两个积分必须相同, 于是我们得到低温下的结果

$$\begin{aligned} \text{Tr} \log(\partial_\tau + \omega) &= \text{Tr} \log(-\partial_\tau + \omega) = \hbar \beta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \log(-i\omega' + \omega) = \hbar \beta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \log(i\omega' + \omega) \\ &= \frac{\hbar \beta \omega}{2}. \end{aligned} \quad (2.535)$$

相同的结果能够从关于 $\partial_\epsilon(\pm i\omega' + \omega)^\epsilon$ 积分的解析延拓到 $\epsilon = 0$ 得到

对于有限的温度, 我们可以利用等式(2.524)来得到

$$\text{Tr} \log(\partial_\tau + \omega) = \text{Tr} \log(-\partial_\tau + \omega) = \frac{1}{2} \text{Tr} \log(-\partial_\tau^2 + \omega^2) = \log \left(2 \sinh \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right), \quad (2.536)$$

对于 $T \rightarrow 0$, 上式简化为(2.535)。

如果在对数迹的自变量中有一个额外的因子*i*, 结果是相同的。为了了解这一点, 我们考虑与时间无关频率的情况, 并且在这里威尔特曼规则(2.506)告诉我们计算对 $\log(i\omega' \mp \omega)$ 的积分或者对 $\log(\omega' \pm i\omega)$ 积分是无关紧要的。

在零温度二阶微分算法($-\partial_\tau^2 + \omega^2$)的对数迹(2.502)下, 我们用 ω' by $i\omega'$ 代替 ω' 。然后, 我们在复平面下顺时针旋转积分回路, 得到

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \log(-\omega'^2 + \omega^2 - i\eta) = \omega, \quad \omega \geq 0, \quad (2.537)$$

这里, 无穷小正的 η 规定了如何沿着积分回路在 $\omega' = \pm \omega \mp i\eta$ 绕开奇点。回顾3.3节中关于*iη*-规定 (*iη*-prescription) 的讨论。积分(2.537)可以被分成积分

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \log[\omega' \pm (\omega - i\eta)] = i \frac{\omega}{2}, \quad \omega \geq 0. \quad (2.538)$$

因此公式(2.535)可以推广到任意复频率 $\omega = \omega_R + i\omega_I$, 有如下:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \log(\omega' \pm i\omega) = \mp \epsilon(\omega_R) \frac{\omega}{2}, \quad (2.539)$$

并且

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \log(\omega' \pm \omega) = -i\epsilon(\omega_I) \frac{\omega}{2}, \quad (2.540)$$

这里 $\epsilon(x) = \Theta(x) - \Theta(-x) = x/|x|$ 是反对称的赫维赛德函数(1.311), 该函数给出自变量的符号。公式(2.539)和(2.540)是如下更复杂求和式在大的时间下的极限

$$\frac{k_B T}{\hbar} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \log(\omega_m \pm i\omega) = \frac{k_B T}{\hbar} \log \left[2\epsilon(\omega_R) \sinh \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right], \quad (2.541)$$

并且

$$\frac{k_B T}{\hbar} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \log(\omega_m \pm \omega) = \frac{k_B T}{\hbar} \log \left[-2i\epsilon(\omega_I) \sin \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right]. \quad (2.542)$$

第一个表达式在 ω 的虚部下是周期性的, 周期是 $2\pi k_B T$, 第二个在 ω 实部下是周期性的。只有当 ω 的周期性部分消失, 行列式才具有很有意义的大时间极限。然而, 在许多应用下涨落包含具有不同复频率 ω 的对数(2.542) 和(2.541)的和, 并且只有虚部或者实部的和必须为零才能得到有意义的大时间极限 (large-time limit)。在这些情况下, 我们可以利用简化的公式(2.539) 和(2.540)。我们将在18.9.2节遇到重要的例子。

在3.3.2小节里, 公式(2.536)将推广到具有任意正的与时间有关的频率 $\Omega(\tau)$ 的情况, 这里有[见(3.133)]

$$\begin{aligned} \text{Tr log} [\pm \partial_\tau + \Omega(\tau)] &= \log \left\{ 2 \sinh \left[\frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau'' \Omega(\tau'') \right] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau'' \Omega(\tau'') + \log \left[1 - e^{- \int_0^{\hbar\beta} d\tau'' \Omega(\tau'')} \right]. \end{aligned} \quad (2.543)$$

2.15.5 一维对数迹的梯度展开式

公式(2.543)可以用来计算具有任意频率的二阶微分方程的对数迹, 作为一个半经典展开式。我们引入普朗克常数 \hbar 和势 $w(\tau) \equiv \hbar\Omega(\tau)$, 并且像在(2.534)中的那样分解成因子:

$$\text{Det} [-\hbar^2 \partial_\tau^2 + w^2(\tau)] = \text{Det} [-\hbar \partial_\tau - \bar{w}(\tau)] \times \text{Det} [\hbar \partial_\tau - \bar{w}(\tau)], \quad (2.544)$$

这里, 函数 $\bar{w}(\tau)$ 满足里卡蒂微分方程 (*Riccati differential equation*) : ²³

$$\hbar \partial_\tau \bar{w}(\tau) + \bar{w}^2(\tau) = w^2(\tau). \quad (2.545)$$

求解这个方程, 我们从(2.543)得到对数迹:

$$\text{Tr log} [-\hbar^2 \partial_\tau^2 + w^2(\tau)] = \log \left\{ 4 \sinh^2 \left[\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \bar{w}(\tau') \right] \right\}. \quad (2.546)$$

²³ 回顾卡里蒂微分方程 $y' = f(\tau)y + g(\tau)y^2 + h(y)$ 的一般形式, 是伯努利微分方程 $y' = f(\tau)y + g(\tau)y^n$ 在 $n = 2$ 时的非齐次形式。

该式的指数给出泛函行列式。对于常数 $\bar{w}(\tau) = \omega$, 这与周期边界条件下Gelfand-Yaglom函数的结果(2.431)一致。

这个一致性不是巧合。如果我们知道如何求解二阶微分方程(2.431), 就能找到任何里卡蒂微分方程的解。利用(2.431)里的Gelfand-Yaglom边界条件, 我们发现 $D_{\text{ren}}(\tau)$ 并且由此得到泛函行列式 $2[\dot{D}_{\text{ren}}(\hbar\beta) - 1]$ 。对比(2.546)表明里卡蒂微分方程(2.545)的解由以下给出

$$\bar{w}(\tau) = 2\hbar\partial_\tau \operatorname{arsinh} \sqrt{[\dot{D}_{\text{ren}}(\tau) - 1]/2}. \quad (2.547)$$

对于谐振子, 有 $\dot{D}_{\text{ren}}(\tau)$ 等于(2.435), 从而得到常数 $\bar{w}(\tau) = \hbar\omega$ 。

如果我们不能求解二阶微分方程(2.431), 里卡蒂方程(2.545)的解仍可以以 \hbar 幂次级数的形式给出:

$$\bar{w}(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{w}_n(\tau) \hbar^n, \quad (2.548)$$

该式给我们提供了一种被称作对数迹梯度展开式 (*gradient expansion*) 的形式。最低阶系数函数 $\bar{w}_0(\tau)$ 显然等于 $w(\tau)$ 。高阶遵守递归关系

$$\bar{w}_n(\tau) = -\frac{1}{2w(\tau)} \left(\dot{w}_{n-1}(\tau) + \sum_{k=1}^{n-1} \bar{w}_{n-k}(\tau) \bar{w}_k(\tau) \right), \quad n \geq 1. \quad (2.549)$$

对于 $n = 0, 1, 2, 3$, 我们解得

$$\begin{cases} \sqrt{v(\tau)}, -\frac{v'(\tau)}{4v(\tau)}, -\frac{5v'(\tau)^2}{32v(\tau)^{5/2}} + \frac{v''(\tau)}{8v(\tau)^{3/2}}, -\frac{15v'(\tau)^3}{64v(\tau)^4} + \frac{9v'(\tau)v''(\tau)}{32v(\tau)^3} - \frac{v^{(3)}(\tau)}{16v(\tau)^2}, \\ -\frac{1105v'(\tau)^4}{2048v(\tau)^{11/2}} + \frac{221v'(\tau)^2v''(\tau)}{256v(\tau)^{9/2}} - \frac{19v''(\tau)^2}{128v(\tau)^{7/2}} - \frac{7v'(\tau)v^{(3)}(\tau)}{32v(\tau)^{7/2}} + \frac{v^{(4)}(\tau)}{32v(\tau)^{5/2}} \end{cases}, \quad (2.550)$$

这里 $v(\tau) \equiv w^2(\tau)$ 。当然, 级数可以展开到任一阶。

2.15.6 对偶变换和低温展开式

存在另一种方法来计算自由能(2.489)的有限温度部分, 有必要在此给出该方法, 因为在统计力学里此方法有广阔的应用性。为此, 我们以如下形式改写(2.513)

$$\Delta F_\omega = \frac{k_B T}{2} \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} -\frac{\hbar}{k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_m}{2\pi} \right) \log(\omega_m^2 + \omega^2). \quad (2.551)$$

将积分变量变成 m , 于是变成

$$\Delta F_\omega = \frac{k_B T}{2} \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dm \right) \log \left[\left(\frac{2\pi k_B T}{\hbar} \right)^2 m^2 + \omega^2 \right]. \quad (2.552)$$

在解析正规化下, 利用公式(2.504)这个公式可以改写为

$$\Delta F_\omega = -\frac{k_B T}{2} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dm \right) e^{-\tau[(2\pi k_B T/\hbar)^2 m^2 + \omega^2]}. \quad (2.553)$$

对偶变换就是利用泊松公式(1.205)，对松原频率求和，在这里就是一个 $\int d\mu$ 积分加上一个额外的对整数 n 的求和。这使得(2.553)变为(用 β 来表示温度)，

$$\Delta F_\omega = -\frac{1}{2\beta} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \int_{-\infty}^\infty d\mu \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi\mu ni} - 1 \right) e^{-\tau[(2\pi/\hbar\beta)^2\mu^2 + \omega^2]}. \quad (2.554)$$

圆括号包含求和式 $2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{2\pi\mu ni}$ 。完成指数的平方计算后

$$2\pi\mu ni - \tau \left(\frac{2\pi}{\hbar\beta} \right)^2 \mu^2 = -\tau \left(\frac{2\pi}{\hbar\beta} \right)^2 \left[\mu - i \frac{n\hbar^2\beta^2}{4\pi\tau} \right]^2 - \frac{1}{4\tau} (\hbar\beta n)^2, \quad (2.555)$$

可以进行对 μ 的积分，结果是

$$\Delta F_\omega = -\frac{\hbar}{2\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \tau^{-1/2} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(n\hbar\beta)^2/4\tau - \tau\omega^2}. \quad (2.556)$$

现在我们可以利用积分公式[比较(1.343)]²⁴

$$\int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \tau^\nu e^{-a^2/\tau - b^2\tau} = 2 \left(\frac{a}{b} \right)^\nu K_\nu(2ab), \quad K_\nu(2ab) = K_{-\nu}(2ab), \quad (2.557)$$

从而得到关于修正的贝塞尔函数的求和式

$$\Delta F_\omega = -\frac{\hbar\omega}{2\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} 2(n\beta\hbar\omega)^{-1/2} \sqrt{2} K_{1/2}(n\beta\hbar\omega). \quad (2.558)$$

带有 $1/2$ 指标的修正的贝塞尔函数特别简单：

$$K_{1/2}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}. \quad (2.559)$$

代入(2.558)中，求和式是一个简单的几何式，可以如下处理：

$$\Delta F_\omega = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{-\beta\hbar\omega n} = \frac{1}{\beta} \log \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega} \right), \quad (2.560)$$

与以前的结果(2.523)一致。

对偶变换的作用可以用另一种方式来表达。它把(2.514)中对松原频率 ω_m 的求和：

$$S(\beta\hbar\omega) = k_B T \sum_{m=1}^{\infty} \log \left(1 + \frac{\omega^2}{\omega_m^2} \right) \quad (2.561)$$

转化为对谐振子量子数 n 的求和：

$$S(\beta\hbar\omega) = \frac{\beta\hbar\omega}{2} - \log \beta\hbar\omega - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{-n\beta\hbar\omega}. \quad (2.562)$$

²⁴I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *op. cit.*, Formulas 3.471.9 and 8.486.16.

在高温下，求和式(2.561)迅速收敛，这里可以以 ω^2 的幂次展开：

$$S(\beta\hbar\omega) = - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^{2k}} \right) \left[\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2\pi} \right)^2 \right]^k. \quad (2.563)$$

展开式系数等于等式在偶数自变量 $z = 2k$ 下(2.519)中的黎曼 ζ 函数 $\zeta(z)$ ，于是我们可以写为

$$S(\beta\hbar\omega) = - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \zeta(2k) \left(\frac{\beta\hbar\omega}{2\pi} \right)^{2k}. \quad (2.564)$$

在偶数的正自变量下， ζ 函数值与伯努利数有关²⁵

$$\zeta(2n) = \frac{(2\pi)^{2n}}{2(2n)!} |B_{2n}|. \quad (2.565)$$

伯努利数由以下展开式来定义

$$\frac{t}{e^t - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{t^n}{n!}. \quad (2.566)$$

最低的非零伯努利数是 $B_0 = 1$, $B_1 = -1/2$, $B_2 = 1/2$, $B_4 = -1/30, \dots$ 。伯努利数也决定负的奇数自变量的 ζ 函数值：

$$\zeta(1 - 2n) = -\frac{B_{2n}}{2n}, \quad (2.567)$$

这是以下这个一般恒等式的结果²⁶

$$\zeta(z) = 2^z \pi^{z-1} \sin(\pi z/2) \Gamma(1-z) \zeta(1-z) = 2^{z-1} \pi^z \zeta(1-z)/\Gamma(z) \cos \frac{z\pi}{2}. \quad (2.568)$$

这里我们给出需要的 $\zeta(z)$ 典型值²⁷

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}, \quad \zeta(5) = \frac{\pi^6}{945}, \quad \dots, \quad \zeta(\infty) = 1. \quad (2.569)$$

相比松原频率求和式(2.561) 和它的展开式(2.564), (2.562)中对量子数 n 的对偶变换求和在低温下迅速收敛。低温下处处收敛，但在相当高的温度下，是对数发散的。精确的变化形式由如下计算给出：对于大的 T ，存在一个大数 N ，与 $1/\beta\hbar\omega$ 比起来仍是小的多，从而使得 $e^{-\beta\hbar\omega N}$ 接近于1。这样我们将求和分成如下形式

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{-n\beta\hbar\omega} \approx \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{n} + \sum_{n=N}^{\infty} \frac{1}{n} e^{-n\beta\hbar\omega}. \quad (2.570)$$

²⁵ *ibid.*, Formulas 9.542 and 9.535.

²⁶ *ibid.*, Formula 9.535.2.

²⁷ 其他的经常需要的值是 $\zeta(0) = -1/2$, $\zeta'(0) = -\log(2\pi)/2$, $\zeta(-2n) = 0$, $\zeta(3) \approx 1.202057$, $\zeta(5) \approx 1.036928, \dots$

因 N 是个大数，第二项可以近似成一个积分

$$\int_N^\infty \frac{dn}{n} e^{-n\beta\hbar\omega} = \int_{N\beta\hbar\omega}^\infty \frac{dx}{x} e^{-x},$$

这是等式(2.468)的一个指数积分 $E_1(N\beta\hbar\omega)$ ，具有等式(2.469)的大自变量展开式 $-\gamma - \log(N\beta\hbar\omega)$ 。

计算(2.570)中的第一个求和式可以利用双 Γ 函数

$$\psi(z) \equiv \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)}. \quad (2.571)$$

有一个展开式²⁸

$$\psi(z) = -\gamma - \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{n+z} - \frac{1}{n+1} \right), \quad (2.572)$$

对于整数自变量可以简化为

$$\psi(N) = -\gamma + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{n}, \quad (2.573)$$

并且对于大的 z ，有展开式

$$\psi(z) \approx \log z - \frac{1}{2z} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_{2n}}{2nz^{2n}}. \quad (2.574)$$

与(2.469)联合，消掉 N 的对数，我们得到(2.570)中求和在大 T 下的变化

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{-n\beta\hbar\omega} \underset{T \rightarrow \infty}{\approx} -\log \beta\hbar\omega + \mathcal{O}(\beta). \quad (2.575)$$

这消掉(2.562)中的对数。

低温级数(2.562)可以用来表明解析正规化的幂次。假如我们想从里面提取出大 T 的表现（large- T behavior），这里，求和式

$$g(\beta\hbar\omega) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{-n\beta\hbar\omega} \quad (2.576)$$

缓慢收敛。我们想以 ω 的幂次展开求和式中的指数，但是这导致对 n 的正幂次求和。利用解析延拓来使得这些求和有意义是有可能的。为此，我们引入(2.576)的推广式：

$$\zeta_\nu(e^{\beta\hbar\omega}) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^\nu} e^{-n\beta\hbar\omega}, \quad (2.577)$$

²⁸I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *op. cit.*, Formula 1.362.1.

对于 $\nu = 1$, 该式简化为 $g(\beta\hbar\omega)$ 。上面的求和式可以分成两部分, 一部分是关于 n 的积分, 另一部分是求和与积分的差:

$$\zeta_\nu(e^{\beta\hbar\omega}) = \int_0^\infty dn \frac{1}{n^\nu} e^{-n\beta\hbar\omega} + \left(\sum_{n=1}^\infty - \int_0^\infty \right) \frac{1}{n^\nu} e^{-n\beta\hbar\omega}. \quad (2.578)$$

对于 $\nu < 1$ 积分是收敛的, 并且通过积分公式(2.496)给出 $\Gamma(1 - \nu)(\beta\hbar\omega)^\nu$ 。对于其它的 ν , 要靠解析延拓来定义。剩余部分我们将以 ω 的幂次展开, 给出

$$\zeta_\nu(e^{\beta\hbar\omega}) = \int_0^\infty dn \frac{1}{n^\nu} e^{-n\beta\hbar\omega} + \left(\sum_{n=1}^\infty - \int_0^\infty \right) \frac{1}{n^\nu} + \sum_{k=1}^\infty \left[\left(\sum_{n=1}^\infty - \int_0^\infty \right) n^{k-\nu} \right] \frac{(-1)^k}{k!} (\beta\hbar\omega)^k. \quad (2.579)$$

第二项就是简单的黎曼 ζ 函数 $\zeta(\nu)$ [回顾(2.519)]。由于威尔特曼规则(2.506)额外的积分为零, 因此也可以用以下的形式来定义 ζ 函数

$$\left(\sum_{n=1}^\infty - \int_0^\infty \right) \frac{1}{\nu^k} = \zeta(\nu), \quad (2.580)$$

如果这个公式用于(2.579)中的最后一项, 我们就得到被称作罗宾逊展开式 (*Robinson expansion*)²⁹ 的形式

$$\zeta_\nu(e^{\beta\hbar\omega}) = \Gamma(1 - \nu)(\beta\hbar\omega)^{\nu-1} + \zeta(\nu) + \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k!} (-\beta\hbar\omega)^k \zeta(\nu - k). \quad (2.581)$$

这个展开式以后将在波色-爱因斯坦凝聚 (Bose-Einstein condensation) 的讨论中发挥重要作用[见等式(7.38)]。

对于不同的应用, 给出辅助公式也是很有用的

$$\left(\sum_{n=1}^\infty - \int_0^\infty \right) \frac{e^{n\beta\hbar\omega}}{n^\nu} = \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k!} (-\beta\hbar\omega)^k \zeta(\nu - k) \equiv \bar{\zeta}_\nu(e^{\beta\hbar\omega}), \quad (2.582)$$

因为在求和减积分中, 第一个罗宾逊项不存在, 因此结果可以通过指数 $e^{n\beta\hbar\omega}$ 的泰勒展开和求和公式(2.580)来得到。

从(2.581)中我们可以通过极限 $\nu \rightarrow 1$ 来提取想要的求和式(2.576)。在极限附近, Γ 函数有一个极点 $\Gamma(1 - \nu) = 1/(1 - \nu) - \gamma + \mathcal{O}(\nu - 1)$ 。由恒等式

$$2^z \Gamma(1 - z) \zeta(1 - z) \sin \frac{\pi z}{2} = \pi^{1-z} \zeta(z) \quad (2.583)$$

和(2.520), 我们得出 $\zeta(\nu)$ 在 $\nu = 1$ 附近的变化行为如下

$$\zeta(\nu) = \frac{1}{\nu - 1} + \gamma + \mathcal{O}(\nu - 1) = -\Gamma(1 - \nu) + \mathcal{O}(\nu - 1). \quad (2.584)$$

因此, (2.581) 中的前两项联合给出对于 $\nu \rightarrow 1$ 时的有限结果 $\lim_{\nu \rightarrow 1} \Gamma(1 - \nu)[(\beta\hbar\omega)^{\nu-1} - 1] = -\log \beta\hbar\omega$ 。剩下的项在极限下包含的

²⁹J.E. Robinson, Phys. Rev. 83, 678 (1951).

值有 $\zeta(0) = -1/2$, $\zeta(-1)$, $\zeta(-2)$, 等等。这里, 我们利用 ζ 函数在偶数负自变量下为零的性质, 并且由恒等式(2.583)得出的性质, 即在任意负自变量下的函数与正自变量下的函数相联系。这表示在极限 $\nu \rightarrow 1$ 下, 对于(2.581)中 $k = 1, 2, 3, \dots$ 的展开式系数, 有:

$$\zeta(-2p) = 0, \quad \zeta(1 - 2p) = \frac{1}{p}(-1)^p \frac{(2p)!}{(2\pi)^{2p}} \zeta(2p), \quad p = 1, 2, 3, \dots . \quad (2.585)$$

因此, 对于展开式(2.581), 我们得到在极限 $\nu \rightarrow 1$ 下, 有:

$$g(\beta\hbar\omega) = \zeta_1(e^{\beta\hbar\omega}) = -\log \beta\hbar\omega + \frac{\beta\hbar\omega}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \zeta(2k) \frac{(-1)^k}{k!} (\beta\hbar\omega)^{2k}. \quad (2.586)$$

现在我们将此式代入等式(2.562), 于是我们再次得到之前关于 $S(\beta\hbar\omega)$ 的展开式(2.564), 之前该式是通过适当的对偶变换得到的。

如果忘记分开式(2.578), 即将求和式分成一个积分加上一个求和减积分的形式, 并且忘记正规化, 我们研究将会出什么错, 这是很有意思的。为此, 我们再以 ω 的幂次展开(2.576)。这样我们得到在 $\nu = 1$ 时的正规展开式

$$\zeta_1(e^{\beta\hbar\omega}) = \sum_{p=0}^{\infty} \left(\sum_{n=1}^{\infty} n^{p-1} \right) \frac{(-1)^p}{p!} (\beta\hbar\omega)^p = -\zeta(1) + \sum_{p=1}^{\infty} \zeta(1-p) \frac{(-1)^p}{p!} (\beta\hbar\omega)^p, \quad (2.587)$$

其中包含无穷量 $\zeta(1)$ 。由此我们用 $-\log \beta\hbar\omega$ 替换无穷量 $\zeta(1)$, 则可得到正确结果(2.586), 这里, 可以将这种替换看做对 $\zeta_{\text{reg}}(1)$ 的正规化:

$$\zeta(1) \rightarrow \zeta_{\text{reg}}(1) = -\log \beta\hbar\omega. \quad (2.588)$$

以上罗宾逊展开式的推导可以通过如下的对偶形式来补充。利用泊松公式(1.197), 我们将求和式(2.577)改写为对 n 的积分和对整数 m 的辅助求和, 这之后可以进行对 n 的积分, 给出

$$\begin{aligned} \zeta_{\nu}(e^{\beta\hbar\omega}) &\equiv \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dn e^{(2\pi im + \beta\hbar\omega)n} \frac{1}{n^{\nu}} = \Gamma(1 - \nu)(-\beta\hbar\omega)^{\nu-1} \\ &+ \Gamma(1 - \nu) 2 \operatorname{Re} \sum_{m=1}^{\infty} (-\beta\hbar\omega - 2\pi im)^{\nu-1}. \end{aligned} \quad (2.589)$$

求和式可以再次以 ω 的幂次展开

$$\begin{aligned} 2 \operatorname{Re} \sum_{m=1}^{\infty} (-2\pi im)^{\nu-1} \left(1 + \frac{\beta\hbar\omega}{2\pi im} \right)^{\nu-1} \\ = 2 \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\nu-1}{k} \cos[(1 - \nu - k)\pi/2] (2\pi)^{\nu-1-k} \zeta(1 - \nu + k) (\beta\hbar\omega)^k. \end{aligned} \quad (2.590)$$

利用关于 ζ 函数的关系式(2.583), 可以看出展开式2.589)与(2.577)一致。

注意到Note that the representation (2.589) of $\zeta_\nu(e^{\beta\hbar\omega})$ 的表达式是关于松原频率 $\omega_m = 2\pi m/\beta$ 的一个求和式[回顾等式(2.379)]:

$$\begin{aligned}\zeta_\nu(e^{\beta\hbar\omega}) &\equiv \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^\infty dn e^{(i\omega_m + \hbar\omega)\beta n} \frac{1}{n^\nu} \\ &= \Gamma(1-\nu)(-\beta\hbar\omega)^{\nu-1} \left[1 + 2 \operatorname{Re} \sum_{m=1}^{\infty} (1 + i\omega_m/\hbar\omega)^{\nu-1} \right].\end{aligned}\quad (2.591)$$

源于等式(2.578)对 n 积分的第一项与零松原频率相联系。这一项代表展开式的高温或经典极限。剩余项包含对所有非零松原频率的求和，是量子涨落的效应。

低温展开式(2.562)中的前两项也可以由求和式(2.561)得到，其中要用到欧拉-麦克劳林公式 (Euler-Maclaurin formula)³⁰ 该公式是关于一个函数 $F(t)$ 的离散点 $t = a + (k + \kappa)\Delta$ 的求和式，是从 $k = 0$ 到 $K \equiv (b - a)/\Delta$ 的:

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^K F(a + k\Delta) &= \frac{1}{\Delta} \int_a^b dt F(t) + \frac{1}{2} [F(a) + F(b)] \\ &+ \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\Delta^{2p-1}}{(2p)!} B_{2p} [F^{(2p-1)}(b) - F^{(2p-1)}(a)],\end{aligned}\quad (2.592)$$

或者，对 $t = a + (k + \kappa)\Delta$ 更一般的有

$$\sum_{k=0}^{K-1} F(a + (k + \kappa)\Delta) = \frac{1}{\Delta} \int_a^b dt F(t) + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\Delta^{p-1}}{p!} B_p(\kappa) [F^{(p-1)}(b) - F^{(p-1)}(a)],\quad (2.593)$$

这里， $B_n(\kappa)$ 是由展开式(2.566)的一般归纳来定义的伯努利函数:

$$\frac{te^{\kappa t}}{e^t - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(\kappa) \frac{t^n}{n!}.\quad (2.594)$$

在 $\kappa = 0$ 处，伯努利函数以伯努利数开始: $B_n(0) = B_n$ 。函数 $B_0(\kappa)$ 处处等于1。

公式(2.595)的另一种写法为

$$\sum_{k=0}^{K-1} F(a + (k + \kappa)\Delta) = \frac{1}{\Delta} \int_a^b dt \left[1 + \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\Delta^p}{p!} B_p(\kappa) \partial_t^p \right] F(t).\quad (2.595)$$

这表示对一个函数的离散值的求和式可以用关于该函数梯度展开式的积分来代替。

利用第一欧拉-麦克劳林公式(2.592)，并且有 $a = \omega_1^2$, $b = \omega_M^2$, $\Delta = \omega_1$ ，我们得到

$$\begin{aligned}\sum_{m=0}^M [\log(\omega_m^2 + \omega^2) - \log(\omega_m^2)] &= \left\{ \pi \frac{\omega}{\omega_1} + \frac{\omega_m}{\omega_1} [\log(\omega_m^2 + \omega^2) - 2] \right\} \Big|_{m=1}^{m=M} - \left\{ \omega = 0 \right\} \Big|_{m=1}^{m=M} \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ \log(\omega_1^2 + \omega^2) + \log(\omega_M^2 + \omega^2) \right\} - \left\{ \omega = 0 \right\}.\end{aligned}\quad (2.596)$$

³⁰M. Abramowitz and I. Stegun, op. cit., Formulas 23.1.30 and 23.1.32.

对于小的温度 T , 右边领头的两项为

$$\pi \frac{\omega}{\omega_1} - \frac{1}{2} \log \frac{\omega^2}{\omega_1^2}, \quad (2.597)$$

这与低温级数(2.562)中的前两项一致。我们注意到因为欧拉-麦克劳林公式不能以 T 的幂次展开, 所以不能由该公式重新得到(2.562)中小的指数项。

高温展开式到低温展开式的变换在统计力学模型里是一种分析相变的重要工具。³¹

2.16 热力学量的有限N行为 (finite-N Behavior)

欧几里得路径积分中的热力学涨落通常在计算机模拟下给出, 并且需要利用一个分割时间轴。这样, 知道热力学量以何种方式收敛于连续极限是很重要的。由(2.482), 我们可以计算对于有限的 N 的内能 E 和定容比热 C 。利用(2.482), 我们有

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\beta\tilde{\omega}_e)}{\partial\beta} &= \frac{\omega}{\cosh(\epsilon\tilde{\omega}_e/2)}, \\ \frac{\partial(\epsilon\tilde{\omega}_e)}{\partial\beta} &= \frac{2}{\beta}\tanh(\epsilon\tilde{\omega}_e/2), \end{aligned} \quad (2.598)$$

并且得到内能

$$\begin{aligned} E &= \frac{\partial}{\partial\beta}(\beta F) = \frac{\hbar}{2}\coth(\beta\hbar\tilde{\omega}_e/2)\frac{\partial(\beta\tilde{\omega}_e)}{\partial\beta} \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}\frac{\coth(\beta\hbar\tilde{\omega}_e/2)}{\cosh(\epsilon\tilde{\omega}_e/2)}. \end{aligned} \quad (2.599)$$

定容比热为

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_B}C &= -\beta^2\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}(\beta F) = -\beta^2\frac{\partial}{\partial\beta}E \\ &= \frac{1}{4}\beta^2\hbar^2\omega^2\left[\frac{1}{\sinh^2(\beta\hbar\tilde{\omega}_e/2)} + \coth(\beta\hbar\tilde{\omega}_e/2)\tanh(\epsilon\tilde{\omega}_e/2)\frac{\epsilon}{\hbar\beta}\right]\frac{1}{\cosh^2(\epsilon\tilde{\omega}_e/2)}. \end{aligned} \quad (2.600)$$

利用自然单位制 $\hbar = 1$, $k_B = 1$, Fig. 2.5显示出在不同 N 下的图表关系。在高温下, F , E , 和 C 不依赖 N :

$$F \rightarrow \frac{1}{\beta}\log\beta, \quad (2.601)$$

$$E \rightarrow \frac{1}{\beta} = T, \quad (2.602)$$

$$C \rightarrow 1. \quad (2.603)$$

这些极限是杜隆-珀蒂定理 (Dulong-Petit law) 的一个表现: 振子有一个动能自由度和一个势能自由度, 每一个自由度携带内能 $T/2$ 和比热 $1/2$ 。一方面, 在低温下 E 和 C 强烈的依赖 N (注意到因为在 $T = 0$ 时 F 和 E 不同, 格点近似的熵在连续极限下不为零)。这样, 收敛 $N \rightarrow \infty$ 是高度不均匀的。在达到极限后, 对于 $T \rightarrow 0$ 比热指数式迅速的趋于零, 如同 $e^{-\omega/T}$ 。 ω 被称作活化能

³¹See H. Kleinert, *Gauge Fields in Condensed Matter*, Vol. I Superflow and Vortex Lines, World Scientific, Singapore, 1989, pp. 1–742 (<http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/b1>).

Figure 2.4 对于时间分割片的不同数目 $N+1$, 内能 E 和定容比热 C 中的有限格点效应是温度的函数。注意到不均匀路线, 在该路线中, 在极限 $N \rightarrow \infty$ 下, 有趋近 $C \propto e^{-\omega/T}$ 的指数小 T 行为。

(activation energy)。³² 它是谐振子基态和第一激发态的能量差。另一方面, 对于大的但是有限的 N 比热在 $T = 0$ 时有大的值 $N+1$ 。这是由于对于一个有限的 N 和 $T \rightarrow 0$ (这里 ϵ 变大), $\tilde{\omega}_e$ 的变化如下

$$\begin{aligned}\tilde{\omega}_e &\rightarrow \frac{1}{\epsilon} \log(\epsilon^2 \omega^2), \\ \cosh(\epsilon \tilde{\omega}_e / 2) &\rightarrow \epsilon \omega / 2.\end{aligned}\quad (2.604)$$

因此

$$E \xrightarrow{T \rightarrow 0} \frac{1}{\beta} \coth[(N+1) \log(\epsilon \omega)] \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0, \quad (2.605)$$

$$C \xrightarrow{T \rightarrow 0} N+1. \quad (2.606)$$

关于 $N \rightarrow \infty$ 极限的不均匀接近 (nonuniform approach) 的原因是显然的: 如果我们以 ϵ 的幂次展开(2.482), 发现

$$\tilde{\omega}_e = \omega \left(1 - \frac{1}{24} \epsilon^2 \omega^2 + \dots \right). \quad (2.607)$$

在有限的 N 下趋近低温 T 时, 修正是相当大的, 就像通过写下(2.607)看到的那样, 其中 $\epsilon = \hbar \beta / (N+1)$, 有

$$\tilde{\omega}_e = \omega \left[1 - \frac{1}{24} \frac{\hbar^2 \omega^2}{k_b^2 T^2 (N+1)^2} + \dots \right]. \quad (2.608)$$

注意到(2.607)不含有 (order) ϵ 的修正。这表示对于固定温度 T 在极限 $N \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0$ 下, 所以热力学量的收敛性是相当迅速的—在 $1/N$ 的一阶下要比我们起初预计的要快[Trotter公式(2.26)也展示了 $1/N^2$ 的变化]。

³² 注意到在 D 维固体中, 格点振动可以看作是谐振子构成的一个系综, 其中这些谐振子的频率 ω 的大小是从零到德拜频率 (Debye frequency)。积掉对应的具有适当态密度的比热, $\int d\omega \omega^{D-1} e^{-\omega/k_B T}$, 从而给出低温下著名的指数定律 $C \propto T^D$ 。

2.17 自由下落粒子的时间演化振幅

在地球表面的一个粒子所具有的引力势为

$$V(\mathbf{x}) = V_0 + M \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}, \quad (2.609)$$

这里 $-\mathbf{g}$ 是地球的加速度矢量，指向地面， V_0 是一个常数。运动方程是

$$\ddot{\mathbf{x}} = -\mathbf{g}, \quad (2.610)$$

求解得到

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_a + \mathbf{v}_a(t - t_a) + \frac{\mathbf{g}}{2}(t - t_a)^2, \quad (2.611)$$

具有初速度

$$\mathbf{v}_a = \frac{\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a}{t_b - t_a} - \frac{\mathbf{g}}{2}(t_b - t_a). \quad (2.612)$$

代到作用量中

$$\mathcal{A} = \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - V_0 - \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \right), \quad (2.613)$$

我们得到经典作用量

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = -V_0(t_b - t_a) + \frac{M}{2} \frac{(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)^2}{t_b - t_a} - \frac{1}{2}(t_b - t_a)\mathbf{g} \cdot (\mathbf{x}_b + \mathbf{x}_a) - \frac{1}{24}(t_b - t_a)^3 \mathbf{g}^2. \quad (2.614)$$

因为(2.613)的平方部分和自由粒子的相同涨落因子也相同[见(2.125)]，于是我们得到时间演化振幅

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar \omega (t_b - t_a)/M}^3} e^{-\frac{i}{\hbar} V_0 (t_b - t_a)} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i M}{2\hbar} \left[\frac{(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)^2}{t_b - t_a} - (t_b - t_a)\mathbf{g} \cdot (\mathbf{x}_b + \mathbf{x}_a) - \frac{1}{12}(t_b - t_a)^3 \mathbf{g}^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.615)$$

势(2.609)可以看作是谐势的一个极限

$$V(\mathbf{x}) = V_0 + \frac{M}{2} \omega^2 (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2 \quad (2.616)$$

对于

$$\omega \rightarrow 0, \quad \mathbf{x}_0 = -\mathbf{g}/\omega^2 \rightarrow -\infty \approx \hat{\mathbf{g}}, \quad V_0 = -M \mathbf{x}_0^2/2 = -M g^2/2\omega^4 \rightarrow -\infty, \quad (2.617)$$

保持

$$\mathbf{g} = -M \omega^2 \mathbf{x}_0, \quad (2.618)$$

和

$$v_0 = V_0 + \frac{M}{2} \omega^2 \mathbf{x}_0^2 \quad (2.619)$$

不变。如果我们在振幅(2.175)采用这个极限，可以得到(2.615)。

波函数可以通过在谐振子波函数上取极限来得到。在一维下，我们令 $n = E/\omega$ ，发现谱表示(2.292)趋于

$$(x_b t_b | x_a t_a) = \int dE A_E(x_b) A_E^*(x_a) e^{-iE(t_b - t_a)/\hbar}, \quad (2.620)$$

具有波函数

$$A_E(x) = \frac{1}{\sqrt{l\varepsilon}} \text{Ai}\left(\frac{x}{l} - \frac{E}{\varepsilon}\right). \quad (2.621)$$

这里 $\varepsilon \equiv (\hbar^2 g^2 M/2)^{1/3}$ 和 $l \equiv (\hbar^2/2M^2g)^{1/3} = \varepsilon/Mg$ 分别是能量和长度的自然单位， $\text{Ai}(z)$ 是满足如下微分方程的艾里函数 (*Airy function*)

$$\text{Ai}''(z) = z \text{Ai}(z), \quad (2.622)$$

对于正 z ，艾里函数可以以修正的贝塞尔函数 $I_\nu(\xi)$ 和 $K_\nu(\xi)$ 来表示：³³

$$\text{Ai}(z) = \frac{\sqrt{z}}{2} [I_{-1/3}(2z^{3/2}/3) - I_{1/3}(2z^{3/2}/3)] = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{z}{3}} K_{1/3}(2z^{3/2}/3). \quad (2.623)$$

对于大的 z ，该式指数衰减：

$$\text{Ai}(z) \rightarrow \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} e^{-2z^{3/2}/3}, \quad z \rightarrow \infty. \quad (2.624)$$

对于大 z ，解析延拓³⁴

$$\begin{aligned} I_\nu(\xi) &= e^{-\pi\nu i/2} J(e^{\pi i/2}\xi), \quad -\pi < \arg\xi \leq \pi/2, \\ I_\nu(\xi) &= e^{-\pi\nu i/2} J(e^{\pi i/2}\xi), \quad \pi/2 < \arg\xi \leq \pi, \end{aligned} \quad (2.625)$$

给出

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{3} \sqrt{z} [J_{-1/3}(2(-z)^{3/2}/3) + J_{1/3}(2(-z)^{3/2}/3)], \quad (2.626)$$

这里， $J_{1/3}(\xi)$ 是一般的贝塞尔函数。对于大的自变量，这些函数作如下变动

$$J_\nu(\xi) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi\xi}} \cos(\xi - \pi\nu/2 - \pi/4) + \mathcal{O}(\xi^{-1}), \quad (2.627)$$

由此，我们得到艾里函数的变动部分 (oscillating part)

$$\text{Ai}(z) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} \sin [2(-z)^{3/2}/3 + \pi/4], \quad z \rightarrow -\infty. \quad (2.628)$$

艾里函数具有简单的傅里叶表示

$$\text{Ai}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{i(xk + k^3/3)}. \quad (2.629)$$

³³A compact description of the properties of Bessel functions is found in M. Abramowitz and I. Stegun, op. cit., Chapter 10. The Airy function is expressed in Formulas 10.4.14.

³⁴I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, op. cit., Formulas 8.406.

事实上，能量 E 的动量空间波函数是

$$\langle p|E\rangle = \sqrt{\frac{l}{\varepsilon}} e^{-i(pE - p^3/6M)l/\varepsilon\hbar} \quad (2.630)$$

满足正交关系和完备性关系

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar} \langle E'|p\rangle \langle p|E\rangle = \delta(E' - E), \quad \int dE \langle p'|E\rangle \langle E|p\rangle = 2\pi\hbar\delta(p' - p). \quad (2.631)$$

由于(2.629), (2.630)的傅里叶变换等于(2.621)。

2.18 磁场中的带电粒子

我们已经学会如何求解谐子的路径积分，现在我们准备研究一种更加复杂的具有物理重要性的简谐系统：磁场中的一个带电粒子。这个问题首先由朗道(L.D. Landau)在1930时在薛定谔理论下解决。³⁵

2.18.1 作用量

一个电量为 e 的粒子具有磁相互作用量为

$$\mathcal{A}_{\text{mag}} = \frac{e}{c} \int_{t_a}^{t_b} dt \dot{\mathbf{x}}(t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}(t)), \quad (2.632)$$

这里 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ 是磁场的矢势。总作用量是

$$\mathcal{A}[\mathbf{x}] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(t) + \frac{e}{c} \dot{\mathbf{x}}(t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}(t)) \right]. \quad (2.633)$$

现在假定粒子在均匀磁场 \mathbf{B} 中沿着 z 方向运动。这样的场可以由矢势来描述

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = (0, Bx, 0). \quad (2.634)$$

但是还有其他的可能性。磁场

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x}) \quad (2.635)$$

与磁相互作用量(2.632)在规范变换下是不变的

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \nabla \Lambda(\mathbf{x}), \quad (2.636)$$

这里， $\Lambda(\mathbf{x})$ 是 \mathbf{x} 的任意单值函数。严格意义上，它们满足施瓦茨可积分性条件(Schwarz integrability condition) [比较(1.40)–(1.41)]

$$(\partial_i \partial_j - \partial_j \partial_i) \Lambda(\mathbf{x}) = 0. \quad (2.637)$$

³⁵L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Pergamon, London, 1965.

例如，轴对称矢势

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{x} \quad (2.638)$$

给定相同的磁场；它不同于(2.634)，因为有规范变换

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \nabla \Lambda(\mathbf{x}), \quad (2.639)$$

规范函数

$$\Lambda(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} B xy. \quad (2.640)$$

在正则形式下，作用量为

$$\mathcal{A}[\mathbf{p}, \mathbf{x}] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - \frac{1}{2M} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right]^2 \right\}. \quad (2.641)$$

这样，由如下的被称作动量变量的最小减除 (*minimal substitution*)，从而使得点粒子的磁相互作用量包含于路径积分中：

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{P} \equiv \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}). \quad (2.642)$$

对于矢势(2.634)，作用量(2.641)变为

$$\mathcal{A}[\mathbf{p}, \mathbf{x}] = \int_{t_a}^{t_b} dt [\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - H(\mathbf{p}, \mathbf{x})], \quad (2.643)$$

具有哈密顿量

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + \frac{1}{8} M \omega_L^2 \mathbf{x}^2 - \frac{1}{2} \omega_L l_z(\mathbf{p}, \mathbf{x}), \quad (2.644)$$

这里， $\mathbf{x} = (x, y)$ ， $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ 并且

$$l_z(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = (\mathbf{x} \times \mathbf{p})_z = x p_y - y p_x \quad (2.645)$$

是轨道角动量的 z 分量。在薛定谔方程里， $H(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ 中的最后一项在态上是对角的，并且具有围绕 z 轴的特定的角动量。我们已经引入与场有关的频率

$$\omega_L = \frac{e}{Mc} B, \quad (2.646)$$

称其为朗道频率 (*Landau frequency*) 或者回旋频率 (*cyclotron frequency*)。也可以用包含波尔磁子 (*Bohr magneton*) 的形式给出

$$\mu_B \equiv \frac{\hbar e}{Mc}, \quad (2.647)$$

有

$$\omega_L = \mu_B B / \hbar. \quad (2.648)$$

(2.644)的前两项描述了 xy 平面下的谐振子，并且具有与场相关的磁频率(*magnetic frequency*)

$$\omega_B \equiv \frac{\omega_L}{2}. \quad (2.649)$$

注意到在标准规范(2.634)中，哈密顿量具有如下的旋转不变形式

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega_L^2 x^2 - \omega_L x p_y \quad (2.650)$$

而不是2.644)，上式表明在 x 方向上是频率为 ω_L 的振动， y 方向上是自由运动。

正则作用量(2.641)的时间分割形式为

$$\mathcal{A}_e^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \mathbf{p}_n (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}) - \frac{1}{2M} [p_{x_n}^2 + (p_{y_n} - Bx_n)^2 + p_{z_n}^2] \right\}, \quad (2.651)$$

关于粒子从 \mathbf{x}_a 运动到 \mathbf{x}_b 的时间演化振幅为

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = \prod_{n=1}^N \left[\int d^3 x_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} \right] \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}_e^N \right), \quad (2.652)$$

其中，时间分割作用量为

$$\mathcal{A}^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \mathbf{p}_n (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}) - \frac{1}{2M} [p_{x_n}^2 + (p_{y_n} - Bx_n)^2 + p_{z_n}^2] \right\}. \quad (2.653)$$

2.18.2 规范性质

注意到时间演化振幅不是规范不变的。如果我们在其他的规范下利用矢势

$$\mathbf{A}'(\mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \nabla \Lambda(\mathbf{x}), \quad (2.654)$$

作用量通过一个表面项发生改变

$$\Delta \mathcal{A} = \frac{e}{c} \int_{t_a}^{t_b} dt \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla \Lambda(\mathbf{x}) = \frac{e}{c} [\Lambda(\mathbf{x}_b) - \Lambda(\mathbf{x}_a)]. \quad (2.655)$$

因此，在振幅的两端都乘上一个相因子

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a)_A \rightarrow (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a)_{A'} = e^{ie\Lambda(\mathbf{x}_b)/c\hbar} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a)_A e^{-ie\Lambda(\mathbf{x}_a)/c\hbar}. \quad (2.656)$$

对于显著的粒子分布， $(\mathbf{x} t_b | \mathbf{x} t_a)$ ，显然相因子是不相干的。但是，如果系统的所有其他的观测量对应着规范不变的算符，那么这些量也必须是与相位 $\Lambda(\mathbf{x})$ 无关。

2.18.3 时间分割路径积分

因为作用量 \mathcal{A}^N 只在第一项 $\sum_{n=1}^{N+1} i\mathbf{p}_n \mathbf{x}_n$ 中含有变量 y_n 和 z_n ，所有我们可以对 y_n, z_n 进行积分，于是得到一个在动量 \mathbf{p}_n 的 y 分量和 z 分量下的 N Δ函数乘积式。如果用 \mathbf{p}' 来表示 \mathbf{p} 在 yz 平面上的投影，则乘积式为

$$(2\pi\hbar)^2 \delta^{(2)}(\mathbf{p}'_{N+1} - \mathbf{p}'_N) \cdots (2\pi\hbar)^2 \delta^{(2)}(\mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}'_1). \quad (2.657)$$

这允许对任意的 p_{yn}, p_{zn} 作积分，但是不能对总的 p_y, p_z 进行积分。因此，路径积分简化为

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^2} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{dp_{xn}}{2\pi\hbar} \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[p_y(y_b - y_a) + p_z(z_b - z_a) - (t_b - t_a) \frac{p_z^2}{2M} \right] \right\} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}_x^N \right), \end{aligned} \quad (2.658)$$

这里， \mathcal{A}_x^N 是时间分割作用量，它只包括对路径的 x 分量 $x(t)$ 作积分的一维路径积分，其形式为

$$\mathcal{A}_x^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left[p_{xn}(x_n - x_{n-1}) - \frac{p_{xn}^2}{2M} - \frac{1}{2M} \left(p_y - \frac{e}{c} B x_n \right)^2 \right]. \quad (2.659)$$

这是一维谐振子的作用量，具有与场有关的频率 ω_B ，并且振动中心依赖于 p_y ，我们给出其位置

$$x_0 = p_y/M\omega_L. \quad (2.660)$$

关于 $x(t)$ 的路径积分是简谐的，并且从(2.173)得到：

$$\begin{aligned} (x_b t_b | x_a t_a)_{x_0} &= \sqrt{\frac{M\omega_L}{2\pi i\hbar \sin \omega_L (t_b - t_a)}} \\ &\times \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{M\omega_L}{2 \sin \omega_L (t_b - t_a)} \left\{ [(x_b - x_0)^2 + (x_a - x_0)^2] \cos \omega_L (t_b - t_a) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2(x_b - x_0)(x_a - x_0) \right\} \right). \end{aligned} \quad (2.661)$$

在(2.658)中作 p_z 的积分，因此我们得到公式

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar(t_b - t_a)/M}} e^{i\frac{M}{2\hbar} \frac{(z_b - z_a)^2}{t_b - t_a}} (\mathbf{x}_b^\perp t_b | \mathbf{x}_a^\perp t_a), \quad (2.662)$$

并且有，正交于磁场的振幅为

$$(\mathbf{x}_b^\perp t_b | \mathbf{x}_a^\perp t_a) \equiv \frac{M\omega_L}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 e^{iM\omega_L x_0 (y_b - y_a)/\hbar} (x_b t_b | x_a t_a)_{x_0}. \quad (2.663)$$

通过计算 x_0 下的平方项后, (2.663)里总的指数项为

$$\begin{aligned} & \frac{iM\omega_L}{2\hbar} \left[-(x_b^2 + x_a^2) \tan[\omega_L(t_b - t_a)/2] + (x_b - x_a)^2 \frac{1}{\sin \omega_L(t_b - t_a)} \right] \\ & - i \frac{M\omega_L}{\hbar} \tan[\omega_L(t_b - t_a)/2] \left(x_0 - \frac{x_b + x_a}{2} - \frac{y_b - y_a}{2 \tan[\omega_L(t_b - t_a)/2]} \right)^2 \\ & + i \frac{M\omega_L}{2\hbar} \left[\frac{(x_b + x_a)^2}{2} \tan[\omega_L(t_b - t_a)/2] + \frac{(y_b - y_a)^2}{2 \tan[\omega_L(t_b - t_a)/2]} \right] \\ & + i \frac{M\omega_L}{2\hbar} (x_b + x_a)(y_b - y_a). \end{aligned} \quad (2.664)$$

积分 $M\omega_L \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 / 2\pi\hbar$ 除去第二项, 产生一个因子

$$\frac{M\omega_L}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{iM\omega_L \tan[\omega_L(t_b - t_a)/2]}}. \quad (2.665)$$

重新排列剩下的项, 我们得到振幅为

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = \sqrt{\frac{M}{2\pi i\hbar(t_b - t_a)}} \frac{\omega_L(t_b - t_a)/2}{\sin[\omega_L(t_b - t_a)/2]} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathcal{A}_{\text{cl}} + \mathcal{A}_{\text{sf}}) \right], \quad (2.666)$$

具有作用量

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\text{cl}} = \frac{M}{2} \left\{ \frac{(z_b - z_a)^2}{t_b - t_a} + \frac{\omega_L}{2} \cot[\omega_L(t_b - t_a)/2] [(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2] \right. \\ \left. + \omega_L (x_a y_b - x_b y_a) \right\} \end{aligned} \quad (2.667)$$

并且表面项为

$$\mathcal{A}_{\text{sf}} = \frac{M\omega_L}{2} (x_b y_b - x_a y_a) = \frac{e}{2c} B xy \Big|_a^b. \quad (2.668)$$

2.18.4 经典作用量

因为作用量是简谐的, 所有振幅有是一个相位 $e^{i\mathcal{A}_{\text{cl}}}$ 和涨落因子的乘积。与(2.639)和(2.656)的比较表明如果在轴对称规范(2.638)下利用矢势来计算振幅 $(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a)_{\tilde{A}}$ 的话, 表面项将不会出现。这样, 在此规范下, \mathcal{A}_{cl} 必须等于经典作用量。正交部分可以改写为

$$\mathcal{A}_{\text{cl}}^{\perp} = \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{M}{2} \frac{d}{dt} (x \dot{x} + y \dot{y}) + \frac{M}{2} [x(-\ddot{x} + \omega_L \dot{y}) + y(-\ddot{y} - \omega_L \dot{x})] \right\}. \quad (2.669)$$

运动方程

$$\ddot{x} = \omega_L \dot{y}, \quad \ddot{y} = -\omega_L \dot{x}, \quad (2.670)$$

将经典轨道的作用量简化为

$$\mathcal{A}_{\text{cl}}^{\perp} = \frac{M}{2} (x\dot{x} + y\dot{y}) \Big|_{t_a}^{t_b} = \frac{M}{2} ([x_b\dot{x}_b - x_a\dot{x}_a] + [y_b\dot{y}_b - y_a\dot{y}_a]). \quad (2.671)$$

轨道很容易的确定下来。将(2.670)中的两个方程代入彼此后，我们发现 \dot{x} 和 \dot{y} 作相互独立的振动：

$$\ddot{x} + \omega_L^2 x = 0, \quad \ddot{y} + \omega_L^2 y = 0. \quad (2.672)$$

这两个方程的一般解是

$$x = \frac{1}{\sin \omega_L(t_b - t_a)} [(x_b - x_0) \sin \omega_L(t - t_a) - (x_a - x_0) \sin \omega_L(t - t_b)] + x_0, \quad (2.673)$$

$$y = \frac{1}{\sin \omega_L(t_b - t_a)} [(y_b - y_0) \sin \omega_L(t - t_a) - (y_a - y_0) \sin \omega_L(t - t_b)] + y_0, \quad (2.674)$$

这里我们已经加上边界条件 $x(t_{a,b}) = x_{a,b}$, $y(t_{a,b}) = y_{a,b}$ 。通过满足(2.670)的要求来确定常数 x_0, y_0 。给出

$$x_0 = \frac{1}{2} \left[(x_b + x_a) + (y_b - y_a) \cot \frac{\omega_L}{2}(t_b - t_a) \right], \quad (2.675)$$

$$y_0 = \frac{1}{2} \left[(y_b + y_a) - (x_b - x_a) \cot \frac{\omega_L}{2}(t_b - t_a) \right]. \quad (2.676)$$

现在我们计算

$$x_b\dot{x}_b = \frac{\omega_L}{\sin \omega_L(t_b - t_a)} x_b [(x_0 - x_a) + (x_b - x_0) \cos \omega_L(t_b - t_a)], \quad (2.677)$$

$$x_a\dot{x}_a = \frac{\omega_L}{\sin \omega_L(t_b - t_a)} x_a [(x_0 - x_a) \cos \omega_L(t_b - t_a) + (x_b - x_0)], \quad (2.678)$$

因此有

$$\begin{aligned} x_b\dot{x}_b - x_a\dot{x}_a &= \omega_L x_0 (x_b + x_a) \tan \frac{\omega_L}{2}(t_b - t_a) \\ &\quad + \frac{\omega_L}{\sin \omega_L(t_b - t_a)} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega_L(t_b - t_a) - 2x_b x_a] \\ &= \frac{\omega_L}{2} \left[(x_b - x_a)^2 \cot \frac{\omega_L}{2}(t_b - t_a) + (x_b + x_a)(y_b - y_a) \right]. \end{aligned} \quad (2.679)$$

类似的，我们得到

$$\begin{aligned} y_b\dot{y}_b - y_a\dot{y}_a &= \omega_L y_0 (y_b + y_a) \tan \frac{\omega_L}{2}(t_b - t_a) \\ &\quad + \frac{\omega_L}{\sin \omega_L(t_b - t_a)} [(y_b^2 + y_a^2) \cos \omega_L(t_b - t_a) - 2y_b y_a] \\ &= \frac{\omega_L}{2} \left[(y_b - y_a)^2 \cot \frac{\omega_L}{2}(t_b - t_a) - (x_b - x_a)(y_b + y_a) \right]. \end{aligned} \quad (2.680)$$

代入到(2.671)后，给出正交运动的经典作用量

$$\mathcal{A}_{\text{cl}}^{\perp} = \frac{M}{2} \left\{ \frac{\omega_L}{2} \cot[\omega_L(t_b - t_a)/2] \left[(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2 \right] + \omega_L (x_a y_b - x_b y_a) \right\}, \quad (2.681)$$

这确实作用量(2.667)的正交部分。

2.18.5 平移不变性

振幅是如何保证所有的物理观测量是平移不变的，理解这一点是很有意思的。经典作用量的第一项是平凡不变的。最后一项为

$$\Delta\mathcal{A} = \frac{M\omega_L}{2}(x_a y_b - x_b y_a). \quad (2.682)$$

在距离为**d**的平移下

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{d}, \quad (2.683)$$

这一项变为

$$\frac{M\omega_L}{2}[d_x(y_b - y_a) + d_y(x_a - x_b)] = \frac{M\omega_L}{2}[(\mathbf{d} \times \mathbf{x})_b - (\mathbf{d} \times \mathbf{x})_a]_z \quad (2.684)$$

从而导致振幅有如下的纯规范变换

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) \rightarrow e^{ie\Lambda(\mathbf{x}_b)/c\hbar} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) e^{-ie\Lambda(\mathbf{x}_a)/c\hbar}, \quad (2.685)$$

其中相位是

$$\Lambda(\mathbf{x}) = -\frac{M\omega_L \hbar c}{2e} [\mathbf{d} \times \mathbf{x}]_z. \quad (2.686)$$

因为观测量只包含规范不变的量，所有这样的变换是不相关的。

这将在2.23.3中完成。

2.19 磁场中的带电粒子加上简谐势

对于在第5章中的应用，我们通过增加一个谐振子势来概括以上的磁系统，这样使得路径积分可以被求解。为了简单起见，我们只考虑关于磁场的系统的正交部分。省略正交符号，哈密顿量和(2.644)中的相同。我们可以不太费力的求解更一般的系统的路径积分，该系统下(2.644)的简谐势有一个不同的频率 $\omega \neq \omega_L$ ，这样，哈密顿量为

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2\mathbf{x}^2 - \omega_B l_z(\mathbf{p}, \mathbf{x}). \quad (2.687)$$

相关联的欧几里得作用量

$$\mathcal{A}_e[\mathbf{p}, \mathbf{x}] = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau [-i\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} + H(\mathbf{p}, \mathbf{x})] \quad (2.688)$$

具有拉格朗日形式

$$\mathcal{A}_e[\mathbf{x}] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + \frac{1}{2} M(\omega^2 - \omega_B^2) \mathbf{x}^2(\tau) - i M \omega_B [\mathbf{x}(\tau) \times \dot{\mathbf{x}}(\tau)]_z \right\}. \quad (2.689)$$

此时，我们看到只有当 $\omega \geq \omega_B$ 时，系统是稳定的。作用量(2.689)可以写成如下矩阵标记形式

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \frac{d}{d\tau} (\mathbf{x}\dot{\mathbf{x}}) + \frac{M}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{D}_{\omega^2, B} \mathbf{x} \right], \quad (2.690)$$

这里 $\mathbf{D}_{\omega^2, B}$ 是 2×2 的矩阵

$$\mathbf{D}_{\omega^2, B}(\tau, \tau') \equiv \begin{pmatrix} -\partial_\tau^2 + \omega^2 - \omega_B^2 & -2i\omega_B \partial_\tau \\ 2i\omega_B \partial_\tau & -\partial_\tau^2 + \omega^2 - \omega_B^2 \end{pmatrix} \delta(\tau - \tau'). \quad (2.691)$$

因为这个路径积分是高斯型的，所以我们可以立刻计算出配分函数

$$Z = \frac{1}{(2\pi\hbar/M)^2} \det \mathbf{D}_{\omega^2, B}^{-1/2}. \quad (2.692)$$

将 $\mathbf{D}_{\omega^2, B}(\tau, \tau')$ 展开为傅里叶级数

$$\mathbf{D}_{\omega^2, B}(\tau, \tau') = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \tilde{\mathbf{D}}_{\omega^2, B}(\omega_m) e^{-i\omega_m(\tau-\tau')}, \quad (2.693)$$

我们得到傅里叶分量为

$$\tilde{\mathbf{D}}_{\omega^2, B}(\omega_m) = \begin{pmatrix} \omega_m^2 + \omega^2 - \omega_B^2 & -2\omega_B \omega_m \\ 2\omega_B \omega_m & \omega_m^2 + \omega^2 - \omega_B^2 \end{pmatrix}, \quad (2.694)$$

其中行列式是

$$\det \tilde{\mathbf{D}}_{\omega^2, B}(\omega_m) = (\omega_m^2 + \omega^2 - \omega_B^2)^2 + 4\omega_B^2 \omega_m^2. \quad (2.695)$$

可以写成因子相乘的形式

$$\det \tilde{\mathbf{D}}_{\omega^2, B}(\omega_m) = (\omega_m^2 + \omega_+^2)(\omega_m^2 + \omega_-^2), \quad (2.696)$$

其中有

$$\omega_{\pm} \equiv \omega \pm \omega_B. \quad (2.697)$$

$\tilde{\mathbf{D}}_{\omega^2, B}(\omega_m)$ 的本征矢量是

$$\mathbf{e}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_- = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \quad (2.698)$$

本证值为

$$d_{\pm} = \omega_m^2 + \omega^2 \pm 2i\omega_m \omega_B = (\omega_m + i\omega_{\pm})(\omega_m - i\omega_{\mp}). \quad (2.699)$$

这样，右圆和左圆的组合式 $x_{\pm} = \pm(x \pm iy)/\sqrt{2}$ 使拉氏量(2.690)对角化，有

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\text{cl}} = & \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \frac{d}{d\tau} (x_+^* \dot{x}_+ + x_-^* \dot{x}_-) \right. \\ & \left. + \frac{M}{2} [x_+^* (-\partial_\tau - \omega_+) (-\partial_\tau + \omega_-) x_+ + x_-^* (-\partial_\tau - \omega_-) (-\partial_\tau + \omega_+) x_-] \right\}. \end{aligned} \quad (2.700)$$

延拓回到实的时间上，分量 $x_{\pm}(t)$ 被看做是以频率 ω_{\pm} 的独立的振动。

因数分解(2.696)使得(2.700)成为频率是 ω_{\pm} 的两个相互独立谐振子的作用量。因此，相关联的配分函数有乘积形式

$$Z = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta\omega_+/2)} \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta\omega_-/2)}. \quad (2.701)$$

对于最初2.18节讨论的在磁场中带电粒子的系统，利用在哈密顿量(2.644)中趋近极限 $\omega \rightarrow \omega_B$ 可以得到配分函数。因为系统在空间下变成平移不变的，所以 $\omega_- \rightarrow 0$ 和配分函数(2.701)发散。从记忆替换规则(2.359)中我们看到在这个极限下我们必须用一个正比于系统体积的表达式来替换相应消失的反频率。The role of ω^2 (2.359)中的 ω^2 在这里就是拉格朗日(2.689)中 \mathbf{x}^2 项前面的频率。因为是二维的。所以我们必须作如下替换

$$\frac{1}{\omega^2 - \omega_B^2} \xrightarrow{\omega \rightarrow \omega_B} \frac{1}{2\omega\omega_-} \xrightarrow{\omega_- \rightarrow 0} \frac{\beta}{2\pi/M} V_2, \quad (2.702)$$

这样，有

$$Z \xrightarrow{\omega_- \rightarrow 0} \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta\omega)} \frac{V_2}{\lambda_{\omega}^2}, \quad (2.703)$$

这里， λ_{ω} 是关于谐振子的等式(2.301) 和(2.357)中的量子力学长度标度。

2.20 规范不变性和另一种路径积分表示

在外部普通势 $V(\mathbf{x}, t)$ 和矢势 $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ 的粒子的作用量(2.633) 可以改写为如下形式，其中要利用任意的与时空相关的规范函数 $\Lambda(\mathbf{x}, t)$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\mathbf{x}] = & \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{e}{c} \dot{\mathbf{x}}(t) [\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \nabla \Lambda(\mathbf{x}, t)] - V(\mathbf{x}, t) + \frac{e}{c} \partial_t \Lambda(\mathbf{x}, t) \right\} \\ & - \frac{e}{c} [\Lambda(\mathbf{x}_b, t_b) - \Lambda(\mathbf{x}_a, t_a)]. \end{aligned} \quad (2.704)$$

积分里面的 $\Lambda(\mathbf{x}, t)$ 项可以通过最后两个表面项来抵消，使得作用量与 $\Lambda(\mathbf{x}, t)$ 无关。

现在，我们可以选择一个特殊的函数 $\Lambda(\mathbf{x}, t)$ ，它是经典作用量 $A(\mathbf{x}, t)$ 的 c/e 倍，是哈密顿-雅各比方程1.65)的解，即：

$$\frac{1}{2M} \left[\nabla A(\mathbf{x}, t) - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right]^2 + \partial_t A(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (2.705)$$

这样，我们得到作用量的另一种表达式：

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\mathbf{x}] = & \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{1}{2M} \left[M \dot{\mathbf{x}} - \nabla A(\mathbf{x}, t) + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right]^2 \\ & + A(\mathbf{x}_b, t_b) - A(\mathbf{x}_a, t_a). \end{aligned} \quad (2.706)$$

对于哈密顿-雅各比方程的两个极微小不同的解，相关联的作用量的差 δA 满足微分方程

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \delta A + \partial_t \delta A = 0, \quad (2.707)$$

这里 \mathbf{v} 是经典速度场

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \equiv (1/M) \left[\nabla A(\mathbf{x}, t) - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (2.708)$$

微分方程(2.707) 表明两个解 $A(\mathbf{x}, t)$ 分别满足运动关系 $\delta E = \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{p}/M = \dot{\mathbf{x}}_{\text{cl}} \cdot \nabla \delta A$, 并且对于这两个解, 在 \mathbf{x} 和 t 下, 粒子能量和动量也不同, 分别有 δE 和 $\delta \mathbf{p}$ 的差别。这直接是由 $E = \mathbf{p}^2/2M$ 得出的。这样的约束变分 δE 和 $\delta \mathbf{p}$ 使得作用量(2.706)是不变的。

一系列这种类型的改变 δA 可以用来使函数 $A(\mathbf{x}, t)$ 与路径的作用量 $A(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_a, t_a)$ 一致, 其中该路径从 \mathbf{x}_a, t_a 开始, 并且到达 \mathbf{x}, t 。在这个作用量函数的项中, 时间演化振幅的路径积分表示有如下形式

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) &= e^{iA(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a)/\hbar} \int_{\mathbf{x}(t_a) = \mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}(t_b) = \mathbf{x}_b} \mathcal{D}\mathbf{x} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{1}{2M} \left[M \dot{\mathbf{x}} - \nabla A(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_a, t_a) + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right]^2 \right\} \end{aligned} \quad (2.709)$$

或者利用 $\mathbf{v}(\mathbf{x}(t), t)$,

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = e^{iA(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a)/\hbar} \int_{\mathbf{x}(t_a) = \mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}(t_b) = \mathbf{x}_b} \mathcal{D}\mathbf{x} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} (\dot{\mathbf{x}} - \mathbf{v})^2 \right]. \quad (2.710)$$

现在, 涨落由瞬时速度的导数 $\dot{\mathbf{x}}(t)$ 来控制, 其中 $\dot{\mathbf{x}}(t)$ 来自于经典速度场 $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ 的定域值。因为路径积分保持导数尽可能的小, 所以我们称 $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ 为粒子在 \mathbf{x} 和 t 处的期望速度 (*desired velocity*)。引入动量变量 $\mathbf{p}(t)$, 振幅可以写成相空间路径积分

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) &= e^{iA(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a)/\hbar} \int_{\mathbf{x}(t_a) = \mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}(t_b) = \mathbf{x}_b} \mathcal{D}'\mathbf{x} \int \frac{\mathcal{D}\mathbf{p}}{2\pi\hbar} \\ &\times \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \mathbf{p}(t) [\dot{\mathbf{x}}(t) - \mathbf{v}(\mathbf{x}(t), t)] - \frac{1}{2M} \mathbf{p}^2(t) \right\} \right), \end{aligned} \quad (2.711)$$

该式将在18.15节中用来给出量子过程的随机解释。

2.21 速度路径积分

然而, 存在另外一种形式来表示路径积分, 在此形式下, 涨落速度发挥着重要作用, 并且以后可以看到这种形式将与18.13和18.640 中介绍的随机计算 (stochastic calculus) 的路径积分密切联系。 我们改写路径积分为

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = \int \mathcal{D}^3 x \delta \left(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a - \int_{t_a}^{t_b} dt \dot{\mathbf{x}}(t) \right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - V(\mathbf{x}) \right] \right\}, \quad (2.712)$$

δ 函数允许我们在路径积分时间分割形式下的积分测度中含有最后的变量 \mathbf{x}_n 。这样, 对于 $n = 0$ 到 N , 积掉所有的时间分割的时间导数 $(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n)/\epsilon$ 表明它们可以看作是独立的涨落变量 \mathbf{v}_n 。在势里, 可以通过代入以下等式使得对速度的依赖性变得很明确

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_b - \int_t^{t_b} dt \mathbf{v}(t), \quad (2.713)$$

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_a + \int_{t_a}^t dt \mathbf{v}(t), \quad (2.714)$$

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{X} + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt' \mathbf{v}(t') \epsilon(t' - t), \quad (2.715)$$

这里

$$\mathbf{X} \equiv \frac{\mathbf{x}_b + \mathbf{x}_a}{2} \quad (2.716)$$

是端点的平均位置，并且 $\epsilon(t - t')$ 是(1.311) 中引入的赫维赛德函数的反对称组合式。

在第一替换下，我们得到速度路径积分 (*velocity path integral*)

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = \int \mathcal{D}^3 v \delta \left(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a - \int_{t_a}^{t_b} dt \mathbf{v}(t) \right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M}{2} \mathbf{v}^2 - V \left(\mathbf{x}_b - \int_t^{t_b} dt \mathbf{v}(t) \right) \right] \right\}. \quad (2.717)$$

归一化积分测度，从而使得

$$\int \mathcal{D}^3 v \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M}{2} \mathbf{v}^2 \right] \right\} = 1. \quad (2.718)$$

对于自由粒子，这个归一化的正确性可以通过计算(2.717)来证实。对于 δ 函数，代入傅里叶表示

$$\delta \left(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a - \int_{t_a}^{t_b} dt \mathbf{v}(t) \right) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi i)^3} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \left(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a - \int_{t_a}^{t_b} dt \mathbf{v}(t) \right) \right], \quad (2.719)$$

利用(2.718)，我们可以完成指数的平方并且 \mathbf{v} 的涨落，得到

$$(\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi i)^3} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{p} (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a) - \frac{\mathbf{p}^2}{2M} (t_b - t_a) \right] \right\}. \quad (2.720)$$

这正好是自由粒子时间演化振幅(1.331)的谱表示(1.329) [也可以参照等式(2.51)]。

可以通过选择第三替换(2.715)来得到更对称的速度路径积分。这给出表达式

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) &= \int \mathcal{D}^3 v \delta \left(\Delta \mathbf{x} - \int_{t_a}^{t_b} dt \mathbf{v}(t) \right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} \mathbf{v}^2 \right\} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V \left(\mathbf{X} + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt' \mathbf{v}(t') \epsilon(t' - t) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (2.721)$$

如果我们想知道像如下形式的整体振幅的话，速度表示特别有用

$$\begin{aligned} \int d^3 x_a (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) &= \int \mathcal{D}^3 v \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} \mathbf{v}^2 \right\} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V \left(\mathbf{x}_b - \frac{1}{2} \int_t^{t_b} dt' \mathbf{v}(t') \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.722)$$

我们将在下一节运用。

2.22 散射矩阵的路径积分表示

在1.16节中，我们看到散射过程的描述需要对时间演化振幅进行几个非平凡的限制程序。我们看看当应用这个振幅的路径积分表示时，这些程序给出什么。

2.22.1 一般发展 (General Development)

动量空间下以时间演化算符来表示的散射矩阵公式(1.471) 有如下路径积分表示：

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle \equiv \lim_{t_b - t_a \rightarrow \infty} e^{i(E_b t_b - E_a t_a)/\hbar} \int d^3 x_b \int d^3 x_a e^{-i(\mathbf{p}_b \mathbf{x}_b - \mathbf{p}_a \mathbf{x}_a)/\hbar} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a). \quad (2.723)$$

引入动量转移 $\mathbf{q} \equiv (\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a)$ ，我们改写 $e^{-i(\mathbf{p}_b \mathbf{x}_b - \mathbf{p}_a \mathbf{x}_a)/\hbar}$ 为 $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_b/\hbar} e^{-i\mathbf{p}_a(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)/\hbar}$ ，于是观察到包含指数前因子 $e^{-i\mathbf{p}_a(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)/\hbar}$ 的振幅有路径积分表示：

$$e^{-i\mathbf{p}_a(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)/\hbar} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = \int \mathcal{D}^3 x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - \mathbf{p}_a \dot{\mathbf{x}} - V(\mathbf{x}) \right] \right\}. \quad (2.724)$$

$\dot{\mathbf{x}}$ 中的线性项可以通过移动路径来消除，其中从 $\mathbf{x}(t)$ 移至

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{x}(t) - \frac{\mathbf{p}_a}{M} t \quad (2.725)$$

给出

$$e^{-i\mathbf{p}_a(\mathbf{x}_b-\mathbf{x}_a)/\hbar} (\mathbf{x}_b t_b | \mathbf{x}_a t_a) = e^{-i\mathbf{p}_a^2(t_b-t_a)/2M\hbar} \int \mathcal{D}^3 y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M}{2} \dot{\mathbf{y}}^2 - V \left(\mathbf{y} + \frac{\mathbf{p}_a}{M} t \right) \right] \right\}. \quad (2.726)$$

将得到的所以等式代入(2.723)，我们得到

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle &\equiv \lim_{t_b-t_a \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{q}^2 t_b / 2M\hbar} \int d^3 y_b e^{-i\mathbf{q}\mathbf{y}_b/\hbar} \int d^3 y_a \\ &\times \int \mathcal{D}^3 y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M}{2} \dot{\mathbf{y}}^2 - V \left(\mathbf{y} + \frac{\mathbf{p}_a}{M} t \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.727)$$

在没有相互作用的情况下，对 $\mathbf{y}(t)$ 的路径积分简单的给出

$$\int d^3 y_a \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t_b-t_a)/M}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(\mathbf{y}_b - \mathbf{y}_a)^2}{t_b - t_a} \right] = 1, \quad (2.728)$$

对 \mathbf{y}_a 的路径积分给出

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{S} | \mathbf{p}_a \rangle|_{V=0} = \lim_{t_b-t_a \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{q}^2(t_b-t_a)/8M\hbar} (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{q}) = (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a), \quad (2.729)$$

这是等式(1.474)中从非散射束到散射矩阵的贡献。

对势进行傅里叶分解后，来自相互作用的一阶贡献为

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_b | \hat{S}_1 | \mathbf{p}_a \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \lim_{t_b-t_a \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{q}^2 t_b / 2M\hbar} \int d^3 y_b e^{-i\mathbf{q}\mathbf{y}_b/\hbar} \int \frac{d^3 Q}{(2\pi\hbar)^3} V(\mathbf{Q}) \int d^3 y_a \\ &\times \int_{t_a}^{t_b} dt' \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{\mathbf{p}_a \mathbf{Q}}{M} t' \right) \int \mathcal{D}^3 y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M}{2} \dot{\mathbf{y}}^2 + \delta(t' - t) \mathbf{Q} \cdot \mathbf{y} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.730)$$

一维下对于任意的源 $j(t)$ ，等式(3.168)求解了谐路径积分。在三维下，对于 $\omega = 0$ 并且有特殊的源 $j(t) = \delta(t' - t)Q$ ，结果是

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar(t_b-t_a)/M}^3} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(\mathbf{y}_b - \mathbf{y}_a)^2}{t_b - t_a} \right] \\ &\times \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{1}{t_b - t_a} \left\{ [\mathbf{y}_b(t' - t_a) + \mathbf{y}_a(t_b - t')] \mathbf{Q} - \frac{1}{2M} (t_b - t')(t' - t_a) \mathbf{Q}^2 \right\} \right). \end{aligned} \quad (2.731)$$

这里，对 \mathbf{y}_a 进行积分，给出

$$\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{y}_b \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2M} (t_b - t') \mathbf{Q}^2 \right\}. \quad (2.732)$$

现在，(2.730)中对 \mathbf{y}_b 的积分给出一个 δ 函数 $(2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{Q} - \mathbf{q})$ ，这样，(2.730) 中的指数前因子通过(2.732)中的第二个因子来消掉。

在极限 $t_b - t_a \rightarrow \infty$ 下，对 t' 的积分产生一个 δ 函数 $2\pi\hbar \delta(\mathbf{p}_b \mathbf{Q}/M + \mathbf{Q}^2/2M) = 2\pi\hbar \delta(E_b - E_a)$ ，该函数保证能量守恒。这样，我们得到著名的伯恩近似(Born approximation)

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{S}_1 | \mathbf{p}_a \rangle = -2\pi i \delta(E_b - E_a) V(\mathbf{q}). \quad (2.733)$$

一般来说，我们从(2.727)中减去非散射粒子项(2.729)，从而得到T矩阵的路径积分表示[对于定义，可以回顾(1.474)]：

$$2\pi\hbar i\delta(E_b - E_a)\langle \mathbf{p}_b | \hat{T} | \mathbf{p}_a \rangle \equiv -\lim_{t_b - t_a \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{q}^2 t_b / 2M\hbar} \int d^3 y_b e^{-i\mathbf{q}\mathbf{y}_b / \hbar} \int d^3 y_a \\ \times \int \mathcal{D}^3 y \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} \dot{\mathbf{y}}^2\right) \left\{ \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V\left(\mathbf{y} + \frac{\mathbf{p}_a}{M} t\right)\right] - 1 \right\}. \quad (2.734)$$

找一个左边不含有保持能量守恒的 δ 函数的公式，这是更好的。为了除去 δ 函数，我们观察到它来源于极限 $t_b - t_a \rightarrow \infty$ 下路径积分的时间平移不变性。如果我们移动时间变量 $t \rightarrow t + t_0$ ，并且同时改变 $\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{y} - \mathbf{p}_a t_0 / M$ ，这样路径积分保持不变，但在移动后的初始时间 $t_b + t_0$ 和最终时间 $t_a + t_0$ 上则发生改变。在极限 $t_b - t_a \rightarrow \infty$ 下，可以再次用 $\int_{t_a}^{t_b} dt$ 代替积分 $\int_{t_a+t_0}^{t_b+t_0} dt$ 。 t_0 依赖性保持不变的地方只在前因子 $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{y}_b / \hbar}$ 并且该前因子变为 $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{y}_b / \hbar} e^{i\mathbf{q}\mathbf{p}_a t_0 / M\hbar}$ 。在所有的路径涨落中，存在一个与路径时间移动等价的自由度。这与给出 δ 函数 $2\pi\hbar\delta(\mathbf{q}\mathbf{p}_a/M) = 2\pi\hbar\delta(E_b - E_a)$ 的对 t_0 的积分是等价的。我们只需要找到时间移动和在路径积分下对应测度的关系。显然，整体上看这是在方向 $\hat{\mathbf{p}}_a \equiv \mathbf{p}_a / |\mathbf{p}_a|$ 下的路径改变。分离出这个自由度的正规方法是根据法杰夫(Faddeev)和波波夫(Popov)³⁶发展的方法来进行的，通过将下面的单位积分表达式代入路径积分(2.727)：

$$1 = \frac{|\mathbf{p}_a|}{M} \int_{-\infty}^{\infty} dt_0 \delta(\hat{\mathbf{p}}_a(\mathbf{y}_b + \mathbf{p}_a t_0 / M)). \quad (2.735)$$

在下面，我们将丢掉入射束的下标 a ，有

$$\mathbf{p} \equiv \mathbf{p}_a, \quad p \equiv |\mathbf{p}_a| = |\mathbf{p}_b|. \quad (2.736)$$

在路劲积分中经过以上的改变，(2.735)中的 δ 函数变为在路径积分里面的 $\delta(\hat{\mathbf{p}}_a \mathbf{y}_b)$ ，并且不具有 t_0 依赖性。现在进行对 t_0 的积分，给出能量下的 δ 函数。从等式中去掉这个函数，我们得到T矩阵的路径积分表达式

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{T} | \mathbf{p}_a \rangle \equiv i \frac{p}{M} \lim_{t_b - t_a \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{q}^2(t_b - t_a) / 2M\hbar} \int d^3 y_b \delta(\hat{\mathbf{p}}_a \mathbf{y}_b) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{y}_b / \hbar} \int d^3 y_a \\ \times \int \mathcal{D}^3 y \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} \dot{\mathbf{y}}^2\right) \left\{ \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V\left(\mathbf{y} + \frac{\mathbf{P}}{M} t\right)\right] - 1 \right\}. \quad (2.737)$$

此时，我们很方便的转到路径积分(2.721)的速度表示(velocity representation)。这样能确保我们平凡的进行对 \mathbf{y}_b 的积分，于是得到(2.722)的 \mathbf{y} 形式。 δ 函数使得 \mathbf{y}_b 的纵向分量为零。 \mathbf{y}_b 的横向分量用 \mathbf{b} 来标记：

$$\mathbf{b} \equiv \mathbf{y}_b - (\hat{\mathbf{p}}_a \mathbf{y}_b) \hat{\mathbf{p}}/a. \quad (2.738)$$

因此，我们得到路径积分表达式

$$\langle \mathbf{p}_b | \hat{T} | \mathbf{p}_a \rangle \equiv i \frac{p}{M} \lim_{t_b - t_a \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{q}^2 t_b / 2M\hbar} \int d^2 b e^{-i\mathbf{q}\mathbf{b} / \hbar} \\ \times \int \mathcal{D}^3 v \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} \mathbf{v}^2\right) [e^{i\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{p}}[\mathbf{v}]} - 1], \quad (2.739)$$

这里，相互作用的效应包含于散射相位中

$$\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{p}}[\mathbf{v}] \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V\left(\mathbf{b} + \frac{\mathbf{p}}{M} t - \int_t^{t_b} dt' \mathbf{v}(t')\right). \quad (2.740)$$

我们用 $\dot{\mathbf{y}}(t) = -\int_t^{t_b} \mathbf{v}(t)$ 替换速度路径 $\mathbf{v}(t)$ ，可以回到传统的路径积分下。在 $t = t_b$ 处，替换形式 $\dot{\mathbf{y}}(t) = -\int_t^{t_b} \mathbf{v}(t)$ 为零。等价的，我们可以利用具有周期边界条件的路径 $\mathbf{z}(t)$ ，并且从这些 $\mathbf{z}(t_b) = \mathbf{z}_b$ 中减去。

³⁶L.D. Faddeev and V.N. Popov, Phys. Lett. B 25, 29 (1967).

从 $\langle \mathbf{p}_b | \hat{T} | \mathbf{p}_a \rangle$ 中，乘上因子 $-M/2\pi\hbar$ ，我们得到散射振幅 $f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a}$ ，这个振幅的平方给出微分截面[见等式(1.494)]。

注意到在速度表示下，(2.730)中对 \mathbf{y}_a 的简谐路径积分计算比以前我们需要的(2.731)，(2.732)要简单的多。在对(2.740)中的 $V(\mathbf{x})$ 进行傅里叶分解后，我们得到相关的积分是

$$\int \mathcal{D}^3 v \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M}{2} \mathbf{v}^2 - \Theta(t_b - t') \mathbf{Q} \cdot \mathbf{v} \right] \right\} = e^{-\frac{i}{2M\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \Theta^2(t_b - t') \mathbf{Q}^2} = e^{-\frac{i}{2M\hbar} (t_b - t') \mathbf{Q}^2}. \quad (2.741)$$

(2.732)中的第一个因子直接来自下面这个势的傅里叶表示中的自变量 \mathbf{Y}

$$V \left(\mathbf{y}_b + \frac{\mathbf{p}}{M} t - \int_t^{t_b} dt' \mathbf{v}(t') \right)$$

并且，这个势是在 S 矩阵(2.727)的速度表示下的。

2.22.2 改良的公式 (Improved Formulation)

公式(2.739)中的前因子 $e^{i\mathbf{q}^2 t_b / 2M\hbar}$ 阻碍我们在等式右边取更明确的极限 $t_b - t_a \rightarrow \infty$ 。为了克服这一点，我们用关于一些矢量场 $\mathbf{w}(t)$ 的辅助路径积分³⁷来表示这个因子：

$$e^{i\mathbf{q}^2 t_b / 2M\hbar} = \int \mathcal{D}^3 w \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} \mathbf{w}^2(t) \right] e^{i \int_{t_a}^{t_b} dt \Theta(t) \mathbf{w}(t) \cdot \mathbf{q} / \hbar}. \quad (2.742)$$

最后面的因子将(2.739)中的指数 $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{b}/\hbar}$ 变成 $e^{-i\mathbf{q}[\mathbf{b} + \int_{t_a}^{t_b} dt \Theta(t) \mathbf{w}(t)]/\hbar}$ 。因为 \mathbf{b} 是积分的哑变量 (dummy variable)，我们可以在散射相位 $\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{p}}[\mathbf{v}]$ 中作等价的替换 $\mathbf{b} \rightarrow \mathbf{b}_{\mathbf{w}} \equiv \mathbf{b} - \int_{t_a}^{t_b} dt \Theta(t) \mathbf{w}(t)$ ，并且有

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a} &= \lim_{t_b - t_a \rightarrow \infty} \frac{p}{2\pi i \hbar} \int d^2 b e^{-i\mathbf{q}\mathbf{b}/\hbar} \int \mathcal{D}^3 w \\ &\times \int \mathcal{D}^3 v \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{M}{2} (\mathbf{v}^2 - \mathbf{w}^2) \right] [\exp(i\chi_{\mathbf{b}_{\mathbf{w}}, \mathbf{p}}) - 1]. \end{aligned} \quad (2.743)$$

这个表达式中的散射相位可以从公式(2.740)中利用对整个 t 轴的积分来计算：

$$\chi_{\mathbf{b}_{\mathbf{w}}, \mathbf{p}}[\mathbf{v}, \mathbf{w}] = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt V \left(\mathbf{b} + \frac{\mathbf{p}}{M} t - \int_{t_a}^{t_b} dt' [\Theta(t' - t) \mathbf{v}(t') - \Theta(t') \mathbf{w}(t')] \right). \quad (2.744)$$

$\mathbf{w}(t)$ 的涨落需要使得出去的粒子平均上不是以速度 $\mathbf{p}/M = \mathbf{p}_a/M$ 运动，而是以速度 $\mathbf{p}_b/M = (\mathbf{p} + \mathbf{q})/M$ 。

我们也可以通过代入 $\mathbf{y}(t) = -\int_t^{t_b} \mathbf{v}(t)$ 并令 $\mathbf{z}(t) = -\int_t^{t_b} \mathbf{w}(t)$ ，从而回到更常规的路径积分形式。这样，我们得到另一种表示

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a} &= \lim_{t_b - t_a \rightarrow \infty} \frac{p}{2\pi i \hbar} \int d^2 b e^{-i\mathbf{q}\mathbf{b}/\hbar} \int d^3 y_a \int d^3 z_a \\ &\times \int \mathcal{D}^3 y \int \mathcal{D}^3 z \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} (\dot{\mathbf{y}}^2 - \dot{\mathbf{z}}^2) \right] [e^{i\chi_{\mathbf{b}_{\mathbf{z}}, \mathbf{p}}[\mathbf{y}]} - 1], \end{aligned} \quad (2.745)$$

有

$$\chi_{\mathbf{b}_{\mathbf{z}}, \mathbf{p}}[\mathbf{y}] \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V \left(\mathbf{b} + \frac{\mathbf{p}}{M} t + \mathbf{y}(t) - \mathbf{z}(0) \right), \quad (2.746)$$

这里，路径积分取遍满足 $\mathbf{y}_b = 0$ 和 $\mathbf{z}_b = 0$ 的所以路径。在3.26节，我们将微扰计算这样的路径积分。

³⁷See R. Rosenfelder, notes of a lecture held at the ETH Zürich in 1979: *Pfadintegrale in der Quantenphysik*, 126 p., PSI Report 97-12, ISSN 1019-0643, and Lecture held at the 7th Int. Conf. on Path Integrals in Antwerpen, *Path Integrals from Quarks to Galaxies*, 2002.

2.22.3 散射振幅的短时距近似

对于最小近似，我们忽略(2.746)中涨落变量 $\mathbf{y}(t)$ 和 $\mathbf{z}(t)$ 。因为(2.745)中的积分

$$\int d^3 y_a \int d^3 z_a \int \mathcal{D}^3 y \int \mathcal{D}^3 z \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{M}{2} (\dot{\mathbf{y}}^2 - \dot{\mathbf{z}}^2) \right] \quad (2.747)$$

具有单位归一性[回顾(2.732)的计算]，我们直接得到散射振幅的短时距近似(eikonal approximation)

$$f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a}^{\text{ei}} \equiv \frac{p}{2\pi i \hbar} \int d^2 b e^{-i\mathbf{q}\mathbf{b}/\hbar} \left[\exp \left(i\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{p}}^{\text{ei}} \right) - 1 \right], \quad (2.748)$$

有

$$\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{p}}^{\text{ei}} \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt V \left(\mathbf{b} + \frac{\mathbf{p}}{M} t \right). \quad (2.749)$$

通过引入变量 $z \equiv pt/M$ ，我们时间的积分转变为沿入射粒子方向的线积分。这样我们可以写出

$$\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{p}}^{\text{ei}} \equiv -\frac{M}{p} \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dz V(\mathbf{b} + \hat{\mathbf{p}}z). \quad (2.750)$$

I如果 $V(\mathbf{x})$ 是旋转对称的，它只取决于 $r \equiv |\mathbf{x}|$ 。这样，我们将势写为 $V(r)$ ，于是计算(2.750)时有如下积分

$$\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{p}}^{\text{ei}} \equiv -\frac{M}{p} \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dz V \left(\sqrt{b^2 + z^2} \right). \quad (2.751)$$

将上式代入(2.748)中，我们可以对 \mathbf{q} 和 \mathbf{b} 之间的所以角度进行积分，其中要用到公式

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \exp \left(\frac{i}{\hbar} qb \cos \theta \right) = J_0(qb), \quad (2.752)$$

这里， $J_0(\xi)$ 是贝塞尔函数，并且得到

$$f_{\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a}^{\text{ei}} = \frac{p}{i\hbar} \int db b J_0(qb) \left[\exp \left(i\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{p}}^{\text{ei}} \right) - 1 \right]. \quad (2.753)$$

积分变量 b 与等式(1.497)中引入的碰撞参数(impact parameter) b 一致。(2.753)的结果正好就是短时距近似(1.497)，其中所具有的 $\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{p}}^{\text{ei}}/2$ 充当角动量 $l = pb/\hbar$ 的散射相位 $\delta_l(p)$ ，即：

$$\chi_{\mathbf{b}, \mathbf{p}}^{\text{ei}} = 2i\delta_{pb/\hbar}(p). \quad (2.754)$$

2.23 时间演化振幅的海森堡算符方法

基于量子力学的海森堡绘景，我们可以得到简谐系统时间演化振幅的另一种有意思的路径积分形式。该形式的简单性在于此路径积分的得出需要通过求解给定初始位置和最终位置的经典运动方程来得到经典作用量的指数 $e^{iA/\hbar}$ 。然而，伴随这个指数的涨落因子是从处于不同时间的可操作轨道(operatorial orbits)的对易规则中得到的，我们现在将给出演示。

2.23.1 自由粒子

我们想计算时间演化算符的矩阵元

$$(\mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0) = \langle \mathbf{x} | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle, \quad (2.755)$$

这里， \hat{H} 是哈密顿算符

$$\hat{H} = H(\hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M}. \quad (2.756)$$

我们将通过求解一下微分方程来计算时间演化振幅(2.755)

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle &\equiv \langle \mathbf{x} | \hat{H} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle = \langle \mathbf{x} | e^{-i\hat{H}t/\hbar} [e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{H} e^{-i\hat{H}t/\hbar}] | \mathbf{x}' \rangle \\ &= \langle \mathbf{x} t | H(\hat{\mathbf{p}}(t)) | \mathbf{x}' 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.757)$$

现在自变量包含算符 $\hat{\mathbf{p}}$ 的依赖时间的海森堡绘景形式。等式右边的计算将基于把算符 $H(\hat{\mathbf{p}}(t))$ 重新表达为初始位移和最终位移算符的函数，在此方式下所有的最终位移算符排在所有初始位移算符的左边：

$$\hat{H} = H(\hat{\mathbf{x}}(t), \hat{\mathbf{x}}(0); t). \quad (2.758)$$

这样，等式右边的矩阵元可以立刻利用以下本证值方程来计算

$$\langle \mathbf{x} t | \hat{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{x} \langle \mathbf{x} t |, \quad \hat{\mathbf{x}}(0) | \mathbf{x}' 0 \rangle = \mathbf{x}' | \mathbf{x}' 0 \rangle, \quad (2.759)$$

有

$$\langle \mathbf{x} t | H(\hat{\mathbf{x}}(t), \hat{\mathbf{x}}(0); t) | \hat{\mathbf{x}} 0 \rangle = H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle, \quad (2.760)$$

于是微分方程(2.757)变为

$$i\hbar\partial_t \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle \equiv H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle, \quad (2.761)$$

或者

$$\langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle = C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') E(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) \equiv C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') e^{-i \int_t dt' H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t')/\hbar}. \quad (2.762)$$

前因子 $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 包含一个不确定的常数，该常数来自指数中的时间积分。

通过求解下面的海森堡运动方程，哈密顿算符处于编时形式 (time-ordered form) (2.758)

$$\frac{d\hat{\mathbf{x}}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{x}}(t)] = \frac{\hat{\mathbf{p}}(t)}{M}, \quad (2.763)$$

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}(t)] = 0. \quad (2.764)$$

第二个方程表明动量与时间无关：

$$\hat{\mathbf{p}}(t) = \hat{\mathbf{p}}(0), \quad (2.765)$$

这样，第一个方程可以通过

$$\hat{\mathbf{x}}(t) - \hat{\mathbf{x}}(0) = t \frac{\hat{\mathbf{p}}(t)}{M}, \quad (2.766)$$

来求解，并且使(2.756)成为

$$\hat{H} = \frac{M}{2t^2} [\hat{\mathbf{x}}(t) - \hat{\mathbf{x}}(0)]^2. \quad (2.767)$$

然而，这还不是我们想要的形式(2.758)，因为有一个不是编时形式的因子。适当的顺序可以由改写 \hat{H} 来达到，如下

$$\hat{H} = \frac{M}{2t^2} \{ \hat{\mathbf{x}}^2(t) - 2\hat{\mathbf{x}}(t)\hat{\mathbf{x}}(0) + \hat{\mathbf{x}}^2(0) + [\hat{\mathbf{x}}(t), \hat{\mathbf{x}}(0)] \}, \quad (2.768)$$

并且从等式(2.766)和正则对易规则 $[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = -i\hbar\delta_{ij}$ 中计算对易子，有

$$[\hat{\mathbf{x}}(t), \hat{\mathbf{x}}(0)] = -\frac{i\hbar}{M} D t, \quad (2.769)$$

这样我们得到想要的表达式

$$\hat{H} = H(\hat{\mathbf{x}}(t), \hat{\mathbf{x}}(0); t) = \frac{M}{2t^2} [\hat{\mathbf{x}}^2(t) - 2\hat{\mathbf{x}}(t)\hat{\mathbf{x}}(0) + \hat{\mathbf{x}}^2(0)] - i\hbar \frac{D}{2t}. \quad (2.770)$$

现在，矩阵元(2.760)可以立刻写出来：

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) = \frac{M}{2t^2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 - i\hbar \frac{D}{2t}. \quad (2.771)$$

由此，我们直接得到(2.762)的指数因子

$$E(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) = e^{-i \int dt H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t)/\hbar} = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2t} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 - \frac{D}{2} \log t \right]. \quad (2.772)$$

将(2.772)代入等式(2.762)，我们得到

$$\langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle = C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \frac{1}{t^{D/2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2t} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 \right]. \quad (2.773)$$

(2.772)中依赖 \mathbf{x}, \mathbf{x}' 的积分不确定常数被前因子 $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 吸收。含有 \mathbf{x} 的微分方程确定这一点：

$$\begin{aligned} -i\hbar \nabla \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle &= \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle = \langle \mathbf{x} | e^{-i\hat{H}t} \left[e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\mathbf{p}} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \right] | \mathbf{x}' \rangle = \langle \mathbf{x} t | \hat{\mathbf{p}}(t) | \mathbf{x}' 0 \rangle. \\ i\hbar \nabla' \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle &= \langle \mathbf{x} | e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x} t | \hat{\mathbf{p}}(0) | \mathbf{x}' 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.774)$$

代入(2.766)，并且利用动量守恒(2.765)，于是变为

$$\begin{aligned} -i\hbar \nabla \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle &= \frac{M}{t} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle, \\ i\hbar \nabla' \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle &= \frac{M}{t} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.775)$$

将之前的结果(2.773)代到这里，我们得到条件

$$-i\nabla C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 0, \quad i\nabla' C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 0, \quad (2.776)$$

只有通过常数 C 才可求解。接着，常数由初始条件来确定

$$\lim_{t \rightarrow 0} \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle = \delta^{(D)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.777)$$

得到

$$C = \sqrt{\frac{M}{2\pi i\hbar}}^{-D}, \quad (2.778)$$

这样，我们得到正确的自由粒子振幅(2.130)

$$\langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle \equiv \sqrt{\frac{M}{2\pi i\hbar t}}^{-D} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2t} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 \right]. \quad (2.779)$$

注意到此方法中涨落因子 $1/t^{D/2}$ 的出现是对易关系(2.769)的结果。

2.23.2 谐振子

这里，我们处理哈密顿算符

$$\hat{H} = H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} \mathbf{x}^2, \quad (2.780)$$

必须再次将此算法写成编时形式(2.758)。现在我们必须求解海森堡运动方程

$$\frac{d\hat{\mathbf{x}}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{x}}(t)] = \frac{\hat{\mathbf{p}}(t)}{M}, \quad (2.781)$$

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}(t)] = -M\omega^2 \hat{\mathbf{x}}(t). \quad (2.782)$$

通过求解这些方程，我们得到[比较(2.156)]

$$\hat{\mathbf{p}}(t) = M \frac{\omega}{\sin \omega t} [\hat{\mathbf{x}}(t) \cos \omega t - \hat{\mathbf{x}}(0)]. \quad (2.783)$$

将此式代入(2.780)，我们得到

$$\hat{H} = \frac{M\omega^2}{2 \sin^2 \omega t} \left\{ [\hat{\mathbf{x}}(t) \cos \omega t - \hat{\mathbf{x}}(0)]^2 + \sin^2 \omega t \hat{\mathbf{x}}^2(t) \right\}, \quad (2.784)$$

等于

$$\hat{H} = \frac{M\omega^2}{2 \sin^2 \omega t} \left\{ \hat{\mathbf{x}}^2(t) + \hat{\mathbf{x}}^2(0) - 2 \cos \omega t \hat{\mathbf{x}}(t) \hat{\mathbf{x}}(0) + \cos \omega t [\hat{\mathbf{x}}(t), \hat{\mathbf{x}}(0)] \right\}. \quad (2.785)$$

通过与等式带有 $\hat{\mathbf{x}}(t)$ 的(2.783)对易，我们得到对易子[比较(2.769)]

$$[\hat{\mathbf{x}}(t), \hat{\mathbf{x}}(0)] = -\frac{i\hbar}{M} D \frac{\sin \omega t}{\omega}, \quad (2.786)$$

这样，我们得到(2.760)形式中的哈密顿算符矩阵元[比较(2.771)]

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) = \frac{M\omega^2}{2 \sin^2 \omega t} \left(\mathbf{x}^2 + \mathbf{x}'^2 - 2 \cos \omega t \mathbf{x} \mathbf{x}' \right) - i\hbar \frac{D}{2} \omega \cot \omega t. \quad (2.787)$$

有如下积分[比较(2.772)]

$$\int dt H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) = -\frac{M\omega}{2 \sin \omega t} \left[(\mathbf{x}^2 + \mathbf{x}'^2) \cos \omega t - 2 \mathbf{x} \mathbf{x}' \right] - i\hbar \frac{D}{2} \log \frac{\sin \omega t}{\omega}. \quad (2.788)$$

将此式代入等式(2.762)，除了因子 $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ ，我们恰好得到谐振子振幅(2.175)。这又是微分方程(2.774)决定的，只留下由初始条件(2.777)确定的归一化因子结果是(2.778)。

再次的，涨落因子来自于对易子(2.786)。

2.23.3 磁场中的带电粒子

现在我们考虑2.18节讨论的处于三维磁场下的带电粒子，这里，哈密顿算符一般表示为协变动量算符(2.642)形式，

$$\hat{\mathbf{P}} \equiv \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}), \quad (2.789)$$

有[比较(2.641)]

$$\hat{H} = H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M}. \quad (2.790)$$

由于存在磁场，它的分量不对易，但是满足对易规则：

$$[\hat{P}_i, \hat{P}_j] = -\frac{e}{c} [\hat{p}_i, \hat{A}_j] - \frac{e}{c} [\hat{A}_i, \hat{p}_j] = i \frac{e\hbar}{c} (\nabla_i A_j - \nabla_j A_i) = i \frac{e\hbar}{c} B_{ij}, \quad (2.791)$$

这里的 $B_{ij} = \epsilon_{ijk} B_K$ 是通常的磁场反对称张量表示。

现在我们需要求解海森堡运动方程

$$\frac{d\hat{\mathbf{x}}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{x}}(t)] = \frac{\hat{\mathbf{P}}(t)}{M} \quad (2.792)$$

$$\frac{d\hat{\mathbf{P}}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}(t)] = \frac{e}{Mc} B(\hat{\mathbf{x}}(t)) \hat{\mathbf{P}}(t) + i \frac{e\hbar}{Mc} \nabla_j B_{ji}(\hat{\mathbf{x}}(t)), \quad (2.793)$$

这里， $B(\hat{\mathbf{x}}(t)) \hat{\mathbf{P}}(t)$ 理解为矩阵 $B_{ij}(\hat{\mathbf{x}}(t))$ 与矢量 $\hat{\mathbf{P}}$ 的乘积。在一个不变(*constant*)场， $B_{ij}(\hat{\mathbf{x}}(t))$ 是一个常数矩阵 B_{ij} ，第二个方程的最后一项消失，于是我们得到解

$$\hat{\mathbf{P}}(t) = e^{\Omega_L t} \hat{\mathbf{P}}(0), \quad (2.794)$$

这里, Ω_L 朗道频率(2.646)的矩阵形式

$$\Omega_{Lij} \equiv \frac{e}{Mc} B_{ij}, \quad (2.795)$$

利用朗道频率矢量

$$\boldsymbol{\omega}_L \equiv \frac{e}{Mc} \mathbf{B} \quad (2.796)$$

和转动群的 3×3 生成元

$$(L_k)_{ij} \equiv -i\epsilon_{kij} \quad (2.797)$$

我们得到

$$\Omega_L = i \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\omega}_L. \quad (2.798)$$

将上式代入等式(2.792), 我们得到

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \frac{e^{\Omega_L t} - 1}{\Omega_L} \frac{\hat{\mathbf{P}}(0)}{M}, \quad (2.799)$$

这里, 等式右边的矩阵再次由幂次级数展开式来确定

$$\frac{e^{\Omega_L t} - 1}{\Omega_L} = t + \Omega_L \frac{t^2}{2} + \Omega_L^2 \frac{t^3}{3!} + \dots . \quad (2.800)$$

我们可以反解(2.799), 得到

$$\frac{\hat{\mathbf{P}}(0)}{M} = \frac{\Omega_L/2}{\sinh \Omega_L t/2} e^{-\Omega_L t/2} [\hat{\mathbf{x}}(t) - \hat{\mathbf{x}}(0)]. \quad (2.801)$$

利用(2.794), 有

$$\hat{\mathbf{P}}(t) = MN(\Omega_L t) [\hat{\mathbf{x}}(t) - \hat{\mathbf{x}}(0)], \quad (2.802)$$

其中, 矩阵为

$$N(\Omega_L t) \equiv \frac{\Omega_L/2}{\sinh \Omega_L t/2} e^{\Omega_L t/2}. \quad (2.803)$$

将(2.802)求平方, 得到

$$\frac{\hat{\mathbf{P}}^2(t)}{2M} = \frac{M}{2} [\hat{\mathbf{x}}(t) - \hat{\mathbf{x}}(0)]^T K(\Omega_L t) [\hat{\mathbf{x}}(t) - \hat{\mathbf{x}}(0)], \quad (2.804)$$

这里

$$K(\Omega_L t) = N^T(\Omega_L t) N(\Omega_L t). \quad (2.805)$$

利用矩阵 Ω_L 的反对称性, 我们可以将上式改写为

$$K(\Omega_L t) = N(-\Omega_L t) N(\Omega_L t) = \frac{\Omega_L^2/4}{\sinh^2 \Omega_L t/2}. \quad (2.806)$$

由于等式(2.799), 处于不同时间的两个算符 $\hat{\mathbf{x}}(t)$ 的对易子是

$$[\hat{\mathbf{x}}_i(t), \hat{\mathbf{x}}_j(0)] = -\frac{i}{M} \left(\frac{e^{\Omega_L t} - 1}{\Omega_L} \right)_{ij}, \quad (2.807)$$

并且

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{x}}_i(t), \hat{\mathbf{x}}_j(0)] + [\hat{\mathbf{x}}_j(t), \hat{\mathbf{x}}_i(0)] &= -\frac{i}{M} \left(\frac{e^{\Omega_L t} - 1}{\Omega_L} + \frac{e^{\Omega_L^T t} - 1}{\Omega_L^T} \right)_{ij} \\ &= -\frac{i}{M} \left(\frac{e^{\Omega_L t} - e^{-\Omega_L t}}{\Omega_L} \right)_{ij} = -2 \frac{i}{M} \left[\frac{\sinh \Omega_L t}{\Omega_L} \right]_{ij}. \end{aligned} \quad (2.808)$$

考虑到这一点，我们以算符 $\hat{\mathbf{x}}(t)$ 和 $\hat{\mathbf{x}}(0)$ 的幂次展开(2.804)，因此编时顺序有如下表示，其中较晚的算符在较早的算符的左边：

$$\begin{aligned} H(\hat{\mathbf{x}}(t), \hat{\mathbf{x}}(0)) &= \frac{M}{2} [\hat{\mathbf{x}}^T(t) K(\Omega_L t) \hat{\mathbf{x}}(t) - 2\hat{\mathbf{x}}^T K(\Omega_L t) \hat{\mathbf{x}}(0) + \hat{\mathbf{x}}^T K(\Omega_L t) \hat{\mathbf{x}}(0)] \\ &\quad - \frac{i\hbar}{2} \text{tr} \left[\frac{\Omega_L}{2} \coth \frac{\Omega_L t}{2} \right]. \end{aligned} \quad (2.809)$$

这必须在 t 下积掉，其中我们需要利用公式

$$\int dt K(\Omega_L t) = \int dt \frac{\Omega_L^2/2}{\sinh^2 \Omega_L t/2} = -\frac{\Omega_L}{2} \coth \frac{\Omega_L t}{2}, \quad (2.810)$$

并且

$$\int dt \frac{1}{2} \text{tr} \left[\frac{\Omega_L}{2} \coth \frac{\Omega_L t}{2} \right] = \text{tr} \log \frac{\sinh \Omega_L t/2}{\Omega_L/2} = \text{tr} \log \frac{\sinh \Omega_L t/2}{\Omega_L t/2} + 3 \log t, \quad (2.811)$$

这些结果再次是由两边的泰勒展开得到。最后一项的因子3源于三维的求迹。这样我们可以立刻写出(2.762)中的指数因子 $E(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t)$ ：

$$E(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) = \frac{1}{t^{3/2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^T \left(\frac{\Omega_L}{2} \coth \frac{\Omega_L t}{2} \right) (\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \frac{1}{2} \text{tr} \log \frac{\sinh \Omega_L t/2}{\Omega_L t/2} \right\}. \quad (2.812)$$

最后一项给出一个前因子

$$\left[\det \frac{\sinh \Omega_L t/2}{\Omega_L t/2} \right]^{-1/2}. \quad (2.813)$$

像以前一样，(2.762)中的与时间无关的积分因子 $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 由 \mathbf{x} 和 \mathbf{x}' 中的微分方程所确定，并且这里需要协变导数：

$$\begin{aligned} \left[-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right] \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle &= \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{P}} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle = \langle \mathbf{x} | e^{-i\hat{H}t/\hbar} \left[e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\mathbf{P}} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \right] | \mathbf{x}' \rangle \\ &= \langle \mathbf{x} t | \hat{\mathbf{P}}(t) | \mathbf{x}' 0 \rangle = L(\Omega_L t)(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle, \end{aligned} \quad (2.814)$$

$$\begin{aligned} \left[i\hbar \nabla' - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right] \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle &= \langle \mathbf{x} | e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\mathbf{P}} | \mathbf{x}' \rangle \\ &= \langle \mathbf{x} t | \hat{\mathbf{P}}(0) | \mathbf{x}' 0 \rangle = L(\Omega_L t)(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.815)$$

计算部分导数，我们得到

$$\begin{aligned} -i\hbar \nabla \langle \mathbf{x} t | \mathbf{x}' 0 \rangle &= [-i\hbar \nabla C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')] E(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) + C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') [-i\hbar \nabla E(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t)] \\ &= [-i\hbar \nabla C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')] E(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) + C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') M \left(\frac{\Omega_L}{2} \coth \frac{\Omega_L t}{2} \right) (\mathbf{x} - \mathbf{x}') E(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t). \end{aligned}$$

减去(2.814)的右边，给出

$$M \left(\frac{\Omega_L}{2} \coth \frac{\Omega_L t}{2} \right) (\mathbf{x} - \mathbf{x}') - M L(\Omega_L t)(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -\frac{M}{2} \Omega_L (\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.816)$$

这样 $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 满足与时间无关的微分方程

$$\left[-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} A(\mathbf{x}) - \frac{M}{2} \Omega_L (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 0. \quad (2.817)$$

从第二个方程(2.815)中可以得到一个类似的方程：

$$\left[i\hbar \nabla' - \frac{e}{c} A(\mathbf{x}) - \frac{M}{2} \Omega_L (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 0. \quad (2.818)$$

求解这些方程得到

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = C \exp \left\{ i \frac{\hbar}{c} \int_{\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}} d\xi \left[\frac{e}{c} \mathbf{A}(\xi) + \frac{M}{2} \Omega_L(\xi - \mathbf{x}') \right] \right\}. \quad (2.819)$$

积分回路是任意的，因为括号中的矢量场

$$\frac{e}{c} \mathbf{A}'(\xi) \equiv \frac{e}{c} \mathbf{A}(\xi) + \frac{\Omega_L}{2} (\xi - \mathbf{x}') = \frac{e}{c} \left[\mathbf{A}(\xi) - \frac{1}{2} \mathbf{B} \times (\xi - \mathbf{x}') \right] \quad (2.820)$$

旋度为零， $\nabla \times \mathbf{A}'(\mathbf{x}) = 0$ 。因此，我们选择一条连接 \mathbf{x}' 和 \mathbf{x} 的直线来作为回路，在这种情况下， $d\xi$ 指向 $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$ 的方向，即 $\xi - \mathbf{x}'$ ，这样交叉乘积为零。因此，对于直线联系我们可以写下 Ω_L 项

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = C \exp \left\{ i \frac{e}{c} \int_{\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}} d\xi \mathbf{A}(\xi) \right\}. \quad (2.821)$$

最后，归一化常数 C 由初始条件(2.777)来确定，得到值(2.778)。

集合所有的项，我们得到振幅是

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' | 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar^2 t/M}}^3 \left[\det \frac{\sinh \Omega_L t/2}{\Omega_L t/2} \right]^{-1/2} \exp \left\{ i \frac{e}{c} \int_{\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}} d\xi \mathbf{A}(\xi) \right\} \\ &\times \exp \left\{ i \frac{M}{\hbar} \frac{t}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^T \left(\frac{\Omega_L}{2} \coth \frac{\Omega_L t}{2} \right) (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right\}. \end{aligned} \quad (2.822)$$

如果我们假定磁场指向 z 方向，那么所有的表达式都变得简单，在这种情况下频率矩阵变为

$$\Omega_L = \begin{pmatrix} 0 & \omega_L & 0 \\ -\omega_L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.823)$$

这样

$$\cos \frac{\Omega_L t}{2} = \begin{pmatrix} \cos \omega_L t/2 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \omega_L t/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.824)$$

并且

$$\frac{\sinh \Omega_L t/2}{\Omega_L t/2} = \begin{pmatrix} 0 & \sin \omega_L t/2 & 0 \\ -\sin \omega_L t/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.825)$$

行列式是

$$\det \frac{\sinh \Omega_L t/2}{\Omega_L t/2} = \left(\frac{\sinh \omega_L t/2}{\omega_L t/2} \right)^2. \quad (2.826)$$

我们计算在(2.822)中含有矢势的指数项我们选择矢势指向 y 方向的规范[回顾(2.634)]，并且在 \mathbf{x}' 和 \mathbf{x} 之间用参数表示直线 \mathbf{x}' 和 \mathbf{x} ，有

$$\xi = \mathbf{x}' + s(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad s \in [0, 1]. \quad (2.827)$$

这样，我们得到

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}} d\xi \mathbf{A}(\xi) &= B(y - y') \int_0^1 ds [x' + s(x - x')] = B(y - y')(x + x') \\ &= B(xy - x'y') + B(x'y - xy'). \end{aligned} \quad (2.828)$$

将此式和(2.826)代入(2.762)，我们重新得到之前的结果(2.666)。

Appendix 2A 贝克-坎贝尔-豪斯多夫公式与马格努斯展开式

我们在推导公式(2.9)中用到了贝克-坎贝尔-豪斯多夫公式T, 它的形式是

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{C}}, \quad (2A.1)$$

这里

$$\hat{C} = \hat{B} + \int_0^1 dt g(e^{\text{ad } A t} e^{\text{ad } B})[\hat{A}], \quad (2A.2)$$

$g(z)$ 是函数

$$g(z) \equiv \frac{\log z}{z-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1-z)^n}{n+1}, \quad (2A.3)$$

并且 $\text{ad } B$ 是在伴随表示 (*adjoint representation*) 中与 \hat{B} 相关的算符, 有如下定义

$$\text{ad } B[\hat{A}] \equiv [\hat{B}, \hat{A}]. \quad (2A.4)$$

我们也可以定义平凡的伴随算符 $(\text{ad } B)^0[\hat{A}] = 1[\hat{A}] \equiv \hat{A}$ 。通过展开等式(2A.2)中的指数并且利用幂次级数(2A.3), 我们得到明确的公式formula

$$\begin{aligned} \hat{C} &= \hat{B} + \hat{A} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n+1} \sum_{p_i, q_i: p_i + q_i \geq 1} \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^n p_i} \\ &\quad \times \frac{(\text{ad } A)^{p_1}}{p_1!} \frac{(\text{ad } B)^{q_1}}{q_1!} \dots \frac{(\text{ad } A)^{p_n}}{p_n!} \frac{(\text{ad } B)^{q_n}}{q_n!} [\hat{A}]. \end{aligned} \quad (2A.5)$$

最低展开项是

$$\begin{aligned} \hat{C} &= \hat{B} + \hat{A} - \frac{1}{2} [\frac{1}{2} \text{ad } A + \text{ad } B + \frac{1}{6} (\text{ad } A)^2 + \frac{1}{2} \text{ad } A \text{ad } B + \frac{1}{2} (\text{ad } B)^2 + \dots] [\hat{A}] \\ &\quad + \frac{1}{3} [\frac{1}{3} (\text{ad } A)^2 + \frac{1}{2} \text{ad } A \text{ad } B + \frac{1}{2} \text{ad } B \text{ad } A + (\text{ad } B)^2 + \dots] [\hat{A}] \\ &= \hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{12} ([\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]) + \frac{1}{24} [\hat{A}, [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}]] \dots . \end{aligned} \quad (2A.6)$$

结果可以重新排列为与扎森豪斯公式 (*Zassenhaus formula*) 密切联系的形式

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{\hat{Z}_2} e^{\hat{Z}_3} e^{\hat{Z}_4} \dots, \quad (2A.7)$$

这里

$$\hat{Z}_2 = \frac{1}{2} [\hat{B}, \hat{A}] \quad (2A.8)$$

$$\hat{Z}_3 = -\frac{1}{3} [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] - \frac{1}{6} [\hat{A}, [\hat{B}, \hat{A}]] \quad (2A.9)$$

$$\hat{Z}_4 = \frac{1}{8} \left([[[\hat{B}, \hat{A}], \hat{B}], \hat{B}] + [[[\hat{B}, \hat{A}], \hat{A}], \hat{B}] \right) + \frac{1}{24} [[[\hat{B}, \hat{A}], \hat{A}], \hat{A}] \quad (2A.10)$$

⋮

为了证明展开式(2A.6), 我们求解关于算符函数的微分方程

$$\hat{C}(t) = \log(e^{\hat{A}t} e^{\hat{B}}). \quad (2A.11)$$

$t = 1$ 时该式的值就是我们在(2A.5)中想要的结果 \hat{C} 。出发点是对于任意的算法 \hat{M} 我们有

$$e^{\hat{C}(t)} \hat{M} e^{-\hat{C}(t)} = e^{\text{ad } C(t)} [\hat{M}], \quad (2A.12)$$

由 $\text{ad } C$ 的定义得到。代入(2A.11)，等式的左边也能写为 $e^{\hat{A}t}e^{\hat{B}}\hat{M}e^{-\hat{B}}e^{-\hat{A}t}$ ，由定义(2A.4)，我们知道是等于 $e^{\text{ad } A t}e^{\text{ad } B}[\hat{M}]$ 的。因此，我们有

$$e^{\text{ad } C(t)} = e^{\text{ad } A t}e^{\text{ad } B}. \quad (2A.13)$$

(2A.11)的微分给出

$$e^{\hat{C}(t)} \frac{d}{dt} e^{-\hat{C}(t)} = -\hat{A}. \quad (2A.14)$$

另一方面，左边一般写为

$$e^{\hat{C}(t)} \frac{d}{dt} e^{-\hat{C}(t)} = -f(\text{ad } C(t))[\dot{\hat{C}}(t)], \quad (2A.15)$$

有

$$f(z) \equiv \frac{e^z - 1}{z}. \quad (2A.16)$$

下面将证实这一点。因为有

$$f(\text{ad } C(t))[\dot{\hat{C}}(t)] = \hat{A}. \quad (2A.17)$$

现在我们像在(2A.3)中那样定义函数 $g(z)$ ，并且看到该函数满足

$$g(e^z)f(z) \equiv 1. \quad (2A.18)$$

因此，我们有平凡的恒等式

$$\dot{\hat{C}}(t) = g(e^{\text{ad } C(t)})f(\text{ad } C(t))[\dot{\hat{C}}(t)]. \quad (2A.19)$$

利用(2A.17)和(2A.13)，由我们直接得到的结果(2A.2)，上式变为微分方程

$$\dot{\hat{C}}(t) = g(e^{\text{ad } C(t)})[\hat{A}] = e^{\text{ad } A t}e^{\text{ad } B}[\hat{A}], \quad (2A.20)$$

为了完成证明，我们必须证实(2A.15)。因为 $\dot{\hat{C}}(t)$ 一般不与 $\hat{C}(t)$ 对易，所以这个表达式并不是简单的等于 $-e^{\hat{C}(t)}\dot{\hat{C}}(t)Me^{-\hat{C}(t)}$ 。为了说明，我们考虑算符

$$\hat{O}(s, t) \equiv e^{\hat{C}(t)s} \frac{d}{dt} e^{-\hat{C}(t)s}. \quad (2A.21)$$

对此式作 s 的微分给出

$$\begin{aligned} \partial_s \hat{O}(s, t) &= e^{\hat{C}(t)s} \hat{C}(t) \frac{d}{dt} \left(e^{-\hat{C}(t)s} \right) - e^{\hat{C}(t)s} \frac{d}{dt} \left(\hat{C}(t) e^{-\hat{C}(t)s} \right) \\ &= -e^{\hat{C}(t)s} \dot{\hat{C}}(t) e^{-\hat{C}(t)s} \\ &= -e^{\text{ad } C(t)s} [\dot{\hat{C}}(t)]. \end{aligned} \quad (2A.22)$$

因此

$$\begin{aligned} \hat{O}(s, t) - \hat{O}(0, t) &= \int_0^s ds' \partial_{s'} \hat{O}(s', t) \\ &= - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^{n+1}}{(n+1)!} (\text{ad } C(t))^n [\dot{\hat{C}}(t)], \end{aligned} \quad (2A.23)$$

我们得到

$$\hat{O}(1, t) = e^{\hat{C}(t)} \frac{d}{dt} e^{-\hat{C}(t)} = -f(\text{ad } C(t))[\dot{\hat{C}}(t)], \quad (2A.24)$$

这正是我们想要证明的。

注意到利用关于对易子的雅各比恒等式，我们发现(2A.6) 中 \hat{C} 级数的最终形式可以以许多不同的方式来重新排列。找到一个含有最少的项的形式是很重要的任务。³⁸

可以利用相同的数学工具来推导诺依曼-刘维尔展开式 (Neumann-Liouville expansion) 或戴森级数(1.239) 与(1.251)的有用的修正。这被称作马格努斯展开式 (*Magnus expansion*)³⁹，在这个展开式中，我们写为 $\hat{U}(t_b, t_a) = e^{\hat{E}}$ ，并且将 \hat{E} 展开为

$$\begin{aligned}\hat{E} &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt_1 \hat{H}(t_1) + \frac{1}{2} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_a}^{t_b} dt_2 \int_{t_a}^{t_2} dt_1 [\hat{H}(t_2), \hat{H}(t_1)] \\ &+ \frac{1}{4} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^3 \left\{ \int_{t_a}^{t_b} dt_3 \int_{t_a}^{t_3} dt_2 \int_{t_a}^{t_2} dt_1 [\hat{H}(t_3), [\hat{H}(t_2), \hat{H}(t_1)]] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{3} \int_{t_a}^{t_b} dt_3 \int_{t_a}^{t_b} dt_2 \int_{t_a}^{t_b} dt_1 [[\hat{H}(t_3), \hat{H}(t_2)], \hat{H}(t_1)] \right\} + \dots, \end{aligned}\quad (2A.25)$$

该式要比诺依曼-刘维尔展开式更加迅速的收敛。

Appendix 2B 时间分割振子振幅的直接计算

时间分割之后，振幅(2.143)变成关于短时间振幅的一个多重积分[利用作用量(2.190)]

$$(x_n \epsilon | x_{n-1} 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \left[\frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\epsilon} - \epsilon\omega^2 \frac{1}{2} (x_n^2 + x_{n-1}^2) \right] \right\}. \quad (2B.26)$$

我们将上式写为

$$(x_n \epsilon | x_{n-1} 0) = \mathcal{N}_1 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [a_1(x_n^2 + x_{n-1}^2) - 2b_1 x_n x_{n-1}] \right\}, \quad (2B.27)$$

有

$$\begin{aligned}a_1 &= \frac{M}{2\epsilon} \left[1 - 2 \left(\frac{\omega\epsilon}{2} \right)^2 \right], \quad b_1 = \frac{M}{2\epsilon}, \\ \mathcal{N}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/M}}.\end{aligned}\quad (2B.28)$$

当在 N 个这样的振幅乘积下进行中间积分 (intermediate integrations) 时，结果必须由相同的一般形式

$$(x_N \epsilon | x_{N-1} 0) = \mathcal{N}_N \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [a_N(x_N^2 + x_0^2) - 2b_N x_N x_0] \right\}. \quad (2B.29)$$

乘上另一个短时间振幅，并且对中间位置积分，给出递归关系

$$\mathcal{N}_{N+1} = \mathcal{N}_N \mathcal{N}_N \sqrt{\frac{i\pi\hbar}{a_N + a_1}}, \quad (2B.30)$$

$$a_{N+1} = \frac{a_N^2 - b_N^2 + a_1 a_N}{a_1 + a_N} = \frac{a_1^2 - b_1^2 + a_1 a_N}{a_1 + a_N}, \quad (2B.31)$$

$$b_{N+1} = \frac{b_1 b_N}{a_1 + a_N}. \quad (2B.32)$$

³⁸For a discussion see J.A. Oteo, J. Math. Phys. 32, 419 (1991).

³⁹See A. Iserles, A. Marthinsen, and S.P. Nørsett, *On the implementation of the method of Magnus series for linear differential equations*, BIT 39, 281 (1999) (<http://www.damtp.cam.ac.uk/user/ai/Publications>).

由(2B.31), 我们得到

$$a_N^2 = b_N^2 + a_1^2 - b_1^2, \quad (2B.33)$$

求解的唯一的不平凡的递归关系是关于 b_N 的。利用(2B.32), 变为

$$b_{N+1} = \frac{b_1 b_N}{a_1 + \sqrt{b_N^2 - (b_1^2 - a_1^2)}}, \quad (2B.34)$$

或者

$$\frac{1}{b_{N+1}} = \frac{1}{b_1} \left(\frac{a_1}{b_N} + \sqrt{1 - \frac{b_1^2 - a_1^2}{b_N^2}} \right). \quad (2B.35)$$

现在我们引入等式(2.161)中的辅助频率 $\tilde{\omega}$ 。这样

$$a_1 = \frac{M}{2\epsilon} \cos \tilde{\omega}, \quad (2B.36)$$

和关于 b_{N+1} 的递归式给出

$$\frac{1}{b_{N+1}} = \frac{\cos \tilde{\omega}\epsilon}{b_N} + \frac{2\epsilon}{M} \sqrt{1 - \frac{M^2 \sin^2 \tilde{\omega}\epsilon}{4\epsilon^2 b_N^2}}. \quad (2B.37)$$

通过引入简化量

$$\beta_N \equiv \frac{2\epsilon}{M} b_N, \quad (2B.38)$$

有

$$\beta_1 = 1, \quad (2B.39)$$

递归式变为

$$\frac{1}{\beta_{N+1}} = \frac{\cos \tilde{\omega}\epsilon}{\beta_N} + \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \tilde{\omega}\epsilon}{\beta_N^2}}. \quad (2B.40)$$

对于 $N = 1, 2$, 有

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta_2} &= \cos \tilde{\omega}\epsilon + \sqrt{1 - \sin^2 \tilde{\omega}\epsilon} = \frac{\sin 2\tilde{\omega}\epsilon}{\sin \tilde{\omega}\epsilon}, \\ \frac{1}{\beta_3} &= \cos \tilde{\omega}\epsilon \frac{\sin 2\tilde{\omega}\epsilon}{\sin \tilde{\omega}\epsilon} + \sqrt{1 - \sin^2 \tilde{\omega}\epsilon \frac{\sin^2 2\tilde{\omega}\epsilon}{\sin^2 \tilde{\omega}\epsilon}} = \frac{\sin 3\tilde{\omega}\epsilon}{\sin \tilde{\omega}\epsilon}. \end{aligned} \quad (2B.41)$$

因此我们猜想一般的结果

$$\frac{1}{\beta_{N+1}} = \frac{\sin \tilde{\omega}(N+1)\epsilon}{\sin \tilde{\omega}\epsilon}. \quad (2B.42)$$

很简单去证实这个解满足递归关系(2B.40)。这样, 由(2B.38)我们得到

$$b_{N+1} = \frac{M}{2\epsilon} \frac{\sin \tilde{\omega}\epsilon}{\sin \tilde{\omega}(N+1)\epsilon}. \quad (2B.43)$$

将此式代入(2B.30)和(2B.33), 给出

$$a_{N+1} = \frac{M}{2\epsilon} \sin \tilde{\omega}\epsilon \frac{\cos \tilde{\omega}(N+1)\epsilon}{\sin \tilde{\omega}(N+1)\epsilon}, \quad (2B.44)$$

$$\mathcal{N}_{N+1} = \mathcal{N}_1 \sqrt{\frac{\sin \tilde{\omega}\epsilon}{\sin \tilde{\omega}(N+1)\epsilon}}, \quad (2B.45)$$

这样, (2B.29) 变为时间分割振幅(2.197)。

Appendix 2C 梅勒公式的推导

这里，我们简单的概述一下梅勒公式的推导。⁴⁰ 这基于对等式(2.295)左边的观察，我们称 $F(x, x')$ 为下面这个函数的变换

$$\tilde{F}(k, k') = \pi e^{-(k^2 + k'^2 + akk')/2}, \quad (2C.46)$$

可以在傅里叶表示下进行两个高斯积分来证实，即

$$F(x; x') = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{dk'}{2\pi} e^{ikx + ik'x} \tilde{F}(k, k'). \quad (2C.47)$$

现在我们考虑(2.295)的右边，并且构成傅里叶变换，其中要讲指数通过 $e^{k^2/2 - ikx}$ 看作是厄米多项式的生成函数⁴¹

$$e^{k^2/2 - ikx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ik/2)^n}{n!} H_n(x). \quad (2C.48)$$

这给出

$$\begin{aligned} \tilde{F}(k, k') &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dx' F(x, x') e^{-ikx - ik'x} = e^{-(k^2 + k'^2)/2} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dx' F(x, x') \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{(-ik/2)^n}{n!} \frac{(-ik'/2)^{n'}}{n'!} H_n(x) H_{n'}(x). \end{aligned} \quad (2C.49)$$

将(2.295)右边的展开式代入上式，并且利用厄米多项式的正交关系(2.304)，我们再次得到(2C.47)。

Notes and References

The basic observation underlying path integrals for time evolution amplitudes goes back to the historic article

P.A.M. Dirac, Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion **3**, 64 (1933).

He observed that the short-time propagator is the exponential of i/\hbar times the classical action.
See also

P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, Oxford, 1947;
E.T. Whittaker, Proc. Roy. Soc. Edinb. **61**, 1 (1940).

Path integrals in configuration space were invented by R. P. Feynman in his 1942 Princeton thesis.
The theory was published in 1948 in

R.P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20**, 367 (1948).

The mathematics of path integration had previously been developed by

N. Wiener, J. Math. Phys. **2**, 131 (1923); Proc. London Math. Soc. **22**, 454 (1924); Acta Math. **55**, 117 (1930);

N. Wiener, *Generalized Harmonic Analysis and Tauberian Theorems*, MIT Press, Cambridge, Mass., 1964,

after some earlier attempts by

P.J. Daniell, Ann. Math. **19**, 279; **20**, 1 (1918); **20**, 281 (1919); **21**, 203 (1920);

⁴⁰See P.M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York, Vol. I, p. 781 (1953).

⁴¹I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *op. cit.*, Formula 8.957.1.

discussed in

M. Kac, Bull. Am. Math. Soc. **72**, Part II, 52 (1966).

Note that even the name *path integral* appears in Wiener's 1923 paper.

Further important papers are

I.M. Gelfand and A.M. Yaglom, J. Math. Phys. **1**, 48 (1960);

S.G. Brush, Rev. Mod. Phys. **33**, 79 (1961);

E. Nelson, J. Math. Phys. **5**, 332 (1964);

A.M. Arthurs, ed., *Functional Integration and Its Applications*, Clarendon Press, Oxford, 1975,

C. DeWitt-Morette, A. Maheshwari, and B.L. Nelson, Phys. Rep. **50**, 255 (1979);

D.C. Khandekar and S.V. Lawande, Phys. Rep. **137**, 115 (1986).

The general harmonic path integral is derived in

M.J. Goovaerts, Physica **77**, 379 (1974); C.C. Grosjean and M.J. Goovaerts, J. Comput. Appl. Math. **21**, 311 (1988); G. Junker and A. Inomata, Phys. Lett. A **110**, 195 (1985).

The Feynman path integral was applied to thermodynamics by

M. Kac, Trans. Am. Math. Soc. **65**, 1 (1949);

M. Kac, *Probability and Related Topics in Physical Science*, Interscience, New York, 1959, Chapter IV.

A good selection of earlier textbooks on path integrals is

R.P. Feynman, A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw Hill, New York 1965,

L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Wiley-Interscience, New York, 1981,

F.W. Wiegel, *Introduction to Path-Integral Methods in Physics and Polymer Science*, World Scientific, Singapore, 1986.

G. Roepstorff, *Path Integral Approach to Quantum Physics*, Springer, Berlin, 1994.

The path integral in phase space is reviewed by

C. Garrod, Rev. Mod. Phys. **38**, 483 (1966).

The path integral for the most general quadratic action has been studied in various ways by

D.C. Khandekar and S.V. Lawande, J. Math. Phys. **16**, 384 (1975); **20**, 1870 (1979);

V.V. Dodonov and V.I. Manko, Nuovo Cimento **44B**, 265 (1978);

A.D. Janussis, G.N. Brodimas, and A. Streclas, Phys. Lett. A **74**, 6 (1979);

C.C. Gerry, J. Math. Phys. **25**, 1820 (1984);

B.K. Cheng, J. Phys. A **17**, 2475 (1984);

G. Junker and A. Inomata, Phys. Lett. A **110**, 195 (1985);

H. Kleinert, J. Math. Phys. **27**, 3003 (1986) (<http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/144>).

The caustic phenomena near the singularities of the harmonic oscillator amplitude at $t_b - t_a =$ integer multiples of π/ω , in particular the phase of the fluctuation factor (2.167), have been discussed by

J.M. Souriau, in *Group Theoretical Methods in Physics, IVth International Colloquium*, Nijmegen, 1975, ed. by A. Janner, *Springer Lecture Notes in Physics*, **50**;

P.A. Horvathy, Int. J. Theor. Phys. **18**, 245 (1979).

See in particular the references therein.

The amplitude for the freely falling particle is discussed in

G.P. Arrighini, N.L. Durante, C. Guidotti, Am. J. Phys. **64**, 1036 (1996);

B.R. Holstein, Am. J. Phys. **69**, 414 (1997).

For the Baker-Campbell-Hausdorff formula see

J.E. Campbell, Proc. London Math. Soc. **28**, 381 (1897); **29**, 14 (1898);

H.F. Baker, *ibid.*, **34**, 347 (1902); **3**, 24 (1905);

F. Hausdorff, Berichte Verhandl. Sächs. Akad. Wiss. Leipzig, Math. Naturw. Kl. **58**, 19 (1906);

W. Magnus, Comm. Pure and Applied Math **7**, 649 (1954), Chapter IV;

J.A. Oteo, J. Math. Phys. **32**, 419 (1991);

See also the internet address

E.W. Weisstein, <http://mathworld.wolfram.com/baker-hausdorffseries.html>.

The Zassenhaus formula is derived in

W. Magnus, Comm. Pure and Appl. Mathematics, **7**, 649 (1954); C. Quesne, *Disentangling q -Exponentials*, (math-ph/0310038).

For Trotter's formula see the original paper:

E. Trotter, Proc. Am. Math. Soc. **10**, 545 (1958).

The mathematical conditions for its validity are discussed by

E. Nelson, J. Math. Phys. **5**, 332 (1964);

T. Kato, in *Topics in Functional Analysis*, ed. by I. Gohberg and M. Kac, Academic Press, New York 1987.

Faster convergent formulas:

M. Suzuki, Comm. Math. Phys. **51**, 183 (1976); Physica A **191**, 501 (1992);

H. De Raedt and B. De Raedt, Phys. Rev. A **28**, 3575 (1983);

W. Janke and T. Sauer, Phys. Lett. A **165**, 199 (1992).

See also

M. Suzuki, Physica A **191**, 501 (1992).

The path integral representation of the scattering amplitude is developed in

W.B. Campbell, P. Finkler, C.E. Jones, and M.N. Misheloff, Phys. Rev. D **12**, 12, 2363 (1975).

See also:

H.D.I. Abarbanel and C. Itzykson, Phys. Rev. Lett. **23**, 53 (1969);

R. Rosenfelder, see Footnote 37.

The alternative path integral representation in Section 2.18 is due to

M. Roncadelli, Europhys. Lett. **16**, 609 (1991); J. Phys. A **25**, L997 (1992);

A. Defendi and M. Roncadelli, Europhys. Lett. **21**, 127 (1993).