第一次作业

mny

2023年9月20日

1 Path Integral without $\int dp$

标准的路径积分

$$\langle x_N | U(t_N, t_0) | x_0 \rangle = \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int \frac{\mathrm{d}p_{n+\frac{1}{2}} \, \mathrm{d}x_n}{2\pi\hbar} \right) \int \frac{\mathrm{d}p_{\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar} \times \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left[p_{n+\frac{1}{2}}(x_{n+1} - x_n) - \delta t \frac{H(p_{n+\frac{1}{2}}, x_{n+1}, t_{n+\frac{1}{2}}) + H(\dots, x_n, \dots)}{2} \right] \right),$$
(1.1)

其中动量的部分是高斯型的, 我们把它写出来

$$\prod_{n=0}^{N-1} \left[\int \frac{\mathrm{d}p_{n+\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left[p_{n+\frac{1}{2}} \delta x_n - \delta t \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{V(x_{n+1} + V(x_n))}{2} \right) \right] \right) \right]. \tag{1.2}$$

应用高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2 + bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}.$$
 (1.3)

对应到这里,

$$\begin{cases} a = \frac{i\delta t}{\hbar} \frac{1}{2m} \\ b = \frac{i\delta x_n}{\hbar} \end{cases}$$
 (1.4)

于是(1.2)的结果为

$$\prod_{n=0}^{N-1} \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi\hbar m}{\mathrm{i}\delta t}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(\delta x_n)^2 m}{2\hbar\delta t}} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta t \frac{V(x_{n+1}+V(x_n))}{2}} \tag{1.5}$$

路径积分去掉动量之后的结果为

$$\langle x_N | U(t_N, t_0) | x_0 \rangle = \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}} e^{\frac{i\delta t}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\delta x_n}{\delta t} \right)^2 - \frac{V(x_{n+1}) + V(x_n)}{2} \right]} \right)$$
(1.6)

2 UNITARY 2

也可以写成紧致的形式

$$\langle x_N | U(t_N, t_0) | x_0 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}} \prod_{n=1}^{N-1} \left(\int dx_n \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \int dt L}$$
 (1.7)

相对论性的哈密顿量 $H=\sqrt{p^2+m^2}$. 对指数上的项 $p\dot{x}-\sqrt{p^2+m^2}$ 使用鞍点近似 (saddle approximation), 带入

$$p = \frac{m\dot{x}}{\sqrt{1 - \dot{x}^2}} + p_{(1)},\tag{1.8}$$

这一项变为

$$p\dot{x} - H = \frac{m\dot{x}^{2}}{\sqrt{1 - \dot{x}^{2}}} + p_{(1)}\dot{x} - \sqrt{m^{2} + \frac{m^{2}\dot{x}^{2}}{1 - \dot{x}^{2}}} + 2\frac{m\dot{x}}{\sqrt{1 - \dot{x}^{2}}}p_{(1)} + p_{(1)}^{2}$$

$$= \frac{m\dot{x}^{2}}{\sqrt{1 - \dot{x}^{2}}} + p_{(1)}\dot{x} - \frac{m}{\sqrt{1 - \dot{x}^{2}}}\sqrt{1 + \frac{2\dot{x}\sqrt{1 - \dot{x}^{2}}}{m}}p_{(1)} + \frac{1 - \dot{x}^{2}}{m^{2}}p_{(1)}^{2}$$

$$= \frac{m\dot{x}^{2}}{\sqrt{1 - \dot{x}^{2}}} - \frac{m}{\sqrt{1 - \dot{x}^{2}}} + p_{(1)}\dot{x} - p_{(1)}\dot{x} - \frac{m\dot{x}^{2}}{\sqrt{1 - \dot{x}^{2}}}\frac{1 - \dot{x}^{2}}{2m^{2}}p_{(1)}^{2} - \frac{m}{\sqrt{1 - \dot{x}^{2}}}\left(-\frac{1}{8}\right)\frac{4\dot{x}^{2}(1 - \dot{x}^{2})}{m^{2}}p_{(1)}^{2}$$

$$= -m\sqrt{1 - \dot{x}^{2}} + \left(1 - \dot{x}^{2}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{p_{(1)}^{2}}{2m}$$

$$(1.9)$$

于是,含有动量的积分为

$$\prod_{n=0}^{N-1} \left[\int \frac{\mathrm{d}p_{n+\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{\mathrm{i}\delta t}{\hbar} \left[-m\sqrt{1-\dot{x}^2} + \left(1-\dot{x}^2\right)^{\frac{3}{2}} \frac{p_{(1)}^2}{2m} \right] \right) \right]$$
(1.10)

完成积分, 它变为

$$\prod_{n=0}^{N-1} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t (1 - \dot{x}^2)^{\frac{3}{2}}}} e^{-\frac{i \delta t}{\hbar} m \sqrt{1 - \dot{x}^2}} \right)$$
 (1.11)

最终的结果是

$$\langle x_N | U(t_N, t_0) | x_0 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \delta t}} \frac{1}{(1 - \dot{x}_N^2)^{\frac{4}{3}}} \prod_{n=1}^{N-1} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \delta t}} \frac{\mathrm{d}x_n}{(1 - \dot{x}_n^2)^{\frac{4}{3}}} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\delta t}{\hbar} m\sqrt{1 - \dot{x}^2}} \right), \quad (1.12)$$

其中 $\dot{x}_n \equiv \frac{x_n - x_{n-1}}{\delta t}$.

对于零质量情形, H = p, 上面的小量展开条件不再成立,

2 Unitary

2.1 算符方法

在 t=0 时, 满足. 所以我们只计算 $\frac{d}{dt}\left(U^{\dagger}U\right)$.

2 UNITARY 3

由 Schrödinger 方程, 我们有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t,0) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t)U(t,0), \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(U(t,0)\right)^{\dagger} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(U(t,0)\right)^{\dagger}\hat{H}(t) \tag{2.1}$$

所以,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(U^{\dagger} U \right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} (U^{\dagger}) U + U^{\dagger} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} U = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} U^{\dagger} \hat{H} U - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} U^{\dagger} \hat{H} U = 0 \tag{2.2}$$

这保证了幺正性.

2.2 路径积分方法

路径积分当中我们得到的是一个矩阵元,

$$\langle x_N | U(t_N, t_0) | x_0 \rangle \tag{2.3}$$

它的幺正性可以写成

$$\int dx_b \left(\langle x_b | U(t_N, t_0) | x_c \rangle \right)^{\dagger} \langle x_a | U(t_N, t_0) | x_a \rangle = \langle x_c | x_a \rangle = \delta(x_c - x_a)$$
(2.4)

幺正性是对于每个时刻成立的, t 不是这个算符 (矩阵) 的角标, 不需要对 t 积分.

$$(\langle x_b|U(t_N,t_0)|x_c\rangle)^{\dagger}\langle x_a|U(t_N,t_0)|x_a\rangle$$

$$= \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int \frac{\mathrm{d}p'_{n+\frac{1}{2}} \, \mathrm{d}x'_{n}}{2\pi\hbar}\right) \int \frac{\mathrm{d}p'_{\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar} \quad \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int \frac{\mathrm{d}p_{n+\frac{1}{2}} \, \mathrm{d}x_{n}}{2\pi\hbar}\right) \int \frac{\mathrm{d}p_{\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar}$$

$$\times \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left[p'_{n+\frac{1}{2}}(x'_{n+1} - x'_{n}) - \delta t \frac{H(p'_{n+\frac{1}{2}}, x'_{n+1}, t_{n+\frac{1}{2}}) + H(\cdots, x'_{n}, \cdots)}{2}\right]\right)$$

$$\times \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left[p_{n+\frac{1}{2}}(x_{n+1} - x_{n}) - \delta t \frac{H(p_{n+\frac{1}{2}}, x_{n+1}, t_{n+\frac{1}{2}}) + H(\cdots, x_{n}, \cdots)}{2}\right]\right)$$