13：传播子与路径积分简介

#Quantum_Mechanics

> 当历史囊括了所有轨迹
> 当自然似不再留有疑义
> 难道又一个发现
> 再从头拾起

在之前，我们介绍了态矢随着时间的演化：

$$
\begin{aligned}
|\alpha, t_0; t\rangle &= \exp\left(-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right)|\alpha; t_0\rangle \\
&= \sum_a |a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0\rangle \exp\left(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right)
\end{aligned}
$$

我们要看态矢在 $|x\rangle$ 基底下的变化，因此上式两侧同时与 $\langle x|$ 内积，得到：

$$
\langle x'|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'}\langle x'|a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0\rangle \exp\left(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right)
$$

也可以写成下面的形式：

$$
\psi(x', t) = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) u_{a'}(x') \exp\left(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right)
$$

注意到：

$$
\begin{aligned}
\langle x''|\alpha\rangle &= \sum_{a'}\langle x''|a'\rangle\langle a'|\alpha_0\rangle \exp\left(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right) \\
&= \sum_{a'}\sum_{a''}\langle x''|a''\rangle\langle a''|a'\rangle\langle a'|\alpha_0\rangle \exp\left(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right) \\
&= \int d^3x' \sum_{a''}\langle x''|a''\rangle\langle a''|x'\rangle\langle x'|a'\rangle\langle a'|\alpha_0\rangle \exp\left(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right) \\
&= \int d^3x' \sum_{a'}\sum_{a''}\langle x''|a''\rangle\langle a''|x'\rangle \sum_{a'}\langle x'|a'\rangle\langle a'|\alpha_0\rangle \exp\left(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right)
\end{aligned}
$$

重新整理上式，我们发现实际上我们得到了：

$$\psi(x'',t) = \int d^3x' K(x'',t;x',t)\psi(x',t_0)$$

其中:

$$K(x'',t,x',t_0) = \sum_{a'} \langle x''|a'\rangle\langle a'|x'\rangle \exp\left(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right)$$

因此，假如我们将 $t=t_0$ 和 $t=t$ 时刻的波函数看作两个"沙堆"，K 的作用就是指挥我们如何搬运"沙堆"：将 t_0 时刻位于 x' 处的沙子搬运多少到 t 时刻的 x'' 处。我们将函数 K 成为传播子。因此，在量子力学中，从一个分布到另一个分布的转移实际上是确定的，由 K 支配，只有观测的时候我们是在从一个分布中采样。
传播子有两个显而易见的重要性质:

- $K(x'',t,x',t_0)$ 服从含时的薛定谔波动方程，变量是 x'',t
- $\lim_{t\to t_0} K = \delta^3(x''-x')$
  因此，$K(x'',t,x',t_0)$ 就是初始时刻位于 x' 处的粒子的波函数，显然我们可以将它重新写成:

  $$K(x'',t,x',t_0) = \langle x''|\exp\left(-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right)|x'\rangle$$

  所以我们在求解一个一般问题的时候，只需将 K 乘以波函数，再对全空间积分，相当于将全空间的贡献加和，就像是我们在求解电荷激发的静电场一样。

我们接下来看一些具体的例子（但是我们只给出结果）。传播子满足的偏微分方程是:

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla''^2 + V(x'') - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]K(x'',t,x',t_0) = -i\hbar\delta^3(x''-x')\delta(t-t_0)$$

边界条件：$K(x'',t;x',t_0)=0,\ \text{for}\ t<t_0$。对于一个自由粒子，传播子是一个高斯波包:

$$K(x'',t,x',t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}\exp\left(\frac{im(x''-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right)$$

对于简谐振子：

$$K(x'',t;x',t_0)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin[\omega(t-t_0)]}}\exp\left[\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin[\omega(t-t_0)]}\right\}\right.$$
$$\left.\times\left\{(x''^2+x'^2)\cos[\omega(t-t_0)]-2x''x'\right\}\right]. \quad (2.282)$$

我们考虑一个特殊情况：将传播子中的 $x''=x'$，那么：

$$\begin{aligned}
G(t)&=\int d^3x'K(x',t;x',0)\\
&=\int d^3x'\sum_{a'}|\langle x'|a'\rangle|^2\exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)\\
&=\sum_{a'}\exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)
\end{aligned}$$

如果我们将 t 变成一个纯虚数，那么上式变成一个类似于统计力学中给配分函数的东西。因此在统计力学中我们可以借用传播子的这一套研究方法。
另外考虑对 $G(t)$ 进行积分变换：

$$\begin{aligned}
\tilde{G}(E)&=-\int_0^\infty dtG(t)\exp\left(\frac{iEt}{\hbar}\right)\frac{1}{\hbar}\\
&=-i\int_0^\infty dt\sum_{a'}\exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{iEt}{\hbar}\right)\frac{1}{\hbar}
\end{aligned}$$

这个积分在 E 取实数的时候是震荡的、积不出来的，要想分析它，需要给 E 加一个小小的虚部 $E\to E+i\epsilon$，并令 $\epsilon\to 0$，此时可以证明：

$$\tilde{G}(E)=\sum_{a'}\frac{1}{E-E_{a'}}$$

也就是说，$\tilde{G}(E)$ 的极点分布和系统的能谱有关系。

要想进一步挖掘传播子的内涵，需要将传播子和前面提到的转移振幅联系起来。我们首先将传播子用海森堡绘景下的基底表示：

$$K(x'',t,x',t_0)=\sum_{a'}\langle x''|\exp(-\frac{iHt}{\hbar})|a'\rangle\langle a'|\exp\left(\frac{iHt_0}{\hbar}\right)|x'\rangle=\langle x'',t|x',t_0\rangle$$

在前面，我们将转移振幅定义为 $\langle b',t|a'\rangle$，是一个系统初态位于 A 的本征态 $|a'\rangle$，而在 t 时刻处于 B 的本征态 $|b'\rangle$ 的概率振幅，根据上面我们重写的传播子，很容易看出

传播子也是一个转移振幅。转移振幅显然有一个性质：我们可以将一段转移拆成两段，比如说：

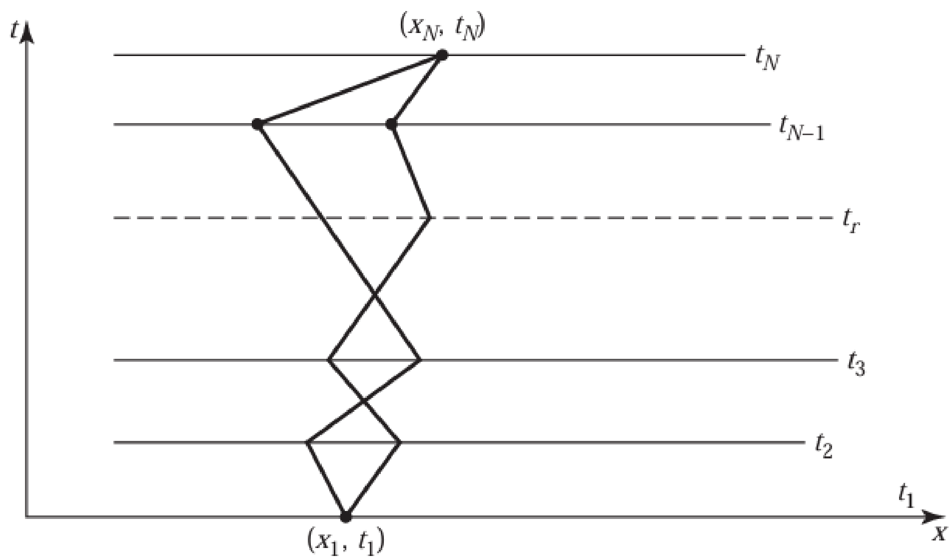
$$\langle x''', t'''|x', t'\rangle = \int d^3x'' \langle x''', t'''|x'', t''\rangle \langle x'', t''|x', t'\rangle$$

这启发我们：假如我们要求一段有限长时间的转移振幅，我们是不是可以将其看作许多无穷小时间段的转移振幅的复合？那么现在我们要给出费曼的想法。

不失一般性，我们只考虑一维系统。现在，将系统的转移路径分成 $N-1$ 段，位置和时间坐标以 (x_N, t_N) 表示。那么利用转移振幅的复合性质我们得到：

$$\langle x_N, t_N|x_1, t_1\rangle = \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \langle x_N, t_N|x_{N-1}, t_{N-1}\rangle \cdots \langle x_2, t_2|x_1, t_1\rangle$$

我们在下图中可视化这个操作：



我们就像固定 (x_1, t_1) 和 (x_N, t_N)，但是在中间时刻，我们允许路径到达每一点。换言之，我们的积分遍及**所有可能的路径**。与之对应地，在经典力学中，可行的道路只有一条，也就是使得拉格朗日量最小的那一条。

量子力学的路径与经典力学的路径是如何对应的呢？如何在 $\hbar \to 0$ 时，从"道路千万条"中选出拉格朗日量最小的那一条呢？普林斯顿大学一个年轻的学生费曼说：他认为 $\langle x_2, t_2|x_1, t_1\rangle$ 与 $\exp\left(i\int_{t_1}^{t_2} \frac{L_{classical}(x, \dot{x})}{\hbar}\right)$ 相对应。我们给出一个记号：

$$S(n, n-1) = \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt\ L_{classical}(x, \dot{x})$$

是沿着某一确定路径微元上的积分。假如我们沿着一条有限长的确定路径看，那么：

$$\prod_{n=2}^{N} \exp\left(\frac{iS(n,n-1)}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{n=2}^{N} S(n,n-1)\right) = \exp\left(\frac{iS(N,1)}{\hbar}\right)$$

我们希望得到的结果就是：

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle \sim \sum_{all\ paths} \exp\left(\frac{iS(N,1)}{\hbar}\right)$$

我们可以从经典极限可以直观看出这个结果的正确性：在 $\hbar \to 0$ 时，$\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right)$ 的结果随着 S 激烈振荡，这导致绝大多数路径的贡献都被附近的路径所抵消！只有在经典力学指出的路径 $\delta S(N,1)=0$ 附近，这种"抵消"现象才不会发生。因此，在 $h \to 0$ 时，对转移振幅有贡献的只剩下了经典力学的路径！

我们现在试着导出具体的表达式，仍然考虑一个无穷小的时间间隔，我们假设有：

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \frac{1}{w(\Delta t)} \exp\left(\frac{iS(n,n-1)}{\hbar}\right)$$

其中，$w(\Delta t)$ 是一个只与时间间隔 Δt 有关的"权重参数"。我们考虑一个简单的自由粒子：

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \frac{1}{W(\Delta t)} \exp\left(\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar \Delta t}\right)$$

利用基底间的正交性：

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle|_{t_n = t_{n-1}} = \delta(x_n - x_{n-1})$$

可以求出系数 w：

$$\frac{1}{w(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}}$$

最终，我们的结果是：

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int_{x_1}^{x_N} \mathscr{D}[x(t)] \exp\left(i \int_{t_1}^{t_N} dt \frac{L_{classical}(x,\dot{x})}{\hbar}\right)$$

其中的多维积分算子是：

$$\mathscr{D}(x(t)) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{\frac{N-1}{2}} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2$$

这个结果就是所谓的费曼路径积分。由于我们已经预先指出了 $\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right)$ 的形式，因此上面这一些算不上推导，只是对我们物理直觉的细化。为了使得我们的逻辑更丰满，我们要指出：费曼路径积分导出的传播子满足含时薛定谔方程。
考虑以上路径积分公式中的一环：

$$\langle x, t+\Delta t | x_1, t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \int d\xi \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} - \frac{iV\Delta t}{\hbar}\right) \langle x-\xi, t | x_1, t_1 \rangle$$

和前面的讨论一样，在 $\Delta t \to 0$ 时，积分的值随着 ξ 剧烈振荡，只有 $\xi \approx 0$ 附近的部分有贡献，其余部分都会相互抵消。因此不妨将 $\langle x-\xi, t | x_1, t_1 \rangle$ 在 $\xi = 0$ 附近展开，同时也将 $\langle x, t+\Delta t | x_1, t_1 \rangle$ 和 $\exp\left(-\frac{iV\Delta t}{\hbar}\right)$ 在 $\Delta t = 0$ 附近展开。注意到 ξ 的一阶项对右侧的积分没有贡献，上式被写成：

$$\langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \Delta t \langle x, t | x_1, t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \int d\xi \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right) \left(1 - \frac{iV\Delta t}{\hbar}\right) \cdot \Big[\langle x, t | x_1, t_1 \rangle +$$

只需将右侧的积分积出，我们就得到了：

$$\Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle = \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\right) (\sqrt{2\pi}) \left(\frac{i\hbar\Delta t}{m}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle - \left(\frac{i}{\hbar}\right) \Delta t V \, \langle x, t | x_1, t$$

化简一下，我们就拿到了含时薛定谔方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + V \, \langle x, t | x_1, t_1 \rangle$$