量子力学

Chapter 5. 传播子与量子力学的路径积分程式

杨焕雄

中国科学技术大学物理学院

hyang@ustc.edu.cn

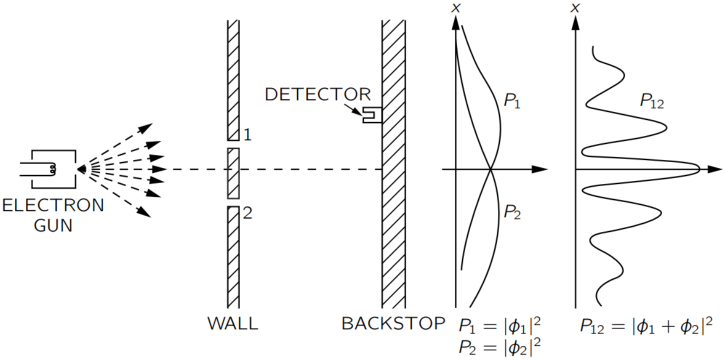
October 15, 2023

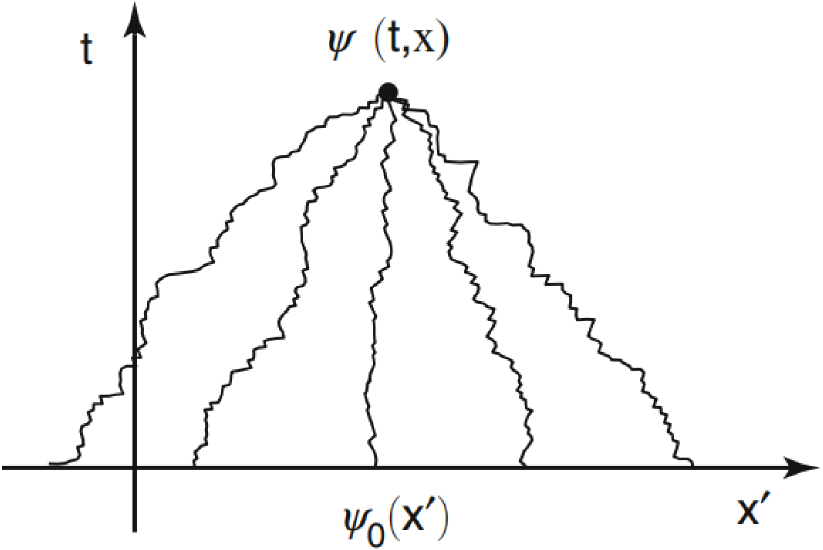
目录

传播子:

量子力学的路径积分程式(Formalism)是费曼发展出来的(1949), 它对微观粒子的波粒二象性提供了一个非常深刻的理解.

1. 新程式的出现往往伴随着新观念的诞生. 费曼通过分析电子的双缝干涉实验, 创造了一个新的概念: 传播子(Propagator).




t
ψ (t,x)
ψ0(x′)
x′

费曼假设:

- 当量子力学体系随时间自然演化时, 时刻 t 在场点 r 处找到粒子的概率幅, 即位置表象中的波函数 $\Psi(r,\ t)$, 是较早时刻 t' 在所有可能的场点 r' 处找到粒子概率幅 $\Psi(r',\ t')$ 的线性叠加

$$\Psi(r,\ t) = \int d^3x'\, G(r, t; r', t')\, \Psi(r',\ t')$$

此处的叠加系数 $G(r, t; r', t')$, 或称积分核 (kernel), 就是体系的传播子.

$\mathcal{Q}$:

- 那么, **如何确定一个量子力学体系的传播子呢?**

费曼假设:

1. 连接时空点 $(r,\ t)$ 与 (r',t') 的所有路径都对传播子 $G(r,t;r',t')$ 有贡献:

$$G(r,t;r',t') = A\sum_{\text{all paths}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}S(i,f)\right]$$

式中 $S(i,f)$ 是沿连接始、终两个时空点的某一条可能路径计算的作用量. 经典力学仅允许作用量取极值的特殊路径,

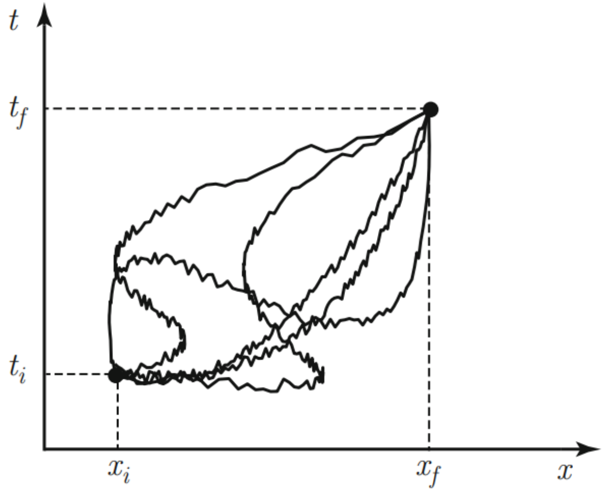
$$\delta S = 0, \quad \rightsquigarrow \quad S_{\text{class}}(i,f) = S_{\text{extr}}(i,f)$$

但量子力学认为所有可能的路径对于传播子的贡献均具有相同的权重,差别仅限于相对位相.

2. 倘若 $t' = t-\epsilon$, $\epsilon \sim 0^+$ 是一个正的无穷小时间间隔,则

$$G(r,t;r',t') = A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{(r',t')}^{(r,t)} L(\dot{r},\ r)d\tau\right] \approx A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon L_{\text{ave}}\right]$$

式中 $L(\dot{r},\ r)$ 是体系的经典拉氏量, L_{ave} 是其在无穷小时间间隔 ϵ 中的平均值.



$$G(x_f, t_f; x_i, t_i) = A \sum_{\text{all paths}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(i, f)\right]$$

为简洁计,以下我们以一维量子力学体系为例,讨论费曼假设的后果.
设体系的拉氏量为

$$L(x,\dot{x}) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)$$

其在无穷小时间间隔 $t-t' = \epsilon \sim 0^+$ 中的平均值是:

$$L_{\text{ave}} \approx \frac{m}{2}\left(\frac{x-x'}{t-t'}\right)^2 - V\big[(x+x')/2\big] \approx \frac{m\eta^2}{2\epsilon^2} - V(x-\eta/2)$$

式中约定 $x-x'=\eta$. 进而,

$$\begin{aligned} G(x,t;x',t') &\approx A\exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} - \frac{i}{\hbar}\epsilon V(x-\eta/2)\right] \\ &= A\exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\epsilon V(x-\eta/2)\right] \end{aligned}$$

亦即:

$$G(x,t;x',t') \approx A\exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right]\left[1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon V(x-\eta/2) + \mathscr{O}(\epsilon^2)\right]$$

所以，我们可以把波函数 $\Psi(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}dx'\ G(x,t;x',t')\Psi(x',\ t')$ 进一步表达为：

$$
\begin{aligned}
\Psi(x,t) \quad & \approx A\int_{-\infty}^{+\infty}d\eta\ \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right]\left[1-\frac{i}{\hbar}\epsilon V(x-\eta/2)\right]\Psi(x-\eta,\ t-\epsilon)\\
& \approx A\int_{-\infty}^{+\infty}d\eta\ \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right]\left[1-\frac{i}{\hbar}\epsilon V(x-\eta/2)\right]\\
& \qquad\qquad \cdot\left[\Psi(x-\eta,t)-\epsilon\frac{\partial\Psi(x-\eta,t)}{\partial t}+\mathscr{O}(\epsilon^2)\right]\\
& \approx A\int_{-\infty}^{+\infty}d\eta\ \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right]\left[\Psi(x-\eta,t)-\frac{i}{\hbar}\epsilon V(x-\eta/2)\Psi(x-\eta,t)\right.\\
& \qquad\qquad \left.-\epsilon\frac{\partial\Psi(x-\eta,t)}{\partial t}+\mathscr{O}(\epsilon^2)\right]
\end{aligned}
$$

现在把 $\Psi(x-\eta,t)$ 和 $V(x-\eta/2)$ 关于参数 η 作如下形式化的泰勒展开，

$$\Psi(x-\eta,t)=\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{(-1)^n\eta^n}{n!}\frac{\partial^n}{\partial x^n}\Psi(x,t),\quad V(x-\eta/2)=\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{(-1)^n\eta^n}{2^n n!}\frac{\partial^n}{\partial x^n}V(x)$$

由此知：

$$\frac{\partial\Psi(x-\eta,t)}{\partial t}=\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{(-1)^n\eta^n}{n!}\frac{\partial^n}{\partial x^n}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

且

$$\begin{aligned}V(x-\eta/2)\Psi(x-\eta,t)&=\sum_{m,n=0}^{+\infty}\frac{(-1)^{m+n}\eta^{m+n}}{2^m m!n!}\frac{\partial^m V(x)}{\partial x^m}\frac{\partial^n\Psi(x,t)}{\partial x^n}\\&=\sum_{m,k=0}^{+\infty}\frac{(-1)^k\eta^k}{2^m m!(k-m)!}\frac{\partial^m V(x)}{\partial x^m}\frac{\partial^{(k-m)}\Psi(x,t)}{\partial x^{(k-m)}}\\&=\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{(-1)^n\eta^n}{n!}\left[\sum_{m=0}^{n}\frac{n!}{2^m m!(n-m)!}\frac{\partial^m V(x)}{\partial x^m}\frac{\partial^{(n-m)}\Psi(x,t)}{\partial x^{(n-m)}}\right]\end{aligned}$$

利用上页所列的几个深蓝色表达式，我们有：

$$\Psi(x,t)=A\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_{-\infty}^{+\infty}d\eta\,\eta^n\exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right]\left\{\frac{\partial^n}{\partial x^n}\Psi(x,t)-\epsilon\frac{\partial^n}{\partial x^n}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}\right.$$
$$\left.-\frac{i\epsilon}{\hbar}\left[\sum_{m=0}^{n}\frac{n!}{2^m m!(n-m)!}\frac{\partial^m V(x)}{\partial x^m}\frac{\partial^{(n-m)}\Psi(x,t)}{\partial x^{(n-m)}}\right]\right\}$$

式中出现的定积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty}d\eta\,\eta^n\exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right]$$

在 n 取奇数时恒等于零、在 n 取偶数时是所谓菲涅尔积分 (可按高斯积分处理). 高斯积分是：

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-ax^2)\,dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}},\quad \mathrm{Re}(a)\geqslant 0}$$

它有一个简单的推论:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} \exp\left(-ax^2\right) dx = (-1)^n \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}a^n} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-ax^2\right) dx = \frac{(2n-1)!!}{2^n a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

式中约定 $n \in \mathbb{N}$.

在以上高斯积分公式中把参数 a 取作 $a = -im/2\hbar\epsilon$, 可知:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \ \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right] = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}, \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \ \eta^2 \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right] = \frac{i\hbar\epsilon}{m}\sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}$$

一般地,

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \ \eta^{2n} \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right] = (2n-1)!! \frac{(i\hbar\epsilon)^n}{m^n}\sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}, \quad n \in \mathbb{N}}$$

所以：

$$\Psi(x,t) = A\sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}\left[\Psi(x,t) - \frac{i}{\hbar}\epsilon V(x)\Psi(x,t) - \epsilon\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m}\epsilon\frac{\partial^2\Psi(x,\ t)}{\partial x^2} + \mathscr{O}(\epsilon^2)\right]$$

只要在费曼假设中把系数 A 取为 $A = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}}$，上式就是在一维保守力场中运动的微观粒子的薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) + \mathscr{O}(\epsilon)$$

这个推理过程表明费曼对量子力学逻辑体系的新构思确实是合理的. **虽然传播子中仅仅出现了经典作用量 $S = \int L d\tau$，不涉及算符，但它确实包含了体系的量子力学信息.** 时间间隔相差无穷小的两个空间点之间的传播子为：

$$G(x,t;x',t-\epsilon) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}}\exp\left\{\frac{i\epsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x-x'}{\epsilon}\right)^2 - V(x)\right]\right\}$$

传播子的物理意义：

倘若使用狄拉克 (Dirac) 符号，传播子的定义式

$$\Psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \; G(x_b, t_b; x', t_a)\Psi(x', \; t_a)$$

在海森堡绘景中可等价地写为：

$$\langle x_b(t_b)|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \; G(x_b, t_b; x', t_a)\langle x'(t_a)|\Psi\rangle$$

式中 $\langle x_b(t_b)|\Psi\rangle = \Psi(x_b, \; t_b)$，$\langle x'(t_a)|\Psi\rangle = \Psi(x', \; t_a)$ 分别是时刻 t_b 和时刻 t_a 量子态 $|\Psi\rangle$ 对应的位置表象波函数. $|x_b(t_b)\rangle$ 与 $|x'(t_a)\rangle$ 分别是时刻 t 和时刻 t' 位置坐标算符的本征右矢. 倘若取 $|\Psi\rangle = |x_a(t_a)\rangle$，我们有

$$\langle x'(t_a)|\Psi\rangle = \langle x'(t_a)|x_a(t_a)\rangle = \delta(x' - x_a)$$

进而，

$$\langle x_b(t_b)|x_a(t_a)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \; G(x_b, t_b; x', t_a)\delta(x' - x_a) = G(x_b, t_b; x_a, t_a)$$

此式清晰地揭示了传播子的物理意义：$G(x_b, t_b; x_a, t_a)$ 就是粒子从时刻 t_a 的位置算符本征态 $|x_a(t_a)\rangle$ 自发演化到时刻 t_b 的位置算符本征态 $|x_b(t_b)\rangle$ 的跃迁概率幅 $\langle x_b(t_b)|x_a(t_a)\rangle$.

对于有限大小的时间间隔 $(t_b - t_a)$，我们可以将其 N 等份：

$$\frac{t_b - t_a}{N} = \epsilon, \qquad t_i = t_a + i\epsilon, \qquad 0 \leqslant i \leqslant N$$

并约定 $t_0 = t_a$ 和 $t_N = t_b$. $N \to \infty$ 则 $\epsilon \to 0^+$. 此情形下，

$$\langle x_i(t_i)|x_{i-1}(t_{i-1})\rangle \approx \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}} \exp\left\{\frac{i\epsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_i - x_{i-1}}{\epsilon}\right)^2 - V(x_i)\right]\right\}$$

使用各个中间时刻 $t_i\ (1 \leqslant i \leqslant N-1)$ 位置算符本征右矢系的完备性条件

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx_i(t_i)\, |x_i(t_i)\rangle\langle x_i(t_i)| = \hat{I}$$

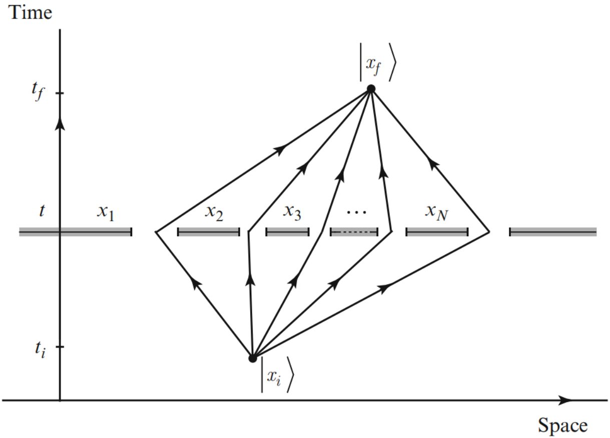
我们可以把传播子 $\langle x_b(t_b)|x_a(t_a)\rangle$ 表达为：

$$\begin{aligned}
\langle x_b(t_b)|x_a(t_a)\rangle &= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx_1(t_1)\, \langle x_b(t_b)|x_1(t_1)\rangle\langle x_1(t_1)|x_a(t_a)\rangle \\
&= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx_1(t_1) \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx_2(t_2)\, \langle x_b(t_b)|x_2(t_2)\rangle\langle x_2(t_2)|x_1(t_1)\rangle\langle x_1(t_1)|x_a(t_a)\rangle \\
&= \cdots\cdots \\
&= A^{N-1} \prod_{i=1}^{N-1} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx_i(t_i) \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(a, b)\right], \quad A = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}}
\end{aligned}$$

即传播子表达成了路径积分：

$$G(x_b,t_b;x_a,t_a)=\mathrm{limit}_{N\to\infty}\left[\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right]^{\frac{N-1}{2}}\prod_{i=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{+\infty}dx_i(t_i)\exp\left[\frac{i}{\hbar}S(a,b)\right]$$

此式形成了量子力学路径积分程式的出发点.



传统量子力学程式(例如薛定谔绘景)虽然没有过分渲染传播子,但传播子的实际上是存在的,它就是时间演化算符在位置算符本征态之间的矩阵元:

$$G(r,t;r',t') := \left\langle r\middle|\hat{\mathscr{U}}(t,\ t')\middle|r'\right\rangle$$

采取薛定谔绘景. 我们知道,量子力学体系的随时间的自然演化表现为描写体系状态的态矢量 $|\Psi(t')\rangle$ 经受如下幺正变换

$$\hat{\mathscr{U}}(t,\ t'): \qquad \left|\Psi(t')\right\rangle \rightsquigarrow \left|\Psi(t)\right\rangle = \hat{\mathscr{U}}(t,\ t')\left|\Psi(t')\right\rangle$$

因此,其在位置表象的波函数 $\Psi(r,t) = \langle r|\Psi(t)\rangle$ 随时间的演化方式是:

$$\langle r|\Psi(t)\rangle = \left\langle r\middle|\hat{\mathscr{U}}(t,\ t')\middle|\Psi(t')\right\rangle = \int d^3x' \left\langle r\middle|\hat{\mathscr{U}}(t,\ t')\middle|r'\right\rangle\left\langle r'\middle|\Psi(t')\right\rangle$$

这正是传播子的定义式:

$$\Psi(r,t) = \int d^3x'\ G(r,t;r',t')\Psi(r',t')$$

约定 $\hat{H}$ 不显含时间参数 t，并假设体系包括 $\hat{H}$ 在内的一组相容力学量算符完全集合 $\{\hat{\mathscr{A}}\}$ 的共同本征右矢系为 $\{|a_n\rangle\}$：

$$\hat{\mathscr{A}} = \hat{\mathscr{A}}^{\dagger}, \quad \hat{\mathscr{A}}\,|a_n\rangle = a_n\,|a_n\rangle, \quad \langle a_m|a_n\rangle = \delta_{mn}, \quad \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = \hat{I}.$$

特别地，$\hat{H}\,|a_n\rangle = E_n\,|a_n\rangle$. 我们有：

$$\begin{aligned}
\hat{\mathscr{U}}(t,t') &= \hat{\mathscr{U}}(t,t')\left[\sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\right] = \sum_n \left[\hat{\mathscr{U}}(t,t')\,|a_n\rangle\right]\langle a_n| \\
&= \sum_n \exp\left[-i\hat{H}(t-t')/\hbar\right]|a_n\rangle\langle a_n| \\
&= \sum_n \exp\left[-i\hat{E}_n(t-t')/\hbar\right]|a_n\rangle\langle a_n|
\end{aligned}$$

所以，

$$\boxed{G(r,t;r',t') = \sum_n \exp\left[-i\hat{E}_n(t-t')/\hbar\right]\langle r|a_n\rangle\langle a_n|r'\rangle}$$

或者，

$$G(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{r}', t') = \sum_n \exp\left[-i\hat{E}_n(t-t')/\hbar\right] \psi_n(\boldsymbol{r})\psi_n^*(\boldsymbol{r}')$$

此处的 $\psi_n(\boldsymbol{r}) := \langle \boldsymbol{r}|a_n\rangle$ 是力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 的本征态 $|a_n\rangle$ 在位置表象中的波函数.

不难检验:

- 传播子 $G(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{r}', t')$ 服从初始条件

$$\text{limit}_{t\to t'} G(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{r}', t') = \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

- 传播子 $G(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{r}', t')$ 是含时薛定谔方程的 Green 函数. 倘若

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

  则传播子满足的微分方程是:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right] G(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{r}', t') = -i\hbar\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta(t-t')$$