暑期学校总结报告

宋相龙——南开大学物理科学学院 21 级伯苓班
dcmpsr0234@outlook.com

2022 年 7 月 10 日

摘要

本文主要内容是我参加北京大学物理学院理论物理暑期学校之后对整个课程的印象和个人感想，以及对于路径积分的学习和思考，还有最后的总结。

目录

1 对整个课程的印象 **4**

2 路径积分：Path Integral **5**

2.1 路径积分的基本架构 . . . 5

2.1.1 幺正时间演化算符 . . . 5

2.1.2 传播子及其性质 . . . 5

2.1.3 相空间的路径积分 . . . 6

2.1.4 位形空间的路径积分 . . . 7

2.1.5 传播子的两类表达式 . . . 8

2.2 自由粒子——相空间的路径积分 . . . 8

2.2.1 自由粒子的传播子与其无穷小情况具有相同的形式 . . . 9

2.2.2 得到自由粒子的传播子 . . . 9

2.3 自由粒子——位形空间的路径积分 . . . 10

2.3.1 自由粒子的传播子与其无穷小情况具有相同的形式 . . . 10

2.3.2 得到自由粒子的传播子 . . . 11

2.4 自由粒子——用对角化方法求路径积分 . . . 11

2.4.1 对作用量进行变量代换 . . . 11

2.4.2 经典路径的分离 . . . 12

2.4.3 用对角化的方法计算传播子积分 . . . 13

2.4.4 特征多项式与连乘积 . . . 13

2.5 谐振子——用对角化求解路径积分 . . . 14

2.5.1 对作用量进行变量代换 . . . 14

2.5.2 经典路径的分离 . . . 15

2.5.3 用对角化的方法计算传播子积分 . . . 15

2.5.4 特征多项式与连乘积 . . . 16

2.6 个人的理解 . . . 16

1 对整个课程的印象

今年 5 月从班导师处得知了暑假有北京大学物理学院开办的理论物理暑期学校，我本来就有志于从事理论物理的研究，于是便欣然报名。后来很幸运地通过了选拔，感谢学院老师，也感谢北京大学物理学院给了我这样一个可以和全国优秀大学生交流和学习知识的机会。我是没有什么竞赛基础的，到了大学也只是学了一些课内内容和少量的四大力学。说实话，这次通过选拔能够参加暑校我并没有很大的信心，因此得知可以参加暑校之后也准备得不甚充分。第一节基础课是马伯强老师讲的相对论，这节课我听得还算明白，但到了时空的黎曼几何描述处我便稍觉云里雾里，不过课后经过学习补充之后也基本搞明白了。

但是第二天的量子力学课我就有些吃力，究其原因主要是数学水平不够，所以困于对数学的思考中导致物理图像不清晰，然后更跟不上老师的讲解了。这节课后我花了很长时间去学习，但是还没有完全弄明白。后面的相对论量子力学和量子场论的情况与之相似，然后最后囫囵吞枣，不求甚解地完成了基础课的学习。如果说马老师讲的内容是十成，那我可能只掌握了 7 成甚至 6 成。

虽然说最后我的基础课学习成果并不很好，但是这种学习环境反而让我感到格外兴奋，源源不断的知识灌输到我的笔记里，头脑中，这几天以来我一直处于学习和吸收的状态，这种感觉让我感到充实而有动力，是一种能够带来正反馈的沉浸式学习。并且这几天我了解了更多物理概念，学习了基本的量子力学和量子场论，对狭义相对论的理解更加透彻，并且了解了接下来的学习路线和方向，原本我对于接下来的物理学习有些迷茫，但是经过这几天的学习我想我已经知道接下来要干什么了。这次暑期学校带给我的收获远比我想象中的多。

除了基础课之外，其他老师主讲的讲座也很吸引人，尤其是理论物理前沿综述和有关量子色动力学的内容。其中刘老师的理论物理前沿综述让我们了解了目前理论物理领域的前沿问题，这对于我们选择以后的兴趣方向和对目前物理学科的印象把握十分有帮助。目前我在南开大学常雷教授组中学习，常老师研究的是强子物理，属于量子色动力学，而我现在由于物理知识不足的原因，虽然仅仅在做一些简单的计算等练习，但是本次暑校有关于量子色动力学的内容仍让我对将来的学习方向有了一定的了解，随着对其了解的增加也对这个方向更加感兴趣。

总而言之，本次暑校我收获甚多，不仅感受了久违的全身心投入学习的快感，还收获了量子力学和量子场论的知识，对于物理科研前沿也有了一定的认识。这几天的经历极大地提升了我的物理和数学水平。非常感谢北京大学物理学院和各位辛苦授课的老师!

上面是我对于暑期学校课程的总体印象，这几天我重点学习了路径积分的相关内容下面我将着重聊聊我对于路径积分的理解和具体推导，其实就是一个自我学习的 notes。

2 路径积分：Path Integral

[1][2][3][4][5] 量子力学中有三大等价表述：

1、薛定谔方程 Schrödinger equation

2、海森堡方程 Heisenberg equation

3、以上两个都是哈密顿力学的量子对应，而费曼路径积分是拉格朗日力学的量子对应——与哈密顿力学等价，而主要的研究对象就是作用量。

下面我将具体描绘路径积分的基本架构和某些求解的实例。

2.1 路径积分的基本架构

路径积分总而言之就是研究量子系统态随时间演化的一种方法，实际上和 Schrödinger equation 的作用是相同的。研究态的演化实际上就是研究如何从给定的态 $|\psi(t_0)\rangle$ 写出任意时刻态 $|\psi(t)\rangle$ 的表达式，其中本文默认 $t > t_0$。

2.1.1 幺正时间演化算符

我们先定义一个算符 U，它的作用是给出演化结果 $U(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t)\rangle$。接下来我们要求解 U 的表达式，研究时间演化我们使用 Schrödinger equation：

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hbar|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle = -i\frac{H}{\hbar}U(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle \tag{2}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t-t_0) = -i\frac{H}{\hbar}U(t-t_0) \tag{3}$$

$$\mathrm{d}\ln U(t-t_0) = -i\frac{H}{\hbar}\mathrm{d}t \tag{4}$$

$$U(t-t_0) = e^{-i\frac{H}{\hbar}t}\cdot const \tag{5}$$

那么如果时间不变就不会发生演化，以此作为初始条件，即 $t = t_0 \Rightarrow U = I$。确定系数后可以得到幺正时间演化算符的表达式：

$$U(t-t_0) = e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)} \tag{6}$$

这样我们就不再需要使用薛定谔方程，而可以形式地使用 $|\psi(t)\rangle = U(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle$ 这个方便的式子。

2.1.2 传播子及其性质

传播子即时间演化算符的不同时刻坐标表象下的矩阵元。我们接下来对 $|\psi(t)\rangle = U(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle$ 取坐标表象，即左乘 $\langle\vec{r}|$，再插入完备性关系式 $I = \int|\vec{r}_0\rangle\langle\vec{r}_0|\,\mathrm{d}\vec{r}_0$，可以得到：

$$\psi(\vec{r},t) = \int\langle\vec{r}|U(t,t_0)|\vec{r}_0\rangle\langle\vec{r}|\psi(t_0)\rangle\,\mathrm{d}\vec{r}_0 = \int K(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0)\psi(\vec{r}_0,t_0)\mathrm{d}\vec{r}_0 \tag{7}$$

其中 $K(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0)$ 称作传播子，作用如上所示，路径积分的最终目的就是求传播子。

由传播子的定义，我们可以发现它有以下特性：

$$
\begin{aligned}
K(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0) &= \langle\vec{r}|\,U(t,t_0)\,|\vec{r}_0\rangle \\
&= \langle\vec{r}|\,U(t,t_1)U(t_1,t_0)\,|\vec{r}_0\rangle \\
&= \int \langle\vec{r}|\,U(t,t_1)\,|\vec{r}_1\rangle\,\langle\vec{r}_1|\,U(t_1,t_0)\,|\vec{r}_0\rangle\,\mathrm{d}\vec{r}_1 \\
&= \int \langle\vec{r}|\,U(t,t_2)\,|\vec{r}_2\rangle\,\langle\vec{r}_2|\,U(t_2,t_1)\,|\vec{r}_1\rangle\,\langle\vec{r}_1|\,U(t_1,t_0)\,|\vec{r}_0\rangle\,\mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2 \\
&= \int K(\vec{r},t;\vec{r}_2,t_2)K(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_1,t_1)K(\vec{r}_1,t_1;\vec{r}_0,t_0)\mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2
\end{aligned}
\tag{8}
$$

上面使用定义（下面沿用这一定义）：$t_0 < t_n \le t = t_N, n \in \{1,2,3,\cdots,N\}$。而且我们要求上式满足以下关系：$\vec{r}_N = \vec{r}, t_N = t, a > b \Leftrightarrow t_a > t_b$。物理中常常研究极限情况，我们利用上述性质进行无穷分割可得：

$$
K(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0) = \int \left[\prod_{n=1}^{N} K(\vec{r}_n,t_n;\vec{r}_{n-1},t_{n-1})\right]\mathrm{d}\vec{r}_1\cdots\mathrm{d}\vec{r}_{N-1} \tag{9}
$$

但是后面我们将要利用无穷小过程这个特性将无穷小过程的传播子进一步化简，然而这个化简在有限过程中一般是不成立的，所以我们将积分号中的无穷小过程传播子换一个符号（本文所有的运算都取了极限 $\max\{t_n - t_{n-1}\} \to 0$，为了写起来简单省略极限符号），记为：

$$
K(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0) = \int \left[\prod_{n=1}^{N} \mathcal{K}(\vec{r}_n,t_n;\vec{r}_{n-1},t_{n-1})\right]\mathrm{d}\vec{r}_1\cdots\mathrm{d}\vec{r}_{N-1} \tag{10}
$$

2.1.3 相空间的路径积分

首先，记 $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$，显然想求得 $K(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0)$ 就要先求得 $\mathcal{K}(\vec{r}_n,t_n;\vec{r}_{n-1},t_{n-1})$：

$$
\mathcal{K}(\vec{r}_n,t_n;\vec{r}_{n-1},t_{n-1}) = \langle\vec{r}_n|\,U(t_n,t_{n-1})\,|\vec{r}_{n-1}\rangle = \langle\vec{r}_n|\,e^{-i\frac{H}{\hbar}\Delta t_n}\,|\vec{r}_{n-1}\rangle \tag{11}
$$

考虑到：

$$
e^{-i\frac{H}{\hbar}\Delta t_n} = e^{-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^2}{2m}+V(\vec{R},t_n)\right]\Delta t_n} = e^{-\frac{i}{\hbar}V(\vec{R},t_n)}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t_n} \quad (\Delta t_n \to 0) \tag{12}
$$

那么就恒有 $K \neq \mathcal{K}$，除非是自由粒子（后面会提到）。那么就可以推知：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}(\vec{r}_n,t_n;\vec{r}_{n-1},t_{n-1}) &= \langle\vec{r}_n|\,e^{-\frac{i}{\hbar}V(\vec{R},t_n)}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t_n}\,|\vec{r}_{n-1}\rangle \\
&= \int e^{-\frac{i}{\hbar}V(\vec{r}_n,t_n)\Delta t_n}\,\langle\vec{r}_n\mid\vec{p}_n\rangle\,e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p_n^2}{2m}\Delta t_n}\,\langle\vec{p}_n\mid\vec{r}_{n-1}\rangle\,\mathrm{d}\vec{p}_n
\end{aligned}
\tag{13}
$$

记 $\dot{\vec{r}}_n = \frac{\Delta\vec{r}_n}{\Delta t_n}$，但这只是一个记号，其实路径基本都是不可微的所以并不表征速度，同理下面的 Lagrangian 也只是一个记号，并不是真正的 Lagrangian。那么有：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}\left(\vec{r}_n,t_n;\vec{r}_{n-1},t_{n-1}\right) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{-\frac{i}{\hbar}V(\vec{r}_n,t_n)\Delta t_n}e^{i\frac{\vec{p}_n}{\hbar}\cdot\Delta\vec{r}_n}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p_n^2}{2m}\Delta t_n}\,\mathrm{d}\vec{p}_n \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}_n\cdot\frac{\Delta\vec{r}_n}{\Delta t_n}-H(\vec{r}_n,\vec{p}_n,t_n)\right]\Delta t_n}\,\mathrm{d}\vec{p}_n \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}_n\cdot\dot{\vec{r}}_n-H(\vec{r}_n,\vec{p}_n,t_n)\right]\Delta t_n}\,\mathrm{d}\vec{p}_n \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{i\frac{L(\vec{r}_n,\vec{p}_n,t_n)\Delta t_n}{\hbar}}\mathrm{d}\vec{p}_n
\end{aligned}
\tag{14}
$$

将上式带回传播子的表达式就得到相空间的路径积分：

$$
\begin{aligned}
K\left(\vec{r}, t ; \vec{r}_0, t_0\right) &= \int\left[\prod_{n=1}^N \mathcal{K}\left(\vec{r}_n, t_n ; \vec{r}_{n-1}, t_{n-1}\right)\right] \mathrm{d} \vec{r}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{r}_{N-1} \\
&= \int \prod_{n=1}^N\left[\frac{1}{(2 \pi \hbar)^3} \int e^{\frac{i}{\hbar} L\left(\vec{r}_n, \vec{p}_n, t_n\right) \Delta t_n} \mathrm{~d} \vec{p}_n\right] \mathrm{d} \vec{r}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{r}_{N-1} \\
&= \frac{1}{(2 \pi \hbar)^{3 N}} \int\left[\int e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N L\left(\vec{r}_n, \vec{p}_n, t_n\right) \Delta t_n} \mathrm{~d} \vec{p}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{p}_N\right] \mathrm{d} \vec{r}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{r}_{N-1} \\
&= \frac{1}{(2 \pi \hbar)^{3 N}} \int e^{\frac{i}{\hbar} \int L(\vec{r}, \vec{p}, \tau) \mathrm{d} \tau} \mathrm{d} \vec{r}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{r}_{N-1} \mathrm{~d} \vec{p}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{p}_N \\
&= \frac{1}{(2 \pi \hbar)^{3 N}} \int \mathcal{D} \vec{r} \mathcal{D} \vec{p} e^{i \frac{S(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\hbar}}
\end{aligned}
\tag{15}
$$

这里的 $\mathcal{D}$ 表示我们对各种包括闪现在内的所有路径进行积分。在这里可以注意到积分重数比动量少一层，从 1 积到 $N-1$ 是理所当然的，因为端点是固定的。

2.1.4 位形空间的路径积分

我们更常用的并不是相空间的路径积分，而是位形空间的，其实就是把动量先积掉：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}\left(\vec{r}_n, t_n ; \vec{r}_{n-1}, t_{n-1}\right) &= \frac{1}{(2 \pi \hbar)^3} \int e^{-\frac{i}{\hbar} V\left(\vec{r}_n, t_n\right) \Delta t_n} e^{i \frac{\vec{p}_n}{\hbar} \cdot \Delta \vec{r}_n} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2 m} \Delta t_n} \mathrm{~d} \vec{p}_n \\
&= \frac{1}{(2 \pi \hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} V\left(\vec{r}_n, t_n\right) \Delta t_n} \int e^{i \frac{\vec{p}_n}{\hbar} \cdot \Delta \vec{r}_n} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2 m} \Delta t_n} \mathrm{~d} \vec{p}_n
\end{aligned}
\tag{16}
$$

后面的积分直接套用结论（在自由粒子的格林函数中求解过）：

$$
\frac{1}{(2 \pi \hbar)^3} \int e^{i \frac{\vec{p}_n}{\hbar} \cdot \Delta \vec{r}_n} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2 m} \Delta t_n} \mathrm{~d} \vec{p}_n=\left(\frac{m}{2 \pi i \hbar \Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[i \frac{m\left(\Delta \vec{r}_n\right)^2}{2 \hbar \Delta t_n}\right] \tag{17}
$$

我们将上式带回无穷小间隔传播子表达式可以得到：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}\left(\vec{r}_n, t_n ; \vec{r}_{n-1}, t_{n-1}\right) &= \frac{1}{(2 \pi \hbar)^3} \int e^{-\frac{i}{\hbar} V\left(\vec{r}_n, t_n\right) \Delta t_n} e^{i \frac{\vec{p}_n}{\hbar} \cdot \Delta \vec{r}_n} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2 m} \Delta t_n} \mathrm{~d} \vec{p}_n \\
&= \left(\frac{m}{2 \pi i \hbar \Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} V\left(\vec{r}_n, t_n\right) \Delta t_n} e^{i \frac{m\left(\Delta \vec{r}_n\right)^2}{2 \hbar \Delta t_n}} \\
&= \left(\frac{m}{2 \pi i \hbar \Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{1}{2} m \frac{\left(\Delta \vec{r}_n\right)^2}{\left(\Delta t_n\right)^2}-V\left(\vec{r}_n, t_n\right)\right] \Delta t_n} \\
&= \left(\frac{m}{2 \pi i \hbar \Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}_n^2-V\left(\vec{r}_n, t_n\right)\right] \Delta t_n}
\end{aligned}
\tag{18}
$$

将上述结果带回传播子的表达式得到位形空间的路径积分：

$$\begin{aligned}
K\left(\vec{r}, t ; \vec{r}_0, t_0\right) &= \int\left[\prod_{n=1}^N \mathcal{K}\left(\vec{r}_n, t_n ; \vec{r}_{n-1}, t_{n-1}\right)\right] \mathrm{d} \vec{r}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{r}_{N-1} \\
&= \int\left[\prod_{n=1}^N\left(\frac{m}{2 \pi i \hbar \Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}_n^2-V\left(\vec{r}_n, t_n\right)\right] \Delta t_n}\right] \mathrm{d} \vec{r}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{r}_{N-1} \\
&= \prod_{n=1}^N\left(\frac{m}{2 \pi i \hbar \Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}} \int e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N\left[\frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}_n^2-V\left(\vec{r}_n, t_n\right)\right] \Delta t_n} \mathrm{~d} \vec{r}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{r}_{N-1} \\
&= \prod_{n=1}^N\left(\frac{m}{2 \pi i \hbar \Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}} \int e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}_n^2-V(\vec{r}, \tau) \mathrm{d} \tau} \mathrm{d} \vec{r}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{r}_{N-1} \\
&= \prod_{n=1}^N\left(\frac{m}{2 \pi i \hbar \Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}} \int \mathcal{D} \vec{r} e^{i \frac{S(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t)}{\hbar}}
\end{aligned} \tag{19}$$

2.1.5 传播子的两类表达式

综上所述，路径积分中的传播子就表达为：

$$K\left(\vec{r}, t ; \vec{r}_0, t_0\right)=\frac{1}{(2 \pi \hbar)^{3 N}} \int \mathcal{D} \vec{r} \mathcal{D} \vec{p} e^{i \frac{S(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\hbar}} \tag{20}$$

$$K\left(\vec{r}, t ; \vec{r}_0, t_0\right)=\prod_{n=1}^N\left(\frac{m}{2 \pi i \hbar \Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}} \int \mathcal{D} \vec{r} e^{i \frac{S(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t)}{\hbar}} \tag{21}$$

这是比较便于表达的形式，但是如果要进行具体计算还是要回到：

$$K\left(\vec{r}, t ; \vec{r}_0, t_0\right)=\frac{1}{(2 \pi \hbar)^{3 N}} \int e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N\left[\vec{p}_n \cdot \dot{\vec{r}}_n-H\left(\vec{r}_n, \vec{p}_n, t_n\right)\right] \Delta t_n} \mathrm{~d} \vec{r}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{r}_{N-1} \mathrm{~d} \vec{p}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{p}_N \tag{22}$$

$$K\left(\vec{r}, t ; \vec{r}_0, t_0\right)=\prod_{n=1}^N\left(\frac{m}{2 \pi i \hbar \Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}} \int e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N\left[\frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}_n^2-V\left(\vec{r}_n, t_n\right)\right] \Delta t_n} \mathrm{~d} \vec{r}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{r}_{N-1} \tag{23}$$

其中 $\left\{\begin{array}{l}\Delta t_n=t_n-t_{n-1} \\ \Delta \vec{r}_n=\vec{r}_n-\vec{r}_{n-1} \\ \dot{\vec{r}}_n=\Delta \vec{r}_n / \Delta t_n \\ n \in\{1,2,3, \cdots, N\}\end{array}\right.$ 且规定 $\left\{\begin{array}{l}\vec{r}_N=\vec{r} \\ t_N=t \\ t_0<t_n \leq t \\ a>b \Leftrightarrow t_a>t_b \\ \min \left\{t_n-t_{n-1}\right\} \rightarrow 0\end{array}\right.$

2.2 自由粒子——相空间的路径积分

相空间传播子表达式即

$$K\left(\vec{r}, t ; \vec{r}_0, t_0\right)=\int\left[\prod_{n=1}^N \mathcal{K}\left(\vec{r}_n, t_n ; \vec{r}_{n-1}, t_{n-1}\right)\right] \mathrm{d} \vec{r}_1 \cdots \mathrm{d} \vec{r}_{N-1} \tag{24}$$

其中

$$\mathcal{K}\left(\vec{r}_n, t_n ; \vec{r}_{n-1}, t_{n-1}\right)=\frac{1}{(2 \pi \hbar)^3} \int e^{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}_n \cdot \Delta \vec{r}_n-H\left(\vec{r}_n, \vec{p}_n, t_n\right) \Delta t_n\right]} \mathrm{d} \vec{p}_n \tag{25}$$

自由粒子 Hamiltonian 无势能项：$H=\frac{P^2}{2 m}$，得

$$\mathcal{K}\left(\vec{r}_n, t_n ; \vec{r}_{n-1}, t_{n-1}\right)=\frac{1}{(2 \pi \hbar)^3} \int e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}_n \cdot \Delta \vec{r}_n-\frac{p_n^2}{2 m} \Delta t_n\right)} \mathrm{d} \vec{p}_n \tag{26}$$

2.2.1 自由粒子的传播子与其无穷小情况具有相同的形式

接下来要证明 $\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_0,t_0)=\int\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_1,t_1)\mathcal{K}(\vec{r}_1,t_1;\vec{r}_0,t_0)\,\mathrm{d}\vec{r}_1$，注意 $K(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_0,t_0)=\int\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_1,t_1)\mathcal{K}(\vec{r}_1,t_1;\vec{r}_0,t_0)\,\mathrm{d}\vec{r}_1$ 是显然的，而这个是需要证明的。证明：

$$\begin{aligned}
&\int\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_1,t_1)\mathcal{K}(\vec{r}_1,t_1;\vec{r}_0,t_0)\,\mathrm{d}\vec{r}_1\\
&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^6}\int\left[\int e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}_2\cdot\Delta\vec{r}_2-\frac{p_2^2}{2m}\Delta t_2\right)}\mathrm{d}\vec{p}_2\right]\left[\int e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}_1\cdot\Delta\vec{r}_1-\frac{p_1^2}{2m}\Delta t_1\right)}\mathrm{d}\vec{p}_1\right]\mathrm{d}\vec{r}_1\\
&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^6}\int\mathrm{d}\vec{p}_1\mathrm{d}\vec{p}_2\ \mathrm{d}\vec{r}_1e^{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}_1\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_0)+\vec{p}_2\cdot(\vec{r}_2-\vec{r}_1)-\frac{p_2^2}{2m}(t_2-t_1)-\frac{p_1^2}{2m}(t_1-t_0)\right]}\\
&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^6}\int\mathrm{d}\vec{p}_1\mathrm{d}\vec{p}_2\ \mathrm{d}\vec{r}_1e^{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}_1\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_0)+\vec{p}_2\cdot(\vec{r}_2-\vec{r}_0+\vec{r}_0-\vec{r}_1)-\frac{p_2^2}{2m}(t_2-t_0+t_0-t_1)-\frac{p_1^2}{2m}(t_1-t_0)\right]}\\
&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^6}\int\mathrm{d}\vec{p}_1\mathrm{d}\vec{p}_2e^{\frac{1}{\hbar}\left[\vec{p}_2\cdot(\vec{r}_2-\vec{r}_0)-\frac{p_2^2}{2m}(t_2-t_0)\right]}e^{i\frac{p_2^2-p_1^2}{2m\hbar}(t_1-t_0)}\left[\int e^{-i\frac{\vec{p}_2-\vec{p}_1}{\hbar}\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_0)}\mathrm{d}\vec{r}_1\right]
\end{aligned}\tag{27}$$

接下来要利用最右边那重积分构造一个三维 delta function：$\delta(\vec{p}_2-\vec{p}_1)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-i\frac{(\vec{r}_1-\vec{r}_0)}{\hbar}\cdot(\vec{p}_2-\vec{p}_1)}\frac{\mathrm{d}(\vec{r}_1-\vec{r}_0)}{\hbar^3}$，那么有：

$$\begin{aligned}
&\int\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_1,t_1)\mathcal{K}(\vec{r}_1,t_1;\vec{r}_0,t_0)\,\mathrm{d}\vec{r}_1\\
&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\mathrm{d}\vec{p}_1\mathrm{d}\vec{p}_2e^{\frac{1}{\hbar}\left[\vec{p}_2\cdot(\vec{r}_2-\vec{r}_0)-\frac{p_2^2}{2m}(t_2-t_0)\right]}e^{i\frac{p_2^2-p_1^2}{2m\hbar}(t_1-t_0)}\delta(\vec{p}_2-\vec{p}_1)\\
&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}_2\cdot(\vec{r}_2-\vec{r}_0)-\frac{p_2^2}{2m}(t_2-t_0)\right]}\mathrm{d}\vec{p}_2\\
&=\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_0,t_0)
\end{aligned}\tag{28}$$

2.2.2 得到自由粒子的传播子

由前面的证明可知显然可以推广这个关系：

$$\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_0,t_0)=\int\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_1,t_1)\mathcal{K}(\vec{r}_1,t_1;\vec{r}_0,t_0)\,\mathrm{d}\vec{r}_1\tag{29}$$

$$\mathcal{K}(\vec{r}_3,t_3;\vec{r}_0,t_0)=\int\mathcal{K}(\vec{r}_3,t_3;\vec{r}_2,t_2)\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_0,t_0)\,\mathrm{d}\vec{r}_2\tag{30}$$

$$\cdots$$

$$\mathcal{K}(\vec{r}_N,t_N;\vec{r}_0,t_0)=\int\mathcal{K}(\vec{r}_N,t_N;\vec{r}_{N-1},t_{N-1})\mathcal{K}(\vec{r}_{N-1},t_{N-1};\vec{r}_0,t_0)\,\mathrm{d}\vec{r}_{N-1}\tag{31}$$

将前一行公式逐级带入下一行，我们将得到以下关系：

$$\mathcal{K}(\vec{r}_N,t_N;\vec{r}_0,t_0)=\int\left[\prod_{n=1}^{N}\mathcal{K}(\vec{r}_n,t_n;\vec{r}_{n-1},t_{n-1})\right]\mathrm{d}\vec{r}_1\cdots\mathrm{d}\vec{r}_{N-1}=K(\vec{r},t;\vec{r}_0,t)\tag{32}$$

上述关系说明自由粒子的传播子与其对应的无穷小过程的传播子具有相同的形式，这就可以推出[1]：

$$K(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0)=\mathcal{K}(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}_0)-\frac{p^2}{2m}(t-t_0)\right]}\mathrm{d}\vec{p} \tag{33}$$

然后将积分积出来，得到：

$$K(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0)=\left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right]^{\frac{3}{2}}\exp\left[i\frac{m(\vec{r}-\vec{r}_0)^2}{2\hbar(t-t_0)}\right] \tag{34}$$

2.3 自由粒子——位形空间的路径积分

位形空间传播子表达式即

$$K(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0)=\int\left[\prod_{n=1}^{N}\mathcal{K}(\vec{r}_n,t_n;\vec{r}_{n-1},t_{n-1})\right]\mathrm{d}\vec{r}_1\cdots\mathrm{d}\vec{r}_{N-1} \tag{35}$$

其中

$$\mathcal{K}(\vec{r}_n,t_n;\vec{r}_{n-1},t_{n-1})=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_n^2-V(\vec{r}_n,t_n)\right]\Delta t_n} \tag{36}$$

自由粒子 Lagrangian 无势能项：$L=\frac{P^2}{2m}$，得

$$\mathcal{K}(\vec{r}_n,t_n;\vec{r}_{n-1},t_{n-1})=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t_n}\right)^{\frac{3}{2}}e^{i\frac{m}{2\hbar}\frac{(\Delta\vec{r}_n)^2}{\Delta t_n}} \tag{37}$$

2.3.1 自由粒子的传播子与其无穷小情况具有相同的形式

接下来要证明 $\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_0,t_0)=\int\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_1,t_1)\mathcal{K}(\vec{r}_1,t_1;\vec{r}_0,t_0)\mathrm{d}\vec{r}_1$，注意 $K(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_0,t_0)=\int\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_1,t_1)\mathcal{K}(\vec{r}_1,t_1;\vec{r}_0,t_0)\mathrm{d}\vec{r}_1$ 是显然的，而这个是需要证明的。证明：

$$\begin{aligned}&\int\mathcal{K}(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_1,t_1)\mathcal{K}(\vec{r}_1,t_1;\vec{r}_0,t_0)\mathrm{d}\vec{r}_1\\&=\int\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t_2}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t_1}\right)^{\frac{3}{2}}e^{i\frac{m}{2\hbar}\frac{(\Delta\vec{r}_2)^2}{\Delta t_2}}e^{i\frac{m}{2\hbar}\frac{(\Delta\vec{r}_1)^2}{\Delta t_1}}\ \mathrm{d}\vec{r}_1\\&=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t_2}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t_1}\right)^{\frac{3}{2}}\int e^{i\frac{m}{2\hbar}\left[\frac{(\vec{r}_2-\vec{r}_1)^2}{\Delta t_2}+\frac{(\vec{r}_1-\vec{r}_0)^2}{\Delta t_1}\right]}\mathrm{d}_1\end{aligned} \tag{38}$$

下一步是要将 $\vec{r}_1$ 配方后积掉，先算指数部分：

$$\begin{aligned}&\frac{\vec{r}_2-\vec{r}_1}{\Delta t_2}+\frac{\vec{r}_1-\vec{r}_0}{\Delta t_1}\\&=\left(\frac{1}{\Delta t_2}+\frac{1}{\Delta t_1}\right)\left[\vec{r}_1-\left(\frac{1}{\Delta t_2}+\frac{1}{\Delta t_1}\right)^{-1}\left(\frac{\vec{r}_2}{\Delta t_2}+\frac{\vec{r}_0}{\Delta t_1}\right)\right]^2+\frac{\vec{r}_0^2+\vec{r}_2^2-2\vec{r}_2\vec{r}_0}{\Delta t_1+\Delta t_2}\end{aligned} \tag{39}$$

---

[1] 如果这里不用路径积分那么将会非常简单：$|\psi(t)\rangle=U(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle\Rightarrow\psi(\vec{r},t)=\int\left\langle\vec{r}\left|e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)}\right|\vec{r}_0\right\rangle\psi(\vec{r}_0,t_0)\mathrm{d}\vec{r}_0$

$K(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0)=\left\langle\vec{r}\left|e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)}\right|\vec{r}_0\right\rangle=\int\langle\vec{r}\mid\vec{p}\rangle\left\langle\vec{p}\left|e^{-i\frac{P^2}{2m\hbar}(t-t_0)}\right|\vec{p}'\right\rangle\langle\vec{p}'\mid\vec{r}_0\rangle\mathrm{d}\vec{p}\,\mathrm{d}\vec{p}'$

$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{i\frac{\vec{p}}{\hbar}\cdot\vec{r}}e^{-i\frac{p^2}{2m\hbar}(t-t_0)}e^{-i\frac{\vec{p}}{\hbar}\cdot\vec{r}_0}\ \mathrm{d}p\int\delta(\vec{p}-\vec{p}')\mathrm{d}\vec{p}'$

$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}_0)-\frac{p^2}{2m}(t-t_0)\right]}\mathrm{d}\vec{p}$

所以根据不同场合要选择不同工具。

上述指数代回原式得到：

$$\begin{aligned}
&\int \mathcal{K}\left(\vec{r}_2, t_2; \vec{r}_1, t_1\right) \mathcal{K}\left(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_0, t_0\right) \mathrm{d}\vec{r}_1 \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t_2}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t_1}\right)^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{m}{2\hbar}\frac{(\vec{r}_2-\vec{r}_0)^2}{t_2-t_0}} \int e^{i\frac{m}{2\hbar}\left(\frac{1}{\Delta t_2}+\frac{1}{\Delta t_1}\right)\vec{x}^2}\ \mathrm{d}\vec{x} \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t_2}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{\pi i\Delta t_1}\right)^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{m}{2\hbar}\frac{(\vec{r}_2-\vec{r}_0)^2}{t_2-t_0}} \int e^{-\frac{\Delta t_2+\Delta t_1}{i\Delta t_2\Delta t_1}\vec{y}^2}\ \mathrm{d}\vec{y}^2 \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t_2}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{\pi i\Delta t_1}\right)^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{m}{2\hbar}\frac{(\vec{r}_2-\vec{r}_0)^2}{t_2-t_0}} \left(\frac{\pi i\Delta t_2\Delta t_1}{t_2-t_0}\right)^{\frac{3}{2}} \\
&= \left[\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t_2-t_0\right)}\right]^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{m}{2\hbar}\frac{(\vec{r}_2-\vec{r}_0)^2}{t_2-t_0}} \\
&= \mathcal{K}\left(\vec{r}_2, t_2; \vec{r}_0, t_0\right)
\end{aligned} \tag{40}$$

2.3.2 得到自由粒子的传播子

与 2.2.2相似，我们仍可以得到自由粒子的传播子与其对应的无穷小过程传播子具有相同的形式的结论：

$$K\left(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0\right) = \left[\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t-t_0\right)}\right]^{\frac{3}{2}} \exp\left[i\frac{m\left(\vec{r}-\vec{r}_0\right)^2}{2\hbar\left(t-t_0\right)}\right] \tag{41}$$

以上的内容我们了解了路径积分的由来和结构组成，下面我们将使用对角化的方法再解决一次自由粒子的问题，然后再解决谐振子的问题。

2.4 自由粒子——用对角化方法求路径积分

我们设定：$\Delta t_n = \frac{t-t_0}{N} = \varepsilon$，下面所有的讨论都取极限 $N \to \infty, \varepsilon \to 0$。

一维系统中，位形空间传播子即

$$K\left(x, t; x_0, t_0\right) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \int \mathrm{D}x e^{i\frac{S}{\hbar}} \tag{42}$$

其中

$$S = \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{2} m \frac{\left(\Delta x_n\right)^2}{\varepsilon^2} \varepsilon = \frac{m}{2\varepsilon} \sum_{n=1}^{N} \left(x_n - x_{n-1}\right)^2, x_N = x \tag{43}$$

2.4.1 对作用量进行变量代换

现在作代换：

$$x_n = x_n^c + y_n \tag{44}$$

其中 $x_n^c = x^c(t_n) = x^c(t_0 + n\varepsilon)$，$y_n$ 同理。规定：

$$x_0^c = x^c(t_0) = x_0 \tag{45}$$

$$x_N^c = x^c(t_N) = x_N = x \tag{46}$$

这样一来就有 $y_0 = 0, y_N = 0$。注意 $t_N = t_0 + N\varepsilon; \Delta t_2 + \Delta t_1 = t_2 - t_0 \Rightarrow \sum_{n=1}^{N} \Delta t_n = N\varepsilon = t_N - t_0$。为了不出现某些奇怪难以处理的耦合项，后面我们会要求 x_n^c 带着首尾端点一起满足经典路径方程然后整体被抽离出去。积分是从 $\mathrm{d}x_1$ 到 $\mathrm{d}x_{N-1}$ 的。

带入后得到：

$$S=\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left(\Delta x_n\right)^2=\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left(\Delta x_n^c+\Delta y_n\right)^2 \tag{47}$$

$$S=\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left(\Delta x_n^c\right)^2+\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left(\Delta y_n\right)^2+\frac{m}{\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\Delta x_n^c\Delta y_n \tag{48}$$

由此我们将 S 分成如上三个部分：$S=S^c+S'+S^\times$

2.4.2 经典路径的分离

先利用 y_n 的边界条件解决交叉项 $S^\times$

$$\begin{aligned}
S^\times&=\frac{m}{\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\Delta x_n^{\mathrm{c}}\Delta y_n=m\sum_{n=1}^{N}\dot{x}_n^{\mathrm{c}}\left(y_n-y_{n-1}\right)\\
&=m\left(\sum_{n=1}^{N}\dot{x}_n^{\mathrm{c}}y_n-\sum_{n=1}^{N}\dot{x}_n^{\mathrm{c}}y_{n-1}\right)\\
&\overset{y_N=0}{=}m\left(\sum_{n=1}^{N-1}\dot{x}_n^{\mathrm{c}}y_n-\sum_{n=0}^{N-1}\dot{x}_{n+1}^{\mathrm{c}}y_n\right)\\
&\overset{y_0=0}{=}m\left(\sum_{n=1}^{N-1}\dot{x}_n^{\mathrm{c}}y_n-\sum_{n=1}^{N-1}\dot{x}_{n+1}^{\mathrm{c}}y_n\right)=-m\varepsilon\sum_{n=1}^{N-1}\frac{\Delta\dot{x}_{n+1}^{\mathrm{c}}}{\varepsilon}y_n=-m\varepsilon\sum_{n=1}^{N-1}\ddot{x}_{n+1}^{\mathrm{c}}y_n
\end{aligned} \tag{49}$$

如果我们将 $x^c(\tau)$ 取为[2]满足经典自由粒子方程 $F=m\ddot{x}^c=0$ 的解，则有 $S^\times=0$。

再计算经典路径 S^c：

$$S^c=\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left(\Delta x_n^c\right)^2=\frac{m\varepsilon}{2}\sum_{n=1}^{N}\frac{\left(\Delta x_n^c\right)^2}{\varepsilon^2}=\frac{m\varepsilon}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(\dot{x}_n^c\right)^2\overset{\varepsilon\to 0}{=}\frac{m}{2}\int_{t_0}^{t}\left(\dot{x}^c\right)^2\ \mathrm{d}\tau \tag{50}$$

取了经典自由粒子解的 $\dot{x}^c$ 是一个常数，并且有 $\dot{x}^c=\frac{x-x_0}{t-t_0}$。所以

$$S^c=\frac{m}{2}\int_{t_0}^{t}\left(\dot{x}^c\right)^2\mathrm{d}\tau=\frac{m}{2}\left(\frac{x-x_0}{t-t_0}\right)^2\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}\tau=\frac{m\left(x-x_0\right)^2}{2\left(t-t_0\right)} \tag{51}$$

因为取定了经典路径，所以直接就可以算出作用量了，那么传播子可以进一步写为：

$$K\left(x,t;x_0,t_0\right)=e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\int e^{\frac{i}{\hbar}S'}\mathrm{d}y_1\cdots\mathrm{d}y_{N-1} \tag{52}$$

取定的路径的 $x_n^c=x^c(t_n)$ 都是给定的，所以 $\mathrm{d}x_n^c=0\Rightarrow\mathrm{d}x_n=\mathrm{d}\left(x_n^c+y_n\right)=\mathrm{d}y_n$，那么与积分变量无关的 $e^{i\frac{S^c}{\hbar}}$ 可以直接不管了。

[2] $x^c(\tau)$ 是取完极限之后的 $x_n^c=x^c(t_n)$，因为 t 已经取为时间末态了所以用 τ。

2.4.3 用对角化的方法计算传播子积分

最后需要化简的就是 S'，我们现在将其对角化：

$$\begin{aligned} S' &= \frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left(y_n-y_{n-1}\right)^2 \\ &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[y_1^2+\left(y_2-y_1\right)^2+\cdots+\left(y_{N-1}-y_{N-2}\right)^2+y_{N-1}^2\right] \\ &= \frac{m}{2\varepsilon}\left(2\sum_{n=1}^{N-1}y_n^2-2\sum_{n=1}^{N-1}y_ny_{n-1}\right) \\ &= \frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N-1}\left(2y_n^2-2y_ny_{n-1}\right)=\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n,m=1}^{N-1}y_mA_{mn}y_n=\frac{m}{2\varepsilon}y^TAy \end{aligned} \tag{53}$$

其中 A 是一个 $N-1$ 维正定实对称矩阵，即 $A_{mn}=2\delta_{mn}-\delta_{m,n-1}-\delta_{m-1,n}$。显然 $y^T=(y_1,y_2,\cdots,y_{N-1})$。如果没有了 $y_0=y_N=0$ 就没法对角化了。

因为实对称矩阵一定可以通过一个幺正变换对角化，所以：

$$R^TAR=\Lambda=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{N-1}) \tag{54}$$

其中 R 是正交阵，我们令 $y=Ru\Rightarrow y^{\mathrm{T}}Ay=u^{\mathrm{T}}R^{\mathrm{T}}ARu=u^{\mathrm{T}}\Lambda u=\sum_{n=1}^{N-1}\lambda_nu_n^2$，再进行一次变量代换 $\mathrm{d}y_1\cdots\mathrm{d}y_{N-1}=|\det R|\mathrm{d}u_1\cdots\mathrm{d}u_{N-1}=\mathrm{d}u_1\cdots\mathrm{d}u_{N-1}$ 经过上述操作传播子的表达式被简化了：

$$\begin{aligned} K\left(x,t;x_0,t_0\right) &= e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\int e^{i\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\sum_{n=1}^{N-1}\lambda_nu_n^2}\,\mathrm{d}u_1\cdots\mathrm{d}u_{N-1} \\ &= e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\int e^{-\frac{m\lambda_n}{2i\hbar\varepsilon}u_n^2}\,\mathrm{d}u_n \\ &= e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\sqrt{\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m\lambda_n}}=e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}}\left(\prod_{n=1}^{N-1}\lambda_n\right)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{55}$$

2.4.4 特征多项式与连乘积

接下来要求的就是本征值的连乘积 $\prod_{n=1}^{N-1}\lambda_n$，先构造多项式

$$P_n(\lambda)=\begin{vmatrix} 2-\lambda & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2-\lambda & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2-\lambda & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2-\lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2-\lambda \end{vmatrix} \tag{56}$$

显然 A 的本征多项式 $|A-\lambda I|=P_{N-1}(\lambda)$。对 $P_n(\lambda)$ 关于第一行展开可以得到递推关系：$P_n=(2-\lambda)P_{n-1}-P_{n-2}$。

想求解改行列式则需先定义一个能提升多项式阶数的线性算符 L，即有 $LP_n=P_{n+1}$，代入递推关系可得

$$\left[L^2+(\lambda-2)L+1\right]P_n=0\Rightarrow(L-\alpha)(L-\beta)P_n=0 \tag{57}$$

其中 $\alpha=\frac{2-\lambda+\sqrt{\lambda^2-4\lambda}}{2},\beta=\frac{2-\lambda-\sqrt{\lambda^2-4\lambda}}{2}$。显然 $(L-\alpha)P_n=0$ 与 $(L-\beta)P_n=0$ 的解都是方程的解，可解得通解：

$$P_n=c_1\alpha^n+c_2\beta^n \tag{58}$$

其中 c_1 和 c_2 均为待定系数，我们将用比较容易算的初始条件将其确定。很容易得到 $P_1=2-\lambda,P_2=(2-\lambda)^2-1$，但 $P_2=c_1\alpha^2+c_2\beta^2$ 算起来仍然不容易，但是如果强行定义 $P_0\equiv 1$ 就会发现递推关系仍然成立，所以可以用 $P_0=1$ 和 $P_1=2-\lambda$ 将 c_1 和 c_2 确定下来，综上所述，解得

$$P_n=\frac{\alpha^{n+1}-\beta^{n+1}}{\alpha-\beta}=\frac{(\alpha-\beta)\left(\alpha^n+\alpha^{n-1}\beta+\cdots+\beta^n\right)}{\alpha-\beta} \tag{59}$$

接下来可以求出本征值的连乘积 $\prod_{n=1}^{N-1}\lambda_n$，显然 $\prod_{n=1}^{N-1}\lambda_n=|A|$。前面我们得到 $|A-\lambda I|=P_{N-1}(\lambda)$，那么显然：$|A|=P_{N-1}(0)$。

$$\begin{aligned}&\lambda=0\Rightarrow\alpha=\beta=1\\&\Rightarrow P_{N-1}(0)=\frac{(\alpha-\beta)\left(\alpha^{N-1}+\alpha^{N-2}\beta+a^{N-3}\beta^2+\cdots+\beta^{N-1}\right)}{\alpha-\beta}=N\end{aligned} \tag{60}$$

综上所述，$\prod_{n=1}^{N-1}\lambda_n=|A|=P_{N-1}(0)=N$，我们将上述结论代入传播子的表达式得到：

$$K\left(x,t;x_0,t_0\right)=e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}}\frac{1}{\sqrt{N}}=e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t-t_0\right)}} \tag{61}$$

代入 S^c 即

$$K\left(x,t;x_0,t_0\right)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t-t_0\right)}}\exp\left[i\frac{m\left(x-x_0\right)^2}{2\hbar\left(t-t_0\right)}\right] \tag{62}$$

2.5 谐振子——用对角化求解路径积分

一维谐振子势即 $V=\frac{1}{2}m\omega^2X^2$，位形空间传播子即

$$K\left(x,t;x_0,t_0\right)=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\int \mathrm{D}xe^{i\frac{S}{\hbar}} \tag{63}$$

其中

$$S=\sum_{n=1}^{N}\left[\frac{1}{2}m\frac{\left(\Delta x_n\right)^2}{\varepsilon^2}\varepsilon-\frac{1}{2}m\omega^2x_n^2\right]=,\Delta x_n=x_n-x_{n-1},x_N=x \tag{64}$$

2.5.1 对作用量进行变量代换

代入后得到

$$S=\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left[\left(\Delta x_n\right)^2-\varepsilon^2\omega^2x_n^2\right]=\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left[\left(\Delta x_n^c+\Delta y_n\right)^2-\varepsilon^2\omega^2\left(x_n^c+y_n\right)^2\right] \tag{65}$$

$$\begin{aligned}S^c&=\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left[\left(\Delta x_n^c\right)^2-\varepsilon^2\omega^2\left(x_n^c\right)^2\right]\\S'&=\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left[\left(\Delta y_n\right)^2-\varepsilon^2\omega^2y_n^2\right]\\S^\times&=\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left(2\Delta x_n^c\Delta y_n-\varepsilon^2\omega^2 2x_n^cy_n\right)\end{aligned} \tag{66}$$

2.5.2 经典路径的分离

先利用 y_n 的边界条件计算交叉项 $S^\times$

$$\begin{aligned} S^\times &= \frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left(2\Delta x_n^c\Delta y_n-\varepsilon^2\omega^2 2x_n^c y_n\right) \\ &= -\varepsilon\sum_{n=1}^{N-1}\left(m\ddot{x}_{n+1}^c+m\omega^2x_n^c\right)y_n \end{aligned} \tag{67}$$

现在人为地选定 $x^c(\tau)$ 为经典方程 $m\ddot{x}^c=-\frac{\partial V}{\partial x^c}=-m\omega^2x^c$ 的解，则有 $S^\times=0$。再计算经典路径项 S^c：

$$\begin{aligned} S^c &= \frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left[\left(\Delta x_n^c\right)^2-\varepsilon^2\omega^2\left(x_n^c\right)^2\right] \\ &= \frac{m\varepsilon}{2}\sum_{n=1}^{N}\left[\left(\dot{x}_n^c\right)^2-\omega^2\left(x_n^c\right)^2\right]=\frac{m}{2}\int_{t_0}^{t}\left[\left(\dot{x}^c\right)^2-\omega^2\left(x^c\right)^2\right]\mathrm{d}\tau \end{aligned} \tag{68}$$

其中 $m\ddot{x}^c=-m\omega^2x^c\Rightarrow\ddot{x}^c=-\omega^2x^c\Rightarrow x^c=\gamma_1e^{i\omega\tau}+\gamma_2e^{-i\omega\tau}$，其中系数 γ_1 和 γ_2 由初始条件解出，可解得 $x^c=\frac{x\sin[\omega(\tau-t_0)]-x_0\sin[\omega(\tau-t)]}{\sin[\omega(t-t_0)]}$。然后分部积分化简 S^c 得到 $S^c=\frac{m}{2}\dot{x}^cx^c\Big|_{t_0}^{t}$，即

$$S^c=\frac{m\omega}{2}\left\{\left(x^2+x_0^2\right)\cot\left[\omega\left(t-t_0\right)\right]-2xx_0\csc\left[\omega\left(t-t_0\right)\right]\right\} \tag{69}$$

那么就可以把经典路径作用量对应的部分分出来了：

$$K\left(x,t;x_0,t\right)=e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\int e^{i\frac{S'}{\hbar}}\mathrm{d}y_1\cdots\mathrm{d}y_{N-1} \tag{70}$$

2.5.3 用对角化的方法计算传播子积分

最后要计算的就是 $S'=\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left[\left(\Delta y_n\right)^2-\varepsilon^2\omega^2y_n^2\right]$，括号内左边部分作如下改写：$\sum_{n=1}^{N}\left(\Delta y_n\right)^2=y^TAy$，化简传播子表达式：

$$\begin{aligned} &K\left(x,t;x_0,t\right) \\ =&e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\int e^{i\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\left(y^{\mathrm{T}}Ay-\varepsilon^2\omega^2y^{\mathrm{T}}y\right)}\mathrm{d}y_1\cdots\mathrm{d}y_{N-1} \\ =&e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\int e^{i\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\sum_{n=1}^{N-1}\left(\lambda_n-\varepsilon^2\omega^2\right)u_n^2}\ \mathrm{d}u_1\cdots\mathrm{d}u_{N-1} \\ =&e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\int e^{-\frac{m\left(\lambda_n-\varepsilon^2\omega^2\right)}{2i\hbar\varepsilon}u_n^2}\ \mathrm{d}u_n \\ =&e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\sqrt{\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m\left(\lambda_n-\varepsilon^2\omega^2\right)}}=e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}}\left[\prod_{n=1}^{N-1}\left(\lambda_n-\varepsilon^2\omega^2\right)\right]^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{71}$$

2.5.4 特征多项式与连乘积

操作与 2.4.4相似，解得 $P_n = \frac{\alpha^{n+1}-\beta^{n+1}}{\alpha-\beta}$，有 $P_{N-1}(\lambda) = \prod_{n=1}^{N-1}(\lambda_n - \lambda) \Rightarrow \prod_{n=1}^{N-1}(\lambda_n - \varepsilon^2\omega^2) = P_{N-1}(\varepsilon^2\omega^2)$。计算出 $\alpha(\varepsilon^2\omega^2)$ 与 $\beta(\varepsilon^2\omega^2)$：

$$\begin{aligned}\lambda = \varepsilon^2\omega^2 \Rightarrow \alpha &= \frac{2-\lambda+\sqrt{\lambda^2-4\lambda}}{2} \\ &= \frac{2-\varepsilon^2\omega^2+\varepsilon\omega\sqrt{\varepsilon^2\omega^2-4}}{2} \overset{\varepsilon\to 0}{=} \frac{2+\varepsilon\omega\sqrt{-4}}{2} = 1+i\omega\varepsilon\end{aligned}$$

同理 $\beta = \frac{2-\lambda-\sqrt{\lambda^2-4\lambda}}{2} = 1 - i\omega\varepsilon$。

$$\begin{aligned}\prod_{n=1}^{N-1}\left(\lambda_n - \varepsilon^2\omega^2\right) &= P_{N-1}\left(\varepsilon^2\omega^2\right) \\ &= \frac{\alpha^N - \beta^N}{\alpha - \beta} \\ &= \frac{(1+i\omega\varepsilon)^N - (1-i\omega\varepsilon)^N}{1+i\omega\varepsilon-1+i\omega\varepsilon} \\ &= \frac{1}{2i\omega\varepsilon}\left\{\left[1+\frac{i\omega(t-t_0)}{N}\right]^N - \left[1-\frac{i\omega(t-t_0)}{N}\right]^N\right\} \\ &\overset{N\to\infty}{=} \frac{1}{2i\omega\varepsilon}\left[e^{i\omega(t-t_0)} - e^{-i\omega(t-t_0)}\right] = \frac{\sin[\omega(t-t_0)]}{\omega\varepsilon}\end{aligned} \tag{72}$$

将上述结果代入传播子表达式，即得所求：

$$K(x,t;x_0,t_0) = e^{i\frac{S^c}{\hbar}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin[\omega(t-t_0)]}} \tag{73}$$

其中 $S^c = \frac{m\omega}{2}\left\{(x^2+x_0^2)\cot[\omega(t-t_0)] - 2xx_0\csc[\omega(t-t_0)]\right\}$

2.6 个人的理解

积分的本质就是叠加，而路径积分是对每条可能路径的贡献进行叠加，也就是将每条路径的概率加权求和，从而得到了从一点到另一点的概率。这里的路径是一个无线维度的空间中的一个向量，作为路径积分的自变量，而积分结果是从一点到另一点的概率密度。

参考文献

[1] 曾谨言. 量子力学教程. 科学出版社, 2003.

[2] Jun John Sakurai and Eugene D Commins. Modern quantum mechanics, revised edition, 1995.

[3] 喀兴林. 高等量子力学. 高等教育出版社, 2001.

[4] 李文安 and 陈浩. 一维无限深势阱中粒子运动的路径积分解法. 大学物理, 26(1):10–10, 2007.

[5] David C Lay, Steven R Lay, and Judi J McDonald. *Linear algebra and its applications*. Pearson, 2016.