28.传播子的具体形式计算

对于小球，也可能有初速度，我们目前尚没有考虑动量相关的影响路径积分的因素

$$x(t') = x_0 + vt' + \frac{1}{2}gt'^2$$

此外就是我们没有给出具体传播子算出来的形式，只做到了分割的形式。我们先进行一下复习

原来波函数演化：$|\Psi(t')\rangle = U(t',t)|\Psi(t)\rangle$，$U(t',t) = e^{-\frac{iH}{\hbar}(t'-t)}$
在坐标表象：$\langle x'|\Psi(t')\rangle = \Psi(x',t') = \int \langle x'|U(t',t)|x\rangle\langle x|\Psi(t)\rangle dx$
定义传播子：$\langle x'|U(t',t)|x\rangle = U(x',t';x,t)$，可把$\Psi(x,t)$传播到对应的$\Psi(x',t')$
这里传播子的时间较长，可以分割成N份，使得用N个传播子作用，一直到$N\to\infty$，则每个传播子时长为$\Delta t = \frac{t'-t}{N}\to 0$

为使$x\to x'$被分割为无数小时间的传播，我们传播了很多次，这似乎没有必要，但是如果我们可以保证时间是很小的，比如达到$\Delta t\approx 0.5fs$甚至是$\Delta t\approx 2.5as$，那么好处是可以做展开。
当$\Delta t\to 0$时，指数算符展开变为：

$$\begin{aligned}\langle x_{k+1}|e^{-\frac{iH\Delta t}{\hbar}}|x_k\rangle &= \langle x_{k+1}|(1-\frac{iH\Delta t}{\hbar})|x_k\rangle \\ &= \langle x_{k+1}|x_k\rangle - \frac{i\Delta t}{\hbar}\langle x_{k+1}|H|x_k\rangle\end{aligned}$$

能展开的肯定是好事，然后我们考虑具体的哈密顿量形式$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

$$\begin{aligned}\langle x_{k+1}|H|x_k\rangle &= \int \langle x_{k+1}|p_k\rangle\langle p_k|\frac{p^2}{2m} + V(x)|x_k\rangle dp_k \\ &= \int \frac{e^{\frac{ip_k\cdot x_{k+1}}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\cdot H(p_k,x_k)\cdot\frac{e^{-\frac{ip_k x_k}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}dp_k \\ &= \int \frac{e^{\frac{ip_k(x_{k+1}-x_k)}{\hbar}}}{2\pi\hbar}\cdot H(p_k,x_k)dp_k\end{aligned}$$

这里为了让动量算符有地方作用，还插入了动量单位算符，然后哈密顿算符动量部分向左作用就拿到当前动量p_k，坐标算符向右作用拿到当前势能$V(x_k)$，也就是此时哈密顿算符变为了一个当前坐标和动量的函数。随后坐标和动量的内积，结果是平面波，这是我们学过的，因此最后把两个平面波乘在一起，就得到了最终结果。

而此外，$\langle x_{k+1}|x_k\rangle$也可类似插入动量算符得到两个平面波相乘的形式，跟上面一样，于是总结一下，之前的传播子的指数算符的展开，现在变为

$$
\begin{aligned}
\langle x_{k+1}|e^{-\frac{iH\Delta t}{\hbar}}|x_k\rangle &= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar}e^{\frac{ip_k(x_{k+1}-x_k)}{\hbar}}(1-\frac{i\Delta t}{\hbar}H(p_k,x_k)) \\
&= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar}e^{\frac{i\Delta t p_k\cdot\frac{x_{k+1}-x_k}{\Delta t}}{\hbar}}\cdot(1-\frac{i\Delta t}{\hbar}H(p_k,x_k)) \\
&= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar}e^{i\Delta t[\dot{x}_k\cdot p_k-H(p_k,x_k)]/\hbar}
\end{aligned}
$$

这里第二行到第三行利用$\Delta t\to 0$因此可以把泰勒展开倒过来用，变成指数算符，乘进去，同时定义速度$\dot{x}_k=\frac{x_{k+1}-x_k}{\Delta t}$，这就得到了结果。

那么总的大路径积分是上面无数个小的可泰勒展开的传播子的乘积，于是写作：

$$
\begin{aligned}
\langle x'|U(t',t)|x\rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^N}\int dx_{N-1}\cdots dx_1\int dp_{N-1}\cdots dp_0 e^{\frac{i\Delta t}{\hbar}\sum_k[\dot{x}_k p_k-H(p_k,x_k)]} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^N}\int \mathcal{D}x\int \mathcal{D}p e^{\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'}dt[\dot{x}(t)p(t)-H(p(t),x(t))]} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^N}\int \mathcal{D}x\int \mathcal{D}p e^{\frac{i}{\hbar}S}
\end{aligned}
$$

这里第一行里，无数小传播子的乘积变为指数上的累加，当无限小时候，自然就变成积分的形式，而外部的积分号太多了，我们往往会采用这啥符号的写法，好像叫测度？总之这样很方便。但是需要注意的是这里的积分变量，p_0是不同于左边坐标的。左边坐标到x_1就停止了，这是因为传播子把对初始坐标的积分没有涵盖进来，使用传播子的时候是传播子乘初始波函数再补积分号的。而这里动量是到p_0初始的动量。

并且我们类比理论力学，定义拉氏量$\mathcal{L}=\dot{x}p-H$，而其对时间的积分S即作用量，表现出相位因素，这就是上一节我们类比理论力学的结论，现在我们成功用各自算符的插入以及指数算符的展开证明了这个式子。 而经典路径只有一条最小作用量的路径，此时路径满足$\delta S=0$，关于这部分变分的讨论以及复习一下理论力学的结果，可以看下面

在量子力学中，作用量S的大小会作为相位进行干涉。当路径在$\delta S=0$附近时，相邻路径相位大致一致，此时经典效应最显著，如果$\hbar$对于系统而言是小量，那么可以认为相位基本不随空间变化，则体系是十分符合经典力学的；但当S与$\hbar$同一数量级时，路径稍微偏离，S很快进入反复振荡区域，此时量子效应干涉显著。

理论力学里变分运算相关

课上讨论了变分的运算，但是这个其实也不难，随便找个三四十分钟的网课也能看明白，根据变分穿透积分号法则有：

$$\delta S=\int_t^{t'}dt[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}\delta x+\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}}\delta \dot{x}+\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p}\delta p]$$

然后利用变分穿透微分法则：$\delta\dot{x}=\delta(\frac{dx}{dt})=\frac{d}{dt}\delta x$，于是上面的式子我们可以对$\delta\dot{x}$项做分部积分，得到

$$\delta S=\int_t^{t'}dt\left[(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}-\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}})\delta x+\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p}\delta p\right]$$

现在式子要满足$\delta S=0$，意味着对任意δx和δp上式都要为零，因此满足这个条件的位移情况是上面两部分分别恒为零，也就是得到两个方程。

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}-\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}}=0\quad ,\text{以及}\quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p}=0$$

其中前者是欧拉 - 拉格朗日关系，后者代入拉氏量的形式可得

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p}=\dot{x}-\frac{\partial H}{\partial p}=\dot{x}-\frac{2p}{2m}=0$$

即这是动量$m\dot{x}$和正则动量p关系，这是哈密顿方程的一部分。

将欧拉 - 拉格朗日关系同样具体代入拉氏量表达式，得到$-\frac{\partial H}{\partial x}-\frac{d}{dt}p=0$，即

$$-\frac{\partial V}{\partial x}=\frac{d}{dt}p$$

此即牛顿定律，也符合哈密顿方程的另一半。在经典力学中，直接用上述方程结合初值条件求解即可。

传播子的其他具体形式

考虑拉氏量$\mathcal{L}=\dot{x}p-H$，其中由前面变分导出的方程有

$$m\dot{x}=p\quad ,\qquad H=\frac{p^2}{2m}+V$$

则

$$\mathcal{L}=\dot{x}m\dot{x}-\frac{m\dot{x}^2}{2}-V=\frac{m\dot{x}^2}{2}-V$$

这确实就是经典拉氏量，一个只由坐标和坐标导数(动量)决定的量，我们考虑一个量子体系的时候，只需要找到其经典对应，然后一眼看出来拉氏量，然后做勒让德变换就可以得到哈密顿量，然后就拿到了哈密顿算符，然后就可以进行路径积分计算，胜利的方程式已然书写完毕，剩下的只是如何解方程(笑)

不过其实，哈密顿量不一定是上述形式，比如在电磁场的时候，此时$H=\frac{(p-\frac{qA}{c})^2}{2m}+V=\frac{\Pi^2}{2m}+V$，不过幸好这个时候上面的流程也不会变化，我们仍然可以类似地进行讨论计算，至于结果，老师上课没说，笔者也不是很感兴趣，就跳了。

上面解出来的传播子的形式，积分要对坐标和动量进行，但是实际上还有一种传播子的形式，只用对坐标进行积分(动量提前被积完了)，这是怎么回事呢？实际上这是无电磁场情况的特例，又因为一般很多体系都不考虑电磁场，因此这种形式很常见。因此下面我们仍然基于正常的不含电磁场的拉氏量讨论

考虑利用一个单纯的数学上配方操作

$$\int_t^{t'} dt\left[p(t)\dot{x}(t)-\frac{p^2(t)}{2m}\right]=\int_t^{t'} dt\left[-\frac{(p(t)-m\dot{x}(t))^2}{2m}+\frac{m}{2}\dot{x}(t)^2\right]$$

并且我们再利用高斯积分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{-ap^2}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

那么现在我们回到之前的传播子$U(x',t';x,t)$，把其中的动量积分显式写出来，然后把拉氏量做上面的配方替换：

$$\begin{aligned}
U(x',t';x,t)&=\int\mathcal{D}x\prod_k^N\frac{dp_k}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t\left[-\frac{(p_k-m\dot{x_k})^2}{2m}+\frac{m}{2}\dot{x_k}^2-V(x_k)\right]}\\
&=\int\mathcal{D}x\prod_k\left[\left(\frac{2\pi m\hbar}{i\Delta t}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{2\pi\hbar}\right]e^{\frac{i}{\hbar}\int dt\,\mathcal{L}(x,\dot{x})}\\
&=\int\mathcal{D}x\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\Delta t}\right)^{\frac{N}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}S}\longrightarrow\int\mathcal{D}x\,e^{\frac{i}{\hbar}S}
\end{aligned}$$

其中第一行原本是指数上的积分形式，但求和形式更好，于是改为指数上的求和形式，而考虑到指数的求和本质上是分立的连乘，于是改为对积分变量开始进行连乘，然后此时指数上中括号内，第一项是只跟p_k有关的平方，这就可以利用高斯积分，直接算出来，而后面两项则保留下来，写成经典拉氏量的形式，这就得到了第二行，随后对变量进行一下简化，就得到了第三行。由于传播子本身作为算符，其系数是没有关系的，因此省略系数，就变成箭头右边的只跟坐标积分有关的形式，这就是一个很常见的另一种传播子的形式。

但存在电磁场时，上述对动量积分的步骤不可行。

29.统计力学配分函数虚时传播子

在统计力学中，路径积分也有应用。例如，考虑密度矩阵

$$\rho=\frac{e^{-\beta H}}{Z}\quad,\ Z=\mathrm{Tr}(e^{-\beta H})=\sum_k e^{-\beta E_k}=\int dq\langle q|e^{-\frac{\beta\hbar H}{\hbar}}|q\rangle$$

上面配分函数的形式如果在能量表象下就是简单的对角元的求和，这是之前学过的，但是其当然也可以用坐标表象展开，此时就变成了一个积分,但是观察可以发现，我们手动对分子分母乘上一个$\hbar$，那么这个时候配分函数长得就像这是传播子中起点和终点相同$x'=x$的情况。在$\langle q|e^{-\frac{\beta\hbar H}{\hbar}}|q\rangle$中插入$q_k$，可以得到

$$\begin{aligned}\langle q|e^{-\frac{\beta\hbar H}{\hbar}}|q\rangle&=\int dq_{N-1}\cdots dq_1\langle q|e^{-\frac{-\Delta\tau H}{\hbar}}|q_{N-1}\rangle\langle q_{N-1}|\cdots|q\rangle\\&=\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\ e^{-\frac{\widetilde{S}}{\hbar}}\end{aligned}$$

其中$\Delta\tau=\frac{\beta\hbar}{N}\rightarrow 0$,上面同时也进行了动量$p_k$的插入，总之过程是跟之前路径积分是完全一样的，因为我们可以发现如下的对应关系

定义

$$\widetilde{S}=\int_\alpha^{\beta\hbar}d\tau\left[H(P(\tau),q(\tau))-iP(\tau)\frac{dq(\tau)}{d\tau}\right]$$

存在对应关系：

$$\beta\hbar\longleftrightarrow i(t'-t)$$

$$d\tau\longleftrightarrow idt$$

$$\widetilde{S}\longleftrightarrow iS$$

通过代入可以相互印证这种对应关系，这种对应被称为虚时演化，意味着配分函数实际上对应一种虚的时间的演化。前两周听北大春季学校貌似讲啥玩意来着，两年前他们有个工作进一步应用，忘了。全量子动力学的理论差不多也就是这样的。再升级微分几何笔者也听不懂了。

这样的例子在数学上也有异曲同工的案例

正切函数的欧拉公式定义是$\sin x=\frac{e^{-ix}-e^{ix}}{2i}$

将其代入虚x，得到双曲正切函数$\sin(ix)=\frac{e^{x}-e^{-x}}{2i}=\frac{\sinh(x)}{2i}$

作业七

1. 证明：
   (1) 传播子$U(x',t';x,t)$可以写为

$$\sum_a \langle x'|a\rangle\langle a|x\rangle e^{-\frac{iE_a(t'-t)}{\hbar}}$$

其中$A|a\rangle = a|a\rangle$，$[A,H]=0$。
(2)$U(x',t',x,t)$满足薛定谔（Schrödinger）方程。（注意：x，t固定，U是x'，t'的函数）
(3)$\lim_{t'\to t} U(x',t';x,t) = \delta(x'-x)$（可视为初始条件）

第一问没啥好说的，拿原始的传播子定义插入单位算符就可以了。

$$U(x',t';x,t) = \langle x'|e^{-\frac{iH(t'-t)}{\hbar}}|x\rangle = \sum_a \langle x'|e^{-\frac{iH(t'-t)}{\hbar}}|a\rangle\langle a|x\rangle$$

然后利用$|a\rangle$是H的本征态的性质可以变成能量，$e^{-\frac{iH(t'-t)}{\hbar}}|a\rangle = e^{-\frac{iE_a(t'-t)}{\hbar}}|a\rangle$

$$U(x',t';x,t) = \sum_a \langle x'|a\rangle\langle a|x\rangle e^{-\frac{iE_a(t'-t)}{\hbar}}$$

证毕

第二问直接大力出奇迹，对时间偏导就行，但是需要注意的是尽管传播子是末态坐标的函数，但是末坐标也是人为选的，不是含时间的， 因此实际上跟时间有关的只有末时间，那么就求导就行了，有

$$\frac{\partial}{\partial t'}U(x',t';x,t) = \langle x'|\frac{\partial}{\partial t'}e^{-\frac{iH(t'-t)}{\hbar}}|x\rangle = \langle x'|\left(-\frac{iH}{\hbar}\right)e^{-\frac{iH(t'-t)}{\hbar}}|x\rangle.$$

然后我们考虑将H作用到左边的$\langle x'|$或右边的$|x\rangle$，显然我们肯定就近作用到左边，这个的结果是：

$$\langle x'|H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + V(x')\right)\langle x'|.$$

那么这样原本的式子剩下的放回去，写成传播子的形式就是

$$\langle x'|He^{-\frac{iH(t'-t)}{\hbar}}|x\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + V(x')\right)U(x',t';x,t).$$

虚数i和$\hbar$换个位置整理一下，就是薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}U(x',t';x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + V(x')\right)U(x',t';x,t).$$

第三问似乎也没啥好说的，当$t'\to t$，这个时候传播子实际上就是单位算符，或者也可以对Δt泰勒展开，然后舍弃高阶项，但是肯定是单位算符，于是传播子

$$U(x',t';x,t) = \langle x'|e^{-\frac{iH(t'-t)}{\hbar}}|x\rangle \to \langle x'|x\rangle$$

这就是坐标本征态的归一化$\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)$

因此原题得证

$$\lim_{t'\to t} U(x',t';x,t) = \delta(x'-x).$$

但是感觉这个证明好像有点粗糙？但是也不好说，如果具体展开到坐标表象是不是有点麻烦了，还要处理积分，考虑各自积分结果啥的，最终结果估计是不变的。