

# 第 11 讲

$$U(t', t) = e^{i \frac{H}{\hbar} \cdot (t' - t)}$$

$$|t'\rangle = U(t', t) |t\rangle$$

$$\langle x' | t'\rangle = \int \langle x' | U(t', t) | x \rangle \langle x | t \rangle dx$$

定义  $U(x', t'; x, t) \equiv \langle x' | U(t', t) | x \rangle$

$$= \int_{x(t)=x}^{x(t')=x'} \mathcal{D}P(\tau) \mathcal{D}x(\tau) e^{i \frac{S}{\hbar}} \quad \text{--- (A)}$$

$$\mathcal{D}P(\tau) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{dP_{N-1} \cdots dP_0}{(2\pi\hbar)^N}, \quad \mathcal{D}x(\tau) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} dx_{N-1} \cdots dx_1$$

确定函数  $x(\tau), p(\tau)$ , 也就确定了一条路径, path.

作用量  $S$  是 path 的泛函.

$$S = \int_t^{t'} d\tau L(x(\tau), \dot{x}(\tau), p(\tau)) \quad \leftarrow \text{由 } x(\tau), p(\tau) \text{ 决定的一个实数.}$$

$$\lambda(\tau) = p(\tau) \dot{x}(\tau) - H(x(\tau), p(\tau)) \quad \leftarrow \text{由 } \tau \text{ 时刻的 } x, \dot{x}, p \text{ 决定的一个实数.}$$

• 每一条 path 决定一个振幅  $e^{i \frac{S}{\hbar}}$

• 一般而言,  $x(\tau)$  与  $p(\tau)$  独立.

$p(\tau) = m \dot{x}(\tau)$  并不总是成立  $\therefore$  否则动量不一定等于机械动量



• 当  $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

$S$  中依赖于  $p(\tau)$  的部分是

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

$$U(x', t'; x, t) = \int \mathcal{D}(x) \int \frac{\pi dp(\tau)}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} d\tau \left[ \frac{-(p-m\dot{x})^2}{2m} + \frac{m\dot{x}^2}{2} - V \right]}$$

完成对  $p(\tau)$  的积分.

$$U(x', t'; x, t) = \int \mathcal{D}(x) \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \Delta\tau} \right)^{\frac{N}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} d\tau \left[ \frac{m\dot{x}(\tau)^2}{2} - V(x(\tau)) \right]}$$

这里利用了  $\int_{-\infty}^{\infty} dP e^{-\frac{P^2}{2(\frac{m\hbar}{i\Delta\tau})}} = \sqrt{2\pi} \left( \frac{m\hbar}{i\Delta\tau} \right)^{\frac{1}{2}}$

此时  $S = \int_t^{t'} d\tau \left[ \frac{m\dot{x}(\tau)^2}{2} - V(x(\tau)) \right]$

$$U(x', t'; x, t) = \int_{x(t)=x}^{x(t')=x'} \mathcal{D}(x) e^{i\frac{S}{\hbar}} \longrightarrow \textcircled{B}$$

其中  $\int_x^{x'} \mathcal{D}(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{N}{2}} \int dx_{N-1} \dots dx_1$

• 公式(A)与(B)是常见两种形式, 但(A)更基本, 体现了  $x$  与  $p$  是独立的正则变量. 特别是  $i p \dot{x}$  可解释为 Berry phase 以后讲.



§ 等时对易关系的路径积分体现

考虑一个物理量  $F(x, p)$ . 我们来计算它的“路径平均”

$$\langle F(x(t), p(t)) \rangle = \int \mathcal{D}x(\tau) \mathcal{D}p(\tau) F(x(t), p(t)) e^{\frac{i}{\hbar} S(x(t), p(t))}$$

• 每条路径给出一个  $F$  值, 它有一个振幅  $e^{\frac{i}{\hbar} S}$

$\langle F \rangle$  是对所有路径的求和“加权”

我们可以把  $F(x(t), p(t))$  理解成  $F(x_1, \dots, x_{N-1}, p_0, p_1, \dots, p_{N-1})$   
 写成  $F(x(k), p(k))$

同时在积分离散化.

$$\int \mathcal{D}x \mathcal{D}p \rightarrow \prod_k \int dx(k) dp(k)$$

引入变换:

$$\begin{aligned} x(k) &= \tilde{x}(k) + y(k) \\ p(k) &= \tilde{p}(k) + \zeta(k) \end{aligned}$$

重新写  $\langle F \rangle$

$$\langle F(x(k), p(k)) \rangle = \int \prod_k d\tilde{x}(k) d\tilde{p}(k) F(\tilde{x}(k) + y(k), \tilde{p}(k) + \zeta(k)) \times e^{\frac{i}{\hbar} S[\tilde{x}(k) + y(k), \tilde{p}(k) + \zeta(k)]}$$

$$= \int \prod_k d\tilde{x}(k) d\tilde{p}(k) \left( F + \sum_k y(k) \frac{\partial F}{\partial x(k)} + \sum_k \zeta(k) \frac{\partial F}{\partial p(k)} \right) \times \left( 1 + \frac{i}{\hbar} \sum_k y(k) \frac{\partial S}{\partial x(k)} + \frac{i}{\hbar} \sum_k \zeta(k) \frac{\partial S}{\partial p(k)} \right) e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

$$= \langle F(x(k), p(k)) \rangle + \sum_k y(k) \left\langle \frac{\partial F}{\partial x(k)} + \frac{i}{\hbar} F \frac{\partial S}{\partial x(k)} \right\rangle + \sum_k \zeta(k) \left\langle \frac{\partial F}{\partial p(k)} + \frac{i}{\hbar} F \frac{\partial S}{\partial p(k)} \right\rangle \quad (3)$$

以上展开到  $y(k)$  与  $\zeta(k)$  的一阶.



方程对任意变化  $y(k)$  与  $z(k)$  成立, 因此

$$\left\langle \frac{\partial F}{\partial x(k)} \right\rangle = -\frac{i}{\hbar} \left\langle F \frac{\partial S}{\partial x(k)} \right\rangle$$

$$\left\langle \frac{\partial F}{\partial p(k)} \right\rangle = -\frac{i}{\hbar} \left\langle F \frac{\partial S}{\partial p(k)} \right\rangle$$

现在令  $F(x(k), p(k)) = p(k_0)$ , 那么针对  $k_0$  时刻.

$$\langle 1 \rangle = -\frac{i}{\hbar} \left\langle p(k_0) \frac{\partial S}{\partial p(k_0)} \right\rangle$$

$$\text{又由于 } S = \sum_k p(k)(x(k+1) - x(k)) - \Delta t \sum_k H(p(k), x(k))$$

$$\therefore \frac{\partial S}{\partial p(k_0)} = x(k_0+1) - x(k_0) - \Delta t \frac{\partial H(p(k_0), x(k_0))}{\partial p(k_0)}$$

$$\text{当 } \Delta t \rightarrow 0, \quad \frac{\partial S}{\partial p(k_0)} = x(k_0+1) - x(k_0)$$

$$\therefore \boxed{\langle i \hbar \rangle = \langle p(k_0) [x(k_0+1) - x(k_0)] \rangle} \quad \text{--- (c)}$$

上式是  $S$  中  $p$  项的结果. 与具体的 Hamiltonian 无关!

实际上反映的是  $\hat{x}$  与  $\hat{p}$  的对易关系.

为看清这一点, 我作以下计算.



我们来计算

$$\langle x' | U(t', t_{k_0}) \hat{x} \hat{p} \cdot U(t_{k_0}, t) | x \rangle$$

表示:  $t$  时  $|x\rangle$  态在  $t_{k_0}$  时刻被  $\hat{x} \hat{p}$  作用, 然后接着传播到  $t'$  时刻, 处于  $|x'\rangle$  的概率幅.

仍然将  $t' - t$  分成  $N$  份,  $t_{k_0}$  处于第  $k_0$  份.

$$\int \mathcal{D}x \langle x_N | (1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H) | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | (1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H) | x_{N-2} \rangle \cdots \langle x_{k_0+1} | \hat{x} \hat{p} (1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H) | x_{k_0} \rangle \\ \times \langle x_{k_0} | (1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H) | x_{k_0-1} \rangle \cdots \langle x_1 | (1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H) | x_0 \rangle$$

$$\left[ \text{其中 } \langle x_{k_0+1} | \hat{x} \hat{p} | P_{k_0} \rangle \langle P_{k_0} | [1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H(\hat{x}, \hat{p})] | x_{k_0} \rangle \right. \\ \left. = \langle x_{k_0+1} | x_{k_0+1} P_{k_0} | P_{k_0} \rangle \langle P_{k_0} | (1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H(x_{k_0}, P_{k_0}) | x_{k_0} \rangle \right]$$

$$= \int \mathcal{D}x(\tau) \mathcal{D}P(\tau) e^{\frac{iS}{\hbar}} x_{k_0+1} P_{k_0} = \langle x_{k_0+1} P_{k_0} \rangle$$

再计算  $\langle x' | U(t', t_{k_0}) \hat{p} \hat{x} U(t_{k_0}, t) | x \rangle$ , 同样分  $N$  份.

$$= \langle x_N | \cdots | x_{k_0+1} \rangle \langle x_{k_0+1} | \hat{p} \hat{x} (1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H) | x_{k_0} \rangle \cdots \langle x_1 | (1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H) | x_0 \rangle$$

$$= \int \mathcal{D}x(\tau) \mathcal{D}P(\tau) e^{\frac{iS}{\hbar}} P_{k_0} x_{k_0} = \langle x_{k_0} P_{k_0} \rangle$$

$$\text{其中 } \langle x_{k_0+1} | \hat{p} | P_{k_0} \rangle \langle P_{k_0} | \hat{x} (1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H) | x_{k_0} \rangle$$

→ 这  $P$  分处理留作业.

我们发现

$$\langle x' | U(t', t_{k_0}) (\hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x}) U(t_{k_0}, t) | x \rangle = \langle P(k_0) (x_{k_0+1} - x_{k_0}) \rangle \\ = \langle \{h\} \rangle$$

这跟书上页 (c) 式:  $t_{k_0}$  时刻算符对易式, 等价于计算  $P(k_0)(x_{k_0+1} - x_{k_0})$  的路径平均, 都等于  $\langle \{h\} \rangle$ .

(5)



传播子是 Green's function.

静电力中电势  $\phi(\vec{x})$  满足

$$\nabla^2 \phi(\vec{x}) = -4\pi \rho(\vec{x}) \quad (1)$$

$\rho(\vec{x})$  是电荷分布密度, 决定  $\vec{x}$  处电势.

$$\rho(\vec{x}) = \int \delta^3(\vec{x}' - \vec{x}) \rho(\vec{x}') d^3x' \quad (2)$$

再利用

$$\nabla^2 \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} = -4\pi \delta^3(\vec{x} - \vec{x}'), \quad -4\pi \rho(\vec{x}) = \int \nabla^2 \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho(\vec{x}') d^3x'$$

定义:  $G(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$  是 Green's function, 因此

$$\phi(\vec{x}) = \int \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho(\vec{x}') d^3x' = \int G(\vec{x}, \vec{x}') \rho(\vec{x}') d^3x'$$

(以上为自由空间的情形)

$\vec{x}$  处电势  $\phi(\vec{x})$  由  $\vec{x}'$  处电荷密度  $\rho(\vec{x}')$  乘以  $\vec{x}'$  处电荷在  $\vec{x}$  处产生的电势  $G(\vec{x}, \vec{x}')$  叠加得到.

$$\psi(x', t) = \int U(x', t'; x, t) \psi(x, t) dx$$

$U(x', t'; x, t)$  是  $t$  时刻, 局域在  $x$  处的波函数, 在  $t'$  时刻

传播到  $x'$  处的几率幅.

对于  $t$  时刻 分布在一定空间范围的波函数  $\psi(x, t)$ , 其在

$t'$  时刻传播到  $x'$ , 得到的波函数  $\psi(x', t')$  就等于

$U(x', t'; x, t)$  乘以  $\psi(x, t)$ , 再对全空间  $x$  积分.

(6)