

根据 Schrödinger 方程 我们推导出

$$|\psi(t')\rangle = U(t', t) |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iH \cdot (t' - t)}{\hbar}} |\psi(t)\rangle$$

设初始时刻 $t=0$.

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iH \cdot t}{\hbar}} |\psi(0)\rangle$$

传播子 $U(t', t) \rightarrow U(t, 0)$

$$U(x', t; x, 0) = \langle x' | e^{-\frac{iH \cdot t}{\hbar}} | x \rangle$$

我们来作个游戏, 记 $it = \tau$, 或 $t = -i\tau$. 当 τ 是个纯虚数. 那么

$$\begin{aligned} \langle x' | e^{-\frac{iH \cdot t'}{\hbar}} | x \rangle &= \langle x' | e^{-\frac{H\tau'}{\hbar}} | x \rangle \\ &= \int_{x(0)=x}^{x(\tau)=x'} \mathcal{D}x(\tau) \mathcal{D}p(\tau) e^{-\frac{\mathcal{S}'(x(\tau), p(\tau))}{\hbar}} \quad (1) \end{aligned}$$

$-\frac{\mathcal{S}'}{\hbar}$ 的推导. (A 表达式)

$$\frac{i\mathcal{S}'}{\hbar} = \frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} dt'' [p(t'') \dot{x}(t'') - H(x(t''), p(t''))]$$

$$\begin{aligned} i \int_0^{t'} dt'' &\rightarrow \int_0^{\tau} d\tau, & \dot{x}(t'') &= \frac{x(t'' + \Delta t'') - x(t'')}{\Delta t''} \\ & & \rightarrow \frac{x(\tau + \Delta\tau) - x(\tau)}{-i\Delta\tau} &= i\dot{x}(\tau) \end{aligned}$$

①

因此:

$$\frac{iS'}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\tau'} dt \left[-i p(t) \dot{x}(t) - H(x(t), p(t)) \right]$$

$$= -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\tau'} dt \left[H(x(t), p(t)) - i p(t) \dot{x}(t) \right]$$

$$\text{即 } S'(\{x(t)\}, \{p(t)\}) = \int_0^{\tau'} dt \left[H(x(t), p(t)) - i p(t) \dot{x}(t) \right]$$

B 表达式:

$$\langle x' | e^{-\frac{iH \cdot t'}{\hbar}} | x \rangle = \langle x' | e^{-\frac{H \tau'}{\hbar}} | x \rangle$$

$$= \int_{x(0)=x}^{x(\tau')=x'} \mathcal{D}x(t) e^{-\frac{1}{\hbar} S'(\{x(t)\})} \quad (2)$$

$$\frac{iS'}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\tau'} dt \left[\frac{-m\dot{x}(t)^2}{2} - V(x(t)) \right] = -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\tau'} dt \left[\frac{m\dot{x}(t)^2}{2} + V(x(t)) \right]$$

这里利用了: $\dot{x}(t'') \rightarrow i\dot{x}(t)$

$$\dot{x}(t'')^2 \rightarrow -\dot{x}(t)^2$$

$$\bullet S'(\{x(t)\}) = \int_0^{\tau'} dt \left[\frac{m\dot{x}(t)^2}{2} + V(x(t)) \right]$$

被积函数是 $H(x, m\dot{x})$

以上 $\langle x' | e^{-\frac{H\tau'}{\hbar}} | x \rangle$ 在 $x' = x$ 时, 对 x 积分.

$$Z = \int dx \langle x | e^{-\frac{H\tau'}{\hbar}} | x \rangle = \text{Tr} e^{-\beta H} \quad (c)$$

Z 是平衡系综的配分函数, 倒温度 $\beta = \frac{\tau'}{\hbar}$!

• 不是说 τ 是个纯虚数吗?

是的, 如果 τ 是纯虚数, 我们还是在计算系统的动力学(时间)演化.

但是, 如果我们令 τ 是实数, 或 τ 是纯虚数, 路径积分公式可变成 $T = \frac{1}{\beta} = \frac{\hbar}{\tau}$ 的平衡系综配分函数.

也可以从 (c) 出发, 导出它的路径积分公式 (1) 与 (e).

再令 $\tau = i\tau'$, 得到 $\langle x' | e^{-\frac{H\tau'}{\hbar}} | x \rangle$ 的路径积分形式.

这一观察揭示了路径积分应用到统计物理的可能.

附: $\langle x | e^{-\frac{iH\tau'}{\hbar}} | x \rangle$ 与 $\langle x | e^{-\frac{H\tau'}{\hbar}} | x \rangle$ 的关系类似于

$\cos(x)$ 与 $\cosh(x)$ 的关系.

$$\cos(x) = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \quad \xrightarrow{\text{令 } ix = \tau} \quad \frac{e^{\tau} + e^{-\tau}}{2} = \text{ch}(\tau)$$

$$\boxed{\cos(x) = \text{ch}(ix)}$$

(3)

在(1)式中, S 含有对 $i p(t) \dot{x}(t)$ 的积分, 这一点很重要. 因为它可能使 $e^{-S/\hbar}$ 成为复数. 这个“相位”就是 Berry phase. 后面再谈. 与此不同, (2) 式中没有这个相位. $e^{-S/\hbar}$ 是大于零的实数, 是路径 $x(t)$ 的统计权重 (weight)

将 $x(t)$ 理解为 $d+1$ 维空间的一个“位型”, $e^{-S/\hbar}$ 是这个位型的权重. 这样 d 维量子平衡系统在等价于 $d+1$ 维经典统计平衡系统. (1) 式如果相位为 0 也一样)

$$\frac{S(x(t))}{\hbar} \text{ 等价于 } \frac{E(x(t))}{T}$$

例: 一个处于温度 $T = \frac{1}{\beta}$ 环境中的谐振子. $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$

其中 $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$, 在路径积分表述下, ($\beta = \frac{\tau}{\hbar}$)

$$Z = \int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle = \int dx \int_{x(0)=x}^{x(\beta)=x} \mathcal{D}x(t) e^{-\frac{S}{\hbar}}$$

$$\frac{S}{\hbar} = \int_0^\beta d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{x}(\tau)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x(\tau)^2 \right] \xrightarrow{\text{记为}} \frac{H_C}{T}$$

将 $x(\tau)$ 理解为从 0 到 β 长的一根弦上, τ 处质点偏离平衡位置的位移. $\dot{x}(\tau) = \frac{x(\tau+\Delta\tau) - x(\tau)}{\Delta\tau}$ 为相邻两点的位移差.

$T' \frac{m}{2}$ 是杨氏模量, $\frac{1}{2} m \omega^2 x(\tau)^2$ 是 τ 处位移在外场中势能.

质点的动能已经被积分掉 (或为常数). $+\frac{1}{2} m \dot{x}^2$ 的

所以 Z 也是 $\frac{H_C}{T} = \frac{m}{2} \left(\frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \varphi(x)$ 经典系统

的配分函数. 假设此系统杨氏模量 $Y=1$, 则 $T' = \frac{2}{m}$.
外场强度为 ω^2 .

• 哪条路径对 $\langle x' | e^{-\beta H} | x \rangle$ 贡献最大? (τ' 为实数)

求解 $\delta S' = 0$.

$$\delta \int_0^\beta \left[\frac{m \dot{x}(\tau)^2}{2} + V(x(\tau)) \right] d\tau$$

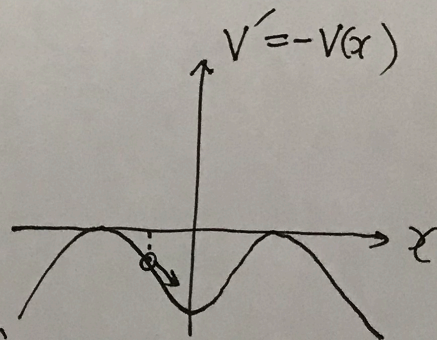
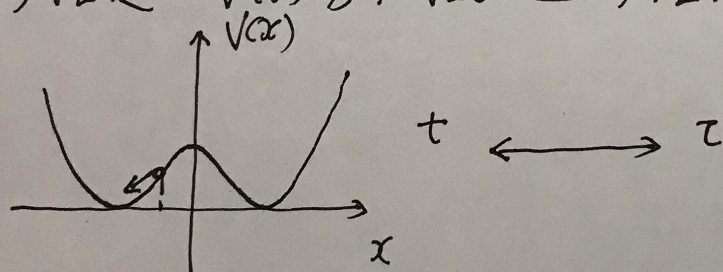
$$= \int_0^\beta \left\{ \delta x \left[-\frac{d}{d\tau} \frac{\partial(m\dot{x}^2)}{2\partial\dot{x}} \right] + \delta x \frac{\partial V}{\partial x} \right\} d\tau$$

$$\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{d}{d\tau} \frac{\partial(m\dot{x}^2)}{2\partial\dot{x}} = 0$$

$$\text{即 } m\ddot{x} = \frac{\partial V}{\partial x} = -\frac{\partial[-V(x)]}{\partial x}$$

(也可直接利用 $L = \frac{m\dot{x}^2}{2} + V$, $\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{d\tau} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0$ 得到)

此方程是 $-V(x)$ 势下粒子的运动方程!



同样的 $H(\hat{x}, \hat{p})$ 系统的动力学(时间演化)有一条最重要的路径, 由 $m\ddot{x} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x}$ 决定

而系统的平衡系序行为 ($\tau = \frac{1}{\beta}$) 由出现几率最大的“路径”, 满足 $m\ddot{x} = \frac{\partial V(x)}{\partial x} = -\frac{\partial[-V(x)]}{\partial x}$, 主导.

其解称为瞬子 (instanton), 也可视为 $H = \frac{p^2}{2m} - V$ 的量子系统对应(动力学)经典路径.