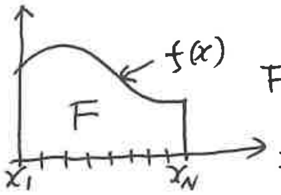
作用量 $S=\int dt\, L(x(t),\dot{x}(t),p(t))$ 称为 L 的泛函 (functional)

· 函数：实数 x 与另一个实数 f(x) 的映射

$f: x\in R \longrightarrow f(x)\in R$ （多元函数：$f: x_1,x_2,\cdots,x_N\in R\to f\in R$）

· functional：一个函数到一个实数的映射

$$F:\ \underset{\downarrow\atop L}{f(x)\in H} \longrightarrow \underset{\downarrow\atop S}{F\in R}$$

例 

$F=\int_{x_1}^{x_N} f(x)\,dx$

我们也可以把泛函理解为"多元函数"：$F(f(x_1), f(x_2),\cdots,f(x_N))$

例：$F=\int_{x_1}^{x_N} f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\cdot\Delta x$

那么 $\delta F=\sum_i \frac{\partial F}{\partial f(x_i)}\Delta f(x_i)$ （$\because \delta F = F(f(x)+\delta f(x)) - F(f(x))$）

$\delta S = \sum_{t_i}\frac{\partial S}{\partial L(t_i)}\Delta L(t_i)$ 由于 $S=\sum_{t_i} L(t_i)=\sum_{t_i} L(x(t_i),\dot{x}(t_i),p(t_i))$

$$\therefore \delta S = \sum_{t_i}\left[\frac{\partial L}{\partial x(t_i)}\Delta x(t_i)+\frac{\partial L}{\partial \dot{x}(t_i)}\Delta \dot{x}(t_i)+\frac{\partial L}{\partial p(t_i)}\Delta p(t_i)\right]$$

$$=\int dt\left[\delta x(t)\frac{\partial L}{\partial x(t)}+\delta\dot{x}(t)\frac{\partial L}{\partial \dot{x}(t)}+\delta p(t)\frac{\partial L}{\partial p(t)}\right]$$

$$\underset{\text{分部积分}}{=}\int dt\left\{\delta x(t)\left[\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right]+\delta p(t)\frac{\partial L}{\partial p}\right\}$$

利用 $\delta\dot{x}(t)=\frac{d}{dt}\delta x(t)$，且 δx 在 t_1, t_N 不变

对于任意变化 $\delta x, \delta p$，都有 $\delta S=0$，才能符合 S 为极值 ← 最小作用量原理

$\Rightarrow$ ① $\frac{\partial L}{\partial x}=\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ 此为欧拉-拉格朗日方程

② $\frac{\partial L}{\partial p}=0$

①与②可以写为 $\frac{dp}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial x}$，$\because L=p\dot{x}-H(x,p)$

与 $\frac{dx}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p}$ 即哈密顿方程.

例：谐振子：$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，$L=p\dot{x}-\frac{p^2}{2m}-\frac{1}{2}m\omega^2x^2$

$\frac{\partial L}{\partial p}=0\Rightarrow \dot{x}=\frac{p}{m}$；$\frac{\partial L}{\partial x}=\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\Rightarrow -m\omega^2x=\frac{dp}{dt}=m\ddot{x}$ 牛顿

回到量子力学公式(A)，路径的相因子 $e^{\frac{i}{\hbar}S}$（S是实数）.

- S就是经典力学作用量！

- $e^{\frac{i}{\hbar}S}$是一条路径的"振幅"：从 x,t 到 x',t' 的跃迁.

由于$\hbar$很小，对于$\delta S \neq 0$的路径，很小的S变化，导致$e^{\frac{i}{\hbar}S}$的剧烈变化，求和之后为零.

但是在 $\delta S=0$ 的路径附近，$e^{\frac{i}{\hbar}S}$不剧烈变化，对积分贡献较大. $\longrightarrow$ 经典力学给出的路径是重要的路径.

(x',t')与(x,t)之间的经典路径是怎样的？

谐振子：$x(t) = A\cos(\omega t+\delta)$

A与δ由 $x(t)=x$，$x(t')=x'$ 定出.

重力场中小球：设 $t=0$ 时在 $x_0=0$处；$t=t'$ 时在$x_{t'}=h$处.

由 $\ddot{x}=-g \Rightarrow x(t)=h_0+v_0t+\frac{1}{2}gt^2$

由 $x(0)=0 \Rightarrow h_0=0$.

由 $x(t')=h \Rightarrow h=v_0t'+\frac{1}{2}gt'^2 \Rightarrow v_0=\dfrac{h-\frac{1}{2}gt'^2}{t'}$

第11讲

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

$$|t'\rangle = \hat{U}(t',t)\ |t\rangle$$

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

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

$$= \int_{x(t)=x}^{x(t')=x'} \mathcal{D}p(\tau)\,\mathcal{D}x(\tau)\ e^{\frac{iS}{\hbar}} \qquad \text{——} (A)$$

$$\mathcal{D}p(\tau) \equiv \lim_{N\to\infty} \frac{dp_{N-1}\cdots dp_0}{(2\pi\hbar)^N},\quad \mathcal{D}x(\tau) \equiv \lim_{N\to\infty} dx_{N-1}\cdots dx_1$$

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.

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

$$L(\tau) = p(\tau)\dot{x}(\tau) - H(x(\tau), p(\tau))$$ ← 由 τ 时刻 $x, \dot{x}, p$ 决定的一个实数.

- 每一条 path 决定一个振幅 $e^{\frac{iS}{\hbar}}$

- 一般而言，$x(\tau)$ 与 $p(\tau)$ 独立.

  $p(\tau) = m\dot{x}(\tau)$ 并不总是成立 ∵ 正则动量不一定等于机械动量 当 $H = \frac{(p-\frac{qA}{c})^2}{2m} + V$

  $p = m\dot{x} + \frac{qA}{c}$

• 当 $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

S 中依赖于 $p(\tau)$ 的部分是

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

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

完成对 $p(\tau)$ 的积分. $\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} = \sqrt{\pi}\right)$

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

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

此时 $S = \int_t^{t'} d\tau \left[\frac{m\dot{x}(\tau)^2}{2} - V(x(\tau)) \right] \longrightarrow$ 另外形式的 L氏量.

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

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

• 公式(A)与(B)是常见的两种形式，但(A)更基本，体现了 x 与 p 是独立的不同变量. 特别是 $ip\dot{x}$ 可解释为 Berry phase 以后讲.

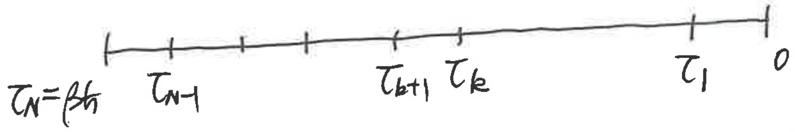
§路径积分与统计物理

一个量子系统处于温度为T的环境中，达到热平衡，可由热平衡系综描述：$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$，$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}$ 可写成

$$Z = \int dq \langle q| e^{-\beta H} |q\rangle,$$

为简单起见，这里考虑一个单粒子系统，q 为其坐标，比如对平衡位置的偏离。

$\langle q| e^{-\beta H} |q\rangle$ 与 $\langle x| e^{-\frac{iHt'}{\hbar}} |x\rangle$ 形式相同，在初始 $t=0$ 的情况下 $\beta\hbar$ 与 it' 相对应。（将 $\beta = \frac{\beta\hbar}{\hbar}$），将 $\beta\hbar$ 分成 N 分。



$$\langle q| e^{-\beta H} |q\rangle = \int dq_{N-1} \cdots dq_k \cdots dq_1 \prod_{k=0}^{N-1} \langle q_{k+1}| e^{-\frac{H\Delta\tau}{\hbar}} |q_k\rangle$$

其中 $\langle q_{k+1}| e^{-\frac{H\Delta\tau}{\hbar}} |q_k\rangle = \int dp_k \langle q_{k+1}|p_k\rangle\langle p_k| e^{-\frac{H\Delta\tau}{\hbar}} |q_k\rangle$

$$= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} e^{\left[i p_k \frac{q_{k+1}-q_k}{\Delta\tau} - H(p_k, q_k)\right]\Delta\tau}$$

$$\Rightarrow \langle q| e^{-\beta H} |q\rangle = \int \mathcal{D}q\mathcal{D}p\, e^{-\frac{\tilde{S}}{\hbar}} \quad \text{——} ①$$

其中 $\tilde{S} = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[H(p(\tau), q(\tau)) - i p(\tau) \frac{dq(\tau)}{d\tau} \right]$

注意到 $\langle q| e^{-\frac{iHt'}{\hbar}} |q\rangle = \int \mathcal{D}q\mathcal{D}p\, e^{\frac{iS}{\hbar}}$ ——— ②

$$S = \int_0^{t'} dt \left[p(t) \frac{dq(t)}{dt} - H(p(t), q(t)) \right]$$

将 it' 视作 $\beta\hbar$，那么 $i\,dt$ 就是 $d\tau$，我们可由②直接写出①式。

$$\tilde{S} = -iS \quad ③$$

即：②中 $iS = -i\int_0^{t'} dt \left[p(t)\frac{dq(t)}{i\,dt}\cdot i - H(p(t), q(t))\right]$

$$= +\int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[H(p(\tau), q(\tau)) - i\, p(\tau)\frac{dq(\tau)}{d\tau}\right]$$

$$= +\tilde{S}$$

对于 p 已被积掉的情况（前面讲到的公式(B)）同样可以

利用这个对应导出

$$\langle q| e^{-\beta H} |q\rangle = \int \mathcal{D}q\, e^{-\frac{\tilde{S}}{\hbar}}$$

其中 $-\tilde{S} = i\int_0^{t'} dt \left[\frac{m\dot{q}(t)^2}{2} - V(q(t))\right]$

$$= -\int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[V(q(\tau)) - \frac{m}{2}\left(\frac{i\,dq}{i\,dt}\right)^2\right]$$

$$= -\int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{m}{2}\left(\frac{dq}{d\tau}\right)^2 + V(q(\tau))\right]$$

以上推导利用了 $\beta\hbar$ 与 it' 的对应，通常 $e^{-\beta H}$ 被称为虚时演化，

也被称为 Wick rotation：

如果我们知道了函数 $U(q, t'; q, 0)$，将 t' 用 $-i\beta\hbar$ 代替，

就知道了 $U(q, -i\beta\hbar; q, 0)$，也就得到了 Z，即系统的统计性质！

- 路径积分将统计物理与量子力学（量子场论）联系起来。