

Feynman 传播子和路径积分

许如清*

2018 年 1 月 8 日

时间演化算子和传播子

在 Schrodinger 表象下, 非相对论性量子力学的基本规律由态矢 $|\psi\rangle$ 随时间的演化来描述, 演化的规则由如下的 Schrodinger 方程描述:

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}(t) = 0 \text{ (implicit)} \quad (2)$$

式中 H 为体系的 Hamiltonian 算符. 若零时刻的态 $|\psi(0)\rangle$ 已知, 则之后任意时刻 t 的态 $|\psi(t)\rangle$ 可由时间演化算符 (*time development operator*) 作用于初态得到:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, 0)|\psi(0)\rangle. \quad (3)$$

比较式 3 和 1 我们可以得到时间演化算符的形式:

$$\hat{U}'(t_f, t_i) = \exp(-i\hat{H}(t_f - t_i)). \quad (4)$$

式 4 给出了对于任意 t 顺序均成立的时间演化算符表示. 但是考虑到真实世界中时间不可能倒退, 我们经常要求 $t_f < t_i$ 的时间演化算子为零 (当然, 考虑到 3 的形式, 时间反演依然可以用 $U^\dagger(t_f, t_i)$):

$$\hat{U}(t_f, t_i) = \theta(t) \hat{U}'(t_f, t_i) \quad (5) \\ = \begin{cases} \exp i\hat{H}(t_f - t_i) & t_f \geq t_i \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}.$$

选取任意表象 (正交归一完备基组) Schrodinger 表象下的时间演化算符在改组表象之下的投影矩阵元 $\langle n|U(t, 0)|n'\rangle$ 被定义为传播子 (*propagator*). 传播子描述的是在一定的 Hamiltonian 描述下系统在各个态之间的跃迁几率. 若所取的表象是非严格归一化的坐标

表象: $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$, $|x\rangle\langle x| = \hat{1}$, 则该种传播子被称为 Feynman 传播子:¹

$$D_F(x, t; x', t') := \langle x|\hat{U}(t - t')|x'\rangle. \quad (6)$$

注意: 至此所有的推导均是在 Schrodinger 表象下进行的. 如果我们在其他表象之下把式 6 的一般形式写出来, 则作为表象的基矢 $|x\rangle$ 应是时间依赖的:

$$D_F(x, t; x', t') := \langle x, t|\hat{U}_{H,I,\text{etc.}}(t - t')|x', t'\rangle. \quad (7)$$

这里我们先转而讨论 Heisenberg 表象之下情形. 考虑到在 Heisenberg 表象之下态矢不随时间演化 $\partial_t|\psi\rangle = 0$, 取而代之的是所有观察算子 $\hat{O}(t)$ 的行为变得依赖于时间, 进而它们的本征态 $|\tau\rangle$ 也随时间演化:

$$\hat{O}_H(t) = \hat{U}^{-1}\hat{O}_S\hat{U} \quad (8)$$

$$|\tau, t\rangle_H = \hat{U}^{-1}|\tau\rangle_S. \quad (9)$$

如果我们在 Heisenberg 表象下也定义一个“时间演化算符”, 我们轻易就会发现它是常算符 $\hat{1}$ ², 所以我们可以验证本征矢的如下演化关系:

$$\langle x, t|_H \hat{U}_H(t, 0)|x', 0\rangle_H = \langle x|U(t)\hat{U}_H U^\dagger(t)|x'\rangle \quad (10) \\ = \langle x|\exp(-i\hat{H}t)\underbrace{\hat{U}_H(t, 0)}_{\hat{1}}\exp(i\hat{H}t)|x'\rangle.$$

将这个传播子仿照上面式 5 进行正时改造, 可以得到: $\hat{U}_H(t, 0) = \theta(t)$.

现转而考虑 Heisenberg 表象下的时间演化算子, 由 $|t\rangle = \hat{U}(t)|t\rangle_H = \hat{U}(t)|0\rangle$ 代入 Schrodinger 方程 1

¹至此为止为第一周上课内容.

²从此开始我们使用简记 $U(t) := U(t, 0)$

*rbh1998@mail.ustc.edu.cn Dept. of Mod. Phys., USTC

可得:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) = \hat{H} \hat{U}(t) \quad (11)$$

$$U(t)|_{t=0} = \hat{1}. \quad (12)$$

这样, Feynman 传播子在 Heisenberg 表象下就可以表示为:

$$D_F(x, t; x', t') = \langle x, t | x', t' \rangle, \quad (13)$$

i.e. $|x', t'\rangle$ 在终了时刻 t 的本征态 $|x, t\rangle$ 上的投影.

传播子的时序展开与路径积分

求解 Schrodinger 方程可以利用一个固定的标架展开, 也可以化为积分来处理. 现考虑如下的函数:

$$\langle x, t | T(\hat{x}(t_1), \hat{x}(t_2), \dots, \hat{x}(t_n)) | x', t' \rangle, \quad (14)$$

其中 $T(\dots)$ 表示括号中个观察算子的编时算子, 它表示将括号内的各个观察算子按时序编排³. 由于对各个时刻的观察算子, 有本征态完备性关系 $\int dx_j |x_j, t_j\rangle \langle x_j, t_j| = \hat{1}$, 将其插入 13 中可得:

$$\begin{aligned} D_F &= \langle x, t | \hat{1} \dots \hat{1} | x', t' \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 dx_3 \dots dx_n \prod_{j=1}^N \langle x_j, t_j | x_{j-1}, t_{j-1} \rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

又由 Schrodinger 表象之下有

$$\langle x_j, t_j | x_{j-1}, t_{j-1} \rangle = \langle x_j | \exp i\hat{H}(t_j - t_{j-1}) | x_{j-1} \rangle, \quad (16)$$

我们可以对这数个矩阵元进行计算. 但这里有个困难: 在 $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{x})$ 中算子 \hat{H} 和 \hat{V} 不对易. 为了克服这个困难, 我们需要将上面 t_1, t_2, \dots, t_n 的间隔取得尽可能小, 使得 $\exp(\dots)$ 展开后的 CBH 对易子可以忽略. 这样就有:

$$\begin{aligned} \langle x_j, t_j | x_{j-1}, t_{j-1} \rangle &= \langle x_j | \hat{1} - i\varepsilon (\hat{p}^2/2m + V(\hat{x})) | x_{j-1} \rangle + O(\varepsilon^2) \\ &= (1 - i\varepsilon V(x_j)) \underbrace{\langle x_j | x_{j-1} \rangle}_{\delta(x_j - x_{j-1})} - i\varepsilon \langle x_j | \frac{\hat{p}^2}{2m} | x_{j-1} \rangle + O(\varepsilon^2) \\ &= (1 - i\varepsilon V(x_j)) \langle x_j | x_{j-1} \rangle \\ &\quad - \frac{i\varepsilon}{2m} \left(-i \frac{\partial}{\partial x_j} \right)^2 \langle x_j | x_{j-1} \rangle + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (17)$$

³注意: 我们现在还在 Heisenberg 图像之下, 不同时刻的观察算子互相不对易.

现在我们要对上式作积分, 考虑到 Fourier 定理:

$$\delta(x_j - x_{j-1}) = \int \frac{dp}{2\pi} \exp ip(x_j - x_{j-1}), \quad (18)$$

得到:

$$\begin{aligned} \langle x_j, t_j | x_{j-1}, t_{j-1} \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi} \exp \left\{ \underbrace{-i\varepsilon \left[\frac{p^2}{2m} + V(x_j) \right]}_{\text{OSC}} + ip(x_j - x_{j-1}) \right\} \\ &\quad + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (19)$$

上式中被标为 OSC 的项在积分 p 较大的区域会剧烈振荡导致积分发散, 为了解决这个发散问题我们需要为 m 引入一个虚数因子. 总之, 我们先认定它可以积分, 有:

$$\begin{aligned} \langle x_j, t_j | x_{j-1}, t_{j-1} \rangle &= \left(\frac{m}{2\pi i\varepsilon} \right)^2 \exp i\varepsilon \overbrace{\left[\frac{1}{2} m \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_j) \right]}^{L_j} \\ &\quad + O(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (20)$$

于是总传播子可以化为:

$$\begin{aligned} D_F &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=2}^n dx_i \prod_{j=1}^N \sqrt{\frac{m}{2\pi i\varepsilon}} \exp i\varepsilon L_j + O(\varepsilon^2) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=2}^n dx_i \sqrt{\frac{m}{2\pi i\varepsilon}} \exp i\varepsilon \sum_{j=1}^N L_j + O(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (21)$$

当时间的区间细分度 $N \rightarrow \infty$ 时, 上式收敛于精确的传播子 D_F . 而右边指数内的求和化为积分:

$$i\varepsilon \sum_{j=1}^N L_j \rightarrow i \int_0^t dt L, \quad (22)$$

而前面的趋于无穷的积分测度并写为 $\mathcal{D}[x(t)]$, 表示对路径 $x(t)$ 的变分. 这样, Feynman 传播子就可以用 Feynman 路径积分的方式表示:

$$D_F = \int \mathcal{D}[x(t)] \exp iS, \quad (23)$$

其中 $S := \int_0^t dt L$ 被称为作用量, 积分是对始末点固定的所有轨迹进行的⁴.

⁴以上为第二周上课的内容

频率表象之下的传播子

现在我们在频率 (动量) 表象之下求解传播子.⁵ 首先有动量本征态的波函数:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}, \quad (24)$$

而坐标、动量本征态分别按如下方式归一化:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle &= \delta^{(3)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \\ \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle &= \delta^{(3)}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}), \end{aligned} \quad (25)$$

这样, 完备性条件就表示为⁶:

$$\int d^3p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = \hat{1}. \quad (26)$$

当然, 也可以在讲坐标空间变换到动量空间的同时将时间变换到频域:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \psi(\mathbf{p}, \omega) \exp i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \frac{d\omega}{2\pi} \exp -i\omega t \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} \psi(\mathbf{p}, \omega) \exp -ip_\mu x^\mu. \end{aligned} \quad (27)$$

即相对论量子力学常用的形式. 式 27 中, 时域波函数到频域波函数的变换式按照如下规则进行的:

$$\begin{aligned} f(\omega) &= \int \frac{dt}{\sqrt{2\pi}} f(t) \exp i\omega t \\ f(t) &= \int \frac{d\omega}{\sqrt{2\pi}} f(\omega) \exp -i\omega t. \end{aligned} \quad (28)$$

按照这个逻辑, 时间演化算子也可以变换到频域:

$$\hat{U}(\omega) := \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{U}(t) \exp i\omega t, \quad (29)$$

需要注意的是, 若使用为正时化的时间演化算子, 由于这个式子的被积因子的模恒为 1, 积分会发散, 这里之前所做的演化算子正时化就发挥了消除发散的作用. 不过要完全消除发散, 我们还需要再在 Hamiltonian 上加一个极小的 (趋于零的) 虚部 $\hat{H} \rightarrow \hat{H} - i\varepsilon$. 这样一来,

⁵这里我们继承初等量子力学常用的 \mathbf{r}, \mathbf{p} 之归一化条件, 和上课所用有所区别.

⁶这样, 6 维像空间的积分测度为 1.

积分式 29 便化为:

$$\begin{aligned} \hat{U}(\omega) &= \int_0^{\infty} dt \exp i(\omega - \hat{H} + i\varepsilon)t \\ &= \frac{1}{i(\omega - \hat{H} + i\varepsilon)} \exp i(\omega - \hat{H} + i\varepsilon)t \Big|_0^{\infty} \\ &= \frac{i}{\omega - \hat{H} + i\varepsilon} = i\hat{\mathcal{K}}(\omega). \end{aligned} \quad (30)$$

下面还需要证明其反变换公式:

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} i\hat{\mathcal{K}}(\omega) \exp -i\omega t = \theta(t) \exp -i(\hat{H} - i\varepsilon)t. \quad (31)$$

利用留数定理, 这个证明并不困难: 先选取 \hat{H} 的本征态作为表象:

$$\hat{\mathcal{K}} = \sum_i \frac{1}{\omega - E_i + i\varepsilon} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \quad (32)$$

代入式 31 后由于积分的其他变量都是数, 求和和投影算子可拿到积分之外. 而对于积分:

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{i}{\omega - E_i + i\varepsilon} \exp -i\omega t$$

当 $t > 0$ 时, 把积分延拓成围绕下半平面进行, 这样圆周上的分量会随着 $\exp -i\omega t$ 的虚部趋于零, 而又留数定理可以导出式 31 的实积分为下半平面上极点上的留数 $\exp -i(E_i - i\varepsilon)$; 而当 $t < 0$ 时, 为了使圆周上的分量趋于零, 积分区间就需要选取在上平面, 然而上平面上没有被积函数的奇异点, 故积分为零. 这一论证对 \hat{H} 的所有本征态都成立, 故对于整个算子, 31 成立.

简谐振子的传播子

为了演示传播子的具体功能, 我们先研究量子力学中少数可解析解的系统之一: 谐振子系统. 谐振子系统的 Lagrangian 和 Hamiltonian 分别为:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (33)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (34)$$

我们可以对这个系统的 Hamiltonian 作上升-下降展开:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega} \right) \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left(\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{m\omega} \right), \quad (35)$$

使得:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger \hat{a} &= \frac{1}{2} m \omega \left(\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m^2 \omega^2} + i \frac{1}{m \omega} \underbrace{[x, p]}_i \right) \\ &= \frac{\hat{H}}{\omega} - \frac{1}{2}.\end{aligned}\quad (36)$$

这样, 原体系的算子就可以被表示成:

$$\hat{H} = \omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (37)$$

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (a + a^\dagger) \quad (38)$$

$$\hat{p} = \frac{-im\omega}{\sqrt{2m\omega}} (a - a^\dagger). \quad (39)$$

这样以来, 在 Heisenberg 图像下求解体系的运动就化为了求解上升-下降算符 a, a^\dagger 随时间的演化. 由 Heisenberg 方程, 我们有:

$$\frac{\partial \hat{a}(t)}{\partial t} = i [\hat{H}, \hat{a}(t)] = -i\omega a(t). \quad (40)$$

由此得到:

$$\hat{a}(t) = \hat{a}(t=0) \exp -i\omega t. \quad (41)$$

在 \hat{V} 含有 \hat{x}^2 之外的项, 若仍定义升降算符 \hat{a}^\dagger, \hat{a} , 则可以对系统作谐振子展开:

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{Harmonic}} + \hat{V} \quad \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}(t) = -i [\hat{H}_0 + \hat{V}, \hat{a}(t)]. \quad (42)$$

此时我们就需要转入相互作用图象:

$$\exp i\hat{H}_0 t : S \rightarrow I. \quad (43)$$

相互作用图象中, 我们利用 \hat{H}_0 已经被解清楚这一事实, 相互作用图象中态矢 $|t\rangle_I$ 的演化规则是:

$$\begin{aligned}i \frac{\partial}{\partial t} |t\rangle_I &= i \frac{\partial}{\partial t} \left(\exp i\hat{H}_0 t |t\rangle \right) \\ &= -\hat{H}_0 \underbrace{\left(\exp i\hat{H}_0 t |t\rangle \right)}_{|t\rangle_I} - \exp i\hat{H}_0 t \underbrace{\hat{H}}_{\exp -i\hat{H}_0 t |t\rangle_I} |t\rangle \\ &= \left(\exp i\hat{H}_0 t \hat{H} \exp -i\hat{H}_0 t - \hat{H}_0 \right) |t\rangle_I \\ &= \exp i\hat{H}_0 t \underbrace{\left(\hat{H} - \hat{H}_0 \right)}_{\hat{V}} \exp -i\hat{H}_0 t |t\rangle_I\end{aligned}\quad (44)$$

$$= \exp i\hat{H}_0 t \left(\hat{H} - \hat{H}_0 \right) \exp -i\hat{H}_0 t |t\rangle_I \quad (45)$$

$$= \hat{V}_I |t\rangle_I \quad (46)$$

这样, 我们就把自由理论的 Heisenberg 图象转入了关于扰动的相互作用图象.

最后我们对 Feynman 传播子关于已对角化的谐振子的各个能级作如下展开:⁷

$$\begin{aligned}D_F(x, t; x', 0) &= \langle x, t | x', 0 \rangle \\ &= \langle x | \exp -i\hat{H}t | x' \rangle \\ &= \sum_n \langle x | n \rangle \langle n | \exp -i\hat{H}t | x' \rangle \\ &= \sum_n \exp -iE_n t \langle x | n \rangle \langle n | x' \rangle. \\ &= \int \mathcal{D}[x(t)] \exp i \int_{T/2}^{-T/2} L(x(t), \dot{x}(t)) dt \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \varepsilon} \right)^{N/2} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_{N-1} (\cdots)\end{aligned}\quad (47)$$

若是令时间含有一个微小的虚的扰动项, 则当 $t \rightarrow \infty$ 时能量高于 E_0 的态分量均会趋于零.

含时微扰论: 传播子的应用

我们现在考虑式 44 所描述的动力学. 由 $|t\rangle_I = \hat{U}_I(t) |0\rangle_I$ 相互作用图象下的时间演化算子满足关系:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_I(t) = \hat{V}_I(t) \hat{U}_I(t). \quad (48)$$

我们可以把式 48 改写成自洽的积分形式:

$$\hat{U}_I = \hat{1} - i \int_0^t dt' \hat{V}_I(t') \hat{U}_I(t'). \quad (49)$$

有了这个自洽场的形式, 我们就可以对相互作用图象下的时间演化从 $\hat{1}$ 开始进行逐阶展开:

$$\begin{aligned}\hat{U}_I &= \hat{1} - i \int_0^t dt' \hat{V}_I(t') \\ &+ (-i)^2 \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \hat{V}_I(t_2) \hat{V}_I(t_1) + \cdots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} U_I^{(n)}(t),\end{aligned}\quad (50)$$

其中, N 阶修正项为:

$$U_I^{(n)}(t) = (-i)^n \int_0^t dt_n \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \hat{V}_I(t_n) \cdots \hat{V}_I(t_1). \quad (51)$$

⁷以上为第三周的内容.

注意上述积分的积分总体积是 n 为立方体体积的 $1/n!$, 我们可以利用编时算子进一步化简上式为⁸:

$$U_I(t) = \theta(t) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_0^t d(t_n \cdots t_1) T \left(\hat{V}_I(t_n) \cdots \hat{V}_I(t_1) \right). \quad (52)$$

进一步地, 我们可以利用指数函数的展开式将这一式写成:

$$U_I(t) = \theta(t) T \left(\exp \left(-i \int_0^t dt \hat{V}_I(t) \right) \right), \quad (53)$$

但千万要注意, 式 52 和 53 都只是形式表示而不可计算的. 回到 Schrodinger 图象:

$$\hat{U}_S(t) = \exp -i\hat{H}_0 t \hat{U}_I(t) \exp i\hat{H}_0 t. \quad (54)$$

现欲按式 6 计算 Feynman 传播子 D_F , 由于 $U_I(t)$ 可以按照各阶修正展开, Feynman 传播子也可以按照各阶修正展开:

$$\begin{aligned} D_F^{(n)} &= \langle x | \exp -i\hat{H}_0 t U_I^{(n)}(t) \exp i\hat{H}_0 t | x' \rangle \\ &= \langle x | \int dt_n \cdots \int dt_1 \hat{U}_0(t, t_n) \left(-i\hat{V} \right) \\ &\quad \hat{U}_0(t_n, t_{n-1}) \cdots | x' \rangle. \end{aligned} \quad (55)$$

在式 55 各个时间演化算符两边插上 \hat{x} 的完备性关系就可以得到:

$$\begin{aligned} D_F^{(n)} &= \int dt_n \cdots dt_1 \left(\prod_1^n -iV(x_i) \right) \\ &\quad D_F^{(0)}(x, t; x_n, t_n) \cdots D_F^{(0)}(x_1, t_1; x', 0), \end{aligned} \quad (56)$$

它表示系统在按照未扰动的时间演化算子演化的过程中与势场作用 n 次的修正项. 用 Feynman 图表示就是图 1.

当然, 也可以将时间演化算符通过 Fourier 变换的方式在频率表象之下展开:

$$\hat{U}(\omega) = \hat{U}^{(0)}(\omega) + U^{(0)}(\omega) \left(-i\hat{V} \right) U^{(0)}(\omega) + \cdots, \quad (57)$$

其中 $\hat{U}^{(0)}(\omega) = 1/(\omega - \hat{H}_0 + i\varepsilon)$ 已知.

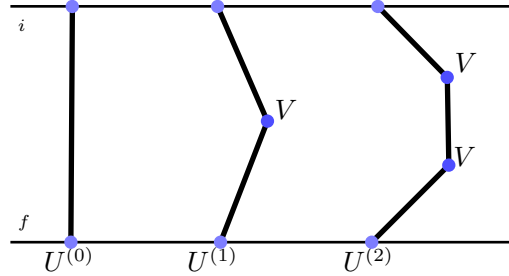


图 1: 零、一、二阶的微扰传播子的 Feynman 图.

⁸顺便再把正时化做了