Feynman Path Integral Note

dx

<2019-04-24 三 >

目录

1 Propagators

1.1 Heisenberg 表象中的态的内积

Propagator 可以看作是 Heisenberg 表象中的态的内积, 即

$$\langle x_N, t_N | x_0, t_0 \rangle = [\langle x_N | U(t_N, 0)] \cdot [U(0, t_0) | x_0 \rangle] \tag{1}$$

1.2 演化算符的矩阵元

Propagator 可以看作是演化算符的矩阵元, 即

$$\langle x_N, t_N | x_0, t_0 \rangle = \langle x_N | U(t_N, t_0) | x_0 \rangle \tag{2}$$

物理意义解释为: t_0 时刻处于 $|x_0\rangle$, 然后演化到 t_N 时刻, 这时在态 $|x_N\rangle$ 上的投影, 即在态 $|x_N\rangle$ 上的概率振幅, 就是 Propagator .

2 Feynman's Path Interal

2.1 核心思路

算得了 Propagator , 就知道了体系的演化, 问题就得到了解决. 所以是目标就是计算 Propagator .

一个基本的假设是

$$\langle x_N, t_N | x_0, t_0\rangle \quad \text{corresponds} \quad \text{to} \quad e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(0,N)} \tag{3}$$

其中 S 是作用量

$$S(N,0) = \int_{t_0}^{t_N} \mathrm{d}t \cdot L(x,\dot{x}) \tag{4}$$

L 是经典的拉氏量. 但是 L 是 x 和 $\dot{x}$ 的函数. 所以只有选定一个路径后, $S(N,0)$ 才有明确定义. 怎么办呢?

解决方法是, 插入完备基. 在 Heisenberg 表象中, 每个时刻的位置的本征态都可以看作是一组完备基. 即

$$\int \mathrm{d}^3x \cdot |\vec{x},t\rangle\langle\vec{x},t| = 1 \tag{5}$$

在 t_0 和 t_N 之间插入无穷多组完备基, 也就是

$$\begin{aligned}
&\langle x_N, t_N | x_0, t_0\rangle \\
=&\int \mathrm{d}^3x_{N-1}\cdots\int \mathrm{d}^3x_1 \cdot \langle x_N, t_N|\vec{x}_{N-1}, t_{N-1}\rangle\langle\vec{x}_{N-1}, t_{N-1}|\cdots|\vec{x}_1, t_1\rangle\langle\vec{x}_1, t_1|x_0, t_0\rangle
\end{aligned}$$

其中 $N\to\infty$. 这样相当于对于所有的路径都作了计算, 也就是

$$\langle x_N, t_N | x_0, t_0\rangle \quad \sim \quad \sum_{\text{all paths}} e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(N,0)} \tag{6}$$

对于无穷短间隔内的 Propagator , 将其假设为

$$\langle x+\Delta x, t+\Delta t | x, t\rangle = \frac{1}{\omega(\Delta t)} e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S} \tag{7}$$

其中 $\omega(\Delta t)$ 是只与 Δt 的大小有关的一个归一化系数.

这样, 就得到了 Feynman 的 Path Integral 的表达式

$$\begin{aligned}
&\langle x_N, t_N | x_0, t_0\rangle \\
=&\lim_{N\to\infty}\frac{1}{[\omega(\Delta t)]^{N-1}} \cdot \int \mathrm{d}^3x_{N-1}\cdots\int \mathrm{d}^3x_1 \cdot e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(N,0)} \\
=&\int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] \cdot e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(N,0)}
\end{aligned}$$

第二个等号采用了新的记号

$$\int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] \equiv \lim_{N\to\infty} \frac{1}{[\omega(\Delta t)]^{N-1}} \cdot \int \mathrm{d}^3 x_{N-1} \cdots \int \mathrm{d}^3 x_1 \tag{8}$$

2.2 归一化系数

下面来求归一化因子 $\omega(\Delta t)$ (假设它与势无关), 可以用自由粒子的拉氏量. 然后, 利用完备基的正交归一性

$$\lim_{\Delta t\to 0} \langle x+\Delta x, t+\Delta t | x, t\rangle = \delta(\Delta x) \tag{9}$$

那么

$$\lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{\omega(\Delta t)} e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S} = \delta(\Delta x) \tag{10}$$

下面先把 S 算出来

$$S = \int_t^{t+\Delta t} \mathrm{d}t' \cdot \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta x}{\Delta t}\right)^2\right] = \frac{m(\Delta x)^2}{2\Delta t} \tag{11}$$

上式中由于是自由粒子, 所以粒子是直线运动, 速度为 $\Delta x/\Delta t$. 将算出来的 S 代回原式并对 Δx 在全空间积分得

$$\frac{1}{\omega(\Delta t)} \cdot \int \mathrm{d}\Delta x \cdot e^{\frac{\mathrm{im}(\ \mathrm{x})^2}{2\hbar\Delta t}} = \frac{1}{\omega(\Delta t)} \sqrt{\pi \frac{2\hbar\Delta t}{m}} = 1 \tag{12}$$

即求得归一化系数为

$$\frac{1}{\omega(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}} \tag{13}$$

3 Classical Limit

当 $\hbar\to 0$ 时, 只有经典轨道有贡献. 所谓经典轨道, 即满足 Hamilton 原理的路径

$$\delta S = 0 \tag{14}$$

. 这是因为, 不满足 Hamilton 原理的作用量 $\delta S \neq 0$, 而 $\hbar \to 0$, 所以作用量即使有很小的改变, 它对应的相位也会有很大的改变, 那么它在对所有路径求和时, 相位会相干相消. 而只有满足 Hamilton 原理的路径, 它有微小的改变时, 它的相位不会相消. 作用量在 $[-\hbar\pi, \hbar\pi]$ 内都会有贡献.

一个周期内的相位都会相消, 只有作用量取平稳值的时候没有其它相位与它相消.

4 Equivalence to Schrodinger's Wave Mechanics

考虑从 Propagator 对时间的微分入手, 将从 t_0, x_0 到任意时刻 t, x 的 Propagator 在 $t - \Delta t$ 处展开

$$\langle x,t|x_0,t_0\rangle = \langle x,t-\Delta t|x_0,t_0\rangle + \Delta t\frac{\partial}{\partial t}\langle x,t-\Delta t|x_0,t_0\rangle + \mathcal{O}[(\Delta t)^2] \tag{15}$$

同时, 也可以用 Path Integral 的方法计算 Propagator 然后再对应 Δt 的一阶项. 这样就用 Path Integral 求得 Propagator 对时间的一阶导数.

可以考虑在离 $|x,t\rangle$ 无穷近的地方插入一组完备基

$$\langle x,t|x_0,t_0\rangle = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\Delta x\cdot e^{-\lambda(\Delta x)^2}\cdot e^{-\frac{\mathrm{i}V\Delta t}{\hbar}}\cdot\langle x-\Delta x,t-\Delta t|x_0,t_0\rangle \tag{16}$$

其中拉氏量已代为 $L = \frac{m}{2}\left(\frac{\Delta x}{\Delta t}\right)^2 - V$, 为了简便记 $\lambda = \frac{m}{2\mathrm{i}\hbar\Delta t} \sim \frac{1}{\Delta t}$. 将上式最后一项在 $\langle x, t-\Delta t|$ 附近展开

$$\begin{aligned}\langle x-\Delta x,t-\Delta t|x_0,t_0\rangle =& \langle x,t-\Delta t|x_0,t_0\rangle + \text{Linear term}\\ &+ \frac{(\Delta x)^2}{2}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\langle x,t-\Delta t|x_0,t_0\rangle + \mathcal{O}[(\Delta x)^3]\end{aligned}$$

上式中的线性项及其它奇数次幂项由于是奇函数, 积分后都为零, 所以不加考虑.

代回积分式中, 并将 $e^{-\frac{\mathrm{i}V\Delta t}{\hbar}}$ 也按 Δt 进行 Taylor 展开, 可得

$$\langle x,t|x_0,t_0\rangle = \langle x,t-\Delta t|x_0,t_0\rangle + \left[\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\cdot\frac{1}{2}\frac{1}{\lambda} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\Delta t\right]\langle x,t-\Delta t|x_0,t_0\rangle + \mathcal{O}[(\Delta t)^3]$$

注意式其中 $\frac{1}{\lambda} \sim t$. 其中利用了积分公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \cdot e^{-\lambda x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \tag{17}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \cdot x^2 e^{-\lambda x^2} = -\frac{\partial}{\partial \lambda}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} \tag{18}$$

比较两种展开的一阶项可得

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle x, t-\Delta t | x_0, t_0\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right]\langle x, t-\Delta t | x_0, t_0\rangle \tag{19}$$

此即 Schrodinger Equation !

5 Reference

J. J Sakurai, Jim Napolitano, Modern Quantum Mechanics 2ed:

- Chap 2.6 Propagators and Feynman Path Integral

R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics 2ed:

- Chap 8 The Path Integral Formulation of Quantum Theory