路径积分

Feynman Path Integrals

从波动力学传播子到路径积分量子力学

RongYu

量子力学系列讲义

2026.8.4

目录

导言 2

1 路径积分总览: 核心公式与物理图像 3
1.1 三条量子力学表述与第三条路线 . . . 3
1.2 核心公式: 跃迁振幅等于所有路径的相位之和 . . . 4
1.3 物理图像: 路径的相干叠加 . . . 4
1.4 经典极限: 相位最稳定的路径 . . . 6
1.5 路径积分与正则量子化的对比 . . . 6
1.6 推广到量子场论的容易程度 . . . 7

2 从波动力学传播子到路径积分 9
2.1 传播子与波函数的演化 . . . 9
2.2 传播子的短时分解 . . . 10
2.3 短时传播子的推导 . . . 12
2.4 连续极限: 路径积分公式 . . . 14
2.5 物理意义: 从波动力学到路径积分的跳板 . . . 15

3 Feynman 路径积分量子力学 17
3.1 公设体系 . . . 17
3.2 由路径积分恢复 Schrödinger 方程 . . . 18
3.3 传播子的组合性质与幺正性 . . . 19
3.4 经典极限与半经典近似 . . . 21
3.5 精确可解体系: 自由粒子与谐振子 . . . 22
3.6 与正则量子化的等价性 . . . 23
3.7 习题 . . . 23

4 路径积分量子化流程 25
4.1 位形变量与路径空间 . . . 25
4.2 作用量泛函 . . . 26
4.3 路径积分给出跃迁振幅核 . . . 26
4.4 每条路径的复相位权重 . . . 27
4.5 量子力学中的振幅与概率 . . . 28

4.6 为什么不能直接把 $|K|^2$ 当成概率 28
4.7 路径积分量子化的完整预测流程 29
4.8 任意初态到任意末态的路径积分表达 30
4.9 可观测量期望值的路径积分表示 30
4.10 最严谨的概括 31

A 路径积分的提出与发展简史 32

A.1 Dirac 的作用量观点 32
A.2 Feynman 的博士论文与时空表述 32
A.3 教材化与系统发展 32
A.4 场论推广: 生成泛函与规范理论 33
A.5 统计力学与 Euclidean 路径积分 33
A.6 数学基础与现代发展 33

导言

我们此前对量子力学的处理,一直沿着两条路线展开. Schrödinger 波动力学把态用波函数 $\psi(x,t)$ 描述, 其演化由含时 Schrödinger 方程决定; Heisenberg 矩阵力学把注意力放在算符上, 观测量由算符及其对易关系构成, 其时间演化由 Heisenberg 方程决定. 这两条路线在数学上完全等价, 在概念上分别对应经典力学的 Hamilton–Jacobi 理论与 Hamilton 正则形式. 本讲介绍第三条路线: Feynman 路径积分. 它既不把波函数, 也不把算符作为出发点, 而以“从一点到另一点的跃迁振幅”为基本对象, 并把这一振幅表述为对所有可能路径的求和.

本讲分为三章和一篇附录. 第一章从整体上俯瞰路径积分: 陈述它的核心公式, 用图形刻画其物理图像, 并与正则量子化对比, 说明各自的优劣以及推广到量子场论的难易. 第二章从 Schrödinger 绘景 (S 绘景) 的波动力学出发, 通过传播子一步一步地“导出”路径积分: 先给出传播子如何把初始波函数变为任意时刻的波函数, 再把传播子分解为短时传播子的乘积, 接着推导短时传播子的显式表达式, 最后分析这一过程的物理意义. 第三章把路径积分作为公设来叙述, 在只涉及高等量子力学、不引入泛函分析的范围内, 从公设严格推出 Schrödinger 方程与传播子的全部性质. 附录回顾路径积分从 Dirac 到 Feynman 再到场论的发展简史.

符号与约定

态矢量写作右矢 $|\psi\rangle$, 其共轭写作左矢 $\langle\phi|$; 内积写作 $\langle\phi|\psi\rangle$, 算符的矩阵元写作 $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$. 位置本征态写作 $|x\rangle$, 它在 Schrödinger 绘景中不含时; 传播子写作 $K(x'',t;x',t_0)$. Hamilton 算符写作 $\hat{H}$, 动能算符写作 $\hat{T}$, 单位算符写作 $\hat{I}$, Hilbert 空间写作 $\mathscr{H}$. 虚数单位、自然对数的底与微分号分别写作 i, e 与 d. 路径积分测度写作 $\mathcal{D}[x(t)]$, 经典作用量写作 $S[x(t)]$. 时间切分的步长写作 Δt (直立大写希腊字母), 时间分点写作 $t_1 < t_2 < \cdots < t_N$, 经典路径写作 $x_{\mathrm{cl}}(t)$.

1

路径积分总览: 核心公式与物理图像

本章俯瞰路径积分这座“大山”: 先说明它在三种量子力学表述中的位置, 再给出核心公式, 然后用图形刻画其物理图像, 最后与正则量子化作系统对比. 全章的论述以形象与整体把握为目的, 严格的推导留待第二、三章.

1.1 三条量子力学表述与第三条路线

经典力学为量子力学提供了三个入口. 若把经典力学写成 Hamilton 正则形式, 以正则坐标与正则动量为基本变量, 观测量满足 Poisson 括号, 那么量子化之后得到以算符和对易关系为对象的 Heisenberg 矩阵力学. 若把经典力学写成 Hamilton–Jacobi 理论, 以作用量函数的梯度定义动量, 那么量子化之后得到以波函数和微分方程为对象的 Schrödinger 波动力学. 这两种量子表述在数学上等价, 各有适用的场合, 但它们都隐含地把一个“经典结构”当作出发点: 前者需要正则坐标与 Poisson 括号, 后者需要波函数满足的偏微分方程.

经典力学的第三个入口是 Lagrange 形式: 力学系统由 Lagrange 量

$$L(x,\dot{x}) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x) \tag{1.1}$$

描述, 轨道由作用量泛函

$$S[x(t)] = \int_{t_1}^{t_N} \mathrm{d}t\, L(x,\dot{x}) \tag{1.2}$$

的变分原理决定. 自然的问题是: 能否也把 Lagrange 形式直接“量子化”, 得到第三种量子力学表述? Feynman 在 1948 年给出肯定回答, 答案就是路径积分. 三种表述与经典力学三套理论的对应如图 1 所示.

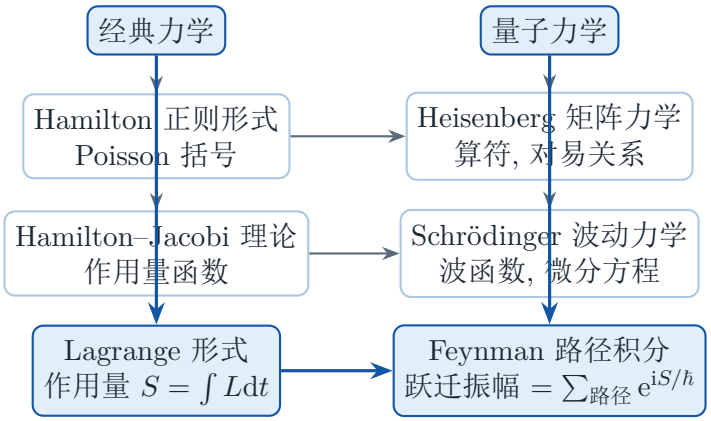


图 1: 经典力学三种表述与对应的量子力学表述. Hamilton 正则形式经正则量子化得到 Heisenberg 矩阵力学, Hamilton–Jacobi 理论对应 Schrödinger 波动力学. 本讲的第三条路线 (蓝色) 由 Lagrange 形式直接构造 Feynman 路径积分.

1.2 核心公式: 跃迁振幅等于所有路径的相位之和

设粒子在 t_1 时刻位于 x_1, 在 t_N 时刻于 x_N 处被观测. 连接两个时空点 (x_1,t_1) 与 (x_N,t_N) 的跃迁振幅, 即传播子 $K(x_N,t_N;x_1,t_1)$, 是路径积分的核心对象. Feynman 的核心公式把它写成对所有路径的求和:

$$\boxed{K(x_N,t_N;x_1,t_1)=\int_{x(t_1)=x_1}^{x(t_N)=x_N}\mathcal{D}[x(t)]\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]}}. \tag{1.3}$$

其中

1. 路径 $x(t)$ 是满足边界条件 $x(t_1)=x_1$, $x(t_N)=x_N$ 的任意连续函数;
2. $S[x(t)]=\int_{t_1}^{t_N}\mathrm{d}t\,L(x,\dot{x})$ 是沿该路径计算的经典作用量;
3. 测度 $\mathcal{D}[x(t)]$ 表示“对所有路径求和”, 它的严格含义是时间切分极限 (第二章将导出, 第三章将作为公设);
4. 每条路径贡献一个相位因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}$, 其模长恒为 1.

更一般地, 可用*位形流形* (configuration manifold) $\mathcal{Q}$ 来表述路径积分: 系统的广义坐标 $q=(q^1,\dots,q^n)$ 是 $\mathcal{Q}$ 上的坐标, 路径是映射 $q:[t_1,t_N]\to\mathcal{Q}$, 作用量 $S[q]=\int_{t_1}^{t_N}L(q,\dot{q})\mathrm{d}t$, 跃迁振幅仍然由(1.3) 形式给出, 只需将 x 换为 q:

$$K(q_N,t_N;q_1,t_1)=\int_{q(t_1)=q_1}^{q(t_N)=q_N}\mathcal{D}[q(t)]\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[q]}.$$

对于场论, 位形变量 q 进一步换为场构型 $\phi(\boldsymbol{x})$, 路径 $q(t)$ 换为场历史 $\phi(x)$ (时空坐标 x).

公式 (1.3) 与 Schrödinger 方程完全等价: 第三章将严格证明, 由它可以恢复 Schrödinger 方程. 因此路径积分并不是在原有量子力学之外增加的新动力学规律, 而是同一量子理论的第三种表述. 它的独特之处在于: 只需要经典作用量 $S[x]$ 这一个输入, 并且经典极限可以由“平稳相位”直接读出. 本章其余部分用图形展开公式 (1.3) 的物理内容.

1.3 物理图像: 路径的相干叠加

与经典力学“粒子沿唯一轨道运动”的图像不同, 路径积分把粒子描述为*同时沿所有可能路径运动*. 每一条路径贡献一个模长为 1 的复振幅, 总振幅是全部路径振幅的相干叠加 (图 2). 由于不同路径的作用量不同, 它们的相位 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}$ 或相长或相消, 这正是量子干涉的根源.

路径的相干叠加最直观地体现在双缝实验之中 (图 3). 在路径积分的语言里, 粒子从光源到屏上一点 P 的跃迁振幅等于所有可能路径的贡献之和; 这些路径被双缝屏分成两大族: 经过上缝的路径与经过下缝的路径. 若记这两族路径的贡献分别为 $A_1=|A_1|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1}$ 与 $A_2=|A_2|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2}$, 则 P 处的总振幅为 $A=A_1+A_2$, 概率为

$$|A|^2=|A_1|^2+|A_2|^2+2|A_1||A_2|\cos(\phi_1-\phi_2), \tag{1.4}$$

交叉项正是干涉项, 它依赖于两族路径的相位差. 双缝实验只是路径积分的一个特例: 缝的存在把路径空间划分成若干类, 而“对所有路径求和”天然包含所有可能分类之间的干涉. 当没有任何障碍时, 求和对象是全部连续路径, 干涉则发生在相邻路径之间.

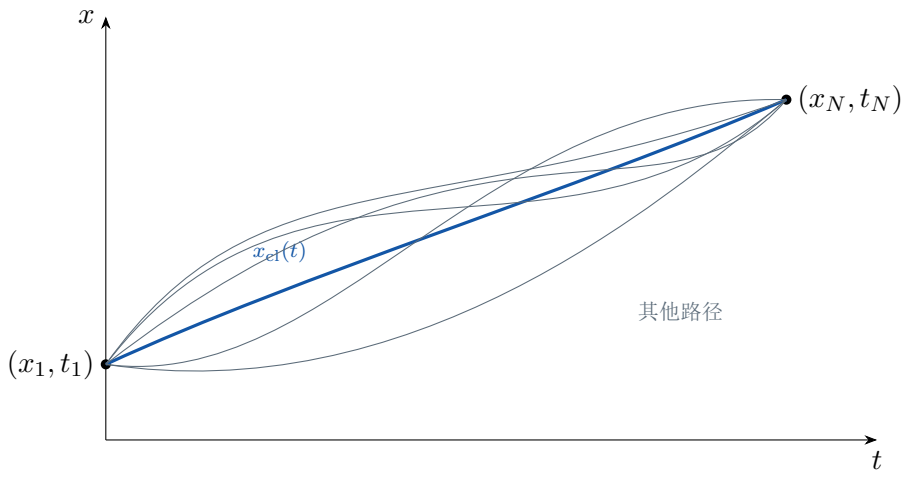


图 2: 连接 (x_1, t_1) 与 (x_N, t_N) 的所有路径. 每条路径 $x(t)$ 对传播子的贡献是相位因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[x]/\hbar}$, 其模恒为 1. 总振幅是全部路径贡献的相干叠加; 蓝色粗线为经典路径 $x_{\mathrm{cl}}(t)$.

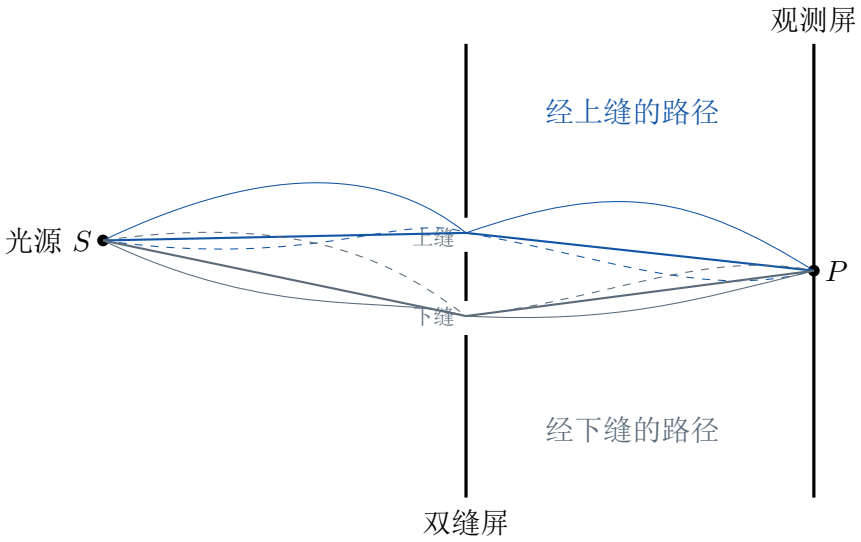


图 3: 双缝实验的路径积分图像. 粒子从光源到屏上 P 点的振幅等于所有路径之和; 双缝屏把所有路径分为经上缝与经下缝两大族. 两族路径的相位差决定 P 处的干涉, 见式(1.4).

1.4 经典极限: 相位最稳定的路径

路径积分在什么意义下回到经典力学? 关键在于相位对路径的敏感程度. 设体系的典型作用量满足 $S \gg \hbar$. 考虑两条相邻路径, 作用量分别为 S 与 $S + \delta S$. 若 $\delta S \gg \hbar$, 则相位差 $\delta S/\hbar \gg 1$, 两条路径的贡献在求和时相互抵消; 若 $\delta S \ll \hbar$, 则相位相近, 贡献相干增强. 于是: 在作用量随路径变化剧烈的区域, 相位快速振荡, 贡献相互抵消; 在作用量变化缓慢的区域, 相位相近, 贡献相干叠加. 由(1.2) 的一阶变分可知, 作用量对路径“变化缓慢”处正是 $\delta S = 0$, 即满足 Euler–Lagrange 方程的经典路径 $x_{\mathrm{cl}}(t)$ 附近. 这一图像见图 4.

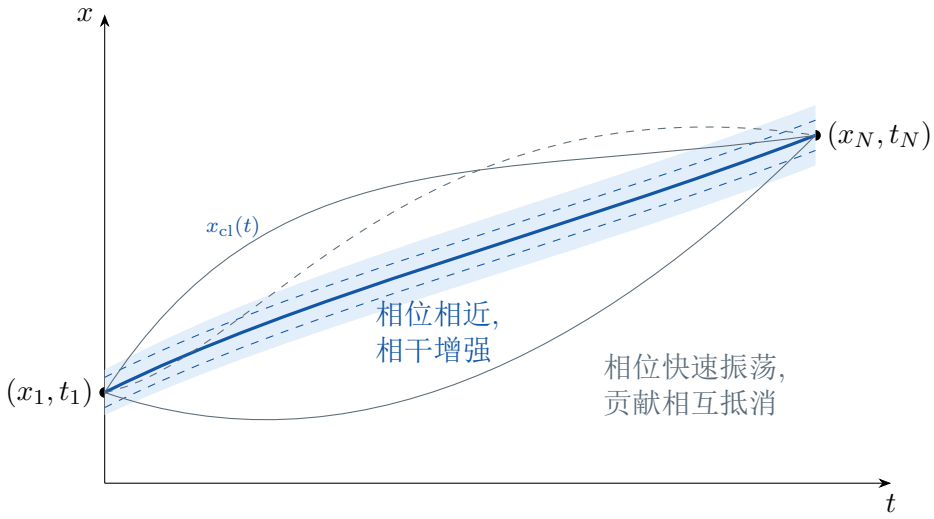


图 4: 经典极限的图像. 当 $S \gg \hbar$ 时, 只有经典路径 x_{cl} 附近 (蓝色浅带) 的路径相位相近, 相干增强; 远离经典路径的路径 (灰线) 相位快速振荡, 相互抵消. 经典轨道是量子干涉的产物, 而不是被挑选出的唯一轨道.

由此得到路径积分对经典力学轨道的解释: 经典力学并不意味着粒子只“尝试”了一条路径. 在经典极限下, 粒子其实仍然“同时沿所有路径运动”, 只是远离经典路径的贡献被量子干涉抹去, 剩下的正是经典路径附近的贡献. 这一概念的严格表述 (半经典近似) 将在第三章第四节给出.

1.5 路径积分与正则量子化的对比

“正则量子化” (canonical quantization) 是教科书中最常用的量子化方案, 它按以下步骤进行:

1. 取经典 Hamilton 量 $H(x,p)$, 把 Poisson 括号 $\{x,p\} = 1$ 换成对易关系 $[\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar$;
2. 把 x, p 换成 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 上的自伴算符 $\hat{x}$, $\hat{p}$, 量子态是 $\mathscr{H}$ 中的右矢;
3. 态的演化由 Schrödinger 方程 $\mathrm{i}\hbar\partial_t |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$ 决定, 其中 $\hat{H}$ 是把经典 $H(x,p)$ 中的 x, p 换成算符并规定算符次序所得.

而路径积分只做一件事: 写下公式 (1.3), 以经典作用量为唯一输入, 直接得到跃迁振幅. 两种方案各有优劣, 表 1 作了系统比较.

具体地说, 路径积分的主要优点有:

方面	正则量子化	路径积分
出发点	Hamilton 量, 对易关系	Lagrange 量, 作用量
基本对象	算符, 态矢量, Hilbert 空间	跃迁振幅, 所有路径之和
算符次序	需显式规定 (对称化, Weyl 排序)	中点规则自动对应 Weyl 排序
经典极限	需另行建立	平稳相位直接给出
束缚态谱	成熟的本征值方法	需要围道积分或 Wick 旋转
约束体系	Dirac 括号等复杂处理	Lagrange 乘子, 规范变量
严格性	有限维 Hilbert 空间上严格	泛函测度需时间切片正则化

Table 1: 正则量子化与路径积分的对比.

1. 直接以 Lagrange 量和作用量为出发点, 经典极限十分直观;
2. 不必先建立算符的具体矩阵表象, 也绕开了算符次序的歧义: 对作用量采用中点规则离散化, 对应的正是 Weyl 排序;
3. 含时问题与不含时问题放在同一框架中处理, 微扰展开与 Feynman 图由作用量自动生成;
4. 作用量形式容易推广到相对论体系与场, 因此在量子场论中具有天然优势.

它的主要缺点是: 泛函积分不是普通有限维 Lebesgue 积分, 需要时间切片正则化; 对束缚态本征值问题, 直接计算往往比解 Schrödinger 方程更繁琐. 正则量子化的优缺点正好互补: 它在有限的 Hilbert 空间上严格, 本征值方法成熟, 但算符次序有歧义, 经典极限不直接, 推广到场论时还要处理协变性与规范对称性的额外问题.

1.6 推广到量子场论的容易程度

正则量子化推广到场论时, 需要把场的坐标 $\phi(\boldsymbol{x})$ 提升为算符, 并规定等时对易关系

$$[\hat{\phi}(\boldsymbol{x}), \hat{\pi}(\boldsymbol{y})] = \mathrm{i}\hbar\, \delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}). \tag{1.5}$$

这一步必须选定一个时间方向, 因而破坏 Lorentz 协变的明显性; 相互作用绘景与 Dyson 级数的展开, 以及紫外发散的重整化, 都需要逐一处理; 对规范理论, 规范的选取还必须额外小心 (如 Gupta–Bleuler 或 Faddeev–Popov 方法). 这些都是可以完成的, 但协变性始终隐藏在后台.

路径积分推广到场论则非常直接: 把粒子的路径 $x(t)$ 换成场构型 $\phi(\boldsymbol{x},t)$ 对整个时空的分布, 把“对所有路径求和”换成“对所有场构型求和”. 关联函数由生成泛函

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\phi\, \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[S[\phi] + \int \mathrm{d}^4x\, J\phi\right]\right\} \tag{1.6}$$

通过泛函微商 $\langle\phi(x_1)\cdots\phi(x_n)|\phi(x_1)\cdots\phi(x_n)\rangle = (-i\hbar)^n\, \delta^n Z/\delta J(x_1)\cdots\delta J(x_n)\big|_{J=0}$ 统一生成. 由于作用量是 Lorentz 标量, 整个表述保持协变; 规范理论直接用规范不变作用量表述, 对称性的保持比算符方法自然得多. 图 5 比较了两种方案推广到场的流程.

需要强调, “容易程度”指表述上的系统性, 并不改变理论的物理内容: 两条路线得到的量子场论面临同样的紫外发散与重整化. 路径积分的优越性在于把理论的组织归约

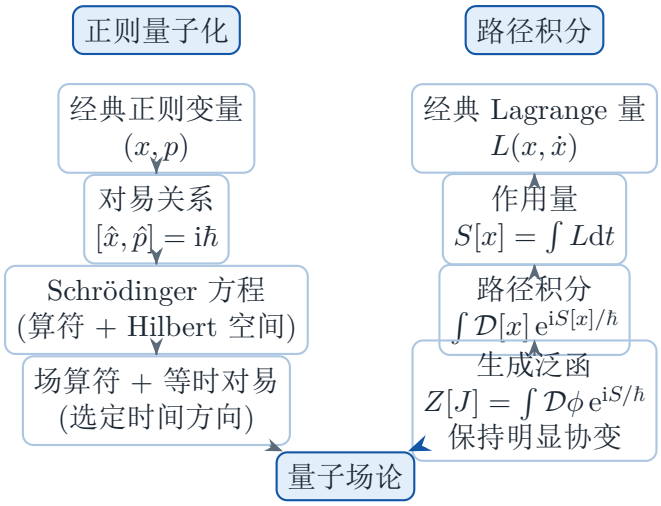


图 5: 正则量子化 (左) 与路径积分 (右) 推广到量子场论的流程. 两条路线最终得到同一个量子场论, 但路径积分始终保持明显 Lorentz 协变, 并以生成泛函(1.6) 统一给出所有关联函数.

为一条经典作用量, 对称性的保持更加透明. 图 5 的右列正是式 (1.3) 的逐级推广: 粒子路径 $\to$ 场构型, 跃迁振幅 $\to$ 生成泛函.

2

从波动力学传播子到路径积分

第一章从图像上描绘了路径积分.本章回答一个根本问题: 路径积分从何而来? 我们将严格局限于 Schrödinger 绘景的波动力学, 用四步逐步“导出”路径积分, 不省略任何关键步骤: (1) 先给出传播子如何把初始波函数变为任意时刻的波函数; (2) 再把传播子分解为短时传播子的乘积; (3) 然后推导短时传播子的显式表达式; (4) 最后分析这一过程的物理意义, 引出路径积分的概念. 每一步用到的数学引理都用引理框标出.

2.1 传播子与波函数的演化

设 $\hat{H}$ 为不含时的 Hamilton 算符, 时间演化算符为

$$\hat{U}(t,t_0)=\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right]. \tag{2.1}$$

若 Hamilton 算符含时, 则演化算符的形式更为复杂. 当 $\hat{H}(t)$ 在不同时刻均对易 ($[\hat{H}(t_1),\hat{H}(t_2)]=0$), 有

$$\hat{U}(t,t_0)=\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t')\,\mathrm{d}t'\right]. \tag{2.2}$$

对一般含时情形, 需引入编时算符 $\mathcal{T}$,

$$\hat{U}(t,t_0)=\mathcal{T}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t')\,\mathrm{d}t'\right]. \tag{2.3}$$

不论哪种情形, 演化算符都满足半群性质 $\hat{U}(t_2,t_1)\hat{U}(t_1,t_0)=\hat{U}(t_2,t_0)$, 初值 $\hat{U}(t_0,t_0)=\hat{I}$, 并且是幺正的 $\hat{U}^{\dagger}=\hat{U}^{-1}$. 在 Schrödinger 绘景中, 位置本征态 $|x\rangle$ 不含时, 态矢量随时间演化:

$$|\psi,t\rangle=\hat{U}(t,t_0)\,|\psi,t_0\rangle. \tag{2.4}$$

在位置基中展开, 就得到传播子.

Def. 1 传播子

传播子 (propagator) 定义为演化算符在位置基中的矩阵元

$$K(x'',t;x',t_0)=\langle x''|\hat{U}(t,t_0)|x'\rangle. \tag{2.5}$$

其物理意义是: 粒子在 t_0 时刻位于 x', 在时刻 t 传播到 x'' 的跃迁振幅.

传播子是量子演化的“积分核”: 它把初始波函数变为任意后继时刻的波函数. 在 $|\psi,t_0\rangle=\int\mathrm{d}x'\,|x'\rangle\langle x'|\psi,t_0\rangle$ 中插入单位算符并左乘 $\langle x''|$, 即得波函数的演化公式.

Prop. 1　波函数的演化

若 t_0 时刻的波函数为 $\psi(x',t_0)$, 则任意时刻 t 的波函数为

$$\psi(x'',t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x'\,K(x'',t;x',t_0)\,\psi(x',t_0). \tag{2.6}$$

因此传播子把初始波函数“映射”为任意时刻的波函数, 它是演化的全部信息.

Pf　由 $|\psi,t\rangle=\hat{U}(t,t_0)\,|\psi,t_0\rangle$ 及位置完备性 $\int\mathrm{d}x'\,|x'\rangle\langle x'|=\hat{I}$, 有

$$\langle x''|\,\psi,t=\int\mathrm{d}x'\;\langle x''|\hat{U}(t,t_0)|x'\rangle\,\langle x'|\psi,t_0\rangle\,,$$

即式 (2.6). 这里的每一步都只是定义(2.5) 与单位算符插入, 没有近似. □

传播子本身还满足两个基本性质, 它们在第三章将作为路径积分恢复 Schrödinger 方程的对照. 首先, 由 $\hat{U}(t_0,t_0)=\hat{I}$ 得初值条件

$$\lim_{t\to t_0^+}K(x'',t;x',t_0)=\delta(x''-x'). \tag{2.7}$$

其次, 由 $\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\hat{U}=\hat{H}\hat{U}$ 取位置矩阵元, 得传播子关于末端变量满足含时 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}K(x'',t;x',t_0)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x''^2}+V(x'')\right]K(x'',t;x',t_0). \tag{2.8}$$

绘景注记

若改在 Heisenberg 绘景中讨论, 位置本征态随时间演化, $|x,t\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}|x\rangle$, 于是传播子可写为 $\langle x'',t|x',t_0\rangle$. 两种写法等价; 本章为突出“从波动力学出发”, 统一采用 Schrödinger 绘景的(2.5).

2.2　传播子的短时分解

传播子把一个整体演化解为若干短时演化的复合.关键的工具是位置完备性关系与演化算符的半群性质.

Prop. 2　传播子的组合性质

对任意 $t_1<t_2<t_3$,

$$K(x_3,t_3;x_1,t_1)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_2\,K(x_3,t_3;x_2,t_2)\,K(x_2,t_2;x_1,t_1). \tag{2.9}$$

Pf　由半群性质 $\hat{U}(t_3,t_1)=\hat{U}(t_3,t_2)\hat{U}(t_2,t_1)$, 在中间时刻 t_2 插入位置完备性 $\int\mathrm{d}x_2\,|x_2\rangle\langle x_2|=\hat{I}$:

$$\langle x_3|\hat{U}(t_3,t_1)|x_1\rangle=\int\mathrm{d}x_2\;\langle x_3|\hat{U}(t_3,t_2)|x_2\rangle\;\langle x_2|\hat{U}(t_2,t_1)|x_1\rangle\,,$$

再按定义(2.5) 改写即可. □

组合性质的物理含义是: 完整的传播过程可以分割为若干连续的短时传播过程, 粒子先从 x_1 传播到中间时刻的某个位置 x_2, 再从那里传播到终点 x_3, 并对所有中间位置求和. 这个“分割, 插入, 求和”的结构是路径积分全部推导的出发点. 把它反复应用, 就得到长时传播子的短时分解.

Thm. 1　传播子的短时分解

把时间区间 $[t_1, t_N]$ 等分为 $N-1$ 段, 分点为

$$t_1 < t_2 < \cdots < t_N, \qquad \Delta t = t_n - t_{n-1} = \frac{t_N - t_1}{N-1}, \tag{2.10}$$

在每一个中间时刻 t_n $(n = 2, \ldots, N-1)$ 插入位置完备性关系, 反复应用组合性质(2.9), 得

$$K(x_N, t_N; x_1, t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x_{N-1} \cdots \mathrm{d}x_2 \prod_{n=2}^{N} K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}). \tag{2.11}$$

即: 长时传播子等于所有短时传播子 $\{K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1})\}$ 之积, 再对所有中间位置 $\{x_2, \ldots, x_{N-1}\}$ 积分.

Pf　对 $N = 3$, 这就是组合性质(2.9). 若式 (2.11) 对 N 成立, 则把最右端的短时因子 $K(x_N, t_N; x_{N-1}, t_{N-1})$ 与 $K(x_{N-1}, t_{N-1}; x_{N-2}, t_{N-2})$ 用组合性质合并, 积分吸收 x_{N-1}, 便得到 $N-1$ 情形的公式. 对 N 归纳即得. □

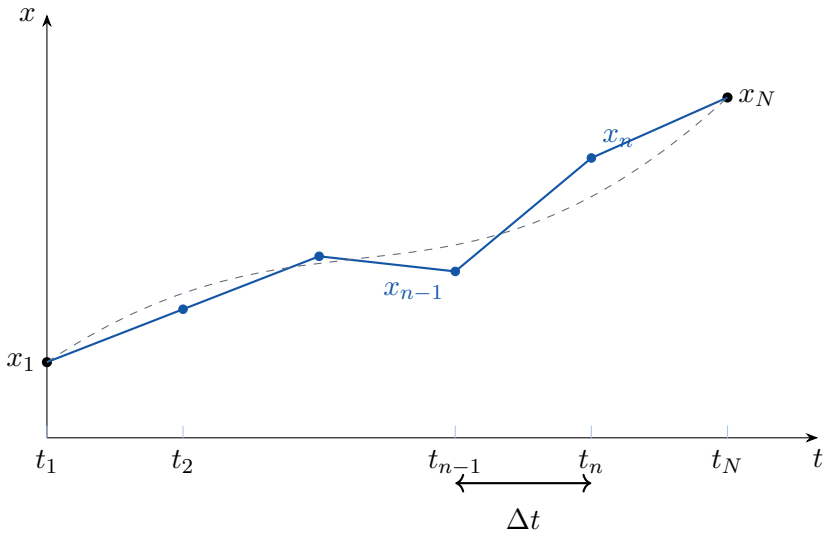


图 6: 时间切片与折线路径. 时间区间 $[t_1, t_N]$ 被分成 $N-1$ 个长度为 Δt 的小区间, 在每个中间时刻 t_n 插入位置完备性关系. 一组中间位置 $\{x_2, \ldots, x_{N-1}\}$ 确定一条连接 (x_1, t_1) 与 (x_N, t_N) 的折线路径 (蓝色实线), 虚线为另一条候选路径. 对中间位置的积分等价于对所有折线路径求和, 当 $N \to \infty$ 时折线密化为连续路径.

式 (2.11) 的积分变量 x_n 同时出现在相邻的两个短时振幅中: 在 $K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1})$ 中作为末端, 在 $K(x_{n+1}, t_{n+1}; x_n, t_n)$ 中作为始端. 这正是“粒子在 t_n 时刻经过 x_n”的数学表达: 对 x_n 积分, 就是对粒子在中间时刻位置的一切可能性求和. 一组中间位置在 (t, x) 平面中确定一条连接两端的折线路径, 对全部中间位置积分就等价于对所有这样的

折线路径求和 (图 6). 当 $N\to\infty$, $\Delta t\to 0$ 时, 折线密化为连续路径. 这样, 式 (2.11) 已经把波动力学的传播子改写为“对折线路径求和”; 剩下的唯一问题, 是求出短时传播子 $K(x_n,t_n;x_{n-1},t_{n-1})$ 在 $\Delta t\to 0$ 时的显式形式.

2.3 短时传播子的推导

现在推导短时传播子.记 $T_n=t_n$, $T_{n-1}=t_{n-1}$, $\Delta t=T_n-T_{n-1}$, 简写 $\hat H=\hat T+\hat V$, 其中 $\hat T=\hat p^2/2m$ 为动能, $\hat V=V(\hat x)$ 为势能 (位置算符的函数). 我们要计算

$$K(x_n,t_n;x_{n-1},t_{n-1})=\langle x_n|\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat H\Delta t\right]|x_{n-1}\rangle \tag{2.12}$$

在 $\Delta t\to 0$ 时的主导表达式. 推导分三步, 用到两个数学引理.

Lem. 1　振荡型高斯积分

对 $\alpha>0$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(p-p_0)^2}=\sqrt{\frac{\mathrm{i}\pi}{\alpha}}. \tag{2.13}$$

等价地, 对任意实数 b,

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha p^2+\mathrm{i}bp}=\sqrt{\frac{\mathrm{i}\pi}{\alpha}}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}b^2}{4\alpha}}. \tag{2.14}$$

Pf　先证实参量版本: 对 $a>0$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{-a(p-p_0)^2}=\sqrt{\frac{\pi}{a}},$$

这是把指数平方配方后化为 $\int\mathrm{d}q\,\mathrm{e}^{-aq^2}$ 得到的标准结果, 与 p_0 无关. 对振荡情形(2.13), 把 a 沿解析延拓 $a=\varepsilon-\mathrm{i}\alpha$, $\varepsilon\to 0^+$ 理解: 此时 $\mathrm{e}^{-a(p-p_0)^2}=\mathrm{e}^{-\varepsilon(p-p_0)^2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(p-p_0)^2}$, 积分绝对收敛, 再取 $\varepsilon\to 0^+$ 即得 $\sqrt{\pi/(-\mathrm{i}\alpha)}=\sqrt{\mathrm{i}\pi/\alpha}$. 式 (2.14) 由配方 $\alpha p^2+bp=\alpha(p+b/2\alpha)^2-b^2/4\alpha$ 并应用(2.13) 得到. 引理得证. □

Lem. 2　Trotter 型短时分解

对 $\hat H=\hat T+V(\hat x)$,

$$\langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat H\Delta t/\hbar}|x'\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{V(x)+V(x')}{2}\Delta t}\,\langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat T\Delta t/\hbar}|x'\rangle+O(\Delta t^3). \tag{2.15}$$

即: 对无穷小时间, 势能与动能“近似可交换”, 势能因子按两个端点 x, x' 对称地提取.

Pf　用对称乘积

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat V\Delta t/2\hbar}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat T\Delta t/\hbar}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat V\Delta t/2\hbar} \tag{2.16}$$

把每个指数展到 Δt^2:

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\hat T+\hat V)\Delta t/\hbar}=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\hat T+\hat V)\Delta t-\frac{(\hat T+\hat V)^2}{2\hbar^2}\Delta t^2+O(\Delta t^3),$$

而对称乘积等于同一展开式 (直接逐项相乘, 线性项与二次项逐一相符), 故

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}\Delta t/\hbar} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{V}\Delta t/2\hbar}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{T}\Delta t/\hbar}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{V}\Delta t/2\hbar} + O(\Delta t^3).$$

取位置矩阵元时, 两端的势能因子对 $|x'\rangle$ 与 $\langle x|$ 作用为乘法, 分别给出 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V(x')\Delta t/2\hbar}$ 与 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V(x)\Delta t/2\hbar}$, 合并即得(2.15). 引理得证. □

BCH 公式的视角

短时分解也可由 Baker–Campbell–Hausdorff (BCH) 公式直接理解. 令 $\hat{A} = -\mathrm{i}\hat{T}\Delta t/\hbar$, $\hat{B} = -\mathrm{i}\hat{V}\Delta t/\hbar$, 则 $\hat{A}, \hat{B} \sim O(\Delta t)$, $[\hat{A}, \hat{B}] \sim O(\Delta t^2)$. BCH 公式 $\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]+\cdots}$ 表明, 当忽略 $O(\Delta t^2)$ 的修正项时, $\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}} \approx \mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}$. 这正是另一种形式的短时分解: $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}\Delta t/\hbar} \approx \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{T}\Delta t/\hbar}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{V}\Delta t/\hbar} + O(\Delta t^2)$, 与 Trotter 分解(2.15) 精度一致, 只是势能因子取单端点而非对称形式. 本讲采用对称形式(2.15), 因为它在后续的高斯积分中自动给出中点规则, 对应 Weyl 排序.

于是短时传播子归结为自由粒子的短时矩阵元, 它由高斯引理 1 精确给出.

Prop. 3　自由粒子的短时矩阵元

对 $\hat{T} = \hat{p}^2/2m$,

$$\langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{T}\Delta t/\hbar}|x'\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}}\,\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(x-x')^2}{2\hbar\Delta t}\right]. \tag{2.17}$$

Pf　在动量本征态中展开. 利用 $\langle x|p\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$ 与动量完备性, 有

$$\langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{T}\Delta t/\hbar}|x'\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\,\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(x-x') - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t\right].$$

指数中 p 的二次项为 $\mathrm{i}\alpha p^2 + \mathrm{i}bp$, 其中 $\alpha = \Delta t/2m\hbar$, $b = (x-x')/\hbar$. 应用引理 1 的(2.14):

$$\int \mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\Delta t}{2m\hbar}p^2 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}(x-x')p} = \sqrt{\frac{\mathrm{i}\pi}{\Delta t/2m\hbar}}\,\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m(x-x')^2}{2\Delta t}\right].$$

除以 $2\pi\hbar$ 并化简 $\frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2\pi\mathrm{i}m\hbar}{\Delta t}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}}$, 即得(2.17). □

把引理 2 与命题 (自由粒子的短时矩阵元) 合并, 就得到短时传播子的显式表达式.

Prop. 4　短时传播子

当 $\Delta t = t_n - t_{n-1} \to 0$ 时,

$$K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}}\,\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(n, n-1)\right], \tag{2.18}$$

其中

$$S(n, n-1) = \frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\Delta t} - V\left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2}\right)\Delta t \tag{2.19}$$

是第 n 小段的离散作用量.

Pf 由引理 2 与命题 (自由粒子的短时矩阵元), 有

$$K(x_n,t_n;x_{n-1},t_{n-1})=\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}}\,\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(x_n-x_{n-1})^2}{2\hbar\Delta t}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{V(x_n)+V(x_{n-1})}{2}\Delta t\right].$$

与(2.19) 相比, 相位只差

$$\frac{1}{\hbar}\left[\frac{V(x_n)+V(x_{n-1})}{2}-V\!\left(\frac{x_n+x_{n-1}}{2}\right)\right]\Delta t=\frac{V''(x_{n-1})}{8\hbar}(x_n-x_{n-1})^2\Delta t+\cdots.$$

在下一步的时间切片求和(2.11) 中, 由于自由粒子高斯权重(2.17) 集中于 $|x_n-x_{n-1}|\sim\sqrt{\hbar\Delta t/m}$, 这一项对 x_n 积分后产生 $O(\Delta t^2)$ 的修正, 对 N 个小段求和为 $O(N\Delta t^2)=O(\Delta t)\to 0$. 因此在连续极限下可以放心使用中点取值(2.19), 命题得证. □

式 (2.18) 正是第一章公式 (1.3) 中“每条路径的相位 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}$”在单个时间切片上的体现: 小段的作用量 $S(n,n-1)$ 是(2.19) 的形式, 归一化因子 $\sqrt{m/2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}$ 只依赖 Δt 而不依赖势能 V, 这与“每条路径贡献单位模长的相位”一致.

中点规则与 Weyl 排序

对离散作用量(2.19), 势能项取左端点 $V(x_{n-1})$, 取右端点 $V(x_n)$, 或取中点 $V((x_n+x_{n-1})/2)$, 都是可行的离散化方案. 端点与中点的差为 $V'(x_{n-1})\Delta x_n/2+\cdots$, 其中 $\Delta x_n=x_n-x_{n-1}$; 这个差代入相位并沿整条路径求和, 一阶项正比于 $\Delta t\sum_n V'(x_{n-1})\Delta x_n\to\Delta t[V(x_N)-V(x_1)]\to 0$, 二阶项正比于 $\Delta t\sum_n\Delta x_n^2\to 0$. 因此不同取值方案在连续极限下给出同一个路径积分. 中点规则的意义在于: 它把位置算符的次序以对称的方式实现, 对应 Weyl 排序, 使离散作用量成为经典作用量的最优二阶近似, 并且对自由粒子精确成立.

2.4 连续极限: 路径积分公式

把短时传播子(2.18) 代入短时分解(2.11), 得到

$$K(x_N,t_N;x_1,t_1)=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{\frac{N-1}{2}}\int\mathrm{d}x_{N-1}\cdots\mathrm{d}x_2\,\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n=2}^{N}S(n,n-1)\right].\tag{2.20}$$

由于各小段作用量可加, 折线路径趋于连续路径时

$$\sum_{n=2}^{N}S(n,n-1)\longrightarrow\int_{t_1}^{t_N}\mathrm{d}t\,\left[\frac{m}{2}\dot{x}(t)^2-V(x(t))\right]=S[x(t)],\tag{2.21}$$

于是(2.20) 在连续极限下正是第一章的核心公式.

Thm. 2 路径积分公式

对一维粒子, 从 (x_1,t_1) 传播到 (x_N,t_N) 的跃迁振幅为

$$K(x_N,t_N;x_1,t_1)=\int_{x(t_1)=x_1}^{x(t_N)=x_N}\mathcal{D}[x(t)]\,\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_1}^{t_N}\mathrm{d}t\,L(x,\dot{x})\right],\tag{2.22}$$

其中泛函积分测度由离散极限定义:

$$\int_{x(t_1)=x_1}^{x(t_N)=x_N} \mathcal{D}[x(t)]\,\big(\cdots\big) \equiv \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{\frac{N-1}{2}} \int \mathrm{d}x_{N-1}\cdots \mathrm{d}x_2\,\big(\cdots\big). \tag{2.23}$$

Pf 定理 2 就是式 (2.20) 结合(2.21) 的连续极限; 测度定义(2.23) 正是(2.20) 中预因子与中间积分的形式. 命题得证. □

这里的 $\mathcal{D}[x(t)]$ 不是普通的一维积分测度, 而是对所有满足边界条件 $x(t_1)=x_1$, $x(t_N)=x_N$ 的路径进行积分的泛函积分测度, 其严格含义正是离散极限(2.23): 把时间轴切成 $N-1$ 段, 对 $N-2$ 个中间位置积分, 并让 $N\to\infty$. 高斯型预因子 $(m/2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t)^{(N-1)/2}$ 保证每一步短时传播的归一化.

2.5 物理意义: 从波动力学到路径积分的跳板

现在分析上一节的推导过程, 这一分析正是路径积分概念的引出.

第一, 从*局域微分方程到整体路径求和*. 波动力学对波函数实行局域更新: $\partial_t\psi$ 由 x 点邻域的 ψ 及其导数决定. 而传播子公式(2.6) 是一个整体公式: 它一次把所有初态信息映射到任意终时刻. 时间切片把这一整体公式展开为 $N-1$ 次短时传播的复合, 从而使“整体”显式化: 中间时刻的位置 $\{x_2,\dots,x_{N-1}\}$ 标记了一条折线路径, “对所有中间位置求和”等价于“对所有路径求和”.

第二, 从*波函数到跃迁振幅*. 波动力学的基本对象是波函数 $\psi(x,t)$; 路径积分的基本对象是跃迁振幅 $K(x_N,t_N;x_1,t_1)$, 波函数只是它作用于初始条件的结果(2.6). 二者通过传播子严格等价: 定理 2 表明, 波动力学中扮演演化核的传播子, 本身就等于所有路径的相位和. 因此, 路径积分并不是在波动力学之外另起炉灶, 而是波动力学的传播子的一种重新表述——这正是本章标题中“跳板与桥梁”的含义.

第三, 从*轨道到历史*. 经典力学中粒子选择一条轨道, 这条轨道由变分原理 $\delta S=0$ 决定. 波动力学中波函数在空间中弥漫, 不谈轨道. 路径积分则给出第三种图像: 粒子同时沿所有路径运动, 每条路径携带相位 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}$; 经典轨道不是被选择的, 而是在 $S\gg\hbar$ 时由干涉“幸存”下来的路径邻域. 这一图像在第一章已从直观上给出, 现在由式 (2.20) 获得了定量基础.

第四, 从*推导到公设*. 本章从 S 绘景的波动力学出发, 只用了传播子的定义、半群性质与位置完备性, 加上两个数学引理 (高斯积分与 Trotter 分解), 就严格导出了路径积分公式(2.22). 这说明路径积分可以成为量子力学的*等价表述*: 如果把它当作出发点, 那么波动力学 (包括 Schrödinger 方程) 应当能够从它推出来. 这正是下一章要做的事: 把路径积分作为公设, 从零建立量子力学. 图 7 概括了本章的推导链条.

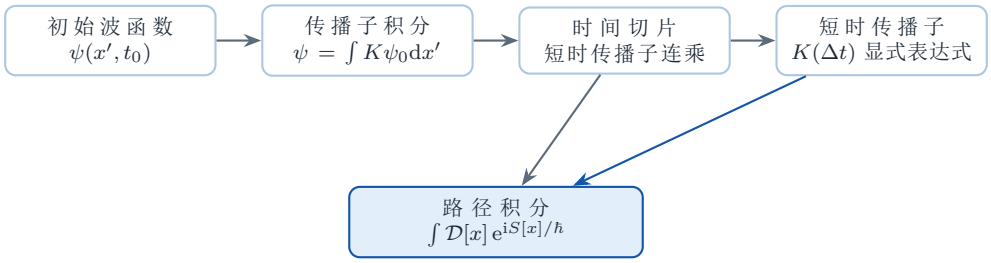


图 7: 第二章的推导链条. 从初始波函数出发, 经传播子积分得到任意时刻的波函数; 把传播子分解为短时传播子并求出其显式形式; 在连续极限下, 这些中间结果汇聚为路径积分(2.22).

3

Feynman 路径积分量子力学

第二章从波动力学“自下而上”地导出了路径积分. 本章反过来, 把路径积分作为出发点, “自上而下”地发展量子力学: 先以公设形式陈述路径积分, 然后从公设严格推出 Schrödinger 方程与传播子的性质. 本章的第一要义是严谨: 每一条结论都以公设或引理为基础, 并给出完整证明. 范围仍限于不涉及泛函分析的高等量子力学——路径空间上测度的严格构造属于泛函分析, 我们始终用时间切片定义泛函积分, 这是不引入泛函分析也能严格处理的方式.

3.1 公设体系

本节把路径积分作为量子力学的基本公设陈述. 公设共两条: 第一条回答“单条路径贡献多大”, 第二条回答“”对所有路径求和”怎样定义”. 两条公设合起来完全确定非相对论量子力学. 波函数不是独立的公设, 而是从公设派生出的概念.

Post. 1　每条路径的权重

连接时空点 (x_1,t_1) 与 (x_N,t_N) 的一条路径 $x(t)$ 对跃迁振幅的贡献为

$$\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]\right], \qquad S[x(t)]=\int_{t_1}^{t_N}\mathrm{d}t\,L(x,\dot{x}), \tag{3.1}$$

其中 $L(x,\dot{x})=m\dot{x}^2/2-V(x)$ 是经典 Lagrange 量. 即: 每条路径贡献模长为 1 的相位因子, 相位是经典作用量除以 $\hbar$.

公设一回答了”单条路径如何贡献”的问题. 但”对所有路径求和”需要一个明确的数学定义. 单条路径 $x(t)$ 是 t 的连续函数, 所有这样的函数构成无穷维空间; 对这个空间上的“积分”迄今没有通用的 Lebesgue 型测度. 物理学的解决方法是借助时间切片, 把路径求和归结为有限维积分的极限. 这就是公设二的内容.

Post. 2　路径积分与测度

跃迁振幅等于所有路径的权重之和:

$$K(x_N,t_N;x_1,t_1)=\int_{x(t_1)=x_1}^{x(t_N)=x_N}\mathcal{D}[x(t)]\,\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]\right], \tag{3.2}$$

其中”对所有路径求和”的测度由时间切片定义:

$$\int\mathcal{D}[x]\big(\cdots\big)=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{\frac{N-1}{2}}\int\mathrm{d}x_{N-1}\cdots\mathrm{d}x_2\,\big(\cdots\big), \tag{3.3}$$

$\Delta t=(t_N-t_1)/(N-1)$ 为切片步长.

公设二中的极限顺序是”先固定 N, 完成有限维积分, 再令 $N\to\infty$”. 这一顺序与第二章的时间切片推导一致. 在完成积分并取极限后, 结果与 N 无关, 只依赖于初末时空点 (x_1,t_1) 与 (x_N,t_N).

用位形流形表述

上述公设可以表述为更一般的形式. 设系统的位形流形 (configuration manifold) 为 $\mathcal{Q}$, 其上的广义坐标为 $q=(q^1,\dots,q^n)$. 一条路径是映射 $q:[t_i,t_f]\to\mathcal{Q}$, 边界条件为 $q(t_i)=q_i$, $q(t_f)=q_f$. 作用量泛函 $S[q]=\int L(q,\dot q)\mathrm{d}t$ 定义在路径空间上. 则跃迁振幅为

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i)=\int_{q_i}^{q_f}\mathcal{D}[q]\,\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[q]\right),$$

其中测度由时间切片定义. 对于场论, 位形变量 q 进一步换为场构型 $\phi(\boldsymbol{x})$, 路径 $q(t)$ 换为时空场历史 $\phi(x)$.

跃迁振幅 K 是路径积分的基本对象. 有了 K, 波函数作为派生概念被引入: 给定初始波函数 $\psi(x_1,t_1)$, 后继时刻的波函数由 K 向前传播,

$$\psi(x_N,t_N)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_1\,K(x_N,t_N;x_1,t_1)\,\psi(x_1,t_1). \tag{3.4}$$

式 (3.4) 与(3.2) 就是本讲的全部动力学假设. 其余一切, 包括 Schrödinger 方程与传播子的性质, 都由它们推出.

3.2 由路径积分恢复 Schrödinger 方程

我们从公设推出波函数满足含时 Schrödinger 方程. 关键的一步是单步演化: 取 $t_N=t+\Delta t$, $t_1=t$, 此时路径积分只有一个时间切片, 路径是连接 (x',t) 与 $(x,t+\Delta t)$ 的唯一折线, 其作用量为 $m(x-x')^2/2\Delta t-V((x+x')/2)\Delta t$. 于是

$$\psi(x,t+\Delta t)=\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x'\,\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(x-x')^2}{2\hbar\Delta t}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\left(\frac{x+x'}{2}\right)\Delta t\right]\psi(x',t). \tag{3.5}$$

令 $\eta=x-x'$, 则 $x'=x-\eta$, $\mathrm{d}x'=-\mathrm{d}\eta$, 积分限颠倒后

$$\psi(x,t+\Delta t)=\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\eta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}a\eta^2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V(x-\eta/2)\Delta t}\psi(x-\eta,t), \tag{3.6}$$

其中 $a=m/2\hbar\Delta t$.

推导需要高斯积分的矩, 它们从引理 1 得出.

Lem. 1 振荡型高斯积分的矩

记 $a=m/2\hbar\Delta t$, $A=\sqrt{m/2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}=\sqrt{a/\pi\mathrm{i}}$. 则

$$A\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\eta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}a\eta^2}=1,\qquad A\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\eta\,\eta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}a\eta^2}=0,\qquad A\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\eta\,\eta^2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}a\eta^2}=\frac{\mathrm{i}\hbar\Delta t}{m}. \tag{3.7}$$

Pf 第一式就是 $\int \mathrm{d}\eta\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}a\eta^2} = \sqrt{\mathrm{i}\pi/a}$, 其值恰为 $1/A$. 第二式因被积函数为奇函数而为零. 对第一式两边关于 a 求导: $\int \mathrm{d}\eta\, \mathrm{i}\eta^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}a\eta^2} = \frac{1}{2}\sqrt{\mathrm{i}\pi/a}\cdot\frac{1}{a}$, 即 $\int \mathrm{d}\eta\, \eta^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}a\eta^2} = \frac{\mathrm{i}}{2a}\sqrt{\frac{\mathrm{i}\pi}{a}}$, 乘以 A 得 $A\int \mathrm{d}\eta\, \eta^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}a\eta^2} = \mathrm{i}/2a = \mathrm{i}\hbar\Delta t/m$. 引理得证. □

现在把式 (3.6) 两端展开到 Δt 的一阶. 左端:

$$\psi(x, t+\Delta t) = \psi(x,t) + \Delta t\,\frac{\partial \psi}{\partial t} + \cdots . \tag{3.8}$$

右端先把 $\psi(x-\eta, t)$ 在 x 处展开:

$$\psi(x-\eta, t) = \psi(x,t) - \eta\,\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2}\,\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \cdots . \tag{3.9}$$

势能因子中 $V(x-\eta/2) = V(x) - (\eta/2)V'(x) + \cdots$, 其中 η 的一次项在下面关于 η 积分时因奇性而消失, 故到 Δt 一阶有效 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V(x-\eta/2)\Delta t/\hbar} = 1 - \mathrm{i}V(x)\Delta t/\hbar + \cdots$. 代入并只保留含 η^2 的高斯矩(3.7):

$$\begin{aligned} \psi + \Delta t\,\frac{\partial \psi}{\partial t} &= \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\Delta t\right)\left(\psi + \frac{\mathrm{i}\hbar\Delta t}{2m}\,\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) + \cdots \\ &= \psi + \frac{\mathrm{i}\hbar\Delta t}{2m}\,\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\psi\Delta t + \cdots , \end{aligned} \tag{3.10}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\,\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\psi. \tag{3.11}$$

两边乘以 $\mathrm{i}\hbar$, 得到

$$\boxed{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)}. \tag{3.12}$$

这正是含时 Schrödinger 方程. 由于 ψ 由公设体系对任意初值传播, 该方程对任意时刻成立.

Thm. 1　路径积分与 Schrödinger 方程等价

由公设 3.1–3.3 与演化公式(3.4) 出发, 波函数满足含时 Schrödinger 方程(3.12). 反之, 满足方程(3.12) 与初值条件(2.7) 的演化核是唯一的, 即传播子(3.2). 因此路径积分与波动力学给出同一套物理内容.

Pf 前半部分已由单步演化推出. 后半部分: 设 K 与 K' 都满足方程(3.12) (关于第二个变量) 与初值条件(2.7), 则 $D = K - K'$ 满足齐次方程且初值为零; 把 $|D|^2$ 对第二个变量积分, 由 $\mathrm{i}\hbar\partial_t D = \hat{H}D$ 与 $\hat{H}$ 的自伴性得 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \mathrm{d}x''|D(x'',t)|^2 = 0$, 初值为零故恒为零. 于是 $K = K'$, 唯一性得证. □

公设的验证性

上述推导表明, 在 $\Delta t \to 0$ 的极限下, 单步演化(3.5) 精确复现 Schrödinger 方程, 而完整传播子(3.2) 正是该方程满足初值条件的演化核. 因此路径积分公设经受住了与波动力学的一致性检验, 它不是另立门户的假说, 而是同一量子理论的等价公理化表述.

3.3 传播子的组合性质与幺正性

传播子的组合性质可以由路径积分公设独立读出, 它保证了测度(3.3) 的自洽性.

Thm. 2　路径积分的组合性质

对 $t_1 < t_2 < t_3$,

$$K(x_3,t_3;x_1,t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x_2\, K(x_3,t_3;x_2,t_2)\, K(x_2,t_2;x_1,t_1). \tag{3.13}$$

Pf　把区间 $[t_1,t_3]$ 切片, 中间时刻 t_2 恰是某个分点 (必要时取并集细化切片, 这不改变测度定义). 那么 $[t_1,t_3]$ 上的切片和就是 $[t_1,t_2]$ 上的切片和与 $[t_2,t_3]$ 上的切片和之乘积再对 x_2 积分, 而 x_2 本来就属于被积变量集. 两个极限按同一顺序完成, 故

$$\int \mathcal{D}[x]\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar} = \int \mathrm{d}x_2 \left(\int \mathcal{D}[x]\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}\right)_{[t_2,t_3]} \left(\int \mathcal{D}[x]\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}\right)_{[t_1,t_2]},$$

此即(3.13). □

组合性质与波动力学中的半群性质 $\hat{U}(t_3,t_1) = \hat{U}(t_3,t_2)\hat{U}(t_2,t_1)$ 是同一事实的两种写法. 它保证了公设定义的跃迁振幅在时间上加性自洽: 任何分割方式给出的振幅相同.

由组合性质与复共轭性质可以推出幺正性. 先注意复共轭与时间反转的关系.

Prop. 1　复共轭与逆传播

$$K(x,t;x',t_0)^* = K(x',t_0;x,t). \tag{3.14}$$

Pf　由公设 3.1–3.2, K 是实数路径上相位 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}$ 的和, 因此

$$K(x,t;x',t_0)^* = \int \mathcal{D}[x]\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}S[x]/\hbar}.$$

沿一条路径反转时间, 由于 $L = m\dot{x}^2/2 - V(x)$ 在 $t \mapsto -t$ 下不变 (动能与势能均不变), 反转路径的作用量仍是 S; 于是上式等于把路径变量改向、从 (x,t) 走到 (x',t_0) 的路径积分, 即 $K(x',t_0;x,t)$. □

Thm. 3　幺正性与概率守恒

演化是幺正的: 波函数的范数不随时间改变,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, |\psi(x,t)|^2 = 0, \tag{3.15}$$

等价地, 传播子满足

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, K(x,t;x',t_0)^* K(x,t;x'',t_0) = \delta(x'-x''). \tag{3.16}$$

Pf　由 Schrödinger 方程(3.12) 与 V 为实函数, 直接计算

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi|^2 = \frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right),$$

对 x 积分, 右端为边界项, 平方可积波函数在无穷远处为零, 故得(3.15). 由于范数守恒(3.15) 对任意初态成立, 演化映射 $\psi_0 \mapsto \psi_t$ 是等距的; 对 $\psi_0(x') = \delta(x'-x'')$ 与 $\psi_0(x') =$

$\delta(x'-x')$ 的任意线性组合应用极化恒等式, 得

$$\int \mathrm{d}x\, K(x,t;x',t_0)^{*} K(x,t;x'',t_0) = \delta(x'-x''),$$

即(3.16). □

因此从路径积分公设建立起来的量子力学, 与波动力学一样具有归一化、概率守恒与幺正演化的全部特征.

3.4 经典极限与半经典近似

本章以严谨方式重述第一章的经典极限图像. 当 $S \gg \hbar$ 时, 相位 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}$ 随路径剧烈振荡, 需要用平稳相位 (stationary phase) 的思想估计泛函积分. 一维的平稳相位引理如下.

Lem. 2　平稳相位

设 $\phi(x)$ 有唯一的驻点 x_0: $\phi'(x_0)=0$, $\phi''(x_0)\neq 0$. 当 $\lambda \to +\infty$ 时,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\phi(x)} \simeq \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\phi(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi\mathrm{i}}{\lambda\,\phi''(x_0)}}. \tag{3.17}$$

Pf　在驻点附近展开 $\phi(x)=\phi(x_0)+\tfrac{1}{2}\phi''(x_0)(x-x_0)^2+\cdots$, 用高斯引理 1 完成积分 $\int \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\phi''(x_0)(x-x_0)^2/2} = \sqrt{2\pi\mathrm{i}/\lambda\phi''(x_0)}$; 远离驻点处相位快速振荡, 对积分的贡献按 $\lambda\to\infty$ 幂次衰减. □

把平稳相位引理用于路径积分: 相位泛函 $S[x]/\hbar$ 的“驻点”是满足 $\delta S=0$ 的经典路径 x_{cl}, 即 Euler–Lagrange 方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \tag{3.18}$$

的解. 在 x_{cl} 附近展开作用量:

$$S[x_{\mathrm{cl}}+\delta x] = S_{\mathrm{cl}} + \frac{1}{2}\,\delta^2 S + \cdots, \tag{3.19}$$

一阶变分因驻点条件消失, 二阶变分 $\delta^2 S$ 是 δx 的二次泛函. 若把路径参数化为 $\delta x(t)=\sum_n c_n \delta x_n(t)$, 二次变分在离散切片上化为有限维二次型, 泛函积分化为高斯积分, 其结果是经典路径贡献乘以一个由 $\delta^2 S$ 决定的预因子. 这个预因子正是 Van Vleck 行列式.

Prop. 2　半经典传播子 (Van Vleck)

当 $S\gg\hbar$ 且初始路径唯一时, 半经典近似给出

$$K(x_N,t_N;x_1,t_1) \simeq \sqrt{-\frac{1}{2\pi\mathrm{i}\hbar}\frac{\partial^2 S_{\mathrm{cl}}}{\partial x_N\,\partial x_1}}\; \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_{\mathrm{cl}}}, \tag{3.20}$$

其中 $S_{\mathrm{cl}}=S[x_{\mathrm{cl}}]$ 是沿经典路径的作用量.

Pf　令 $\delta x(t)$ 在端点为零. 作用量的二阶变分为

$$\delta^2 S = \int_{t_1}^{t_N} \mathrm{d}t\, \left[m\,\delta\dot{x}^2 - \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\delta x^2 \right].$$

在切片离散下, 它是中间位置偏差 $(\delta x_2, \dots, \delta x_{N-1})$ 的二次型. 提取相位 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S_{\mathrm{cl}}/\hbar}$ 后, 剩余的是标准多维高斯积分 $\int \mathrm{d}^{N-2}\delta x\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\delta x^{\top}\mathbb{H}\,\delta x}$, 其结果是 $(\det \mathbb{H})^{-1/2}$ 型的预因子. 对自由粒子 $V=0$, 该积分可由引理 3 逐步合并, 得到 $K_0 = \sqrt{m/2\pi\mathrm{i}\hbar T}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}S_{\mathrm{cl}}/\hbar}$; 此时 $\partial^2 S_{\mathrm{cl}}/\partial x_N \partial x_1 = -m/T$, 代入(3.20) 恰好一致. 对一般 V, 二阶变分的离散二次型给出同一个行列式结构, 故(3.20) 成立; 当 $\partial^2 S_{\mathrm{cl}}/\partial x_N \partial x_1$ 发散 (聚焦点, caustic) 时公式失效, 需要更高级的修正. □

式 (3.20) 精确地解释了经典极限: 传播子由经典路径的相位主导, 预因子来自经典路径周围的量子涨落. 当端点移动时 S_{cl} 变化, $\partial^2 S_{\mathrm{cl}}/\partial x_N \partial x_1$ 刻画经典路径的聚焦程度; 该量发散处 (聚焦点, caustic), 半经典近似失效, 需要更高的修正. 这一公式与第一章图 4 的图像完全一致.

3.5 精确可解体系: 自由粒子与谐振子

路径积分公式给出后, 最直接的应用是把它真正“算出来”. 对自由粒子, 由于作用量是坐标差的二次型, 所有中间积分都是高斯积分, 可以精确完成. 需要用到高斯卷积恒等式, 它由引理 1 直接推出.

Lem. 3　高斯卷积

记 $a = m/2\hbar\Delta t$, 则

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}a(x-z)^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}a(y-x)^2} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\cdot 2\Delta t}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}a\frac{(y-z)^2}{2}}. \tag{3.21}$$

Pf　把指数中的二次型配方:

$$a(x-z)^2 + a(y-x)^2 = 2a\left[x - \frac{y+z}{2}\right]^2 + \frac{a}{2}(y-z)^2,$$

应用高斯引理 1 对 x 积分, 预因子相乘后即得(3.21). □

Prop. 3　自由粒子的传播子

对 $V=0$, 记 $T = t_N - t_1$, $\Delta x = x_N - x_1$. 由路径积分可精确算出

$$K_0(x_N, t_N; x_1, t_1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar T}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}m\Delta x^2}{2\hbar T}\right]. \tag{3.22}$$

Pf　自由粒子短时传播子(2.17) 是精确的. 由组合性质(2.9), 每两步合并一个中间积分, 需用高斯卷积恒等式(3.21): 每应用一次, 时间间隔由 Δt 换成 $2\Delta t$, 即“两步并成一步”. 对 $N-1$ 个短时传播子反复合并, 得

$$K_0 = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(N-1)\Delta t}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(x_N - x_1)^2}{2\hbar(N-1)\Delta t}\right] = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar T}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}m\Delta x^2}{2\hbar T}\right],$$

命题得证. □

作为检验, 对(3.22) 求导可知它满足自由粒子的 Schrödinger 方程与初值条件(2.7), 与动量谱方法 (Fourier 积分) 给出的结果一致. 其相位正是经典作用量 $S_{\mathrm{cl}} = m\Delta x^2/2T$ 除

以 $\hbar$, 其余因子是经典路径周围的量子涨落——这印证了半经典公式(3.20): 对自由粒子, $\partial^2 S_{\mathrm{cl}}/\partial x_N \partial x_1 = -m/T$, 代入即得(3.22), 说明半经典近似对自由粒子精确成立.

谐振子的结果

对谐振子 $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, 用同一方法 (二次型势能的高斯积分可精确完成) 可得

$$K(x'', T; x', 0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \mathrm{i}\hbar \sin \omega T}} \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}m\omega}{2\hbar \sin \omega T} \left[(x'^2 + x''^2)\cos \omega T - 2x'x'' \right] \right\}. \quad (3.23)$$

当 $\omega T = n\pi$ (n 为整数) 时 $\sin \omega T = 0$, 传播子发散: 这是谐振子周期轨道聚焦 (焦点, caustic) 的体现, 在半经典理论中对应 Van Vleck 行列式的奇点 ((3.20) 的平方根发散).

3.6 与正则量子化的等价性

第一章比较了路径积分与正则量子化两种表述.现在可以给出等价性的严格结论: 本章从路径积分公设推出了 Schrödinger 方程(3.12); 而正则量子化 (第一章第五节) 从对易关系与 Hilbert 空间出发, 给出的也是同一个 Schrödinger 方程. 演化方程相同、初值条件相同, 由定理 (路径积分与 Schrödinger 方程等价) 的唯一性, 两种表述给出完全相同的传播子与物理预言.

路径积分还揭示了正则量子化中算符次序约定的含义. 在离散作用量(2.19) 中取中点规则, 对应的正是 Weyl 排序: 经典量中含 xp 型乘积时, 中点规则把它映为对称组合 $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$, 而端点规则则映为非对称组合. 因此, 路径积分以取路径中间值的几何方式固定了算符次序, 不必在算符层次人为规定排序.

小结

本章从两条公设出发: 路径权重(3.1) 与测度的切片定义(3.3). 由此推出: Schrödinger 方程(3.12), 传播子的组合性质(3.13) 与幺正性(3.16), 半经典传播子(3.20), 以及自由粒子的精确传播子(3.22). 路径积分与波动力学、正则量子化完全等价, 但以作用量为唯一输入, 经典极限与场论推广最为自然.

3.7 习题

1. 高斯波包的演化. 设一维自由粒子在 $t = 0$ 时刻的波函数为

$$\psi(x, 0) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp\!\left(-x^2/4\sigma^2\right).$$

   (a) 用自由粒子传播子(3.22) 写出 $\psi(x, t)$ 的积分表达式, 并完成高斯积分;

   (b) 证明 $\psi(x, t)$ 可写成 $(2\pi\tilde{\sigma}^2)^{-1/4}\exp(-x^2/4\tilde{\sigma}^2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ 的形式, 其中 $\tilde{\sigma}^2 = \sigma^2(1 + \mathrm{i}\hbar t/2m\sigma^2)$, θ 为实相位;

   (c) 求概率密度 $|\psi(x, t)|^2$, 证明它是宽度 $\sigma(t) = \sigma\sqrt{1 + \hbar^2 t^2/4m^2\sigma^4}$ 的高斯分布, 并讨论 $t \to \infty$ 时波包展宽的渐近行为.

2. 经典路径与作用量. 对自由粒子, 由 (x_1, t_1) 到 (x_N, t_N) 的经典路径是匀速直线 $x_{\mathrm{cl}}(t) = x_1 + (x_N - x_1)(t - t_1)/T$.

(a) 计算经典作用量 $S_{\mathrm{cl}}=\int_{t_1}^{t_N}\mathrm{d}t\,\frac{1}{2}m\dot{x}^2$;

(b) 验证 x_{cl} 满足 Euler–Lagrange 方程, 即 $\delta S=0$;

(c) 计算 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S_{\mathrm{cl}}/\hbar}$, 并与自由粒子传播子(3.22) 的相位比较, 说明该相位就是传播子的全部相位.

3. 高斯积分的矩. 记 $a=m/2\hbar\Delta t$, $A=\sqrt{m/2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}$. 计算 $A\int\mathrm{d}\eta\,\eta^n\mathrm{e}^{\mathrm{i}a\eta^2}$ 对 $n=0,1,2,3$ 的值, 并指出在恢复 Schrödinger 方程的推导中, 哪些矩给出非零贡献, 哪些矩因奇偶性为零.

4. 两步传播与组合性质. 对自由粒子, 把传播子写成两步:

$$K_0(x,t;x',0)=\int\mathrm{d}x''\,K_0(x,t;x'',t/2)K_0(x'',t/2;x',0),$$

利用高斯卷积恒等式(3.21) 完成积分, 验证其结果与一步传播子(3.22) 一致.

5. 离散化方案的不变性. 设 $V(x)$ 为二次多项式, 比较左端点 $V(x_{n-1})$ 与中点 $V((x_n+x_{n-1})/2)$ 两种离散化, 证明二者给出相同连续极限: 计算相位差 $\Delta\phi=\hbar^{-1}\sum_{n=2}^{N}[V((x_n+x_{n-1})/2)-V(x_{n-1})]\Delta t$, 利用 $\sum_n\Delta x_n=x_N-x_1$ 与 $\sum_n\Delta x_n^2=O(1)$ 证明 $\Delta\phi\to0$, 其中 $\Delta x_n=x_n-x_{n-1}$.

4

路径积分量子化流程

前三章分别从物理图像、波动力学推导和公理化三个角度建立了路径积分.本章从操作层面审视路径积分量子化的完整逻辑链, 逐一澄清每个环节的含义.

给定经典系统的位形空间、作用量泛函、边界条件以及适当的测度和正则化处方, 路径积分量子化通过对所有允许的位形历史 $q:[t_i,t_f]\to\mathcal{Q}$ 的复相位权重 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[q]/\hbar}$ 作泛函积分, 构造时间演化算符的位形表象矩阵元

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i)=\langle q_f|\,\hat{U}(t_f,t_i)\,|q_i\rangle\,,$$

再用该积分核演化实验制备的初态, 并结合具体测量的 Born 规则, 得到测量结果的概率分布和其他物理可观测量.

最核心的逻辑不是

$$\text{路径}\ \longrightarrow\ \text{概率},$$

而是

$$\boxed{\text{路径的复权重}\ \longrightarrow\ \text{总跃迁振幅}\ \longrightarrow\ \text{末态}\ \longrightarrow\ \text{测量概率}}.$$

4.1 位形变量与路径空间

设经典系统的*位形空间* (configuration space) 为 $\mathcal{Q}$. 位形空间中的一个点表示系统在某一时刻的完整构型. 例如:

$$\begin{aligned}
\text{一维粒子}:&\quad \mathcal{Q}=\mathbb{R},\qquad q=x;\\
\text{三维粒子}:&\quad \mathcal{Q}=\mathbb{R}^3,\qquad q=\boldsymbol{x};\\
N\ \text{个粒子}:&\quad q=(\boldsymbol{x}_1,\dots,\boldsymbol{x}_N);\\
\text{刚体或约束系统}:&\quad q=(q^1,\dots,q^n).
\end{aligned}$$

因此, 在一般力学系统中, q 是系统的*一组广义坐标* (generalized coordinates) $q=(q^1,\dots,q^n)\in\mathcal{Q}$. 路径积分中的 q 更准确地写成

$$q(\cdot):[t_i,t_f]\longrightarrow\mathcal{Q},$$

它是一条从时间区间到位形空间的映射, 即系统在时间区间内的一条可能历史 $t \longmapsto q(t)$. 给定初末构型后, 积分所遍历的路径集合为

$$\mathscr{P}_{q_i,q_f} = \{q : [t_i, t_f] \to \mathcal{Q} \mid q(t_i) = q_i,\ q(t_f) = q_f\}.$$

所以

$$\boxed{q \text{ 是位形变量, } q(t) \text{ 是一条位形空间路径}},$$

q 不是" 量子粒子真实走过的某一条轨迹", 而是路径积分中的积分变量. 对于场论, 位形变量不再是有限维坐标 q, 而是某一时刻的场构型, 例如标量场的历史是 ϕ : 时空 $\to \mathbb{R}$, 此时积分变量是整个场函数 $\phi(x)$.

4.2 作用量泛函

经典 Lagrange 量为 $L(q, \dot{q}, t)$, 它定义作用量泛函 (action functional)

$$S[q] = \int_{t_i}^{t_f} L(q(t), \dot{q}(t), t)\, \mathrm{d}t.$$

这里的 S 是一个泛函

$$S : \mathscr{P}_{q_i,q_f} \longrightarrow \mathbb{R},$$

即输入一整条路径 $q(t)$, 输出一个实数 $S[q]$. 应当区分:

$$q(t) \quad \text{是一条路径在时刻} t \text{ 的构型}, \qquad S[q] \quad \text{是整条路径的作用量}.$$

路径积分中的 $S[q]$ 要在所有允许路径上计算, 而不仅仅在经典路径上计算. 经典路径 q_{cl} 只是满足 $\delta S[q_{\mathrm{cl}}] = 0$ 的特殊路径. 所以更准确的说法是:

$$\boxed{S[q] \text{ 是由经典 Lagrange 量定义、作用在任意允许路径上的作用量泛函}}.$$

不宜简单地称为" 选定路径的经典作用量", 因为" 经典路径" 通常特指满足 Euler–Lagrange 方程的驻定路径.

4.3 路径积分给出跃迁振幅核

路径积分首先给出时间演化算符的位形表象积分核

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | q_i \rangle.$$

它的路径积分表示为

$$\boxed{K(q_f,t_f;q_i,t_i)=\int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f}\mathcal{D}q\,\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[q]\right)}.$$

这里真正被构造出来的对象是 $K(q_f,t_f;q_i,t_i)$, 而不是一条具体路径, 也不是直接构造某个确定的粒子轨迹. K 有两个完全等价的解释:

$$\boxed{K=\text{从构型}q_i\text{ 演化到构型}q_f\text{ 的跃迁振幅核}},$$

$$\boxed{K=\text{时间演化算符}\hat{U}(t_f,t_i)\text{ 在位形表象中的矩阵元}}.$$

它满足组合关系

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i)=\int \mathrm{d}q\,K(q_f,t_f;q,t)K(q,t;q_i,t_i),$$

这正对应时间演化算符的组合律 $\hat{U}(t_f,t_i)=\hat{U}(t_f,t)\hat{U}(t,t_i)$.

4.4 每条路径的复相位权重

对于每条路径 $q(t)$, 路径积分形式上赋予一个复权重

$$\mathcal{A}[q]=\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[q]\right).$$

这个量常被称为该路径的" 概率振幅贡献", 但必须注意: 它不是某条路径实际发生的概率振幅. 不能写成 $P[q]=|\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}|^2=1$ 然后认为每条路径概率相同. 单条连续路径通常不是一个可直接测量的互斥事件, 路径积分中的不同路径要先进行复振幅叠加.

真正有物理意义的是总振幅

$$K=\int \mathcal{D}q\,\mathcal{A}[q].$$

不同路径贡献的模相同而相位不同: $\mathcal{A}[q]=\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[q]/\hbar}$, 它们之间会发生相长或相消干涉. 因此更严谨的表达是:

$$\boxed{\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[q]/\hbar}\text{ 是路径}q\text{ 对总跃迁振幅的复相位权重}},$$

而不是" 粒子沿路径 q 运动的概率振幅". 路径积分是在计算某个初末量子事件之间的总概率振幅, 而不是为每条未经测量的路径赋予普通概率.

4.5 量子力学中的振幅与概率

若系统制备于初态 $|\psi_i\rangle$, 经过时间演化后成为

$$|\psi(t_f)\rangle = \hat{U}(t_f, t_i)\,|\psi_i\rangle\,.$$

若最终测量并询问系统是否处于归一化态 $|\psi_f\rangle$, 对应的跃迁振幅是

$$\boxed{\mathcal{A}_{fi} = \langle\psi_f|\,\hat{U}(t_f, t_i)\,|\psi_i\rangle},$$

它是一个复数. 它的模方给出相应测量结果的概率:

$$\boxed{P_{i\to f} = \left|\langle\psi_f|\,\hat{U}(t_f, t_i)\,|\psi_i\rangle\right|^2}.$$

因此, 振幅的操作性含义是" 初态经过演化后, 与指定末态的复内积". 它包含两部分信息: $\mathcal{A}_{fi} = |\mathcal{A}_{fi}|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$, 其中模决定概率, 复相位决定它与其他过程叠加时的干涉.

4.6 为什么不能直接把 $|K|^2$ 当成概率

形式上 $K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f|\,\hat{U}\,|q_i\rangle$ 看起来像从位置 q_i 到 q_f 的跃迁振幅. 但连续谱的位置本征态满足 $\langle q|q'\rangle = \delta(q - q')$, 它们不是可归一化的物理态. 因此, 严格来说 $|q_i\rangle$、$|q_f\rangle$ 是广义态, K 是一个分布意义下的积分核, 不能把 $|K(q_f, t_f; q_i, t_i)|^2$ 直接解释为从一个精确位置到另一个精确位置的普通概率.

物理上应当使用可归一化的初始波包

$$|\psi_i\rangle = \int \mathrm{d}q_i\,\psi_i(q_i)\,|q_i\rangle\,,$$

其演化后的波函数为

$$\boxed{\psi(q_f, t_f) = \int \mathrm{d}q_i\,K(q_f, t_f; q_i, t_i)\,\psi_i(q_i, t_i)}.$$

随后位置落在区域 $\Delta \subset \mathcal{Q}$ 中的概率才是

$$\boxed{P(q_f \in \Delta) = \int_\Delta \mathrm{d}q_f\,|\psi(q_f, t_f)|^2}.$$

这才是完整且物理可实现的预测.

4.7 路径积分量子化的完整预测流程

以下将整个过程写成严格的操作链条.

1. **规定经典系统**.给出位形空间 $\mathcal{Q}$、经典变量 q^a 和作用量 $S[q]=\int L\mathrm{d}t$. 还必须规定边界条件、约束条件、对称性、积分测度和正则化方案. 仅给出形式上的 $S[q]$ 有时还不足以唯一确定量子理论: 测度、算符排序、拓扑边界条件等可能产生额外量子信息.
2. **定义路径积分**.在给定初末构型下定义

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i)=\int_{q_i}^{q_f}\mathcal{D}q\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[q]}.$$

严格通过时间切片理解: 将区间分成 N 段, $t_n=t_i+n\epsilon$, $\epsilon=(t_f-t_i)/N$, 离散路径由 $(q_1,\ldots,q_{N-1})$ 表示,

$$K=\lim_{N\to\infty}C_N\int\prod_{n=1}^{N-1}\mathrm{d}q_n\,\exp\Big[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_N(q_0,\ldots,q_N)\Big],$$

其中 $q_0=q_i$, $q_N=q_f$, C_N 是由短时传播子决定的归一化因子. $\mathcal{D}q$ 是所有中间构型积分的连续极限记号. 实时路径积分 $\int\mathcal{D}q\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}$ 是高度振荡的泛函积分, 通常需要时间切片、$\mathrm{i}\varepsilon$ 处方或 Wick 转动等方法定义.
3. **得到时间演化算符的积分核**.计算路径积分后得到 $K(q_f,t_f;q_i,t_i)=\langle q_f|\,\hat{U}(t_f,t_i)\,|q_i\rangle$, 这等价于确定量子动力学. 在通常条件下 K 满足 Schrödinger 方程 $\mathrm{i}\hbar\,\partial_{t_f}K=\hat{H}_{q_f}K$ 及初始条件 $\lim_{t_f\to t_i}K(q_f,t_f;q_i,t_i)=\delta(q_f-q_i)$.
4. **输入实验制备的初态**.量子理论不能只靠动力学给出预测, 还必须指定实验上制备的初态 $|\psi_i\rangle\in\mathscr{H}$, 在位形表象中写成 $\psi_i(q_i)=\langle q_i|\psi_i\rangle$. 路径积分不会自动告诉我们实验装置制备了哪个初态, 这属于物理问题的初始条件.
5. **用传播子演化初态**.末时刻波函数由

$$\psi(q_f,t_f)=\int\mathrm{d}q_i\,K(q_f,t_f;q_i,t_i)\,\psi_i(q_i,t_i)$$

给出, 即 $|\psi(t_f)\rangle=\hat{U}(t_f,t_i)\,|\psi_i\rangle$. 到此路径积分已经给出了实验测量前的量子态.
6. **规定要测量的物理量**.设测量可观测量 $\hat{A}$, 其谱分解为 $\hat{A}=\sum_a a\,\hat{P}_a$ (连续谱相应地写成投影值测度). 更一般的测量可用 POVM 元素 $\hat{E}_\alpha$ 表示, 满足 $\hat{E}_\alpha\geq 0$, $\sum_\alpha\hat{E}_\alpha=\hat{I}$. 物理预测必须明确: 制备什么初态、经历什么动力学、最终测量什么量. 只有作用量和路径积分, 没有初态和测量问题, 不能产生完整实验概率.
7. **由 Born 规则得到概率**. 测得结果 a 的概率为

$$P(a)=\langle\psi(t_f)|\,\hat{P}_a\,|\psi(t_f)\rangle\,,$$

一般 POVM 测量则为 $P(\alpha)=\langle\psi(t_f)|\,\hat{E}_\alpha\,|\psi(t_f)\rangle$. 将 $|\psi(t_f)\rangle=\hat{U}\,|\psi_i\rangle$ 代入得 $P(\alpha)=\langle\psi_i|\,\hat{U}^\dagger\hat{E}_\alpha\hat{U}\,|\psi_i\rangle$, 而 $\hat{U}$ 的位形表象矩阵元正是由路径积分给出的 K.

因此完整预测链为

$$\boxed{S[q]\;\longrightarrow\;K(q_f,t_f;q_i,t_i)\;\longrightarrow\;\psi(q_f,t_f)\;\longrightarrow\;P(\text{测量结果})}.$$

更完整地写成

经典作用量与量子化处方
$\Downarrow$
路径积分, 得到 $\langle q_f|\,\hat{U}\,|q_i\rangle$
$\Downarrow$
将 $\hat{U}$ 作用于实验制备的初态
$\Downarrow$
得到末态 $|\psi(t_f)\rangle$
$\Downarrow$
指定测量算符或 POVM
$\Downarrow$
通过 Born 规则得到概率分布、期望值和关联函数

4.8 任意初态到任意末态的路径积分表达

若初态和末态分别为可归一化态 $|\psi_i\rangle$、$|\psi_f\rangle$,则跃迁振幅是

$$\mathcal{A}_{fi} = \langle\psi_f|\,\hat{U}(t_f,t_i)\,|\psi_i\rangle\,.$$

插入位形完备关系 $\hat{I}=\int \mathrm{d}q\;|q\rangle\langle q|$, 可得

$$\boxed{\mathcal{A}_{fi} = \int \mathrm{d}q_f\,\mathrm{d}q_i\,\psi_f^*(q_f)\,K(q_f,t_f;q_i,t_i)\,\psi_i(q_i)}.$$

再代入路径积分,

$$\mathcal{A}_{fi} = \int \mathrm{d}q_f\,\mathrm{d}q_i\,\psi_f^*(q_f)\left[\int_{q_i}^{q_f}\mathcal{D}q\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[q]}\right]\psi_i(q_i).$$

如果末态对应一个离散、归一化的测量结果, 则 $P_{i\to f}=|\mathcal{A}_{fi}|^2$. 这才是” 路径积分得到概率预测” 的完整表达, 而不是简单地说 $P=|\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}|^2$.

4.9 可观测量期望值的路径积分表示

若要计算某个时刻 t 的位置函数 $A(q(t))$ 的矩阵元, 可以在路径积分中插入相应泛函:

$$\langle q_f|\,\hat{U}(t_f,t)\hat{A}\,\hat{U}(t,t_i)\,|q_i\rangle = \int_{q_i}^{q_f}\mathcal{D}q\,A(q(t))\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[q]}.$$

多个算符插入给出时间排序关联函数:

$$\langle q_f|\,\mathcal{T}\big[\hat{A}_1(t_1)\cdots\hat{A}_n(t_n)\big]\,\hat{U}(t_f,t_i)\,|q_i\rangle = \int_{q_i}^{q_f}\mathcal{D}q\,A_1(q(t_1))\cdots A_n(q(t_n))\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[q]}.$$

所以路径积分不仅能给出传播子, 也能给出:

跃迁振幅、期望值、关联函数、响应函数以及散射振幅.

4.10 最严谨的概括

可以把” 路径积分量子化” 完整地表述为:

给定经典系统的位形空间、作用量泛函、边界条件以及适当的测度和正则化处方, 路径积分量子化通过对所有允许的位形历史 $q : [t_i, t_f] \to \mathcal{Q}$ 的复相位权重 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[q]/\hbar}$ 作泛函积分, 构造时间演化算符的位形表象矩阵元

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f | \, \hat{U}(t_f, t_i) \, | q_i \rangle \, ,$$

再用该积分核演化实验制备的初态, 并结合具体测量的 Born 规则, 得到测量结果的概率分布和其他物理可观测量.

最核心的逻辑不是” 路径 $\to$ 概率”, 而是

路径的复权重 $\longrightarrow$ 总跃迁振幅 $\longrightarrow$ 末态 $\longrightarrow$ 测量概率.

A

路径积分的提出与发展简史

路径积分的历史横跨量子力学、量子场论与概率论.本附录按时间顺序回顾其提出与发展的主要节点, 所引文献均可核查.

A.1 Dirac 的作用量观点

路径积分的历史起点通常追溯到 Dirac 在 1933 年的论文 *The Lagrangian in Quantum Mechanics* [1]. Dirac 注意到, 经典 Lagrange 量与量子跃迁振幅之间存在深刻联系: 在相邻时刻之间, 作用量的指数相位能够编码量子演化. 他写道, 跃迁振幅与 $e^{iS/\hbar}$ “相似”, 并指出 Lagrange 量通过作用量进入量子力学的方式. 这一步尚未给出本讲使用的连续路径测度或时间切片公式, 但它明确提出了一个方向: 量子力学不必只从 Hamilton 算符或 Schrödinger 方程出发, 也可以直接由作用量组织. Dirac 的这一“类比”后来被 Feynman 认真对待并推广为严格的构造, 是路径积分最直接的源头.

A.2 Feynman 的博士论文与时空表述

Feynman 在 Wheeler 指导下完成的 1942 年普林斯顿博士论文 *The Principle of Least Action in Quantum Mechanics* [2] 中, 首次系统地发展了这一思想. 他从时空观点出发, 把经典最小作用量原理推广到量子情形: 粒子并不只沿使作用量最小的轨道运动, 而是同时沿所有可能路径运动, 每条路径贡献相位 $e^{iS/\hbar}$, 总振幅是这些贡献的和. 这一观点受到双缝实验的直接启发——缝的多条路径对应干涉, 而量子力学的概率幅正是对所有路径的相干求和.

1948 年, Feynman 在 *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics* [3] 中发表了完整的非相对论表述: 时间切片把有限时间传播分解为短时段, 在每个中间时刻插入位置完备性关系, 取连续极限后得到路径积分公式; 他证明了由此可以恢复 Schrödinger 方程, 并展示了自由粒子与谐振子等例子. 这就是本讲第二、三章所采用的构造路线. Feynman 表述的真正新意不在于把量子粒子解释成沿某一条未知经典轨道运动, 而在于把所有允许路径都作为概率幅的贡献者, 它们因作用量相位不同而相长或相消; 在 $\hbar \to 0$ 的平稳相位极限, 经典轨道附近的贡献相干叠加, 从而恢复变分原理.

A.3 教材化与系统发展

1965 年, Feynman 与 Hibbs 出版专著 *Quantum Mechanics and Path Integrals* [6], 系统整理了非相对论路径积分: 测度的时间切片定义、高斯积分的计算技术、微扰展开 (Feynman 图在量子力学中的应用) 以及各种应用. 此后, 路径积分成为量子力学教科书的标准内容之一. 1981 年 Schulman 的 *Techniques and Applications of Path Integration* [7] 进一步系统讨论了路径积分技术及其在量子力学、统计力学中的广泛应用, 是这一主题的权威参考.

A.4 场论推广: 生成泛函与规范理论

路径积分语言成为量子场论的基本工具, 始于 Feynman 1950 年的论文 *Mathematical Formulation of the Quantum Theory of Electromagnetic Interaction* [4]: 他引入源泛函, 把跃迁振幅与关联函数用带源的泛函积分(1.6) 统一生成, 并由此推导出 QED 的 Feynman 规则. 此后, 泛函积分表述逐渐成为场论的标准语言: 粒子的路径 $x(t)$ 被场构型 $\phi(\boldsymbol{x},t)$ 取代, 作用量变为场作用量, 而关联函数由带源泛函积分生成. 对规范理论, 路径积分直接以规范不变作用量为输入, 规范固定用 Faddeev–Popov 方法 (引入所谓“鬼场”) 处理, 对称性的保持比算符方法自然得多. Wilson 在 1974 年的格子规范理论 [8] 中把 Euclidean 路径积分定义在时空格点上, 为量子色动力学等强耦合规范理论提供了非微扰的定义, 这是路径积分在当代理论物理中最具影响力的应用之一.

A.5 统计力学与 Euclidean 路径积分

路径积分与概率论、统计力学的联系由 Kac 在 1949 年确立. Kac 证明了 *Feynman–Kac* 公式 [5]: 把时间变到虚时 (Wick 旋转 $t \to -\mathrm{i}\tau$), Schrödinger 方程化为热方程, 振荡型路径积分变成收敛的 Wiener 积分 (Wiener 测度下的泛函积分), 其归一化形式正是统计力学的配分函数. 这一公式把三条线索统一起来: 量子力学 (Euclidean 路径积分), 概率论 (Wiener 测度, 布朗运动) 与统计力学 (配分函数). 从此, 实时间的路径积分可以通过解析延拓与 Euclidean 路径积分互转, 而后者在数值上 (如格点场论) 和数学上都远为成熟. 这是路径积分作为统一工具的最深刻体现.

A.6 数学基础与现代发展

路径积分在物理上极其有效, 但在数学上始终存在一个认识边界: 实时间表达式 $\int \mathcal{D}[x(t)]\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[x(t)]/\hbar}$ 并不等同于普通有限维 Lebesgue 积分, 也一般不能被定义为路径空间上某个 (复) 测度的积分. 早在 1960 年代, Cameron 等人就构造了在 Feynman 积分意义下导致发散的积分族, 表明这类定义不能随意推广. 因此, 路径积分的确切含义总是依赖某种正则化: 本讲采用的时间切片, 加上解析延拓到 Euclidean 空间的 Wiener 积分, 以及格点化, 是三种最主要的实现方式. 在数学上, 围绕“如何给 Feynman 积分以严格的意义”发展出了循序逼近、解析延拓与公理化构造等方向; 在物理上, 路径积分则贯穿量子力学、量子场论与统计力学, 从原子分子物理到凝聚态与高能物理, 一直是基本的计算与概念工具. 本讲第三公设的时间切片定义正是这一历史背景下最基本且最可计算的一种实现.

References

[1] P. A. M. Dirac, The Lagrangian in Quantum Mechanics, *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* **3**, 64–72 (1933).

[2] R. P. Feynman, The Principle of Least Action in Quantum Mechanics, Ph.D. thesis, Princeton University (1942); 重印于 [9].

[3] R. P. Feynman, Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics, *Reviews of Modern Physics* **20**, 367–387 (1948), doi: `10.1103/RevModPhys.20.367`.

[4] R. P. Feynman, Mathematical Formulation of the Quantum Theory of Electromagnetic Interaction, *Physical Review* **80**, 440–457 (1950).

[5] M. Kac, On Distributions of Certain Wiener Functionals, *Transactions of the American Mathematical Society* **65**, 1–13 (1949).

[6] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York (1965).

[7] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Wiley, New York (1981).

[8] K. G. Wilson, Confinement of Quarks, *Physical Review D* **10**, 2445–2459 (1974).

[9] L. M. Brown (ed.), *Feynman's Thesis: A New Approach to Quantum Theory*, World Scientific, Singapore (2005).