

卡[量子系列专题讲座]

## 近代量子理论中的几个数学专题

### 提纲

[第一讲] 无穷乘积计算和算符行列式计算

[第二讲] 泛函、泛函变分与泛函导数计算，泛函(路径)积分定义

[第三讲] 泛函(路径)积分的数学分析

[第四讲] 二阶变系数线性微分方程求解

[第五讲] 逆算符、Green 函数方法与 Lippmann-Schwinger 方程求解

[第六讲] 简论量子理论中的算符

[第七讲] Grassmann 的数学分析

※

※

※

※

[量子系列专题讲座]

### [第 2 讲]

泛函、泛函变分与泛函导数计算，泛函(路径)积分定义

### 提 纲

一, 泛函数

二, 泛函变分与泛函导数

三, 泛函导数的性质与计算

四, 经典场论与泛函 Poisson 括号

五, 泛函 Taylor 展开

六, 泛函 (路径) 积分定义

## 一, 泛函数

### 1, 概述

数学量之间的一般关系称作“映射 (*Map*)”。粗分为 4 大类：

“数→数”的映射  $\Rightarrow$  函数；

“函数→数”的映射  $\Rightarrow$  泛函数；

“函数→函数”的映射  $\Rightarrow$  算符；

“算符→算符”的映射  $\Rightarrow$  超算符。

下面只叙述其中第二条。

### 2, 泛函数定义

泛函数简称作泛函，是将一类函数集合中的每一个函数映射到某个实(复)数集合中的某个数。每一种映射方式就称作一个泛函数。这时，作为泛函因变数的是实(复)数值，因变数所依赖的自变数就是函数。比如，某个固定空间点的电势是电荷空间分布的泛函数，旅游费用是旅游路线的泛函数，等等。

泛函数  $F$  对函数  $\varphi(\bar{x})$  的依赖关系用方括号表示  $F[\varphi(\bar{x})]$ 。泛函  $F[\varphi(\bar{x})]$  特征是它不依赖于函数  $\varphi(\bar{x})$  在任一特定点的值，而是依赖于  $\varphi(\bar{x})$  在整个定义域的值，即，依赖于  $\varphi(\bar{x})$  的整个形状。因此，自变量  $\bar{x}$  是傀标，于是  $F[\varphi(\bar{x})] = F[\varphi(\bar{y})] = F[\varphi]$ 。比如

$$F[\varphi(\bar{x})] = \int_a^b \varphi(\bar{x}) d\bar{x}, \quad F[\varphi(x)] = \varphi(x_0) = \int_a^b \delta(x-x_0) \varphi(x) dx$$

$$S[\varphi(x)] = \int_a^b \mathcal{L}(\varphi(x), \nabla \varphi(x), \dot{\varphi}(x)) d^4x$$

$$F[\varphi(\bar{x})] = \langle \psi(\bar{x}) | \varphi(\bar{x}) \rangle, \quad \Delta V(\bar{x}) = -4\pi\rho(\bar{x}) \rightarrow V(\bar{x}_0) = V[\rho(\bar{x})] = \frac{-4\pi}{\Delta} \rho(\bar{x})$$

## 二, 泛函变分与泛函导数

## 1, 泛函变分与泛函导数定义

**[泛函变分定义]** 令函数  $\varphi(\bar{x})$  有一无穷小变分  $\varphi(\bar{x}) \rightarrow \varphi'(\bar{x}) = \varphi(\bar{x}) + \delta\varphi(\bar{x})$ , 由此所导致的泛函  $F[\varphi'(\bar{x})] = F[\varphi(\bar{x}) + \delta\varphi(\bar{x})]$  变化称作泛函  $F[\varphi(\bar{x})]$  的变分, 记作

$$\delta F = F[\varphi'(\bar{x})] - F[\varphi(\bar{x})] = F[\varphi(\bar{x}) + \delta\varphi(\bar{x})] - F[\varphi(\bar{x})] \quad (2.1)$$

令函数  $\varphi(\bar{x})$  在点  $\bar{y}$  处有一无穷小变分  $\delta\varphi(\bar{x}) = \varepsilon\delta(\bar{x} - \bar{y})$ , 它导致的泛函  $F[\varphi(\bar{x})]$  的变化率称作  $F[\varphi(\bar{x})]$  在点  $\bar{y}$  处的泛函导数  $\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{y})}$ 。即有

**[泛函导数定义]** 泛函  $F[\varphi(\bar{x})]$  在某一点  $\bar{y}$  处的泛函导数为:

$$\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{y})} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F[\varphi(\bar{x}) + \varepsilon\delta(\bar{x} - \bar{y})] - F[\varphi(\bar{x})]}{\varepsilon} \quad (2.2)$$

注意, 这里特殊变分中所含无穷小量  $\varepsilon$  的真正意图是: **在展开分子泛函  $F[\varphi(\bar{x}) + \varepsilon\delta(\bar{x} - \bar{y})]$  时, 只需计及含  $\varepsilon$  的一阶项, 可以略去含  $\varepsilon$  二阶及以上的项。于是, 展开式一阶项所含  $\varepsilon$  和分母的  $\varepsilon$  相消。只要注意这样做, 就可以直接令  $\delta\varphi(\bar{x}) = \delta(\bar{x} - \bar{y})$ , 定义中也不要除以  $\varepsilon$  并取极限。**

显然,  $\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{y})}$  度量泛函  $F[\varphi(\bar{x})]$  对点  $\bar{y}$  处  $\varphi(\bar{x})$  数值变化的敏感程度。

如若将  $\varphi(\bar{x})$  看成电荷的空间密度, 则  $\delta\varphi(\bar{x}) = \varepsilon\delta(\bar{x} - \bar{x}')$  是某瞬间在点  $\bar{x}_0$  处产生的大小为  $\varepsilon$  的电荷。如果量  $F$  是  $\varphi(\bar{x})$  的泛函 (可以是某类的位势、场强度), 则  $\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{x}_0)}$  表征: 由于点  $\bar{x}_0$  处出现单位电荷引起的  $F$  的变化。

接着, 令函数  $\varphi(\bar{x})$  有一小变分  $\delta\varphi(\bar{x}) = \varphi'(\bar{x}) - \varphi(\bar{x})$ , 则泛函  $F$  的总变分  $\delta F \equiv F[\varphi'] - F[\varphi]$  等于各点变分  $\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{y})}\delta\varphi(\bar{y})$  之和。这导致下面泛

函变分和泛函导数之间的关联,

**[泛函导数与泛函变分关联定义]** 泛函数  $F[\varphi(\bar{x})]$  的变分  $\delta F[\varphi(\bar{x})]$

由各点处泛函导数  $\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{y})}$  和相应变分  $\delta\varphi(\bar{y})$  的乘积积分所决定:

$$\begin{cases} \delta F \equiv F[\varphi + \delta\varphi] - F[\varphi] = \int \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{y})} \delta\varphi(\bar{y}) d\bar{y} \\ F[\varphi + \delta\varphi] = F[\varphi] + \int \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{y})} \delta\varphi(\bar{y}) d\bar{y} \end{cases} \quad (2.3)$$

其实, 这也可以看作是泛函导数的由泛函变分表示的另一个定义。

(2.2) 式和 (2.3) 式的等价关联是明显的。因为, 假定对任意参考点  $\bar{y}$  有特殊变分  $\delta\varphi(\bar{y}) = \varepsilon\delta(\bar{x} - \bar{y})$ , 代入积分表达式 (2.3) 式即可得到 (2.2) 式。同时, 也可以由 (2.2) 式导出 (2.3) 式。从 (2.2) 式左边出发, 乘以  $\delta\varphi(\bar{y})$ , 对  $\bar{y}$  积分可得

$$\int \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{y})} \delta\varphi(\bar{y}) d\bar{y} = \int \frac{F[\varphi(\bar{x}) + \varepsilon\delta(\bar{x} - \bar{y})] - F[\varphi(\bar{x})]}{\varepsilon} \delta\varphi(\bar{y}) d\bar{y}$$

此式右边其实就是 (2.3) 式的左边。因为有

$$\begin{aligned} & \int \frac{F[\varphi(\bar{x}) + \varepsilon\delta(\bar{x} - \bar{y})] - F[\varphi(\bar{x})]}{\varepsilon} \delta\varphi(\bar{y}) d\bar{y} \\ &= \int \frac{1}{\varepsilon} \left\{ F[\varphi(\bar{x})] + \int \frac{\delta F[\varphi(\bar{x})]}{\delta\varphi(\bar{x})} \varepsilon\delta(\bar{x} - \bar{y}) d\bar{x} - F[\varphi(\bar{x})] \right\} \delta\varphi(\bar{y}) d\bar{y} \\ &= \int \left\{ \int \frac{\delta F[\varphi(\bar{x})]}{\delta\varphi(\bar{x})} \delta(\bar{x} - \bar{y}) d\bar{x} \right\} \delta\varphi(\bar{y}) d\bar{y} = \int \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{y})} \delta\varphi(\bar{y}) d\bar{y} \\ &= F[\varphi(\bar{x}) + \delta\varphi(\bar{x})] - F[\varphi(\bar{x})] = \delta F[\varphi(\bar{x})] \end{aligned}$$

证毕。

还可以如下看泛函导数: 比如 *Lagrangian*  $L(t) = L[\varphi(\bar{x}, t), \dot{\varphi}(\bar{x}, t)]$ , 有:

$$\delta L(t) = \int \left( \frac{\delta L}{\delta\varphi} \delta\varphi + \frac{\delta L}{\delta\dot{\varphi}} \delta\dot{\varphi} \right) d\bar{x} \quad (2.4a)$$

另一方面，在分立记号中有  $(\varphi_i(t) \equiv \varphi(\bar{x}_i, t))$ <sup>1</sup>：

$$\delta L(\varphi, \dot{\varphi}) = \sum_i \left( \frac{\partial L}{\partial \varphi_i} \delta \varphi_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}_i} \delta \dot{\varphi}_i \right) = \sum_i \left( \frac{1}{\delta V_i} \frac{\partial L}{\partial \varphi_i} \delta \varphi_i + \frac{1}{\delta V_i} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}_i} \delta \dot{\varphi}_i \right) \delta V_i \quad (2.4b)$$

令(2.4a)式是(2.4b)式的连续极限，由于不同点变分互相独立，可得：

$$\boxed{\frac{\delta L}{\delta \varphi(\bar{x}, t)} = \lim_{\delta V_i \rightarrow 0} \frac{1}{\delta V_i} \frac{\partial L(t)}{\partial \varphi_i(t)}, \quad \frac{\delta L}{\delta \dot{\varphi}(\bar{x}, t)} = \lim_{\delta V_i \rightarrow 0} \frac{1}{\delta V_i} \frac{\partial L(t)}{\partial \dot{\varphi}_i(t)}} \quad (2.5)$$

这里还要除以  $\delta V_i$ ，因为泛函导数在乘以  $\delta \varphi$  后还要  $d\bar{x}$  积分，才得到变分  $\delta L$ 。其中  $\bar{x}$  位于第  $i$  个小盒中。由(2.5)式得知，实质上，在  $(\bar{x}, t)$  点处泛函导数  $\frac{\delta L}{\delta \varphi(\bar{x}, t)}$  正比于  $L(t)$  对函数  $\varphi(\bar{x}t)$  在该点处的导数。

### 三、泛函导数的性质与计算

1、泛函导数满足通常的微分性质：

$$\begin{aligned} \text{i.} & \quad \boxed{\frac{\delta a}{\delta \varphi(\bar{x})} = 0} \\ \text{ii.} & \quad \boxed{\frac{\delta \{aF[\varphi] + bG[\varphi]\}}{\delta \varphi(\bar{x})} = a \frac{\delta F[\varphi]}{\delta \varphi(\bar{x})} + b \frac{\delta G[\varphi]}{\delta \varphi(\bar{x})}} \\ \text{iii.} & \quad \boxed{\frac{\delta \{F[\varphi]G[\varphi]\}}{\delta \varphi(\bar{x})} = \frac{\delta F[\varphi]}{\delta \varphi(\bar{x})} G[\varphi] + F[\varphi] \frac{\delta G[\varphi]}{\delta \varphi(\bar{x})}} \end{aligned} \quad (2.6)$$

**证明 iii:** 按定义，一方面

$$\delta \{F[\varphi]G[\varphi]\} = F[\varphi + \delta\varphi]G[\varphi + \delta\varphi] - F[\varphi]G[\varphi] = \int \frac{\delta \{F[\varphi]G[\varphi]\}}{\delta \varphi(\bar{x})} \delta \varphi(\bar{x}) d\bar{x}$$

另一方面，

<sup>1</sup> D.卢里, <粒子与场>, 科学出版社, 1981年。P.61。

$$\begin{aligned}
& F[\varphi + \delta\varphi]G[\varphi + \delta\varphi] - F[\varphi]G[\varphi] \\
&= \left( \int \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi} \delta\varphi d\bar{x} + F[\varphi] \right) \left( \int \frac{\delta G[\varphi]}{\delta\varphi} \delta\varphi d\bar{x} + G[\varphi] \right) - F[\varphi]G[\varphi] \\
&\cong \int \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi} \delta\varphi d\bar{x} \cdot G[\varphi] + F[\varphi] \cdot \int \frac{\delta G[\varphi]}{\delta\varphi} \delta\varphi d\bar{x}
\end{aligned}$$

有

$$\int \frac{\delta \{F[\varphi]G[\varphi]\}}{\delta\varphi} \delta\varphi d\bar{x} = \int \left[ \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi} G[\varphi] + F[\varphi] \frac{\delta G[\varphi]}{\delta\varphi} \right] \delta\varphi d\bar{x}$$

由于变分  $\delta\varphi$  的任意性，故得，

$$\frac{\delta \{F[\varphi]G[\varphi]\}}{\delta\varphi(\bar{x})} = \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{x})} G[\varphi] + F[\varphi] \frac{\delta G[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{x})}$$

iv. 复合泛函的泛函导数

$$\boxed{\frac{\delta F[\eta[\varphi]]}{\delta\varphi(x)} = \int \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\eta(x')} \frac{\delta\eta(x')}{\delta\varphi(x)} dx'} \quad (2.7)$$

**证明 iv:**  $\int \frac{\delta F}{\delta\varphi(x)} \delta\varphi(x) dx = \int \frac{\delta F}{\delta\eta(x')} \delta\eta(x') dx' = \iint \frac{\delta F}{\delta\eta(x')} \frac{\delta\eta(x')}{\delta\varphi(x)} \delta\varphi(x) dx' \Rightarrow$

$$\frac{\delta F[\eta[\varphi]]}{\delta\varphi(x)} = \int \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\eta(x')} \frac{\delta\eta(x')}{\delta\varphi(x)} dx'; \text{ 这里, 泛函变分 } \delta\eta(x') \text{ 的含义是:}$$

当  $\varphi(x)$  改变  $\delta(x-x')$  时  $\eta[\varphi]$  的改变。

v, 按泛函导数定义, 有如下关系:

$$\boxed{\frac{\delta\varphi_\sigma(x')}{\delta\varphi_\rho(x)} = \delta_{\sigma\rho} \delta(x-x'); \quad \frac{\delta\partial'_\mu\varphi_\sigma(x')}{\delta\varphi_\rho(x)} = \delta_{\sigma\rho} \partial'_\mu \delta(x-x')} \quad (2.8)$$

**证明:**  $\varphi_\sigma(x') = \sum_\rho \int \delta_{\sigma\rho} \varphi_\rho(x'') \delta(x''-x') d^4x''$ , 若固定  $x'$ , 此式或是  $\varphi_\sigma(x'')$  积

分的泛函, 按泛函导数的定义得:

$$\frac{\delta\varphi_\sigma(x')}{\delta\varphi_\rho(x)} = \int \delta_{\sigma\rho} \delta(x''-x) \delta(x''-x') d^4x'' = \delta_{\sigma\rho} \delta(x'-x)$$

类似, 泛函  $\partial'_\mu\varphi_\sigma(x') = \sum_\rho \int \delta_{\sigma\rho} \delta(x''-x') \partial''_\mu\varphi_\rho(x'') d^4x''$ , 令  $\varphi_\rho(x'') = \delta(x''-x)$ ,

即得其泛函导数的该式。

## 2, 泛函变分与泛函导数计算 (I)

i,  $G[\varphi(x)] = \int g(\varphi(x))dx$ , 则泛函导数<sup>2</sup>

$$\frac{\delta G[\varphi(x)]}{\delta \varphi} = \int \{g(\varphi(x') + \delta(x' - x)) - g(\varphi(x'))\} dx' = \int \frac{\partial g}{\partial \varphi}(x) \delta(x' - x) dx' = \frac{\partial g}{\partial \varphi}(x)$$

$$\boxed{\frac{\delta G[\varphi(x)]}{\delta \varphi} = \frac{\partial g}{\partial \varphi}(x)} \quad (2.9)$$

ii, 若  $G[\varphi(x)] = \int g(\nabla \varphi(x))dx$  则有

$$\boxed{\frac{\delta G}{\delta \varphi}(x) = -\nabla \frac{\partial g}{\partial \nabla \varphi}(x)} \quad (2.10)$$

iii, 若  $G[\varphi(x)] = G(\varphi(x))$ , 则,

$$\begin{aligned} \frac{\delta G(x)}{\delta \varphi(x')} &= \frac{\delta}{\delta \varphi(x')} \int G(\varphi(x'')) \delta(x - x'') dx'' \\ &= \int \left\{ G(\varphi(x') + \varepsilon \delta(x' - x)) - G(\varphi(x')) \right\} \frac{1}{\varepsilon} \delta(x - x') \\ &= \int \frac{\partial \{G(\varphi(x''))\}}{\partial \varphi(x'')} \delta(x'' - x') \delta(x - x'') dx'' = \frac{\partial G}{\partial \varphi}(x) \delta(x - x') \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{\delta G(x)}{\delta \varphi(x')} = \frac{\partial G}{\partial \varphi}(x) \delta(x - x')} \quad (2.11)$$

iv, 若  $G[\varphi(x)] = G(\varphi(x), \partial_\mu \varphi(x)) \equiv G(x)$ , 则

$$\begin{aligned} \frac{\delta G(x)}{\delta \varphi(x')} &= \frac{\delta}{\delta \varphi(x')} \int G(x'') \delta(x - x'') dx'' = \\ &= \int \left\{ G(\varphi(x'') + \varepsilon \delta(x'' - x'), \partial''(\varphi(x'') + \varepsilon \delta(x'' - x'))) - G(\varphi(x''), \partial''_\mu \varphi(x'')) \right\} \\ &\quad \cdot \frac{1}{\varepsilon} \delta(x - x'') dx'' \end{aligned}$$

<sup>2</sup> 下式的具体应用见卢里《粒子和场》，P.92

$$= \frac{\partial G}{\partial \varphi}(x)\delta(x-x') + \frac{\partial G}{\partial \partial_\mu \varphi}(x)(\partial_\mu \delta(x-x'))^3$$

于是，总前所述，得如下两个一般公式：

$$G[\varphi(x)] = \int g(\varphi, \partial_\mu \varphi) dx \rightarrow \frac{\delta G[\varphi]}{\delta \varphi} = \frac{\partial g}{\partial \varphi}(x) - \partial_\mu \frac{\partial g}{\partial \partial_\mu \varphi}(x) \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} G[\varphi(x)] &= G(\varphi(x), \partial_\mu \varphi(x)) \equiv G(x, \varphi(x)) \\ \frac{\delta G(x)}{\delta \varphi(x')} &= \frac{\partial G}{\partial \varphi}(x)\delta(x-x') + \frac{\partial G}{\partial \partial_\mu \varphi}(x)\partial_\mu \delta(x-x') \end{aligned} \quad (2.13)$$

对第二种函数结构情况，还可写为便于记忆理解的形式：

$$\begin{aligned} A(x)\partial_\mu \delta(x-x') &= \int A(x'')\delta(x-x'')(\partial_\mu'' \delta(x''-x')) dx'' = \\ &= A(x'')\delta(x-x'')\delta(x''-x') \Big|_{x''=-\infty}^{x''=+\infty} - \int \delta(x''-x')\partial_\mu'' (A(x'')\delta(x-x'')) dx'' \\ &= - \int \delta(x''-x')\partial_\mu'' (A(x'')\delta(x-x'')) dx'' = -\partial_\mu' (A(x')\delta(x-x')) \end{aligned}$$

为取得一致，必须假定：

$$\partial_\mu' (A(x')\delta(x-x')) \equiv \partial_\mu' (A(x)\delta(x-x')) = A(x)\partial_\mu' \delta(x-x') = -A(x)\partial_\mu \delta(x-x')$$

即假定：  $\partial_\mu^{(x)} (A(x)\delta(x-y)) \equiv A(y) (\partial_\mu^{(y)} \delta(x-y))$  (2.14)

### 3. 泛函导数与泛函变分计算 (II)

若设泛函形式为  $F[\varphi(\bar{x})] = \int f(\varphi(\bar{x}), \nabla \varphi(\bar{x})) d\bar{x}$ ，直接算出泛函导数与泛函变分如下：

$$\begin{aligned} \frac{\delta F[\varphi]}{\delta \varphi(\bar{y})} &= \frac{1}{\varepsilon} \int \left\{ f(\varphi(\bar{x}) + \varepsilon \delta(\bar{x}-\bar{y}), \nabla \varphi(\bar{x}) + \nabla \varepsilon \delta(\bar{x}-\bar{y})) - f(\varphi(\bar{x}), \nabla \varphi(\bar{x})) \right\} d\bar{x} \\ &= \int \left\{ \frac{\partial f}{\partial \varphi(\bar{x})} \delta(\bar{x}-\bar{y}) + \frac{\partial f}{\partial (\nabla \varphi(\bar{x}))} \cdot (\nabla \delta(\bar{x}-\bar{y})) \right\} d\bar{x} \\ &= \int \left\{ \frac{\partial f}{\partial \varphi(\bar{x})} \delta(\bar{x}-\bar{y}) + \nabla \cdot \left( \frac{\partial f}{\partial (\nabla \varphi(\bar{x}))} \delta(\bar{x}-\bar{y}) \right) - \left( \nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial (\nabla \varphi(\bar{x}))} \right) \delta(\bar{x}-\bar{y}) \right\} d\bar{x} \end{aligned}$$

于是

<sup>3</sup> 参见 *Gitman* 书, P.63 等页; 杨炳麟书, P.64; 殷鹏程书附录。



$$F[\varphi(\bar{x})] = \int f(\varphi(\bar{x}), \nabla\varphi(\bar{x})) d\bar{x} \rightarrow \boxed{\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{x})} = \left\{ \frac{\partial f}{\partial\varphi} - \nabla \left( \frac{\partial f}{\partial(\nabla\varphi)} \right) \right\}_{(\bar{x})}} \quad (2.15)$$

这就是此泛函在  $\bar{x}$  点的泛函导数。

例如  $\bar{P}(t) = -\int \sum_{\sigma} \pi_{\sigma} \nabla \varphi_{\sigma} d^3x$ , 有:

$$\boxed{\frac{\delta \bar{P}(t)}{\delta \pi_{\sigma}(\bar{x}, t)} = -\nabla \varphi_{\sigma}(\bar{x}, t), \quad \frac{\delta \bar{P}(t)}{\delta \varphi_{\sigma}(\bar{x}, t)} = -\nabla \pi_{\sigma}(\bar{x}, t)} \quad (2.16)$$

#### 4、泛函导数举例 (III)

计算泛函  $\lambda[\varphi] = \frac{\int \varphi^* H \varphi d\tau}{\int \varphi^* \varphi d\tau}$  的泛函导数。设  $\varphi$  为复标量场, 先令虚

部不变, 求实部变分在  $\bar{x}_0$  的泛函导数。则有

$$\begin{aligned} \left. \frac{\delta \lambda[\varphi]}{\delta \varphi_1(\bar{x}_0)} \right|_{\varphi_2 = \text{const}} &= \frac{\delta \lambda[\varphi]}{\varepsilon} = \frac{\int \varphi^* (H - \lambda) \varepsilon \delta(\bar{x} - \bar{x}_0) d\tau + \int [\varepsilon \delta(\bar{x} - \bar{x}_0)] (H - \lambda) \varphi d\tau}{\varepsilon \int \varphi^* \varphi d\tau} \\ &= \frac{\left\{ [(H - \lambda)\varphi]^* + (H - \lambda)\varphi \right\}_{\bar{x} = \bar{x}_0}}{\int \varphi^* \varphi d\tau} \end{aligned}$$

类似地, 若求虚部变分  $\delta\varphi_2 = \frac{\varepsilon}{i} \delta(x - x_0)$  在  $\bar{x}_0$  的泛函导数。得

$$\left. \frac{\delta \lambda[\varphi]}{\delta \varphi_2(\bar{x}_0)} \right|_{\varphi_1 = \text{const}} = \frac{-i \left\{ [(H - \lambda)\varphi]^* + (H - \lambda)\varphi \right\}_{\bar{x} = \bar{x}_0}}{\int \varphi^* \varphi d\tau} \quad (2.17)$$

#### 四、经典场论与泛函 Poisson 括号<sup>4</sup>

1, [泛函 Poisson 括号定义] 若泛函  $F, G$  只通过  $\varphi, \pi$  依赖  $t$  (即不明显依赖于  $t$ )<sup>5</sup>, 则泛函 Poisson 括号定义如下:

$$\boxed{\{F, G\}_{P.B.} = \int \left( \frac{\delta F}{\delta\varphi(\bar{x}, t)} \frac{\delta G}{\delta\pi(\bar{x}, t)} - \frac{\delta F}{\delta\pi(\bar{x}, t)} \frac{\delta G}{\delta\varphi(\bar{x}, t)} \right) d\bar{x}} \quad (2.18a)$$

<sup>4</sup> 卢里, 《粒子与场》, 第 72 页

<sup>5</sup> 当然可依赖于  $\varphi, \pi$  的空间导数

其中,  $\frac{\delta F}{\delta \varphi}$  等是  $F$  对  $\varphi$  的泛函导数 (在  $(\bar{x}, t)$  处)。对多个独立场

$\Omega = \Omega[\varphi_\sigma, \pi_\sigma]$ ,  $\Gamma = \Gamma[\varphi_\sigma, \pi_\sigma]$ , 且泛函不明显依赖  $t$ , 泛函 *Poisson* 括号定义推广如下<sup>6</sup>:

$$\left\{ \Omega, \Gamma \right\}_{P.B} = \sum_{\sigma=1}^N \int \left( \frac{\delta \Omega}{\delta \varphi_\sigma(\bar{x}, t)} \frac{\delta \Gamma}{\delta \pi_\sigma(\bar{x}, t)} - \frac{\delta \Omega}{\delta \pi_\sigma(\bar{x}, t)} \frac{\delta \Gamma}{\delta \varphi_\sigma(\bar{x}, t)} \right) d\bar{x} \quad (2.18b)$$

泛函 *Poisson* 括号定义 (2.18) 和普通 *Poisson* 括号 (无穷多自由度) 实质是相同的<sup>7</sup>。

## 2, 经典场的 *Lagrange* 框架

用 *Lagrangian* 的泛函导数  $\delta L / \delta \varphi_\sigma, \delta L / \delta \dot{\varphi}_\sigma$ <sup>8</sup> 表述经典场运动方程。

这时  $L(t) = \int \mathcal{L}(x) d^3x$ , 按泛函导数定义有

$$\delta L = \int \left\{ \frac{\delta L}{\delta \varphi_\sigma} \delta \varphi_\sigma + \frac{\delta L}{\delta \dot{\varphi}_\sigma} \delta \dot{\varphi}_\sigma \right\} d^3x \quad (2.19)$$

另一方面, 可以实际计算为

$$\begin{aligned} \delta L &= \int \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_\sigma(\bar{x}, t)} \delta \varphi_\sigma(\bar{x}, t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \varphi_\sigma(\bar{x}, t))} \delta (\partial_\mu \varphi_\sigma(\bar{x}, t)) \right\} d^3x \\ &= \int \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_\sigma} \delta \varphi_\sigma + \partial_i \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_\sigma)} \delta \varphi_\sigma \right) - \left( \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_\sigma)} \right) \delta \varphi_\sigma + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_\sigma} \delta \dot{\varphi}_\sigma \right\} d^3x \\ &= \int \left\{ \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_\sigma} - \left( \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_\sigma)} \right) \right) \delta \varphi_\sigma + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_\sigma} \delta \dot{\varphi}_\sigma \right\} d^3x \end{aligned}$$

两者相比较, 即得

<sup>6</sup> 卢里, 《粒子与场》, 第 72 页至 74 页。

<sup>7</sup> 卢里, 《粒子与场》, 第 72 页

<sup>8</sup> 本来是相对论 4 维协变形式, 出现如此非协变的泛函导数是由于 *Hamilton* 变分原理的非协变的缘故。对  $t$  的积分只限于  $(t_1, t_2)$ , 但更主要的是  $L(t)$  是个只对空间的积分, 非  $(\bar{x}, t)$  对称。

$$\begin{cases} \frac{\delta L(t)}{\delta \varphi_\sigma(\bar{x}, t)} = \frac{\partial \mathcal{L}(\bar{x}, t)}{\partial \varphi_\sigma(\bar{x}, t)} - \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}(\bar{x}, t)}{\partial (\partial_i \varphi_\sigma(\bar{x}, t))} \\ \frac{\delta L(t)}{\delta \dot{\varphi}_\sigma(\bar{x}, t)} = \frac{\partial \mathcal{L}(\bar{x}, t)}{\partial \dot{\varphi}_\sigma(\bar{x}, t)} \end{cases} \quad (2.20)$$

上面计算可推广到作用量泛函  $S[\varphi]$  的 4 维积分协变形式  $S[\varphi] = \int \mathcal{L}(\varphi, \partial_\mu \varphi) dx$ ，按 *Hamilton* 变分原理  $\delta S[\varphi_\alpha] = 0$ ，求得 *Euler-Lagrange* 方程为<sup>9</sup>

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{L}(\bar{x}, t)}{\partial \varphi_\sigma(\bar{x}, t)} - \partial_\lambda \left( \frac{\partial \mathcal{L}(\bar{x}, t)}{\partial (\partial_\lambda \varphi_\sigma(\bar{x}, t))} \right) = 0, (\alpha = 1, 2, \dots, n)} \quad (2.21)$$

### 3, 经典场的 *Hamilton* 框架, 正则方程

设 *Lagrangian* 密度  $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\varphi_\sigma, \partial_\mu \varphi_\sigma) = \mathcal{L}(\varphi_\sigma, \partial_i \varphi_\sigma, \dot{\varphi}_\sigma)$ 。接着, 引入新变数  $\pi_\sigma \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_\sigma}$ 。如果能够反解出  $\dot{\varphi}_\sigma$ <sup>10</sup>, 则可引入 (替代旧变数—广义速度场  $\dot{\varphi}_\sigma$  的) 新变数—共轭动量场  $\pi_\sigma$ , 此过程称作 *Legendre* 变换。于是有  $\mathcal{L} = \mathcal{L}[\varphi_\sigma, \partial_i \varphi_\sigma, \dot{\varphi}_\sigma(\varphi_\sigma, \partial_j \varphi_\sigma, \pi_\sigma)]$ , 而 *Hamiltonian* 密度则为,

$$\mathcal{H} = \sum_\sigma \pi_\sigma \dot{\varphi}_\sigma - \mathcal{L} = \mathcal{H}[\varphi_\sigma, \partial_i \varphi_\sigma, \pi_\sigma] \quad (2.22)$$

由于其中  $\dot{\varphi}_\sigma$  已被  $\pi_\sigma$  所替代, 故

$$\begin{aligned} \delta H &= \delta \int \mathcal{H} d\bar{x} = \int \left\{ \sum_{\mu\rho} (\dot{\varphi}_\sigma \delta \pi_\sigma + \pi_\sigma \frac{\partial \dot{\varphi}_\sigma}{\partial \varphi_\rho} \delta \varphi_\rho + \pi_\sigma \frac{\partial \dot{\varphi}_\sigma}{\partial (\partial_i \varphi_\rho)} \delta (\partial_i \varphi_\rho) + \pi_\sigma \frac{\partial \dot{\varphi}_\sigma}{\partial \pi_\rho} \delta \pi_\rho - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_\sigma} \delta \varphi_\sigma - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_\sigma)} \delta (\partial_i \varphi_\sigma) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_\sigma} \frac{\partial \dot{\varphi}_\sigma}{\partial \varphi_\rho} \delta \varphi_\rho - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_\sigma} \frac{\partial \dot{\varphi}_\sigma}{\partial (\partial_i \varphi_\rho)} \delta (\partial_i \varphi_\rho) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_\sigma} \frac{\partial \dot{\varphi}_\sigma}{\partial \pi_\rho} \delta \pi_\rho \right\} d\bar{x} \\ &= \int \left\{ \sum_\sigma \left( \dot{\varphi}_\sigma \delta \pi_\sigma - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_\sigma} \delta \varphi_\sigma - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_\sigma)} \delta (\partial_i \varphi_\sigma) \right) \right\} d\bar{x} \\ &= \int \sum_\sigma \left\{ \dot{\varphi}_\sigma \delta \pi_\sigma - \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_\sigma} - \partial_i \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_\sigma)} \right) \right] \delta \varphi_\sigma \right\} d\bar{x} \end{aligned}$$

<sup>9</sup> 参见张永德, 《高等量子力学 (上)》, 北京: 科学出版社, 2010 年, P. 94--95。

<sup>10</sup> 注意, 不一定能够反解出来。只当变换行列式 *Hessian* 不为零时才可以。见上注下册 P. 360。

但另一方面，根据泛函导数定义，有：

$$\delta H = \sum_{\sigma} \int \left( \frac{\delta H}{\delta \varphi_{\sigma}} \delta \varphi_{\sigma} + \frac{\delta H}{\delta \pi_{\sigma}} \delta \pi_{\sigma} \right) d\bar{x}$$

由以上两方面的对比可得<sup>11</sup>（ $\delta \varphi_{\sigma}, \delta \pi_{\sigma}$  任意）

$$\begin{cases} \frac{\delta H}{\delta \varphi_{\sigma}} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_{\sigma}} + \partial_i \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_{\sigma})} \right) \\ \frac{\delta H}{\delta \pi_{\sigma}} = \dot{\varphi}_{\sigma} \end{cases} \quad (2.23a)$$

根据场的 *Euler-Lagrange* 方程得知，第一式右边乃是  $-\dot{\pi}_{\sigma}$ 。于是最后得到：

$$\boxed{\dot{\varphi}_{\sigma} = \frac{\delta H}{\delta \pi_{\sigma}}, \dot{\pi}_{\sigma} = -\frac{\delta H}{\delta \varphi_{\sigma}}} \quad (2.23b)$$

这就是场方程的 *Hamiltonian* 形式。于是，由给定的 *Lagrangian* 密度  $\mathcal{L}$ ，可得 *Hamiltonian* 密度  $\mathcal{H}$ ，对空间积分即得 *Hamiltonian*，代入 (2.23b) 式得场方程。这就是 *Hamilton* 框架（如 *Lagrange* 框架，则直接由 *Lagrangian* 密度，按 *Euler-Lagrange* 方程得到场方程）。注意这里的正则方程是泛函导数（由于  $H$  是  $(\varphi_{\sigma}, \pi_{\sigma})$  的泛函）。

这时，若有一物理量<sup>12</sup>：

$$\Omega = \int \omega(\varphi_{\sigma}, \pi_{\sigma}, t) d\bar{x}$$

则  $\Omega = \Omega[\varphi_{\sigma}, \pi_{\sigma}; t]$ <sup>13</sup>。于是对  $t$  作变分  $\delta t$ ，得：

<sup>11</sup> 这时， $\frac{d\Omega}{dt}$  应理解为  $\frac{\partial \varphi_{\sigma}}{\partial t}$  和  $\frac{\partial \pi_{\sigma}}{\partial t}$ ！因为  $\bar{x}$  不移动的，它们是自由度的编号，与  $t$  无关， $t$  不通过  $\bar{x}$  影响  $\varphi_{\sigma}$ ！

<sup>12</sup> 若将  $\Omega$  看成  $\varphi_{\sigma}, \pi_{\sigma}$ ，则写成积分泛函形式时，不显含  $t$ （在  $(\varphi_{\sigma}, \pi_{\sigma})$  中），而得：

$$\dot{\varphi}_{\sigma} = \{ \varphi_{\sigma}, H \}, \dot{\pi}_{\sigma} = \{ \pi_{\sigma}, H \}。$$

<sup>13</sup>  $\Omega$  是  $\varphi, \pi$  的泛函，是  $t$  的普通函数！

$$\begin{aligned}\frac{d\Omega[\varphi_\sigma, \pi_\sigma; t]}{dt} \delta t &= \frac{\partial \Omega}{\partial t} \delta t + \sum_\sigma \int \left( \frac{\delta \Omega}{\delta \varphi_\sigma} \frac{\partial \varphi_\sigma}{\partial t} + \frac{\delta \Omega}{\delta \pi_\sigma} \frac{\partial \pi_\sigma}{\partial t} \right) d\bar{x} \\ \frac{d\Omega[\varphi_\sigma, \pi_\sigma; t]}{dt} \delta t &= \frac{\partial \Omega}{\partial t} \delta t + \sum_\sigma \int \left( \frac{\delta \Omega}{\delta \varphi_\sigma} \frac{\partial \varphi_\sigma}{\partial t} + \frac{\delta \Omega}{\delta \pi_\sigma} \frac{\partial \pi_\sigma}{\partial t} \right) \delta t d\bar{x} \Rightarrow \\ \frac{d\Omega}{dt} &= \frac{\partial \Omega}{\partial t} + \int \sum_\sigma \left( \frac{\delta \Omega}{\delta \varphi_\sigma} \frac{\delta H}{\delta \pi_\sigma} - \frac{\delta \Omega}{\delta \pi_\sigma} \frac{\delta H}{\delta \varphi_\sigma} \right) d\bar{x}\end{aligned}\quad (2.24a)$$

于是力学量 $\Omega$ 的动力学方程为

$$\boxed{\frac{d\Omega}{dt} = \frac{\partial \Omega}{\partial t} \{ \Omega, H \}_{(\varphi_\sigma, \pi_\sigma)}}^{14}\quad (2.24b)$$

这里 $\frac{\delta H}{\delta \pi_\sigma}, \frac{\delta H}{\delta \varphi_\sigma}$ 的具体含义见上页。

4, 将(2.24)式中力学量 $\Omega$ 代以 $F = \varphi_\sigma$ 或 $\pi_\sigma$ , 并由(2.24)式出发同样得出所有结果。由于

$$\varphi_\sigma(\bar{x}, t) = \int \sum_\rho \delta_{\sigma\rho} \varphi_\rho(\bar{x}', t) \delta(\bar{x} - \bar{x}') d\bar{x}'$$

根据泛函导数定义, 有:

$$\frac{\delta \varphi_\sigma(\bar{x}, t)}{\delta \varphi_\rho(\bar{x}'', t)} = \int \delta_{\sigma\rho} \delta(\bar{x}' - \bar{x}'') \delta(\bar{x} - \bar{x}') d\bar{x}' = \delta_{\sigma\rho} \delta(\bar{x} - \bar{x}'')$$

同理有 $\frac{\delta \pi_\sigma(\bar{x}, t)}{\delta \pi_\rho(\bar{x}'', t)} = \delta_{\sigma\rho} \delta(\bar{x} - \bar{x}'')$ 。于是,

$$\{ \varphi_\sigma(\bar{x}, t), H \}_{P.B} = \sum_\rho \int \frac{\delta \varphi_\sigma(\bar{x}, t)}{\delta \varphi_\rho(\bar{x}', t)} \frac{\delta H}{\delta \pi_\rho(\bar{x}', t)} d\bar{x}' = \frac{\delta H}{\delta \pi_\sigma(\bar{x}, t)}^{15}$$

同理有

$$\{ \pi_\sigma(\bar{x}, t), H \}_{P.B} = \sum_\rho \int \left( - \frac{\delta \pi_\sigma(\bar{x}, t)}{\delta \pi_\rho(\bar{x}', t)} \frac{\delta H}{\delta \varphi_\rho(\bar{x}', t)} \right) d\bar{x}' = - \frac{\delta H}{\delta \varphi_\sigma(\bar{x}, t)},$$

<sup>14</sup> 这里的 $\frac{\partial \Omega}{\partial t}$ 与 $\frac{d\Omega}{dt}$ 的差别不像经典( $\bar{x} = \bar{x}(t)$ ), 只表明 $\Omega$ 显含 $t$ 与否!

<sup>15</sup> 上面已设 $F, G$ 不显含 $t$ , 因此这里的 $H$ 也应不显含 $t$ , 即

$$H = \int \mathcal{H}(\varphi_\sigma, \partial_i \varphi_\sigma, \pi_\sigma) d^3x$$

于是，(2.24) 式  $\dot{\phi}_\sigma = \{\phi_\sigma, H\}_{P.B}$ ,  $\dot{\pi}_\sigma = \{\pi_\sigma, H\}_{P.B}$  再次给出正则方程：

$$\dot{\phi}_\sigma = \frac{\delta H}{\delta \pi_\sigma}, \quad \dot{\pi}_\sigma = -\frac{\delta H}{\delta \phi_\sigma}$$

同样，还可以得到：

$$\begin{cases} \{\phi_\sigma(\bar{x}, t), \pi_\rho(\bar{x}', t)\}_{P.B} = \delta_{\sigma\rho} \delta(\bar{x} - \bar{x}') \\ \{\phi_\sigma(\bar{x}, t), \phi_\rho(\bar{x}', t)\}_{P.B} = \{\pi_\sigma(\bar{x}, t), \pi_\rho(\bar{x}', t)\}_{P.B} = 0 \end{cases} \quad (2.25)$$

以上这些结果通常文献中作为第一次量子化的跳板。

## 五、泛函 Taylor 展开

令  $\lambda$  为一参数，可以类似于通常的 Taylor 级数展开，定义泛函的 Taylor 级数展开式：

$$F[f(x) + \lambda g(x)] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \int dx_1 \cdots dx_n \frac{\delta^n F[f(x)]}{\delta f(x_1) \cdots \delta f(x_n)} g(x_1) \cdots g(x_n) \quad (2.26)$$

特别地，令  $f(x) = 0$ ,  $\lambda = 1$ ，这相当于假定： $g(x)$  的函数值较小，直接对泛函  $F[g]$  的自变数  $g(x)$  展开：

$$F[g(x)] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dx_1 \cdots dx_n \frac{\delta^n F[g(x)]}{\delta g(x_1) \cdots \delta g(x_n)} \Big|_{g=0} g(x_1) \cdots g(x_n) \quad (2.27)$$

这一展开又称为 *Volterra 级数*。<sup>16</sup>

## 五、泛函（路径）积分定义

### 1. 路径积分定义

这时，被积函数是路径的泛函数，作为积分变数的则是路径空间函数。一般形式为

$$\int D\bar{r}(t) \cdot F[\bar{r}(t)] \quad (2.28)$$

这里对全体可能路径的求和用  $D\bar{r}(t)$  表示。

<sup>16</sup> 卢里，《粒子和场》，P.513

典型例子来自  $QM$  中时间演化问题。设初始波函数分布为  $\psi(\vec{r}_0 t_0)$ ，演化到  $t$  时刻，波函数分布为  $\psi(\vec{r} t)$ 。按照动力学演化总归是依照时序的“Step by step”的思想，将时间  $t$  分隔为  $n$  等分  $\varepsilon = t/n$ ，记相应空间变数为  $\vec{r}(m\varepsilon) = \vec{r}_m$ 。于是  $\vec{r}(t_0) = \vec{r}_0$ ， $\vec{r}(n\varepsilon) = \vec{r}_n = (\vec{r} t)$ 。在每个时刻都分别插入坐标表象完备性条件  $\int |\vec{r}_i\rangle d\vec{r}_i \langle \vec{r}_i| = I$ 。于是，演化结果可以表示为如下连乘积的形式，

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r} t) &= \int \langle \vec{r} t | T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau H(\tau)\right) | \vec{r}_0 \rangle d\vec{r}_0 \psi(\vec{r}_0 t_0) \\ &= \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ n \rightarrow \infty}} \int \int \dots \int \langle \vec{r}_n | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t) \varepsilon\right) | \vec{r}_{n-1} \rangle d\vec{r}_{n-1} \langle \vec{r}_{n-1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t-\varepsilon) \varepsilon\right) | \vec{r}_{n-2} \rangle d\vec{r}_{n-2} \langle \vec{r}_{n-2} | \dots \\ &\quad \dots | \vec{r}_1 \rangle d\vec{r}_1 \langle \vec{r}_1 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(\varepsilon) \varepsilon\right) | \vec{r}_0 \rangle d\vec{r}_0 \psi(\vec{r}_0 t_0) \end{aligned}$$

由于  $H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{r})$ ，每重积分下被积函数矩阵元可以计算出来，得<sup>17</sup>

$$\langle \vec{r}_m | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(m\varepsilon) \varepsilon\right) | \vec{r}_{m-1} \rangle = \frac{1}{A^3} \exp\left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} L\left(\frac{\vec{r}_{m+1} - \vec{r}_m}{2}, \frac{\vec{r}_{m+1} - \vec{r}_m}{\Delta t}, \frac{t_{m+1} + t_m}{2}\right) \right\}$$

这里  $\frac{1}{A} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}}$ 。于是总计成为

$$\boxed{\psi(\vec{r} t) = \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ n \rightarrow \infty}} \int \dots \int \frac{d\vec{r}_{n-1}}{A^3} \dots \frac{d\vec{r}_1}{A^3} \frac{d\vec{r}_0}{A^3} \psi(\vec{r}_0 t_0) \exp\left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{n-1} L\left(\frac{\vec{r}_{i+1} + \vec{r}_i}{2}, \frac{\vec{r}_{i+1} - \vec{r}_i}{\varepsilon}, \frac{t_{i+1} + t_i}{2}\right) \right\}}$$

(2.29a)

实际上，在极限下，这个无穷重积分下的被积指数是空间路径的泛函数。它将整条空间路径函数  $(\vec{r}_0 t_0 \rightarrow \vec{r}_1 t_1 \rightarrow \vec{r}_2 t_2 \rightarrow \dots) \Rightarrow (\vec{r} t)$  当作自变量，每给定一条空间路径函数，被积的指数泛函就有一个复数值，再依照作为积分自变数的全体可能空间路径函数求和。所以，积分实质上是

<sup>17</sup> 张永德，《高等量子力学（第2版，下册）》，北京：科学出版社，2010年。第7.1节。

个泛函积分。也可以将各重积分求和全部乘开来，立即知道，积分求和的每一项都对应一条空间路径，最终结果是对全部可能空间路径求和。由于求和对象的自变数是空间路径函数，通常将这种空间路径相关的特殊泛函积分称作路径积分。利用传播子  $U$  和作用量  $S$ ，可记为

$$\begin{cases} \psi(\vec{r}t) = \int d\vec{r}_0 \cdot U(\vec{r}t; \vec{r}_0t_0) \psi(\vec{r}_0t_0) \\ U(\vec{r}t; \vec{r}_0t_0) = \int D\vec{r}(t) \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\right\} \\ S[\vec{r}(t)] = \int dt L[\vec{r}(t), \vec{p}(t), t] \end{cases} \quad (2.29b)$$

这里  $(\vec{r}t)$  和  $(\vec{r}_0t_0)$  是时间空间的两个参考点， $\vec{r}(t)$  为连结这两个头尾时空点的一切可能路径（包括极端陡峭的所有各类折线！）。

## 2, 泛函积分定义

一般说，这时无穷重积分的自变数是某一类时空函数——（作为时空函数的）场量，而被积函数则是这类时空函数的某种泛函数。一般写为

$$\int D\varphi(\vec{r}t) \cdot F[\varphi(\vec{r}t)] \quad (2.30)$$

这里用  $D\varphi(\vec{r}t)$  表示对所有可能场量时空函数求和。当然，定义可以推广到多个场量情况，成为多重泛函积分。对于多数相互作用，被积泛函指数可能为（积分测度尚未知晓的，严格说相应的泛函积分尚未有定义的）非二次型形式。但泛函积分经常采用相对比值形式，伴有同类型泛函积分作为分母，以期消去因式化的不确定因子或发散因子。

具体事例是量子场论中 *Green* 函数生成泛函。例如，*QED* 中的旋量量子电动力学，其 *Green* 函数生成泛函就是



$$\left\{ \begin{array}{l} Z[\eta] = \frac{1}{N} \int D\psi D\bar{\psi} \prod_{\mu} DA_{\mu} \cdot \exp \left\{ i \int d^4x \mathcal{L}_{eff} \right\} \exp \left\{ i \int d^4x (\bar{\psi}\eta + \psi\bar{\eta} + J_{\mu}A_{\mu}) \right\} \\ \mathcal{L}_{eff} = -\bar{\psi}(\gamma \cdot \partial + m)\psi - \frac{1}{4}(F_{\mu\nu})^2 + ie\bar{\psi}\gamma_{\mu}\psi A_{\mu} - \frac{1}{2\zeta}(\partial_{\mu}A_{\mu})^2, \quad N = Z[0] \end{array} \right. \quad (2.31)$$

其中，任意函数  $\eta(x), \bar{\eta}(x), J_{\mu}(x)$  均是外源。这个泛函积分的自变量是（作为时空函数的）场量  $\psi(x), \bar{\psi}(x), A_{\mu}(x)$ 。被积泛函指数中  $-\frac{1}{2\zeta}(\partial_{\mu}A_{\mu})^2$  项物理上来自规范约束条件  $\partial_{\mu}A_{\mu} = 0$ ，数学上来自该规范条件的 *Fresnel* 型泛函  $\delta$  函数表示（见下讲）。被积泛函指数是个二次型形式。这个泛函积分是可积的。

有关泛函积分的进一步众多性质见下讲。