

[高等量子理论专题系列讲座]

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、泛函数的概念与定义

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

※

※

※

数学量之间的一般关系称作“映射 (Map)”。区分为 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。

本讲叙述其中第二条：泛函数及其相关的问题。

一、泛函数的概念与定义

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，作为泛函因变量的是实(复)数值，自变量则是(某一类)函数。

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 $F[\varphi(\bar{x})]$ 特征是它不仅和函数 $\varphi(\bar{x})$ 在任一特定点值有关，更重要地是依赖于 $\varphi(\bar{x})$ 在整个定义域的值，即依赖于 $\varphi(\bar{x})$ 的整个形状。因此，作为泛函数 $F[\varphi(\bar{x})]$ 自变量的函数 $\varphi(\bar{x})$ 中的自变数 \bar{x} 其实只是个傀标，于是常有记号变动 $F[\varphi(\bar{x})] = F[\varphi(\bar{y})] = F[\varphi]$ ，比如，对给定积分核 $K(\bar{x})$ ，

$$F[\varphi(\bar{x})] \equiv \int_a^b K(\bar{x})\varphi(\bar{x})d\bar{x} = \int_a^b K(\bar{y})\varphi(\bar{y})d\bar{y} \equiv F[\varphi(\bar{y})] \equiv F[\varphi]$$

泛函数的概念广泛存在于自然界。比如，定积分是被积函数的泛函数；旅游费用是旅游路线的泛函数；系统的作用量是系统场量(及其导数)的泛函数，

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

向给定态 $\langle A|$ 的投影概率幅就是状态波函数 $\varphi(\bar{x})$ 的泛函数，

$$F_A[\varphi(\bar{x})] = \langle A|\varphi(\bar{x}) \rangle;$$

还比如，某个给定空间点的电势是电荷空间分布的泛函数，

$$\Delta V(\bar{x}) = -4\pi\rho(\bar{x}) \rightarrow V(\bar{x}_0) = V_{\bar{x}_0}[\rho(\bar{x})] = \left. \frac{-4\pi}{\Delta} \rho(\bar{x}) \right|_{\bar{x}=\bar{x}_0}$$

特殊情况， $\delta(x-y)$ 也可以看作（线性）泛函数：对于固定的 y 值，它将任意给定的（一类）函数 $\psi(x)$ （线性地）映射到数值 $\psi(y) \equiv \psi_y$ ，

$$\psi_y \equiv \int \delta(x-y)\psi(x)dx : \psi(x) \rightarrow \psi_y$$

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¹：

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

注意，这里特殊变分中所含无穷小量 ε 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 ε 的一阶项，可以略去含 ε 二阶及以上的项。于是，展开式一阶项所含 ε 和分母的 ε 相消。** 只要注意展开式只取到一阶项，也可以略写 ε ，直接令 $\delta\varphi(\bar{x}) = \delta(\bar{x} - \bar{y})$ ，定义中也

¹ 杨炳麟，量子场论导引(下册)，北京：科学出版社，1988。第 64 页。

不要除以 ε 并取极限。显然， $\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(\bar{y})}$ 度量泛函数 $F[\varphi(\bar{x})]$ 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 ε 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：

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

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。设定泛函变分 (2.3) 式对任意参考点 \bar{y} 有特殊变分 $\delta\varphi(\bar{y}) = \varepsilon\delta(\bar{x} - \bar{y})$ ，即可得到该点 \bar{y} 的泛函导数 (2.2) 式。同时，也可以由 (2.2) 式也能导出 (2.3) 式。从 (2.2) 式左边出发，乘以 $\delta\varphi(\bar{y})$ ，对 \bar{y} 积分可得

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

其实，此式右边就是 (2.3) 式的左边。因为有

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

证毕。

还可以如下看待泛函导数：设 *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，如用分立记号 ($\varphi_i(t) \equiv \varphi(\bar{x}_i, t)$) 则有²：

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

显然(2.4a)式是(2.4b)式的连续极限，注意不同点变分互相独立，即得：

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

这里需要除以 δV_i ，因为泛函导数在乘以 $\delta\varphi$ 后还要乘以 $d\bar{x}$ 作积分，才

得到变分 δL 。其中 \bar{x} 位于第 i 个小盒中。由(2.5)式得知，实质上，

泛函导数 $\frac{\delta L}{\delta\varphi(\bar{x}, t)}$ 正比于在点 (\bar{x}, t) 处 $L(t)$ 对函数 $\varphi(\bar{x}, t)$ 的偏导数。

这个含意在下面(2.9)—(2.15)式中有更清楚更多样地表现。

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：

² D.卢里，粒子与场，北京：科学出版社，1981年。第61页。

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

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,

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

结合起来, 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

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

$$\begin{aligned}
\text{证明 iv: } & \int \frac{\delta F}{\delta \varphi(x)} \delta \varphi(x) dx = \int \frac{\delta F}{\delta \eta(x')} \delta \eta(x') dx' = \iint \frac{\delta F}{\delta \eta(x')} \frac{\delta \eta(x')}{\delta \varphi(x)} \delta \varphi(x) dx dx' \\
& \Rightarrow \frac{\delta F[\eta[\varphi]]}{\delta \varphi(x)} = \int \frac{\delta F[\varphi]}{\delta \eta(x')} \frac{\delta \eta(x')}{\delta \varphi(x)} dx'
\end{aligned}$$

这里，泛函变分 $\delta\eta(x')$ 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 ，此式就是函数 $\varphi_\sigma(x'')$

的积分泛函，按泛函导数定义得：

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

类似，泛函 $\partial_\mu\varphi_\sigma(x) = \sum_\rho \int \delta_{\sigma\rho}\partial_\mu\varphi_\rho(x'')\delta(x''-x)d^4x''$ ，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³

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

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

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

$$\boxed{G[\varphi(x)] = \int g(\nabla\varphi(x))dx \Rightarrow \frac{\delta G}{\delta\varphi}(x) = -\nabla \frac{\partial g}{\partial\nabla\varphi}(x)} \quad (2.10)$$

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

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

³ 下面各公式的具体应用见上面卢里书，第 92 页。

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

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

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

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

于是, 总前所述, 可得如下两个一般公式:

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

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

注意, 对第二种情况, 即函数结构情况, 可以有如下计算:

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

如果换个角度理解上面结果, 就必须假定可以作如下计算:

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

换句话说, **涉及 δ 函数求导计算时, 为了全部计算自洽, 需要设定:**

$$\boxed{\begin{cases} \delta(x - y) = \delta(y - x), \partial_\mu^{(x)} \delta(x - y) = -\partial_\mu^{(y)} \delta(x - y) \\ \partial_\mu^{(x)} (A(x) \delta(x - y)) \equiv A(y) (\partial_\mu^{(x)} \delta(x - y)) \end{cases}} \quad (2.14)$$

就是说, **除了 δ 函数是偶性, 一阶导数是奇性这两条之外, 与 $\delta(x - y)$**

相乘的函数 $A(x)$ ，对乘积求导时不能出现对 $A(x)$ 的偏导数。数学上这等于提示，**左边与 $\delta(x-y)$ 相乘的 $A(x)$ 已经没有邻域可用于对它求导数。**

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：

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

于是有

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

这就是此泛函数在 \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 $\lambda[\varphi] = \frac{\int \varphi^* H \varphi dv}{\int \varphi^* \varphi dv}$ 的泛函导数。设 $\varphi(\bar{x}) = \varphi_1(\bar{x}) + i\varphi_2(\bar{x})$ 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

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

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

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

四、经典场论与泛函 Poisson 括号⁴

1, [泛函 Poisson 括号定义] 若泛函 F, G 只通过 φ, π 依赖 t (即不明显依赖于 t)，则泛函 Poisson 括号定义如下：

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

其中， $\frac{\delta F}{\delta\varphi}$ 等是 F 对 φ 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：

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

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。

2, 经典场的 Lagrange 框架⁵

用 Lagrangian 的泛函导数 $\delta L/\delta\varphi_\sigma, \delta L/\delta\dot{\varphi}_\sigma$ ⁶ 表述经典场运动方

⁴ D. 卢里, 粒子与场, 北京: 科学出版社, 1981 年。第 72--74 页。

⁵ 也见 D.M.Gitman, et al., 《Quantization of Fields with Constraints》, Springer-Verlag, 1990, §2.7。

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，可以实际计算此泛函变分，

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

两者相比较，即得

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

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⁷

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

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 $\dot{\varphi}_\sigma$ ⁸，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 π_σ ，此过程称作 *Legendre 变换*。

⁶本来是相对论 4 维协变形式，出现非协变的泛函导数是由于 *Hamiltonian* 为非协变的形式。

不但对 t 的积分为有限 (t_1, t_2) ，而且更主要的是 $L(t)$ 只对空间而非 4 维不变积分。

⁷ 见张永德，高等量子力学（上），北京：科学出版社。2010 年。第 94—95 页。

⁸ 注意，不一定能够反解出来。只当变换行列式 *Hessian* 不为零才可以。见上注下册 P. 360。

于是有 $\mathcal{L} = \mathcal{L}[\varphi_\sigma, \partial_i \varphi_\sigma, \dot{\varphi}_\sigma(\varphi_\rho, \partial_j \varphi_\rho, \pi_\rho)]$, 而 *Hamiltonian* 密度 \mathcal{H} 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 π_σ 所替代, 故

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

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⁹ ($\delta \varphi_\sigma, \delta \pi_\sigma$ 任意)

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

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:

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

⁹ 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 φ_σ !

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，由于 H 是 $(\varphi_\sigma, \pi_\sigma)$ 的泛函，这里的正则方程是泛函导数。

这时，若有一物理量¹⁰：

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

则 $\Omega = \Omega[\varphi_\sigma, \pi_\sigma; t]$ ¹¹。于是对 t 作变分 δt ，得：

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

于是力学量 Ω 的动力学方程为

$$\boxed{\frac{d\Omega}{dt} = \frac{\partial \Omega}{\partial t} + \{\Omega, H\}_{(\varphi_\sigma, \pi_\sigma)}}^{12} \quad (2.24b)$$

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 Ω 代以 $F = \varphi_\sigma$ 或 π_σ ，并由 (2.24) 式出发同样得出所有结果。由于

¹⁰ 若将 Ω 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：

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

¹¹ Ω 是 φ, π 的泛函，是 t 的普通函数！

¹² 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 Ω 显含 t 与否！

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

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，

$$\{\varphi_\sigma(\bar{x}, t), H\}_{P.B.} = \sum_\rho \int \frac{\delta\varphi_\sigma(\bar{x}, t)}{\delta\varphi_\rho(\bar{x}', t)} \frac{\delta H}{\delta\pi_\rho(\bar{x}', t)} d\bar{x}' = \frac{\delta H}{\delta\pi_\rho(\bar{x}, t)} \quad 13$$

同理有

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

于是，(2.24) 式 $\dot{\varphi}_\sigma = \{\varphi_\sigma, H\}_{P.B.}$ ， $\dot{\pi}_\sigma = \{\pi_\sigma, H\}_{P.B.}$ 再次给出场正则方程：

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

同样，还可以得到：

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

通常，文献中将以上这些结果作为第一次量子化的跳板。

五、泛函 Taylor 展开

令 λ 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¹⁴：

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

¹³ 上面已设 F, G 不显含 t 了，因此这里的 H 也应不显含 t ，即

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

¹⁴ 杨炳麟，量子场论导引(下)，北京：科学出版社，1988。第 65 页。D. 卢里书，第 513 页。

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*。

五、泛函（路径）积分定义

1、路径积分定义

这时，积分自变数是空间中（作为空间函数的）一条条路径，被积函数则是路径的泛函数。一般形式为

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

对全体可能路径的求和用 $D\bar{r}(t)$ 表示。

典型例子来自 *QM* 中时间演化问题。设初始波函数分布为 $\psi(\bar{r}_0 t_0)$ ，从 t_0 到 t 时刻，波函数分布演化成为 $\psi(\bar{r}t)$ 。注意，**动力学演化总是依照时序的“Step by step”的行为**。于是可将时间 t 分隔为 n 等分 $\varepsilon = t/n$ ，记相应时刻的空间变数为 $\bar{r}(m\varepsilon) = \bar{r}_m$ ， $\bar{r}(t_0) = \bar{r}_0$ ， $\bar{r}(n\varepsilon) = \bar{r}_n = (\bar{r}t)$ 。在每个时刻，分别插入坐标表象完备性条件 $\int |\bar{r}_i\rangle d\bar{r}_i \langle \bar{r}_i| = I$ 。于是，演化过程及结果可以表示为如下连乘积形式，

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

代入 $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ ，每重积分下被积函数矩阵元可以算出来，得¹⁵

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

$$\frac{1}{A} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}}$$

于是总计成为

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

(2.29a)

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（空间函数），被积泛函指数求和就有一个复数，再依照（作为积分自变数的）全体可能空间路径求和。所以，积分实质上是个泛函积分。或者，将全部各重积分求和乘开立即知道，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再求和。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

$$\begin{cases} \psi(\vec{r}t) = \int d\vec{r}_0 U(\vec{r}t; \vec{r}_0 t_0) \psi(\vec{r}_0 t_0) \\ U(\vec{r}t; \vec{r}_0 t_0) = \int D\vec{r}(t) \exp\{iS/\hbar\} \\ S[\vec{r}(t)] = \int dt L[\vec{r}(t), \vec{p}(t), t] \end{cases} \quad (2.29b)$$

$(\vec{r}t)$ 和 $(\vec{r}_0 t_0)$ 分别是系统时空演化时头尾两个参考点， $\vec{r}(t)$ 为连结两个时空点的一切可能的路径（包括极端陡峭的所有各类折线！）。

2. 泛函积分定义¹⁶

¹⁵ 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。

这时，无穷重积分的积分自变数是有关场的场量——时空函数，

而被积函数则是这些场量的某种泛函数。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（作为时空函数的）场量求和。当然，定义可以推广到多个场量情况，成为多重泛函数积分。对于多数相互作用，被积泛函数的指数可能为非二次型形式（这时积分测度尚未知晓，严格说相应泛函数积分未有定义）。但泛函数积分经常采用相对比值形式，伴有同类型泛函数积分作为分母，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，旋量量子电动力学的 *Green* 函数生成泛函，

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

其中，任意函数 $\eta(x), \bar{\eta}(x), J_{\mu}(x)$ 都是工具性的外源函数。这个泛函数积分的自变量是（作为时空函数的）场量 $\psi(x), \bar{\psi}(x), A_{\mu}(x)$ 。被积泛函数指数中的 $-\frac{1}{2\zeta}(\partial_{\mu}A_{\mu})^2$ 项，物理上源自规范约束条件 $\partial_{\mu}A_{\mu} = 0$ ，来自该条件的 *Fresnel* 型泛函数 δ 函数表示（见下讲）。这里，被积泛函数是个二次型形式，此泛函数积分是可积的。

有关泛函数积分的进一步众多性质见下讲。

¹⁶ 见脚注 14 杨炳麟书。