経路積分の方法

あけみ@homuotaku

2023 年 3 月 20 日

経路積分についてまとめる。主に [1] と [2] に拠っている。参考資料や私の気分によって、このノートでもノーテーションのブレがあるかもしれない。

目次

1 Feynman の考え

2 重スリット実験の帰結では、電子銃から放たれ、2 つのスリットを通った粒子のスクリーン上での状態は、確率密度の重ね合わせで実現する。そのスリットを 3 重にしたら、あるいはスリットをもう 1 枚増やしたらどうなるかというと、スクリーンに到達した電子の状態は、これもまたそれらの重ね合わせで表される。ではスリットの穴と枚数をどんどん増やしていき、ついに全面が穴となり、また電子銃とスクリーンの間に隙間なくそのスリットが敷き詰められた場合を考える。結局のところ、電子銃とスクリーンの間に何も無いのと同じなのだが、前述の議論を参考にすれば「あらゆる可能な経路を通る重ね合わせ」でスクリーン上の状態が実現するといえる。言い換えれば、始状態と終状態の間の遷移確率振幅は、その 2 つを結ぶすべての経路の重ね合わせで与えられる、ということになる。

2 量子力学において

はじめにハミルトニアン H は時間並進の生成子であり、$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}tH\right)$ は t だけ時間をシフトするユニタリ演算子であることを確認する。

時間並進の演算子 $U(t, t_0)$ として、状態 $|\psi(t_0)\rangle$ から $|\psi(t)\rangle$ に時間発展させることは以下のように書ける。

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)\, |\psi(t_0)\rangle \tag{2.1}$$

この演算子は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0), \quad U(t_0, t_0) = I \tag{2.2}$$

$$U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0), \quad (t_2 > t_1 > t_0) \tag{2.3}$$

を満たす。これを示すために、Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \tag{2.4}$$

を考える。(2.1) を代入すれば

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = H(t)U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle \tag{2.5}$$

ここで $|\psi(t_0)\rangle$ は任意なので、例えば位置表示で $|\psi(t_0)\rangle = |q\rangle$ をし、さらに両辺 $\langle q|$ をかけて積分することで完全性によって (2.2) が成立する。次にハミルトニアンが時間に依存しないとき

$$U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H\right) \tag{2.6}$$

と書けることを示す。時間を N 等分することを考え、(2.2) の時間微分について無限小の $\Delta t = (t-t_0)/N$ を用いて書き直す。

$$i\hbar\frac{U(t+\Delta t,t) - U(t,t)}{\Delta t} = H(t)U(t,t) \tag{2.7}$$

$U(t,t) = I$ なので

$$U(t+\Delta t,t) = I - \frac{i}{\hbar}\Delta t H(t) \tag{2.8}$$

さらに $t_j = t_{j-1} + \Delta t (j = 1, 2 \cdots, N)$ と書けば

$$U(t_j,t_{j-1}) = I - \frac{i}{\hbar}\Delta t H(t_j) \tag{2.9}$$

これと (2.3) を繰り返し用いれば、

$$U(t,t_0) = \lim_{N\to\infty} U(t,t_{N-1})\cdots U(t_1,t_0) = \lim_{N\to\infty}\left(I - \frac{i}{\hbar}\Delta t H(t)\right)\cdots\left(I - \frac{i}{\hbar}\Delta t H(t_1)\right) \tag{2.10}$$

と書ける。なお、$t_N = t$ である。いまハミルトニアンは時間依存しない状況を考えているので $H(t) = H$ と書いて、$\Delta t = (t-t_0)/N$ と表示すれば

$$U(t,t_0) = \lim_{N\to\infty}\left(I - \frac{i}{\hbar}\frac{t-t_0}{N}H\right)^N = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H\right) \tag{2.11}$$

と書ける。

2.1 Feynman 核

ここでは **Feynman** 核について議論する。Feynman 核は

$$K(q_F,t_F;q_I,t_I) = \langle q_F,t_F|q_I,t_I\rangle = \langle q_F|e^{-\frac{i}{\hbar}(t_F-t_I)H}|q_I\rangle \tag{2.12}$$

で与えられ、経路積分において基本となるものである。これは時刻 t_I、位置 q_I の粒子が時刻 t_F で位置 q_F に見出される確率振幅に対応する。Feynman 核を用いて波動関数表示について

$$\psi(q_F,t_F) = \int dq_I K(q_F,t_F;q_I,t_I)\psi(q_I,t_I) \tag{2.13}$$

と書ける。これは状態を位置表示で

$$|\psi\rangle = \int dq_I\,|q_I\rangle\langle q_I|\psi\rangle \tag{2.14}$$

と書けることから両辺 $\langle q_F|$ をかけて

$$\langle q_F|\psi\rangle = \int dq_I \langle q_F|q_I\rangle \langle q_I|\psi\rangle \Rightarrow \psi(q_F) = \int dq_I \langle q_F|q_I\rangle \psi(q_I) \tag{2.15}$$

とできるためである。また位置表示の基底ベクトルは正規直交なので (2.12) の初期条件として

$$K(q_F,t_F;q_I,t_I)|_{t_F=t_I} = \delta(q_F-q_I) \tag{2.16}$$

が得られる。さらに (2.12) に状態の完全性を挿入すれば

$$K(q_F,t_F;q_I,t_I) = \int dq' \langle q_F,t_F|q',t'\rangle \langle q',t'|q_I,t_I\rangle = \int dq' K(q_F,t_F;q',t')K(q',t';q_I,t_I) \tag{2.17}$$

を満たすことがわかる。あるいは正規直交化されたエネルギー固有関数系 $\{\varphi_n(q)\}$ を用いれば

$$\begin{aligned}
K(q_F,t_F;q_I,t_I) &= \langle q_F|e^{-\frac{i}{\hbar}(t_F-t_IH)}|q_I\rangle && (2.18)\\
&= \sum_n \langle q_F|\, e^{-\frac{i}{\hbar}(t_F-t_I)H}\, |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|q_I\rangle && (2.19)\\
&= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}(t_F-t_I)E_n} \langle q_F|\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|q_I\rangle && (2.20)\\
&= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}(t_F-t_I)E_n} \varphi_n(q_F)\varphi_n^*(q_I) && (2.21)
\end{aligned}$$

と Feynman 核を表すことができる。

2.2　経路積分表示

さて、この Feynman 核を用いて、1 で述べた「あるゆる可能な経路を通る重ね合わせ」という考えが実現されていることを見る。今考えている時間間隔を N 等分して、各時刻を

$$t_n = t_I + n\Delta t, \quad \Delta t = \frac{t_F-t_I}{N} \tag{2.22}$$

と表示する。$(n=0,1,\cdots N)$ 当然 $t_0=t_I, t_N=t_F$ である。次に、Feynman 核に、各時刻 $t_1,t_2,\cdots,t_{N-1}$ における完全系

$$\int dq_n |q_n,t_n\rangle \langle q_n,t_n| = I \tag{2.23}$$

を順次挿入して、以下のように変形する。

$$\begin{aligned}
K(q_F,t_F;q_I,t_I) =& \langle q_F,t_F|q_I,t_I\rangle && (2.24)\\
=& \langle q_F,t_F| \left(\int dq_{N-1} |q_{N-1},t_{N-1}\rangle \langle q_{N-1},t_{N-1}|\right) && (2.25)\\
& \times \left(\int dq_{N-2} |q_{N-2},t_{N-2}\rangle \langle q_{N-2},t_{N-2}|\right) \cdots && (2.26)\\
& \times kakko \int dq_1 |q_1,t_1\rangle \langle q_1,t_1|\, |q_I,t_I\rangle && (2.27)\\
=& \int dq_1 dq_{N-1} \langle q_F,t_F|q_{N-1},t_{N-1}\rangle \langle q_{N-1},t_{N-1}|q_{N-2},t_{N-2}\rangle && (2.28)\\
& \times \langle q_n,t_n|q_{n-1},t_{n-1}\rangle \cdots \langle q_2,t_2|q_1,t_1\rangle \langle q_1,t_1|q_I,t_I\rangle && (2.29)
\end{aligned}$$

この式において、$\langle q_n,t_n|q_{n-1},t_{n-1}\rangle$ は時刻 t_{n-1} で位置 q_{n-1} にいた粒子が時刻 $t_n=t_{n-1}+\Delta t$ で位置 q_n に見出される遷移確率振幅である。よって、一番右から見て行けば、$(q_I,t_I)\to(q_1,t_1)\to\cdots\to(q_{N-1},t_{N-1})\to(q_F,t_F)$

と辿ったときの振幅に対応する。さらに、始状態と終状態は固定されており、中間状態 $n = 1, 2, \cdots N - 1$ の部分はすべて積分されているので、これがすべての可能な経路を足し合わせることを表している。これではじめに述べた考えが実現されていることとなる。

参考文献

[1] 柏太郎, 新板 演習場の量子論, サイエンス社 [2009]

[2] 坂本眞人, 場の量子論 (II), 裳華房 [2021(第 2 版)]