

FEYNMAN の経路積分

KENZOU

2014年8月4日～2015年1月23日

ファインマンが経路積分を発見した経緯については、彼のノーベル賞記念講演で詳しく述べられていますが、幸いにも江沢洋訳・R.P. ファインマン著「物理法則はいかにして発見されたか」(ダイヤモンド社, S52)にその全訳が載っています。

このレポートは、ファインマンが経路積分のアイデアに到達するまでの経緯や、ディラックの論文「量子力学におけるラグランジアン」に触発されて経路積分のアイデアを結実させたという歴史的な流れを、前出の本の内容に沿って自分なりにまとめたもので、最後に経路積分の具体的な応用例として自由粒子と調和振動子の問題を取りあつかいました。

構成は対話形式とし、全3話にまとめました。特に冗長な表現を厭わず、気楽に読めて、なによりもわかりやすさを心掛けたつもりです。もとより怪しい議論や当方の理解不足による間違いなどがあるかもしれません。もし、それらを見つけられれば、ご教示いただくとありがたいです。それでは、お楽しみください。

2014.8.4

最初は軽い読み物として終わるつもりでしたが、その後、次第に嵌まって話が膨らみはじめ、第4話、第5話、第6話と膨張しています。果たして第何話まで続くのか。。。いまのところ分かりません。

おかしなところは注告なく随時修正しています。

目次

第 1 話	古典電磁気学への果敢な挑戦	4
1.1	事の始まり	4
1.2	半先進・半遅延ポテンシャル理論	5
1.3	最小作用の原理	8
第 2 話	量子論への移行	12
2.1	量子化への苦闘	12
2.2	ナッソー酒場にて	12
2.3	ディラック論文に啓発され 経路積分の発見へ	13
第 3 話	ファインマン核を求める	22
3.1	1次元自由粒子	22
3.2	波動関数	28
3.3	調和振動子	30
第 4 話	フーリエ展開	33
4.1	2次形式のラグランジアン	33
4.2	フーリエ級数展開	35
4.2.1	1次元調和振動子のファインマン核	35
4.2.2	一定の外力を受けて運動している粒子のファインマン核	37
第 5 話	量子力学における摂動論	39
5.1	続いて起こる事象	39
5.2	ポテンシャルによる粒子の散乱	40
5.2.1	ラザフォード散乱	49
第 6 話	ファインマン核の性質	50
6.1	ファインマン核の重要な性質	50
6.2	ファインマン核を固有関数で展開	53
6.2.1	自由粒子	54
6.2.2	調和振動子	55
6.3	運動量表示 (p -表示) でのファインマン核	57

第 7 話 WKB 近似 (1)	59
7.1 ハミルトン・ヤコビの方程式	59
7.2 ハミルトン・ヤコビ方程式と幾何光学	60
7.3 アイコナル近似	62
7.4 古典流体の運動方程式	65
第 8 話 WKB 近似 (2)	67
8.1 WKB 近似 (準古典近似)	67
8.2 WKB の接続公式	71

第1話 古典電磁気学への果敢な挑戦

ファインマンがどのようにして経路積分の着想に至ったか、そのことについてはノーベル賞受賞講演¹で詳しく触れられている。幸い、R.P. ファインマン著、江沢洋訳「物理法則はいかにして発見されたか」(昭和52年、ダイヤモンド社)に受賞講演の邦訳記事が載っているので、それに沿って話を進めていこうと思います。

1.1 事の始まり

- K氏：ファインマンが物理学の勉強にいそんでいた学部学生の頃、ディラックやハイトラの本から、電気と磁気の量子力学が完全には満足のいく状態にないことを“悟り”，電磁力学の量子論には2つの根源的な困難があるらしいことを察したんだね。その2つというのは

1. 電子が自分自身と相互作用するエネルギーが無限大になること。
2. 場というものが無限にたくさんの自由度をもつことに関係した無限大。

若きファインマンは、なんだ、この困難は単純なものじゃないか！と考えた。電気力はそれを作り出す粒子そのものに作用するという考えは必要ない、というか、むしろ馬鹿げた考えだ。電子は自分自身には作用せず、他の電子に作用するだけだと考えれば、「場」というものを考える必要がない。一つの電荷をゆり動かすと、少し間をおいてから別の電荷が揺れる。それだけのことで、遅れがあるにしても、電荷が直接に作用しあい、一つの電荷の運動に関係づける力の法則が遅れを含んでいるまでのことじゃないか。。

このように考えると、電子に自身への作用はなく、他の電子への作用があるだけとするので、「自己エネルギー」というものは無い！ また「場」を考えない²ので場の自由度による無限大もない。仮に場が存在するとしても、場はそれを生み出す物質によって完全に規定されてしまうから、独立な自由度をもつことはない、つまり、自由度にかかわる無限大は除かれるじゃないか。。という考えにとり憑かれた。

ファインマンは、この考えにもとづいて、まず古典論における自己エネルギーの無限大を取り除き、そのあとで量子論に移行していけばすべてうまくいくだろう—「ここに希望があると思ったのです。」と述べているが、これがそもそも事の始まりだった。

- コニー：自論を果敢に展開していく姿は、ファインマンの面目躍如たるものね。

¹原文は http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1965/feynman-lecture.html に掲載。

²場を通して作用が伝搬するという近接作用の考えではなく、遠隔作用ということになります。

- K氏：進(ほとばし)りである若いエネルギーはすごいものがある。さて、大学院に進み、いろいろ計算していく中で、電子は自分自身に作用しないというアイデアは完全な間違いだったことに気付いた。どういうことかということ、電子を加速すると輻射をだす(電磁波の放射)よね。外部の力によって加速された電子は、輻射をだした分、力学的エネルギーは減少する。これは電子の運動にブレーキをかけるというか、減衰力として働くんだね。いわゆる輻射抵抗というやつだ。ただ、古典電磁気学が扱う巨視的な物体に対しては、輻射抵抗は完全に無視できるほど小さいので問題にならなかった。

この減衰力は、エネルギー保存則を考慮すれば、電子の自身への作用する力(自己力)から生じることが分かる。したがって、ファインマンの最初のアイデアのように、電子が自身には作用しない、としたらこの力は消失してしまい、エネルギー保存則が破られることになる。

しかし、彼は自分のアイデアを捨てなかった。量子電磁力学の困難の解決は、当初考えたアイデアの中に見いだされる筈だという信念にもとづいて、なんとかそのアイデアを生かそうと奮闘するわけだ。

ここで少し数式を使った説明をしよう。数式の方は適当に眺めているだけでいいとして、1次元 x 軸方向に半径 a の剛体球である電子が加速度運動しているとすると、電子自身に働く力 F は

$$F_{ret} = \alpha \frac{e^2}{ac^2} \ddot{x} - \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \dddot{x} + \gamma \frac{e^2 a}{c^4} \dots + \dots \quad (1.1.1)$$

で与えられる。ここで α, γ は1の程度の係数、 c は光速で、 \ddot{x} は加速度だ。余談になるが、昔、学生時代、力学の講義の時に加速度の時間微分である \ddot{x} は何を意味しますか? と質問したことがある。すると先生は、「それは車の乗り心地みたいなものや」と言われ、妙に納得した記憶がある。

それはともかく、(1.1.1)の右辺に注目すると、電子の半径 a をゼロにすると、第2項は一定に止まり、第3項以降の高次の項はゼロになるが、第1項は”点”電子が自分自身に作用する力で無限大になってしまう。電子は半径 a の剛体球と仮定したが、剛体球という概念はローレンツ変換に対して共变的でなく、相対性理論とは相容れない概念なので、相対論的に共変な方程式に拡張することができない。しかし、 $a \rightarrow 0$ とすると、無限大の発散が生じてしまう。これが自己エネルギーの無限大という問題なんだ。

- コニー：なるほど。

1.2 半先進・半遅延ポテンシャル理論

- K氏：この困難を避けるべく、ディラックは、電子は(1.1.1)の第2項によって自身と作用するが、第1項によっては作用しないということを承認しようと考えた。どういうことかということ、通常マクスウェル方程式の解として遅延波の解だけをとっているが、先進波の解($t \rightarrow -t$ と置きかえる)をとると電子自身に働く力 F は

$$F_{adv} = \alpha \frac{e^2}{ac^2} \ddot{x} + \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \dddot{x} + \gamma \frac{e^2 a}{c^4} \dots + \dots \quad (1.2.1)$$

となる。そこで、電子は自身が作る遅延場と先進場との差の半分だけ自身と作用するという法則を作ろうと考えた。ディラックの処方箋に従うと

$$F = \frac{1}{2}(F_{ret} - F_{adv}) = -\frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \ddot{x} + (\text{高次の項}) \quad (1.2.2)$$

となる。高次の項は a の冪として現れるので $a \rightarrow 0$ とすれば消える。これで無限大の困難が取り除かれ、上手くいったと思われるが、 F に関する任意的な仮定が付け加わっている。スッキリ解決できたとはいいい難い。

ファインマンとその師ホイーラー³は、“電子は他の電子にだけ作用する”という考えにもとづいて、ディラックの特別な仮定の任意さのある程度取り除くのに成功した。

ノーベル賞講演の記事によれば、ファインマンは、最初、次のように考えた。第一の電荷を作用の源(ソース)としよう。これをゆり動かすとそれで第二の電荷がゆれ動く。ところで第二の電荷がゆれ動けば、それは源に作用を返すことになる。これが結局は輻射抵抗になるのではないかと期待した。しかし、計算してみるとその期待は外れる。しかし、外れはしたものの、そのアイデアを師のホイーラー教授に話すと、ホイーラー教授から「大変な見落としをしているよ。第一の電荷を加速すると、第二の電荷が反応を示すのはしばらく経ってからだ。それから源まで作用が返ってくるのにまた時間がかかる。反作用はまちがった時刻に起こるのだね。」との指摘を受け、その時、ファインマンは「私が計算をしたのは、つまり普通の光の反射じゃないか。輻射の反作用ではない。」ということにハッ!と気が付いたと述べている。

ホイーラー教授は、反作用が正しい時刻にくるようにするため、先進波を利用するアイデアをだし、そのアイデアを2人でざっと当たってみたところ、他の電荷の電気量や質量に依存せず、また、電荷間の距離にも依存しない、輻射抵抗を表すのにぴったりの性質がでてくることが分かった。そこで、定量的に詰めていくために、先進波とどれだけの遅延波が必要となるかなど、きちんと計算して正しい答えを見いだすことがファインマンの宿題となった。その結果、ファインマンは、個々の電荷が作り出す場としての先進波と遅延波を半々に用いると正しい答えが得られることを見いだしたんだ。つまり、基本の場が時間的に対称な解

$$F = \frac{1}{2}(F_{ret} + F_{adv}) \quad (1.2.3)$$

で与えられるとするわけだね。因果律に反する先進波は意味がないと捨てられるのが普通だが、このあたりに独創的な着想が窺われるね。

- コニー：う～ん、マクスウェル方程式の解は、原因は結果に先行しないという因果律の考えから遅延波の解を採用するけど、マクスウェルの方程式は時間反転に関して対称なので、 t を $-t$ に置き換えた先進波も解なのね。 t を前向き(未来)の時間とすると、 $-t$ は後ろ向き(過去)の時間ということで、相互作用は時間の前向きにも後ろ向きにも働くということ？

³Joh Archibald Wheeler, 1911.7.9 ~ 2008.4.13: 米国の物理学者。ニールス・ボーアの直弟子で、アインシュタインの共同研究者として統一場理論の構築に取り組む。ブラックホールやワームホールなどの名付け親で、相対性理論や量子重力理論など幅広い分野で成果を上げ、宇宙の波動関数を記述するホイーラー・ドウィット方程式は、量子重力研究の先駆的成果の一つとされる。ファインマンをはじめ、重力とブラックホールの理論で著名なカリフォルニア工科大学のソーン(Kip Thorne)、量子コンピューター理論を提唱した英オックスフォード大学のドイツ(David Deutsch)ら傑出した物理学者を数多く育てた名伯楽として知られた。

- K氏：そうだね，遅延時刻とか先進時刻というのを聞いたことがあると思うが，いま時刻 t_0 で原点から放射された電磁波が光速で伝搬して，時刻 t で距離 x にある観測点に到達したとすると，光速は有限なので放射時刻 t_0 と到着時刻 t は同じというわけにはいかず， $t_0 = t - x/c$ あるいは $t = t_0 + x/c$ と時間の遅れが生じる。この t_0 を遅延時刻と呼んでいる⁴。一方， $t_0 = t + x/c$ あるいは $t = t_0 - x/c$ を先進時刻というが，これは時刻 t_0 で原点から放射された電磁波が観測点 x に到達するのは，それより過去の時刻を意味する。先進時刻を用いると，未来における“場”を決めた時，現在における“場”はどうあるべきかが決まるわけだね。
- コニー：遅延波は原点から外に向かう外向きの波，先進波は遠い所から原点に向かってくる内向きの波か。。いずれにしても過去から未来へ，また未来から過去へというサンドイッチしたような“場”を考えると正しい答えがでてきたというわけね。
- K氏：ファインマン物理学3「電磁気学」(1988, 岩波書店)のP257に次のような記述がある。少し長くなるけど，ためになる記述なので以下に引用しておこう。

『波は電荷の運動で起きることを知っているから，波は電荷から外向きに進行するとわれわれは考えたい。電荷が動き出すまえに無限遠から球面波がやって来て，電荷が動きはじめる時にちょうど到達すると考えるのはむしろ奇妙である。これも可能な解であるが。経験によると電荷が加速されると波は電荷から外へ出て行く。マクスウェル方程式はどちらの可能性も許すけれども，われわれは— 経験をもとにして— 外向きの波の解だけが“物理的に意味がある”という付加事実を加える。

しかしこの付加した仮定から面白い結果が出ることも注意しておく。それはマクスウェル方程式の中に存在する時間に関する対称性がなくなってしまうことである。 E と B に関するもとの方程式も，それから出る波動方程式も， t の符号を変えても方程式は変わらないという性質をもつ。これはある方向に行く波が解ならば，反対方向に進む波も同様に正しい解であることを示している。外向きの球面波だけを考えるというわれわれの陳述は重要な付加仮定である。(この付加仮定をさけた電磁気の定式化は注意深く検討された。驚いたとに，多くの場合，これから物理的に無茶な結論は出て来ない。この考え方をいま議論するのは，わき道にそれすぎることになる。第4巻第7章でこれについてももう少しふれることになる。)

以上が第3巻からの引用だ。そこで第4巻第7章を見てみると，外向きの波の解だけが“物理的に意味がある”という付加仮定をさけた議論の結果が要領よくまとめられている。その要点を書くと

1. 点電荷は他の電荷とだけ作用するのであるが，その作用の半分は先進波により，半分は遅延波によって行われる。
2. ほとんどすべての状況では，先進波の効果は表れないが，輻射の反作用の力だけを生じる効果をもつ。

⁴太田浩一「電磁気学」(丸善, 2002年)には「“遅延時刻”は呼び誤りの一つである。 t_0 は t より前であるから電磁波の“放射時刻”とでもすべきだろう」と書かれている。

3. 輻射抵抗は、電子が自分自身に作用することによるものではなく、次のような効果によって生じる。電子が時刻 t において加速されると、それは後の時刻 $t' = t + r/c$ において、遅延波によって世界中の電荷を揺らす。しかし、同時に、これらの電荷は先進波によって元の電子に作用を及ぼし、これは t' から r/c を差し引いた時刻 $t'' = t' - r/c = t$ 、すなわち、ちょうど時刻 t に元の電子に達する。先進波と遅延波とが半々に混じった解が伝わるとすることで、加速されている瞬間の振動電荷は、輻射波を吸収しようとしているすべての電荷からの力を感じるようになる。

というものだ⁵。ということで、ファインマンとホイーラーは、半先進・半遅延波の理論により、“電子は他の電子にだけ作用する”という考えのもとで古典電磁気学での輻射抵抗の説明に成功したんだね。

- コニー：独創的で面白い理論と思うのだけど、通常の電磁気学のテキストにはその理論の紹介がまったく見られないわね。どうしてなのかしら？
- K氏：そうだね、この理論に触れているのは、林中四郎・天野恒夫共訳、パノフスキー・フィリップス「新版 電磁気学(下)」(吉岡書店, 2002)のテキスト⁶くらいかな。いずれにしても、この理論はファインマン自身が語っているように、あくまで古典的理論の範囲内で成立するだけで、残念ながら半先進・半遅延ポテンシャル量子論まで拡張することができなかったんだ。つまり不完全な理論ということで、電磁気学のテキストには取り上げられなくなったということだと思うよ。

1.3 最小作用の原理

- K氏：先程は、少し先回りして、半先進・半遅延ポテンシャル理論は量子論への拡張ができない不完全な理論であったと述べたけど、そのことはしばらく伏せておくとして、ファインマンの行路を見ていこう。彼は、古典電磁気学の範囲で成功した半先進・半遅延ポテンシャル理論を最小作用の原理から定式化していこうと努力したんだね。

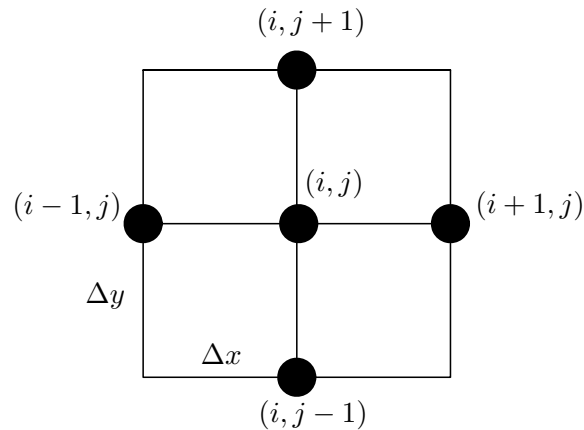
“場”というものを考えると、ある時刻の場が与えられた場合、次の瞬間の場は微分方程式を解くことで得られる。つまり、微分方程式は近接作用を表しているわけだね。このあたりの状況は次の差分方程式を考えるとわかりやすい。簡単のために2次元で考えてみよう。

空間座標 x, y の関数 $u(x, y)$ を考えよう。2次元空間を図のような格子に区切って、各格子点の座

⁵J.A. Wheeler & R.P Feynman: *Interaction with the Absorber as the Mechanism of Radiation*, *Rev. Mod. Phy.*, **17**, 157 – 181(04/1945)

J.A. Wheeler & R.P Feynman: *Classical Electrodynamics in Terms of Direct Interparticle Action*, *Rev. Mod. Phy.*, **21**, 425 – 433(07/1940)

⁶同書 P448 の 21・12 質量の発散積分を除くための、輻射理論の修正、進んだポテンシャルの項参照。



標を (x_i, y_j) とする。各格子点で u を $u_{ij} = u(x_i, y_j)$ とすると、テイラー展開して

$$u_{i+1,j} = u(x_i + \Delta x, y_j) = u_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \dots$$

$$u_{i-1,j} = u(x_i - \Delta x, y_j) = u_{i,j} - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \dots$$

これから

$$u_{i+1,j} - u_{i-1,j} = 2\Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \dots$$

が得られる。両辺を $2\Delta x$ で割って、高次の項を無視すれば

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x}$$

となり、 $u_{i+1,j}$ 、 $u_{i-1,j}$ の両隣りが関係していることがわかるね。変数 y についての微分もまったく同じだ。2階微分についても同様のことが言える。

さて、ファインマンは“場”というものを考えずに、時空間を一気に眺めわたして粒子の経路の性格を規定しようと取り組んだ。その結果、最小作用の原理から粒子の運動方程式を導くことに成功したんだ。

最小作用の原理というのは、解析力学で学習したと思うが、「物体の運動は作用積分と呼ばれる量を最小にするような経路に沿って実現される」というものだった。作用積分を S 、 L をラグランジアンとすると、 S は

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt, \quad L = T - V \quad (1.3.1)$$

で表され、これが極値をとる経路、つまり

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt = 0 \quad (1.3.2)$$

を満たす経路が実際に実現される経路であるというものだ。ラグランジアン L の中身はご存じのように運動エネルギー T からポテンシャルエネルギー V を差し引いたものだね。 q と \dot{q} は位置と速度を表す。(1.3.2) は、数学的には変分法というやつで、変分 $\delta S = 0$ より粒子の運動方程式となるオイラー・ラグランジュの方程式が得られる。

ところで、電磁場内の1個の粒子の相対論的運動は、(1.3.1)のような $L = T - V$ といった形で表すことができず、次のようになることが知られている⁷。

$$S = -m_0 c^2 \int_{t_1}^{t_2} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2} dt - e \int_{t_1}^{t_2} \{\phi(x, y, z, t) - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(x, y, z, t)\} dt \quad (1.3.3)$$

m_0 は静止質量、 ϕ は電場 E と $E = -\nabla\phi$ の関係にあるスカラーポテンシャル、 A は磁場 B と $B = \nabla \times A$ の関係にあるベクトルポテンシャルで、 v は粒子の速度だね。

ファインマンが見いだしたのは多数の粒子の相互作用を含む作用積分⁸で、ここでその式を書かないが、彼は、「電子間の相互作用が先発と遅延と半々であるという事実のおかげで、簡潔な式に書けることが分かった⁹。こういう次第で、古典電磁力学のすべてがこの非常に単純な式に含まれることになりました。自己エネルギーの無限大はなくなっている。これこそは希望した解決であり、古典電磁力学から無限大をなくすものでありました。」と述懐している¹⁰。

- コニー：「ご冗談でしょうファインマンさん(上)」には、この古典的理論がまとまったとき、師のホイーラーからゼミをやることを勧められ、その時の状況が書かれているわね。ゼミの当日、アインシュタインやパウリ、ラッセル、ウィグナーにノイマンといった大頭脳(モンスター・ブレイン)を前にして、「茶封筒からノートを取り出すとき、僕の手がどうしてもなくブルブル震えたのを、今でもはっきり覚えている。」と書かれてあるわ。

さてどうなるのかしらと思って読み進めると、「ところが奇跡が起こった。僕はいったん物理のことを考えはじめ、自分の説明しようとしていることに考えを集中しさえすれば、他のものなどみんな消し飛んでピクともしなくなるのだ。部屋の中にだれがいるかなど、きれいに忘れて何も怖くなくなった。ひたすらこのアイデアを説明する。ただそれだけのことだった。」と書かれているわね。まさに天才の集中力というか、凄い気迫を感じるわね。

- K氏：そうだね。電子の発見などでノーベル賞をとったイギリスの物理学者 J.J. トムソン(1856 - 1940)には、「J.J. トムソンという秀れた物理学者は散歩をしながら思索にふける習慣があり、思索が深まってくると道の真ん中で立ち止まってしまう。トムソンはケンブリッジの街で車の通行をしばしば止めてしまうが、警官もトムソンを注意することはせず、彼が動くまで車の方を止めていた。」という逸話¹¹が残っているね。

⁷非相対論的近似での作用積分は、 $v \ll c$ より $(1 - v^2/c^2)^{1/2} \doteq 1 - v^2/2c^2$ となるので

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{1}{2} m_0 v^2 - e(\phi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \right] dt = \int_{t_1}^{t_2} L dt$$

運動エネルギー $T = (1/2)m_0 v^2$ 、ポテンシャルエネルギー $V = e(\phi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$ とすると、 $L = T - V$ とお馴染みの式になる。突っ込んで知りたい方は HP の特殊相対性理論・第4章2節を参照されたい。

⁸この作用積分は2つの異なる時刻における位置を含んでいて、これが量子論への移行の妨げになった。

⁹R.P.Feynmann, *Rev. Mod. Phys.* 20, 367(1948), *ibid* 76, 749, 769, (1949)

¹⁰引用の都合上、原文を一部改変しています。

¹¹青柳恵介「風の男 白洲次郎」(新潮文庫, 平成18年)

さて、話を戻して、ファインマンは古典理論でやったことを量子論に移しさえすれば、すべてが解決するだろうと思った。ということで、ここらあたりで第1話を終わることにしよう。

第2話 量子論への移行

2.1 量子化への苦闘

- K氏：さて，量子論への移行の模索が始まるのだけど，通常，量子化は古典的運動量 p_x, p_y, p_z を $p_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, p_y \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, p_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ という演算子に置き換えて，次の正準交換関係

$$[q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [q_i, q_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0 \quad (2.1.1)$$

が成立するようにすればよかった。いわゆる正準量子化という奴だね。詳しい説明はここでは省略するけど，ハイゼンベルグ表示では q, p は時間に依存する演算子 $q_H(t), p_H(t)$ となり正準交換関係は“同時刻・正準交換関係”になる。

$$[q_H(t), p_H(t)] = i\hbar \quad (2.1.2)$$

ということで，量子化の手続きは同時刻の交換関係が前提となるわけだ。

ファインマンはノーベル賞講演で、「古典論から量子論を作る仕方は一通りではありません。どの教科書も一通りのようなふりをしてしていますが，それはちがう。教科書に書いてあるのは，運動量の変数を探しだして $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ で置きかえるということですけど，私の場合，運動量が見つからなかった。そんなもの存在しないのです。」と言っている。ファインマンが見いだした作用積分のラグランジアンには，“2つの異なる時刻”における位置を含んでいるので，従来の量子化の処方箋が適用できない，という大きな壁にぶつかったんだ。

- コニー：「それはちがう。」と言い切るファインマンは，スカッ!として恰好いいわね。
- K氏：そうだね。今では，量子化の手法として正準量子化，ネルソンの確率力学による確率過程量子化¹，そしてファインマンの経路積分量子化が知られているけど，ファインマンが，量子化の方法は一通りではないと言い切った背景に何を考えていたのか，興味があるね。それは兎も角として，お話を先に進めよう。

2.2 ナッソー酒場にて

- K氏：量子化の問題と格闘していたある日，ファインマンはプリンストンのナッソー (nassau) 酒場のパーティーに行った。そこでヨーロッパ (イギリス) からやってきた物理学者ハーバート・ジェール (1907 - 1983) に合った。ジェールはファインマンの傍に座って，「君は何をしているの

¹保江邦夫「BLUE BACKS・Excel で学ぶ量子力学」(講談社，2001)

かね？」と尋ねた。ファインマンは「ビールを飲んでいます。」と答えてから、彼は自分の仕事について知りがっていることに気付き、これこれの問題と格闘していますと話したんだね。ファインマンは彼の方を振り向いて「どうでしょう、行列力学や波動力学のようにハミルトニアンを含む微分方程式から出発するのではなく、ラグランジアンについての最小作用の法則から出発して量子力学をやる方法を何かご存じありませんか？量子力学に作用積分が入ってくるやつです。」「いや、知りませんな。。しかし、最小作用の法則はでてこないが、少なくともラグランジアンがでてくる量子力学についての論文をディラックが書いていますね。明日にでもその論文²をお目にかけてみましょう。」という会話を交わし、翌日プリンストンの図書館で、ジェールはその論文をファインマンに見せた。

2.3 ディラック論文に啓発され 経路積分の発見へ

- K氏：いよいよドラマはクライマックスを迎える。ディラックの論文をファインマンが見た。
- コニー：エッ！とファインマンは閃光をみた感じだったでしょうね。ディラックの論文の中身が気になるわ。
- K氏：うん、そうだね。ファインマンは次のように述懐している。『ディラックがいていたのは、次のようなことです。量子力学には、ある時刻の波動関数を別の時刻に移す働きをする重要な量がある。それは積分核の形をしていて、それを $K(x', x)$ と呼ぶことにすれば、これは時刻 t に与えられた波動関数 $\psi(x, t)$ を時刻 $t + \varepsilon t$ の波動関数 $\psi(x', t + \varepsilon)$ に写す。

$$\psi(x', t + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x', x) \psi(x, t) dx \quad (2.3.1)$$

ディラックが指摘したのは位置 x, x' が t と $t + \varepsilon$ に対応するとき、この関数 K が、古典力学におけるラグランジアン $L(\dot{x}, x)$ に $i\varepsilon/\hbar$ を掛けて指数関数の肩にのせたものに 似ている ということです。すなわち $K(x', x)$ が

$$\exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} L \left(\frac{x' - x}{\varepsilon}, x \right) \right] \quad (2.3.2)$$

に似ている³。』

ディラックの論文には確かにラグランジアンが登場してはいるが、それはファインマンが求めていたような最小作用の原理から出発して量子力学を与えるものではなかった。ファインマンは次のように述懐している。『ジェール教授がこの論文を示し、私が読み、彼は説明を加え—そして私がこう言いました。“似ているといったのは、ディラック先生どういふつもりでしょうかね。「似ている」ということの意味はなんですか？そんなことをいってなんの役に立つのでしょうか？「アメリカ人は困ったものだ。何を見ても使い道ばかり気にして！」と彼。私は、ディラックは二つは等しいというつもりだったのにちがいないと思って、彼にそう申しました。「いや、いや、

²P.M.Dirac : *The Lagrangians in quantum mechanics* , Phys. Zeit. der Sowjetunion 3, 64, 1933

³ $(x' - x)/\varepsilon$ は $\varepsilon \rightarrow 0$ で \dot{x} になりますね。もっとも Dirac は「ラグランジアン L を古典的な座標と速度の関数ではなく、時間 t での座標と時間 $t + \varepsilon$ での座標の関数として考えるべきであることを示唆している」と述べている。

ディラックは等しいなんてっていないよ。そこで私は、「よろしい。もし等しいとしたらどうなるか。まあやってみましょう」と黒板に向かった。」

- コニー：このあたりのやり取りは迫力あるわね。
- K氏：うん。ということで、ファインマンはもっとも簡単な例としてポテンシャル V の中の1粒子の運動を取り上げ、ラグランジアンを $L = (1/2)M\dot{x}^2 - V(x)$ 、比例定数を A として

$$\begin{aligned} K(x', x) &= A \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} L \left(\frac{x' - x}{\varepsilon}, x \right) \right] \\ \psi(x', t + \varepsilon) &= \int dx K(x', x) \psi(x, t) \\ &= A \int dx \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} L \left(\frac{x' - x}{\varepsilon}, x \right) \right] \psi(x, t) \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

と書いて、テイラー展開をやった。すると、シュレーディンガー方程式が飛びだしてきたではないか。参考までにその計算プロセス⁴を書いておく。見やすくするために変数を $x' \rightarrow x, x \rightarrow y$ と書きかえると、(2.3.3)は

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \varepsilon) &= A \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} L \left(\frac{x - y}{\varepsilon}, y \right) \right] \psi(y, t) \\ &= A \int_{-\infty}^{\infty} dy \left\{ \exp \left[\frac{i\varepsilon m}{\hbar} \left(\frac{x - y}{\varepsilon} \right)^2 \right] \times \exp \left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V \left(\frac{x + y}{2} \right) \right] \right\} \psi(y, t) \\ &= A \int_{-\infty}^{\infty} dy \left\{ \exp \left[\frac{i m (x - y)^2}{\hbar} \right] \times \exp \left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V \left(\frac{x + y}{2} \right) \right] \right\} \psi(y, t) \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

となる。ただし、ポテンシャル V は x と y の中間点での値を用いている。

右辺の第1項の $\exp[(i/\hbar)m(x-y)^2/2\varepsilon]$ は $\varepsilon \rightarrow 0$ で非常に大きな値となり、位相⁵が大きくなると激しく振動するので、 y で積分すればプラス・マイナス打ち消し合って0になる。しかし、 $x-y$ の値が小さい時、いいかえると y が x に近いときに限り、位相は小さく振動は穏やかになるので、その領域では積分はゼロにはならない。そういうことから、 $y = x + \eta$ とおいて、 η が小さい所だけが積分の主要な寄与を与えることになる。 $y = x + \eta$ を (2.3.4) に入れると

$$\psi(x, t + \varepsilon) = A \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp \left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon} \right) \times \exp \left[\frac{-i\varepsilon}{\hbar} V \left(x + \frac{\eta}{2} \right) \right] \psi(x + \eta, t) \quad (2.3.5)$$

となる。具体的に η の大きさが、指数因子 $\exp(im\eta^2/2\hbar\varepsilon)$ の位相は $\eta \sim \sqrt{2\hbar\varepsilon/m}$ のときに1ラジアン程度の大きさになることから、 η としてはこの程度⁶をとれば十分だろう。

ψ をテイラー展開し、左辺は ε の1次の項までとると

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.3.6)$$

⁴北原和夫訳, R.P. ファインマン, A.R. ヒップス「量子力学と経路積分」(みすず書房, 2001) 参照。

⁵ $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ を思い出されたい。

⁶微小時間 ε の間に電子が移動する距離 η は $\sqrt{2\hbar\varepsilon/m}$ 程度。 $\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ m}^2\text{Kg/s}$, $m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg}$ なので $\eta \sim 10^{-2} \sqrt{\varepsilon} [\text{m}]$ 。仮に $\varepsilon \sim 10^{-10} [\text{s}]$ とすれば $\eta \sim 1000 \text{ \AA}$ となるうか。

右辺は ε の 1 次, η の 2 次までとると

$$\begin{aligned} & A \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right) \times \exp\left[\frac{-i\varepsilon}{\hbar}V\left(x + \frac{\eta}{2}\right)\right] \psi(x + \eta, t) \\ & \simeq A \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right) \times \left[1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}V\left(x + \frac{\eta}{2}\right)\right] \left(\psi + \eta \frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{1}{2}\eta^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) \\ & \simeq A \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right) \left[1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\left(V + \frac{\eta}{2} \frac{dV}{d\eta}\right)\right] \left(\psi + \eta \frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{1}{2}\eta^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) \\ & \simeq A \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right) \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}V\right) \left(\psi + \eta \frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{1}{2}\eta^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

$$= A \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}V\right) \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right) \left(\psi + \eta \frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{1}{2}\eta^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) \quad (2.3.8)$$

となる。(2.3.8) の左辺と右辺の微小量によらない主要項をとりだすと,

$$\psi(x, t) = A \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right) \psi(x, t) = A \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \psi(x, t) \quad (2.3.9)$$

を得る。ただし, ガウス積分の複素変数バージョンである次の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\alpha x^2} = \sqrt{\frac{i\pi}{\alpha}} \quad (2.3.10)$$

を使った。 $\varepsilon \rightarrow 0$ で (2.3.9) の両辺が一致するためには, 係数 A は

$$A \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right) = A \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \longrightarrow A = \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-1/2} \quad (2.3.11)$$

でなければならない。

(2.3.8) の右辺の η の 1 次の項は, 被積分関数が η の奇関数になっているので

$$A \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon} \eta = 0 \quad (2.3.12)$$

η の 2 次の項は, (2.3.10) を α で微分して

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{i\alpha x^2} = \frac{i}{2} \sqrt{\pi i \alpha}^{-3/2}$$

$\alpha = m/2\hbar\varepsilon$ を代入すると

$$A \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon} \eta^2 = \frac{i\hbar\varepsilon}{m} \quad (2.3.13)$$

以上の結果より (2.3.5) は

$$\psi + \varepsilon \frac{\partial\psi}{\partial t} = \psi - \frac{i\varepsilon}{\hbar}V\psi - \frac{\hbar\varepsilon}{2im} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \quad (2.3.14)$$

となり, ε の 1 次のオーダーで次のシュレーディンガー方程式がでてくる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t) \quad (2.3.15)$$

- コニー: なるほど。しかし, この方程式は微小時間における波動関数の時間変化を表しているだけね。

- K氏: そうなんだ。そのことはすぐ後で触れるとして、モノごとを思弁的に考えない、とにかくやってみようというファインマンの真骨頂発揮といったところだね。「私は、ジェル教授のほうに向き直って、よくはわからぬままにこう言いました。このとおり。ディラック教授は二つが比例しているというつもりだったのです。ジェル教授の目が飛び出した。— 彼はちっちゃな帳面をとりだし黒板の計算を写しとっていました。」とファインマンは述べている⁷。

さて、これで少なくともラグランジアンと量子力学との橋渡しはできた。

$$\psi(x', t + \varepsilon) = A \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon L} \psi(x, t) dx \quad (2.3.16)$$

しかし無限小の時間だけ離れた波動関数という制約付きで、有限の時間だけ後の波動関数を計算したいときにはどうしたらよいか。この答えは、「たしか一日かそこらあと、ベッドに横になっていたとき」に思いついた。無限小の時間を無数に積み重ねていけば有限の時間になる！

0 から t までの時間幅を n 等分する。そして n を無限大にすれば分割された時間幅 t/n は無限小になる。まず、0 から t/n までの無限小時間での波動関数は (3.1.6) より

$$\psi(x_1, t/n) = A \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{t}{n} L} \psi(x_0, 0) dx_0 \quad (2.3.17)$$

となるね。次に t/n から $2t/n$ までの区間を考えると、時間 $2t/n$ での波動関数は

$$\psi(x_2, 2t/n) = A \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{t}{n} L} \psi(x_1, t/n) dx_1 = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{t}{n} L} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{t}{n} L} dx_0 dx_1 \quad (2.3.18)$$

となるだろう。以下、それを n 回繰り返し、 $t = nt/n$ のときの波動関数を $\psi(x, t)$ とすると

$$\psi(x, t) = A^n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{t}{n} L} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \frac{t}{n} L} \cdots e^{\frac{i}{\hbar} \frac{t}{n} L} \psi(x_0, 0) dx_0 dx_1 \cdots dx_{n-1}$$

と表すことができる。ただし、(3.1.7) は無限小の時間間隔について成り立つので、正しい結果を得るためには $n \rightarrow \infty$ の極限をとらなければならない。

$$\psi(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} A^n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\frac{t}{n}L + \frac{t}{n}L + \cdots + \frac{t}{n}L)} \psi(x_0, 0) dx_0 dx_1 \cdots dx_{n-1} \quad (2.3.19)$$

$n \rightarrow \infty$ での t/n は無限小時間間隔なので dt に置きかえると、指数関数の肩の部分はラグランジアン⁷の時間積分で表すことができ、これは作用積分 S だった。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{t}{n}L + \frac{t}{n}L + \cdots + \frac{t}{n}L \right) = \int_0^t L dt = S \quad (2.3.20)$$

ということで、(3.1.14) は

$$\psi(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} A^n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{iS}{\hbar}} \psi(x_0, 0) dx_0 dx_1 \cdots dx_{n-1} \quad (2.3.21)$$

となる。ところで、時刻 $t = 0$ で粒子は位置 x_0 で固定されているので、 x_0 での積分は行わず

$$\psi(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} A^n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{iS}{\hbar}} \psi(x_0, 0) dx_1 \cdots dx_{n-1} \quad (2.3.22)$$

⁷後年(1965年)、ファインマンはジェルからのノーベル賞受賞祝いの葉書の返事に「拝啓 ジェール博士 お祝いのはがきをありがとうございます。これもすべてプリンストン大学の図書館で、あなたがディラックの論文を見せてくださったおかげです。感謝しています。」と手紙で返信をしている。(ファインマンの手紙:ソフトバンク クリエイティブ(株), 2006)

と書ける。これから、ある時刻の波動関数と有限時間後の波動関数との関係は iS/\hbar の指数関数を作り、無限個の積分を繰り返す（あらゆる経路についての積分をする）ことによって得られるということになるわけだ⁸。

“ 遂に、量子力学を作用積分 S によって直接に表すことに成功した。 ”

とファインマンの口吻冷めやらぬ様子が伝わってくるようだね。

- コニー：そうね。。まとめるとどうなるのかしら。
- K氏：え〜っと ... そうだね，HP の「Dirac の量子力学を読む (0)」のレポートにも書いているんだけど，量子力学では状態 ϕ からスタートして状態 χ に至る確率振幅は $\langle \chi | \phi \rangle$ で表されるね。ところで，レポートにマルチスリットの例を上げているけど， ϕ から χ へ至る経路はいろいろな経路があり， $\langle \chi | \phi \rangle$ の中身は， χ から基本状態の1つである i に移る振幅と，その状態から χ に移る振幅の積の和となり，次のように表される。

$$\langle \chi | \phi \rangle = \langle \chi | 1 \rangle \langle 1 | \phi \rangle + \langle \chi | 2 \rangle \langle 2 | \phi \rangle + \dots = \sum_i^{all} \langle \chi | i \rangle \langle i | \phi \rangle, \quad \sum_i^{all} |i\rangle \langle i| = \mathbf{1} \quad (2.3.23)$$

いま，出発点 (x_0, t_0) から到達点 (x_n, t_n) に至る経路は無数あるけど，すべての経路が同じだけ寄与するわけではなく，それぞれの経路に沿った指数関数 $e^{iS/\hbar}$ が重みとして掛っている。つまり，出発点の波動関数 $\psi(x_0, 0)$ に，すべての可能な経路に対しての重みをつけ，それらを足し合わせることににより時間 t での波動関数 $\psi(x, t)$ が得られるということだね。

- コニー：なるほど。イメージ的に捉えると，時刻 t を固定したとき，その時刻での経路は無数にあるわけね。それらの和は無限積分で表されるということなのね。
- K氏：そうだね。ファインマンは，すべての可能な経路についての和をとるという意味の積分演算子

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} \mathcal{D}x(t) &= \lim_{n \rightarrow \infty} A^n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_{n-1} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} A^n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{n-1} dx_i \end{aligned} \quad (2.3.24)$$

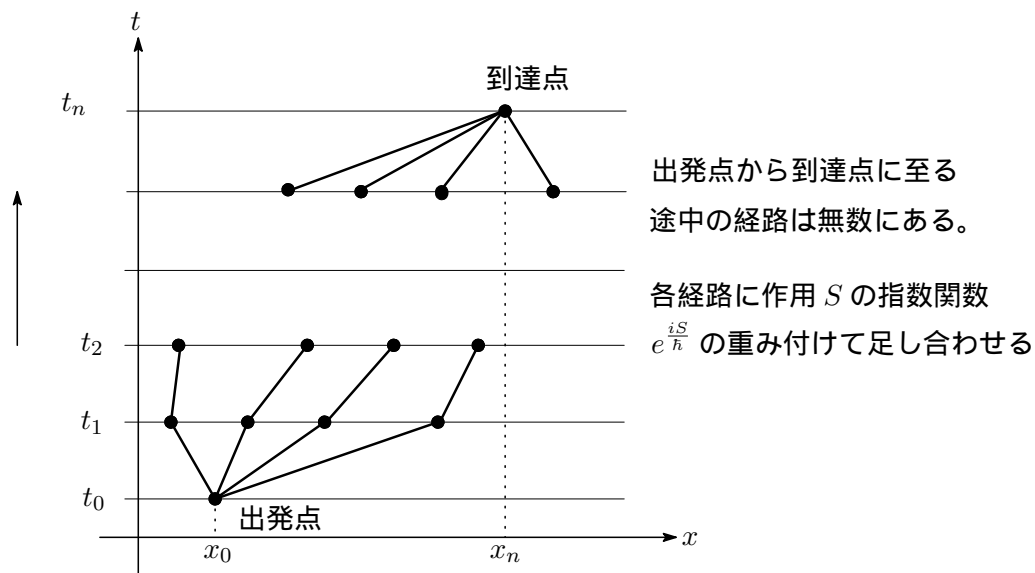
を定義した。これを使うと (2.3.21) は

$$\psi(x, t) = \int_{x_0}^{x_n} \mathcal{D}x(t) e^{iS/\hbar} \psi(x_0, 0) \quad (2.3.25)$$

と表される。したがって， $a \rightarrow b$ への確率振幅 $K(b, a)$ は

$$K(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}x(t) e^{iS/\hbar} \quad (2.3.26)$$

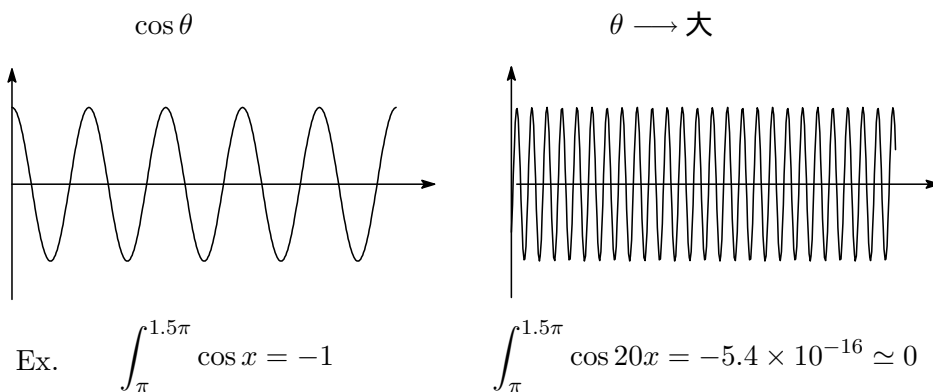
⁸R.P.Feynman, Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics 20,367, Rev. of Mod. Phys(1948)



時間軸方向の変化は作用積分 $S = \int L dt$ で
 同時刻の可能な経路についての和は $\int \mathcal{D}x(t)$ で
 この双方の合体で波動関数の時間変化が表される。

と表すことができる。これを経路積分による量子化という。(2.3.26) をファインマンは経路積分と呼んだ⁹。 $K(b, a)$ はファインマン核と呼ばれる。今後、(2.3.26) の式が活躍することになる。

ところで、経路に付随する重み $e^{iS/\hbar}$ に話を戻すと、これは $e^{iS/\hbar} = \cos(iS/\hbar) + i \sin(iS/\hbar)$ と表されるね。 iS/\hbar は位相で、 \hbar は極めて小さい定数なので、一般に激しく振動する。したがって、



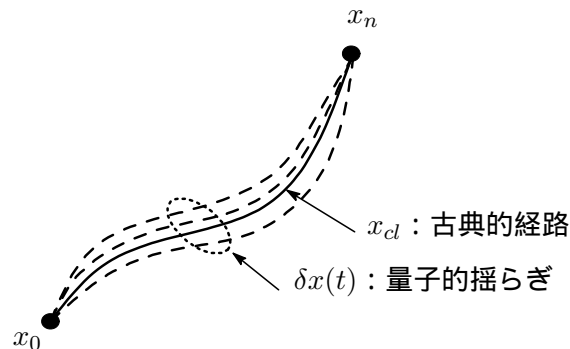
積分 $\int \mathcal{D}x(t) e^{iS/\hbar}$ は、ほとんどの経路については打ち消し合って0になってしまうが、唯一積分に寄与するのは S が最小となるような経路（作用積分 $\int L dt$ が停留値となる古典経路）だけということになる。つまり、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限では作用積分が停留値をとる古典経路 x_{cl} だけが(2.3.26) に寄与する。しかし、量子論では、 \hbar はゼロでない有限の値をもつので、実現される経路としては

$$S[x_{cl}(t) + \delta x(t)] \approx \hbar \tag{2.3.27}$$

程度の周辺の経路からの寄与も無視できない。量子力学では実現経路の回りの拡がり（量子的揺

⁹R.P. ファインマン, A.R. ヒップス「量子力学と経路積分」(P.33)

らぎ)が寄与してくる。明確な一本の経路ではなくその回りに少しぼやけた経路で表されるというわけだ。数学的に言うと、この領域にある経路は1次で S は変化しない ($\delta S = 0$)。このあたりの詳しい話は第4話でやる予定だ。



以上で第2話を終わろう。少しゴタゴタした計算ができて疲れたと思うけど、ゆっくりフォローすればとくに難しくはないと思う。もっとも怪しい議論や明らかな過ちを見つけたら、そっと指摘していただけると嬉しい。

尚、脚注に載せたファインマンやディラックの論文は、インターネットで pdf ファイルを自由に入手できる。興味があれば試してみるといいだろう。

- コニー：お疲れさまでした。ちょっと計算が多くて閉口しそうになったけど、ファインマンの経路積分のイメージが大分固まってきたわ。論文は、また機会があればチェックしてみるわね。
- K氏：少し形式的な展開が続いたので、第3話は自由粒子などを例に取り上げてファインマン核を求める具体的な計算をやる予定だ。計算量が多くて大変になるかもしれないけど、計算のプロセスに留意していけばいいと思う。それではお楽しみに～。

え～っと、ついでに老婆心ながら次の補足もしておこう。無論、不要なら読み飛ばしてもOK。

【補足】: ディラックの「量子力学・原初第4版」(1971, 岩波書店) §32・作用原理 (P167) のところに、このあたりの議論が書かれているので、手短かに紹介しておこう。時刻 t_1 での粒子の座標の固有値を q とし、それから後の時刻 t_2 での座標の固有値を q' としよう。そうすると

$$\langle q', t_2 | q, t_1 \rangle \quad (2.3.28)$$

は、時刻 t_1 で観測された座標が q という値をもつとき、時刻 t_2 で座標が q' という値をもつことの確率振幅を与える。量子力学ではこれを $q \rightarrow q'$ へ遷移する確率振幅¹⁰と呼んでいるが、確率振幅の2乗 $|\langle q', t_2 | q, t_1 \rangle|^2$ は存在確率だ。ディラックは (2.3.28) を

$$\langle q', t_2 | q, t_1 \rangle = e^{iS/\hbar} \quad (2.3.29)$$

¹⁰ディラックは、異なる時刻での2つの基底ケットを結ぶ変換関数と呼んでいる。

とにおいて, q, q' の関数 S を定義し, (2.3.29) はシュレーディンガー方程式の解になることを示した。この段階で, アッ! S は作用積分だと早とちりしてはいけない。あくまで関数 S だ。

さて, シュレーディンガーの波動方程式の解を

$$\psi = Ae^{iS/\hbar}, \quad (A, S: \text{実関数}) \quad (2.3.30)$$

とにおいて, $\hbar \rightarrow 0$ の極限をとると, シュレーディンガー方程式は古典力学のハミルトン・ヤコビの方程式になるが, このことは, 以下のようにしてわかる。 A, S を q, t の実数関数¹¹とし, $\psi = Ae^{iS/\hbar}$ をシュレーディンガー方程式 $i\hbar\partial\psi/\partial t = H\psi$ に入れると

$$i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} e^{iS/\hbar} - Ae^{iS/\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} = H(q, p, t) Ae^{iS/\hbar} \quad (2.3.31)$$

となり, 両辺に左から $e^{-iS/\hbar}$ を掛けて整理すると

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial S}{\partial t} A = e^{-iS/\hbar} H(q, p, t) e^{iS/\hbar} A \quad (2.3.32)$$

が得られる。ここで公式¹²

$$[p, f(q)] = -i\hbar \frac{\partial f(q)}{\partial q} \quad (2.3.33)$$

を使えば

$$[p, e^{iS(q,t)/\hbar}] = -i\hbar \frac{\partial e^{iS/\hbar}}{\partial q} = \frac{\partial S}{\partial q} e^{iS/\hbar} \longrightarrow p e^{iS/\hbar} - e^{iS/\hbar} p = \frac{\partial S}{\partial q} e^{iS/\hbar} \quad (2.3.34)$$

となり, これから

$$e^{-iS/\hbar} p e^{iS/\hbar} = p + \frac{\partial S}{\partial q} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} + \frac{\partial S}{\partial q} \quad (2.3.35)$$

したがって

$$e^{-iS/\hbar} H(q, p, t) e^{iS/\hbar} = H\left(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} + \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) \quad (2.3.36)$$

と表せるので, (2.3.32) は

$$i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} - \frac{\partial S}{\partial t} A = H\left(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} + \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) A \quad (2.3.37)$$

となり, $\hbar \rightarrow 0$ の極限をとれば, シュレーディンガー方程式は

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) = 0 \quad (2.3.38)$$

と古典力学に登場するハミルトン・ヤコビ方程式となる。

- コニー: といえば, 高林武彦「量子論の発展史」(中央公論社, 昭和52年)の第8章に, 1926年に発表された第1論文「固有値問題としての量子化」の中で登場するシュレーディンガーの波動方程式は, ハミルトン・ヤコビの方程式から出発して見いだされたという経過が詳しく解説されていたわね。

¹¹ A は確率密度の平方, ∇S は確率の流れに比例した量になるので, 共に実関数でないといふ具合悪いことになる。J.J.Sakurai「現代の量子力学(上)P136 参照。

¹² ディラック「量子力学・原書第4版」 §22(P123) 参照。

- K氏：そうだね。その本には「シュレーディンガーがこの第1論文で波動方程式を導いたやり方は高踏的であるが、それは彼が最初、実際にそれを見いだした方法ではおそらくないと想像される。」とも書かれている。第1級の物理学者もいろいろ模索と苦闘をしているわけだね。。

まっ、そのことは兎も角として話を戻すと、古典力学で S は作用積分と呼ばれ、系のラグランジアン L とは

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt \quad (2.3.39)$$

の関係にあった¹³。ディラックは同書の中で「こうして (2.3.29) で定義された S は、量子論で古典論の作用関数に似たものであり、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限でそれに一致する。」

$$\text{関数 } S : (\hbar \rightarrow 0) \longrightarrow \text{作用積分} : S_{\text{古典力学}} = \int_{t_0}^t L(t') dt' \quad (2.3.40)$$

と書いている。そして次の記述が重要だ。「量子論で古典論のラグランジュ関数に似たものを求めるには、 $t = t_0 + \delta t$ とおいて時間の隔たりが無限に小さい場合を考えてみる。すると $e^{iL(t_0)\delta t/\hbar}$ に似たものとして $\langle q'_{t_0+\delta t} | q'_{t_0} \rangle$ が得られる。」

ディラックは、前出の「量子力学におけるラグランジアン」という論文の中で、 $t = t_0$ と $t = t_0 + \delta t$ の無限小時間での波動関数の時間変化 $\langle q', t_0 + \delta t | q, t_0 \rangle$ は $e^{i\varepsilon L(t_0)/\hbar}$ に対応していると書いているだけなんだね（ファインマンはそれを“似ている”と表現したが）。繰り返しになるけど、ラグランジアンが登場してはいるが、それはファインマンが求めていたような最小作用の原理から出発して量子力学を与えるものではなかった。

（補足終わり）

¹³HP の解析力学のレポート等を参照。

第3話 ファインマン核を求める

3.1 1次元自由粒子

- K氏: 1次元の自由粒子についてファインマン核を求めていこう。自由粒子のラグランジアンは

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}(t)^2 \quad (3.1.1)$$

ファインマン核は

$$\begin{aligned} K(b, a) &= A^n \iint \cdots \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \exp \left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \sum_{j=0}^{N-1} (x_{j+1} - x_j)^2 \right] \\ &= A^n \iint \cdots \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \prod_{j=0}^{N-1} \exp \left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x_{j+1} - x_j)^2 \right] \\ &= A^n \iint \cdots \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \prod_{j=0}^{N-1} \exp \left[-\frac{\alpha}{2} (x_{j+1} - x_j)^2 \right], \quad \left(\alpha = -\frac{im}{\varepsilon\hbar} \right) \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

具体的に計算をする際に使う公式を先にあげておく。

$$\text{公式: } \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{a(x_1-x)^2} e^{b(x_2-x)^2} = \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}} \exp \left[\frac{ab}{a+b} (x_1 - x_2)^2 \right] \quad (3.1.3)$$

まず, x_1 に関する部分を取り出し x_1 について積分を行うと

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \exp \left[-\frac{\alpha}{2} (x_2 - x_1)^2 \right] \cdot \exp \left[-\frac{\alpha}{2} (x_1 - x_0)^2 \right] \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp \left[-\frac{\alpha}{4} (x_2 - x_0)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

上の結果を反映し, x_2 について積分を行うと

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp \left[-\frac{\alpha}{4} (x_2 - x_0)^2 \right] \cdot \exp \left[-\frac{\alpha}{2} (x_3 - x_2)^2 \right] \\ &= \sqrt{\left(\frac{\pi}{\alpha} \right) \left(\frac{4\pi}{3\alpha} \right)} \exp \left[-\frac{\alpha}{6} (x_3 - x_0)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

上の結果を反映し, x_3 について積分を行うと

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \sqrt{\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \left(\frac{4\pi}{3\alpha}\right)} \exp\left[-\frac{\alpha}{6}(x_3 - x_0)^2\right] \cdot \exp\left[-\frac{\alpha}{2}(x_4 - x_3)^2\right] \\ &= \sqrt{\left(\frac{2\pi}{2\alpha}\right) \left(\frac{4\pi}{3\alpha}\right) \left(\frac{6\pi}{4\alpha}\right)} \exp\left[-\frac{\alpha}{8}(x_4 - x_0)^2\right] \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

以下, 同様にしてこれを繰り返す, x_{N-1} について積分を行うと, ルートの部分は

$$\sqrt{\frac{(2\pi)^{N-1} \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdots (N-1)}{\alpha^{N-1} \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdots (N-1) \cdot N}} = \sqrt{\frac{(2\pi)^{N-1}}{\alpha^{N-1} \cdot N}} = \left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{\frac{N-1}{2}} N^{-\frac{1}{2}}$$

指数関数の部分は初項 4, 公差 2 の等差級数で $N-1$ 項目は $2N$ となるので

$$\exp\left[-\frac{\alpha}{2N}(x_N - x_0)^2\right]$$

ということで

$$\left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{\frac{N-1}{2}} N^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\alpha}{2N}(x_N - x_0)^2\right] \quad (3.1.7)$$

を得る。求めるファインマン核は

$$K(b, a) = \left[A \left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^N \left(\frac{2\pi N}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\alpha}{2N}(x_N - x_0)^2\right] \quad (3.1.8)$$

ここで, $A = \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{-\frac{1}{2}}$, $\alpha = -\frac{im}{\varepsilon \hbar}$, $x_N = x_b$, $x_0 = x_a$, $N\varepsilon = t_b - t_a$ を (3.1.8) に入れて

$$\begin{aligned} K(b, a) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x_b - x_a)^2}{2(t_b - t_a)}\right] = F(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x_b - x_a)^2}{2(t_b - t_a)}\right] \\ \text{ただし, } F(t) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}} \end{aligned} \quad (3.1.9)$$

を得る。 $F(t)$ は時間差のみの関数¹。

- コニー: いま求めたファインマン核は自由粒子が a 点から b 点に行く確率振幅を与えるのね。
- K氏: そうだね。 $K(b, a)$ を作用積分 S_{cl} を使って表しておこう。ラグランジアン $L = m\dot{x}^2/2$, 外力がないから $m\ddot{x} = 0$ を頭に入れておくと

$$S_{cl} = \int_{t_a}^{t_b} dt L = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 = \frac{m}{2} \left\{ [x\dot{x}]_{x_a}^{x_b} - \int_{t_a}^{t_b} dt x\ddot{x} \right\} = \frac{m}{2} (x_b \dot{x}_b - x_a \dot{x}_a) \quad (3.1.10)$$

等速運動するので $\dot{x}_b = \dot{x}_a = (x_b - x_a)/(t_b - t_a)$, これを上式に入れて整理すると

$$S_{cl} = \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a} \quad (3.1.11)$$

¹第4話で詳しく説明するが, ラグランジアンが2次形式で表せる場合には, $K(b, a)$ は (3.1.12) のように時間だけの関数 $F(T)$ を除いて古典的軌道によって決定されるという特徴を持つ。

これは (3.1.9) の指数関数の [] 内の関数だ。ということで

$$K(b, a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right] = F(T) \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right] \quad (3.1.12)$$

$K(b, a)$ は自由粒子が $a(x_a, t_a)$ 点から $b(x_b, t_b)$ 点に行く確率振幅なので、 a 点から b 点に到る確率を $P(b, a)$ とすると、 $P(b, a)$ は $K(b, a)$ の絶対値の2乗で与えられる。

$$P(b, a) = |K(b, a)|^2 \quad (3.1.13)$$

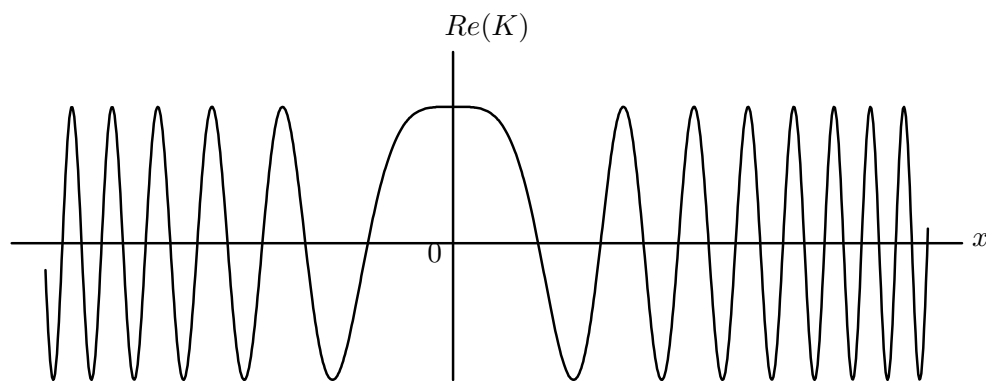
- コニー：量子力学を習うと「古典的軌道という概念は捨てなさい」ということをまず叩き込まれ、その後、雲をつかむような話へとつながっていくわけだけど、ファインマンの経路積分ではイメージしやすい古典的軌道が復活してくるのね。そうすると、時間だけの関数 $F(t)$ は一体何を意味するのかしら。

- K氏：この詳しい話は第4話でやる予定だが、答えを先にいってしまうと、量子的揺らぎを意味しているんだ。第2話で x_{cl} 回りの少しぼやけた軌道の話をしただろう、そいつにあたるんだね。

さて、(3.1.9) の意味を調べてみよう。 a 点を便宜上時空間の原点 $(0, 0)$ にとり b 点を $b = (x, t)$ とすると

$$K(x, t; 0, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right] = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \quad (3.1.14)$$

$K(x, t; 0, 0)$ は $t = 0$ で $x = 0$ に存在した粒子がどのような状態に遷移（移り変わる）するかを与える。時間 t を固定し、距離 x の関数として K の実数部を描くと下図になり²、原点から遠くなれば激しく振動する。



いま、振動が正弦波のように振る舞う領域 ($x \gg \lambda$) を考える。確率振幅 $K(x, t; 0, 0)$ の位相は

$$\phi = \frac{S_{cl}}{\hbar} = \frac{mx^2}{2\hbar t} \quad (3.1.15)$$

位置 x と $x + \lambda$ の間で位相 ϕ が 2π だけ増えるという条件を課してみよう。そうすると

$$2\pi = \frac{m(x + \lambda)^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar t} = \frac{\lambda x}{\hbar t} + \frac{m\lambda^2}{2\hbar t} \simeq \frac{\lambda x}{\hbar t}$$

$$\therefore \lambda = \frac{2\pi\hbar}{m(x/t)} = \frac{h}{m(x/t)} \quad (3.1.16)$$

²虚数部は 90° だけ位相がずれた類似の波になる。

が得られる。古典力学では時間 t で原点から距離 x まで運動する粒子は速度 x/t と運動量 mx/t をもつね。量子論的な効果が表にでず古典物理学がよい近似になっている場合、粒子の運動量は古典的運動量 $p = mx/t$ で近似できるので、(3.1.16) は

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (3.1.17)$$

と表せる。これはいわゆるド・ブロイ波長だ。波数 $k = 2\pi/\lambda$ を使うと運動量は

$$p = \hbar k \quad (3.1.18)$$

これはド・ブロイの公式だね。

- コニー：時刻 t で粒子は運動量 p (波長 $\lambda = h/p$) の物質波になっているというわけね。
- K氏：そうだね。え〜っと、(3.1.18) の関係式を一般的な議論から導いてみよう。波長(位置) λ ならば位相は 2π だね。だから単位長さあたりの位相は $2\pi/\lambda$ で、これは波数 k で表される。

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (3.1.19)$$

終点 x_b が単位長さだけ変位するときの位相 ϕ の変化は $\partial\phi/\partial x_b$ で、これは波数 k に等しいので

$$k = \frac{\partial\phi}{\partial x_b} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial S_{cl}}{\partial x_b} \quad (3.1.20)$$

ところで、古典力学によれば $\partial S_{cl}/\partial x_b$ は終点 x_b における粒子の運動量 p_b を表した³ので、(3.1.20) から

$$p = \hbar k \quad (3.1.21)$$

が得られるというわけだ。

次に、時間について見ていこう。距離を固定して時刻を変えていく。位相が 2π だけ増えるのに必要な時間は周期 T だね。いま、十分長い時間が経過 ($t \gg T$) した場合を考え、時刻が t から T だけ経過したときに位相 ϕ が 2π だけ変化するとすると

$$2\pi = \left| \frac{mx^2}{2\hbar(t+T)} - \frac{mx^2}{2\hbar t} \right| = \frac{mx^2}{2\hbar t^2} \left(\frac{T}{1+T/t} \right) \simeq \frac{mx^2}{2\hbar t^2} T$$

$$\therefore T \simeq 2\pi \frac{2\hbar t^2}{mx^2} \quad (3.1.22)$$

角振動数 $\omega = 2\pi/T$ を入れると

$$\omega \simeq \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{x}{t} \right)^2 \quad (3.1.23)$$

が得られる。古典的運動エネルギーを E とすると、 $E = \frac{1}{2}m(x/t)^2$ なので、(3.1.23) から

$$E = \hbar\omega \quad (3.1.24)$$

³ $p_b = \frac{\partial S_{cl}}{\partial x_b}$ 詳しくは数学コーナーの「変分法談義 第5話：ハミルトン・ヤコビの方程式」を参照。

というアインシュタインの関係式が得られる。この関係式も一般的な議論から導こう。終点の時刻 t_b における位相の時間変化 $\partial\phi/\partial t_b$ は振動数 ω となるので

$$\omega = -\frac{\partial\phi}{\partial t_b} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial S_{cl}}{\partial t_b} \quad (3.1.25)$$

ところで、古典力学によれば $-\partial S_{cl}/\partial t$ はエネルギー E を与える⁴ので

$$E = \hbar\omega \quad (3.1.26)$$

となる。

- コニー：ファインマン核から粒子の波動性がでてきた点が面白いわね。
- K氏：そうだね、 $a \rightarrow b$ に達するさまざまな経路に位相因子 $e^{\frac{iS}{\hbar}}$ の重みをつけて足し合わせた結果として、波動的な性質が現れるということだね。
- コニー：なるほど。今までのお話をまとめると、経路積分法は古典力学の観点から電子の振る舞いを理解することができる特徴を持つということか。
- K氏：ついでに、経路積分では正準交換関係 $[x, p] = i\hbar$ がガウス分布の揺らぎの幅として自然にでてくることを示しておこう。 $x = x_b - x_a$, $t = t_b - t_a$, $\sigma = \sqrt{\frac{i\hbar t}{m}}$ とおくと (3.1.9) はガウス分布の式になる。

$$\begin{aligned} K(b, a) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b - t_a)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x_b - x_a)^2}{2(t_b - t_a)}\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \end{aligned} \quad (3.1.27)$$

σ はガウス分布のゆらぎの幅だ。 $m = 1$ として x^2 の期待値（平均値）は

$$\langle x^2 \rangle = \sigma^2 = i\hbar t$$

さて、運動量を $(x_i - x_{i-1})/\varepsilon$ と表すと

$$[x, p] \longrightarrow \frac{x_i(x_i - x_{i-1})}{\varepsilon} - \frac{x_{i-1}(x_i - x_{i-1})}{\varepsilon} = \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{\varepsilon}$$

$(x_i - x_{i-1})^2$ はガウス分布で平均すると $\sim i\hbar\varepsilon$ となるので

$$[x, p] = \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{\varepsilon} \simeq i\hbar$$

となり、正準交換関係がでてくる。

- コニー：正準交換関係からハイゼンベルグの不確定性原理がでてくるわね。

⁴前出のレポート参照。

- K氏：この節の最後に，一定の力 F の下にある粒子の古典的作用積分 S_{cl} を求めておこう。ラグランジアンを

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - Fx \quad (3.1.28)$$

とする。古典的作用積分は

$$S_{cl} = \int_{t_a}^{t_b} L dt = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - Fx \right) dt \quad (3.1.29)$$

オイラーラグランジュの方程式より

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \longrightarrow m\ddot{x} + F = 0 \quad (3.1.30)$$

(3.1.30) を x について解いて

$$x = -\frac{F}{2m}t^2 + c_1t + c_2 \quad (3.1.31)$$

積分定数は境界条件 $(x_a, t_a), (x_b, t_b)$ を上式に入れた連立方程式を解いて

$$\begin{cases} t_a c_1 + c_2 = x_a + \frac{F}{2m}t_a^2 \\ t_b c_1 + c_2 = x_b + \frac{F}{2m}t_b^2 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} c_1 = \frac{x_b - x_a}{T} + \frac{F}{2m}(t_b + t_a) \\ c_2 = \frac{x_a t_b - x_b t_a}{T} - \frac{F}{2m}t_b t_a \end{cases} \quad (T = t_b - t_a) \quad (3.1.32)$$

と得られる。これを (6.2.16) に入れて整理すると

$$x = \frac{F}{2m}(t_b - t)(t - t_a) + \frac{(t - t_a)x_b + (t_b - t)x_a}{T} \quad (3.1.33)$$

を得る。 t で微分して

$$\dot{x} = \frac{F}{2m}((t_b - t) - (t - t_a)) + \frac{x_b - x_a}{T} \quad (3.1.34)$$

さらに2乗をとると

$$\begin{aligned} \dot{x}^2 &= \frac{F^2}{4m^2}((t_b - t)^2 + (t - t_a)^2 - 2(t_b - t)(t - t_a)) \\ &\quad + \frac{(x_b - x_a)^2}{T^2} + \frac{F(x_b - x_a)((t_b - t) - (t - t_a))}{mT} \end{aligned} \quad (3.1.35)$$

(3.1.34), (3.1.35) を (6.2.15) に入れて積分を実行すると，作用積分は

$$S_{cl} = \frac{m}{2T}(x_b - x_a)^2 - \frac{FT}{2}(x_b + x_a) - \frac{F^2 T^3}{24m} \quad (3.1.36)$$

と求まる⁵。ちなみに，ファインマン核 $K(b, a)$ は

$$K(b, a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x_b - x_a)^2}{2T} - \frac{i}{2\hbar} \left\{ FT(x_b + x_a) + \frac{F^2 T^3}{12m} \right\} \right] \quad (3.1.37)$$

となることが示される（第4章参照）。

⁵手計算は大変なので Mathematica を利用。

3.2 波動関数

- K氏: さて, ここで波動関数とファインマン核の関係を見ておこう。量子力学では電子の振る舞いは波動関数 $\psi(x, t)$ で記述され, その時間的变化は次のシュレーディンガー方程式で表されたね。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t) \quad (3.2.1)$$

H は系のハミルトニアン。点 (x_2, t_2) での波動関数はそれ以前のある過去 t_1 でのあらゆる点での波動関数の重ね合わせで表されるので, 波動関数は次の積分方程式

$$\psi(x_2, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 K(x_2, t_2; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) \quad (3.2.2)$$

を満たす。これは重要な関係式だ。いま, 自由粒子を考え, (3.2.2) の波動関数はシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \quad (3.2.3)$$

を満たしていることを示しておこう。 $K(x_2, t_2; x_1, t_1)$ は自由粒子のファインマン核で

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_2 - t_1)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x_2 - x_1)^2}{2(t_2 - t_1)}\right] \quad (3.2.4)$$

で与えられた。(3.2.3) の左辺は

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} \psi(x_2, t_2) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 K(x_2, t_2; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} \right) K(x_2, t_2; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

となる。次に, ファインマン核を時間微分すると

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} K(x_2, t_2; x_1, t_1) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_2 - t_1)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x_2 - x_1)^2}{2(t_2 - t_1)}\right] \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} K(x_2, t_2; x_1, t_1) \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

が得られる⁶ので, この結果を (3.2.5) の右辺に入れると

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} \psi(x_2, t_2) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 K(x_2, t_2; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x_2, t_2) \end{aligned}$$

となり, $x_2 \rightarrow x, t_2 \rightarrow t$ と書きかえると (3.2.3) のシュレーディンガー方程式となるね。

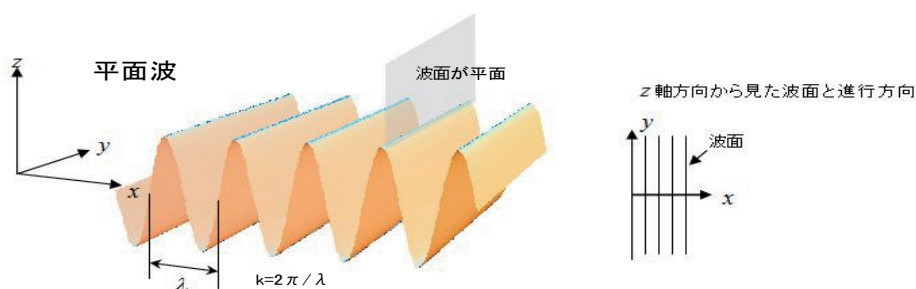
- コニー: つまり, ファインマン核の具体的表式がわかっているならば, 任意の時刻での波動関数 $\psi(x, t)$ はファインマン核と初期時刻での波動関数の積を積分した (3.2.2) で求められるということね。

⁶ファインマン核を時間微分したものと, 位置に関して2階微分したものが一致することを確認すればいい。手計算は相当面倒なので Mathematica を活用。自由粒子のファインマン核はシュレーディンガー方程式に従って時間変化していく。

- K氏: そうなんだ。ファインマン核を具体的に求めることは、いいかえればシュレーディンガー方程式を解いているということになるわけだね。具体的に1次元自由粒子の波動関数の時刻 t における波動関数を (3.2.2) を使って求めてみよう。 $t = 0$ での初期状態が波数 k の平面波 $\psi(x_0, 0) = C e^{ikx_0}$ とする。(3.2.2) より時刻 t での波動関数は

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 K(t, 0) \psi(x_0, 0) = C \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_0)^2}{2t}\right] e^{ikx_0} \\ &= C e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t + ikx} = C e^{i(kx - Et/\hbar)} = C e^{i(kx - \omega t)}, \quad (E_k = \hbar^2 k^2 / 2m = \hbar \omega) \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

と求められ、同じ波数で位相が ω だけ変化している平面波となるという当然期待される結果が得られるね。



おまけとしてガウス波束⁷の時刻 t での波動関数 $\psi_{wp}(x, t)$ を求めてみよう。ガウス波束の初期状態⁸は

$$\psi_{wp}(x_0, t_0) = (\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{x_0^2}{2\sigma^2} + ik_0 x_0\right) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{\alpha}{2}x_0^2 + ik_0 x_0} \quad (\alpha = 1/\sigma^2) \quad (3.2.8)$$

α は波束の広がりを表すパラメーター。時刻 t での波動関数は (3.2.2) より

$$\begin{aligned} \psi_{wp}(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 K(x, t; x_0, t_0) \psi_{wp}(x_0, t_0) \\ &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t_0)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}\right] \exp\left[-\frac{\alpha}{2}x_0^2 + ik_0 x_0\right] \\ &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{1 + i\alpha\hbar(t-t_0)/m}} \exp\left[\frac{-\alpha x^2/2 + ik_0 x - i\hbar k_0^2(t-t_0)/2m}{1 + i\alpha\hbar(t-t_0)/m}\right] \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

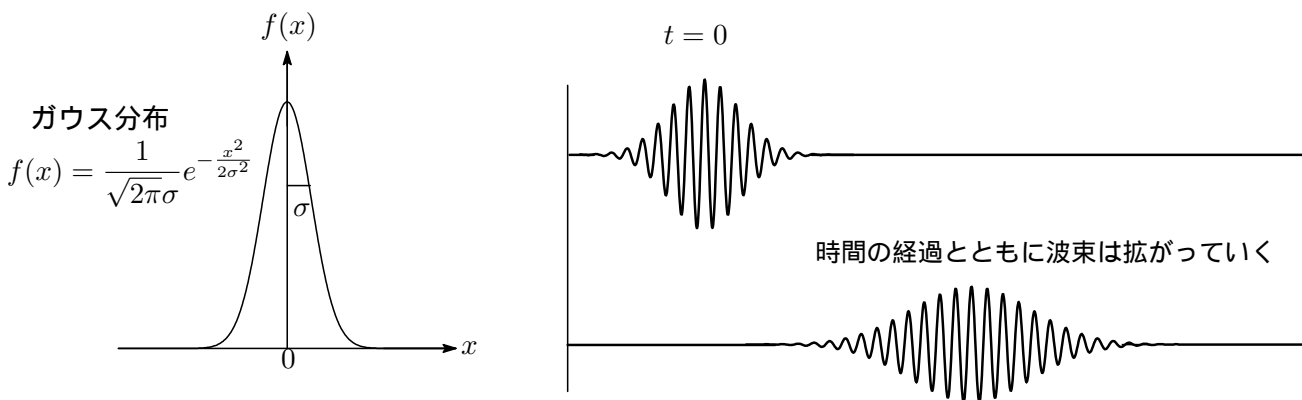
と得られ⁹、先出のレポートの結果と一致する。波束は時間の経過とともに崩れていく¹⁰。

⁷ガウス波束の詳しい説明は「ガウス波束とダイナミクス」のレポートを参照されたし。

⁸ $Re[\psi_{wp}] \propto e^{-(\alpha/2)x_0^2} \cos(k_0 x_0)$

⁹積分計算は Mathematica を利用。

¹⁰波束はいろいろな波長をもつ平面波の重ね合わせからなり、各平面波の位相速度（波の山や谷など特定の位置が移動する速度）は異なるために時間の経過とともに波束が広がっていく。



$\alpha \rightarrow 0$ とすると

$$\sqrt{\frac{1}{1 + i\alpha\hbar(t - t_0)/m}} \exp\left[\frac{-\alpha x^2/2 + ik_0x - i\hbar k_0^2(t - t_0)/2m}{1 + i\alpha\hbar(t - t_0)/m}\right] \rightarrow \exp\left[ik_0x - \frac{\hbar k_0^2}{2m}(t - t_0)\right]$$

となって, (3.2.7) の平面波を表す。

3.3 調和振動子

- K氏: 1次元調和振動子を取り上げよう。ラグランジアンは

$$L = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) \tag{3.3.1}$$

運動方程式はオイラー・ラグランジュの方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0$$

より

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x$$

となる。時刻 t_a で $x_a = x(t_a)$, 時刻 t_b で $x_b = x(t_b)$ を通る古典的調和振動子の解は

$$\begin{cases} x(t) = A \cos \omega(t - t_a) + B \sin \omega(t - t_a) \\ \dot{x}(t) = -A\omega \sin \omega(t - t_a) + B\omega \cos \omega(t - t_a) \\ A = x_a, \quad A \cos \omega T + B \sin \omega T = x_b, \quad (\text{ただし } T = t_b - t_a) \end{cases} \tag{3.3.2}$$

作用積分は

$$\begin{aligned}
 S_{cl} &= \int_{t_a}^{t_b} dt L(\dot{x}, x) = \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \\
 &= \frac{m\omega^2}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ (-A \sin \omega(t-t_a) + B \cos \omega(t-t_a))^2 - (A \cos \omega(t-t_a) + B \sin \omega(t-t_a))^2 \right\} \\
 &= \frac{m\omega^2}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ (B^2 - A^2) \cos 2\omega(t-t_a) - 2AB \sin 2\omega(t-t_a) \right\} \\
 &= \frac{m\omega^2}{2} \int_0^T dt \left[(B^2 - A^2) \cos 2\omega t - 2AB \sin 2\omega t \right] \\
 &= \frac{m\omega^2}{2} \left(\frac{B^2 - A^2}{2\omega} \sin 2\omega T - \frac{2AB}{\omega} \sin^2 \omega T \right) \\
 &= \frac{m\omega}{2} \sin \omega T \left\{ (B^2 - A^2) \cos \omega T - 2AB \sin \omega T \right\}
 \end{aligned} \tag{3.3.3}$$

となる。(3.3.2) より

$$A = x_a, \quad B = \frac{x_b - x_a \cos \omega T}{\sin \omega T}$$

なので

$$\begin{aligned}
 B^2 - A^2 &= \left(\frac{x_b - x_a \cos \omega T}{\sin \omega T} \right)^2 - x_a^2 \\
 &= \frac{1}{\sin^2 \omega T} \left\{ x_b^2 + x_a^2 (\cos^2 \omega T - \sin^2 \omega T) - 2x_a x_b \cos \omega T \right\} \\
 AB &= x_a \frac{x_b - x_a \cos \omega T}{\sin \omega T}
 \end{aligned}$$

を(3.3.3)に入れると, 1次元調和振動子の古典的作用積分は

$$S_{cl} = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} \left\{ (x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b \right\} \tag{3.3.4}$$

と得られる。ファインマン核は(3.1.12)より

$$\begin{aligned}
 K(b, a) &= F(T) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{cl} \right] \\
 &= F(T) \exp \left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} \left\{ (x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b \right\} \right]
 \end{aligned} \tag{3.3.5}$$

と求まる。

- コニー：調和振動子の場合, $F(t)$ はどのようなものかしら？
- K氏：結果だけを書いておくと

$$F(T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \tag{3.3.6}$$

この式の導出は第4話で行う。 $\omega \rightarrow 0$ の極限では当然だが自由粒子のファインマン核になる。

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{x}{\sin x} = 1$$

を使えば

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\omega}{\sin \omega t} = \frac{1}{t} \lim_{x \rightarrow 0} \frac{x}{\sin x} = \frac{1}{t}$$

となるので

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} K(b, a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}} \exp \left[\frac{i m (x_b - x_a)^2}{\hbar 2(t_b - t_a)} \right] \quad (3.3.7)$$

これは (3.1.9) の自由粒子のファインマン核と一致する。

第4話 フーリエ展開

フーリエ展開を活用してファインマン核を求めていくというお話で，具体的には1次元調和振動子と一定の外力を受けて運動している粒子（ラグランジアンは2次形式で与えられる）を取り上げる。これらのファインマン核は

$$K = F(T)e^{(i/\hbar)S_c[b,a]}, \quad (T = t_b - t_a) \quad (4.0.1)$$

で表され，関数 $F(T)$ の具体的表式を求めていく。

4.1 2次形式のラグランジアン

ラグランジアンが変数 x と \dot{x} の2次の多項式で与えられる場合を考える¹。ラグランジアンが

$$L(\dot{x}, x, t) = a(t)\dot{x}^2 + b(t)\dot{x}x + c(t)x^2 + d(t)\dot{x} + e(t)x + f(t) \quad (4.1.1)$$

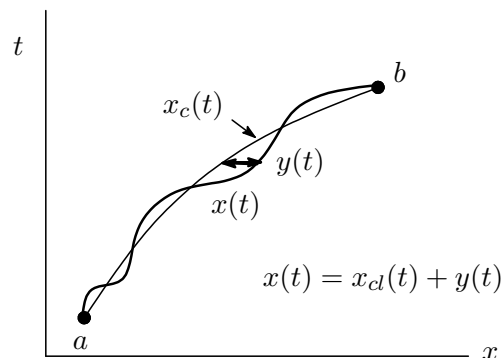
で与えられるような粒子の運動を考えよう。ファインマン核は

$$K(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}x(t) e^{(i/\hbar)S[b,a]} = \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt L(\dot{x}, x, t) \right] \quad (4.1.2)$$

さて， $t = t_a$ で $x = x_a$ を出発し， $t = t_b$ で x_b に至る古典的経路 $x_c(t)$ とすると，これは作用 S の極値を与える経路である。 $x_c(t)$ とは別の可能な経路を $x(t)$ とし，古典的経路からのズレを示す新しい変数 $y(t)$ を導入する。

$$x(t) = x_c(t) + y(t) \quad \begin{cases} y(t_a) = 0 \\ y(t_b) = 0 \end{cases} \quad (4.1.3)$$

$y(t)$ は両端点では $y(t_a) = y(t_b) = 0$ であるが，その間では任意の形をとり得る。古典的経路 $x_c(t)$ は完全に固定²されているので，経路 $x(t)$ を任意に変えることは $y(t)$ を変えることと同じになり， $x(t)$ の動きと $y(t)$ の動きは1対1に対応する。時刻 t_i における値を x_i, y_i とすれば両者は定数 $x_c(t_i)$ しか変わらないので $dx_i = dy_i$ となり，これに



¹このケースでは経路積分はガウス積分になるので積分は可能。

² $x_c(t)$ は経路に関する積分において定数

より $Dx(t) = Dy(t)$ とおくことができる。作用積分は

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= S[x_c(t) + y(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(\dot{x}_c + \dot{y}, x_c + y, t) \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt [a(\dot{x}_c + \dot{y})^2 + b(\dot{x}_c + \dot{y})(x_c + y) + c(x_c + y)^2 + d(\dot{x}_c + \dot{y}) + e(x_c + y) + f] \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt \{L(\dot{x}_c, x_c, t) + [(b\dot{x}_c + 2cx_c + e)y + (2a\dot{x}_c + bx_c + d)\dot{y}] + (a\dot{y}^2 + by\dot{y} + cy^2)\} \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

となる。ラグランジアンを2次元テイラー展開すると

$$\begin{aligned} L(\dot{x}_c + \dot{y}, x_c + y, t) &= L(\dot{x}_c, x_c, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[y \frac{\partial}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial}{\partial \dot{x}} \right]_{x=x_c}^n L(\dot{x}_c, x_c, t) \\ &= L + \left[\frac{\partial L}{\partial x} y + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{y} \right] + \frac{1}{2} \left[y^2 \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} + 2y\dot{y} \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} + \dot{y}^2 \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \right] + \dots \end{aligned}$$

となるので、作用積分 S は

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= \int_{t_a}^{t_b} dt L(\dot{x}_c + \dot{y}, x_c + y, t) \\ &= S[x_c] + \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x=x_c} y + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{x=x_c} \dot{y} \right\} \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \Big|_{x=x_c} y^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \Big|_{x=x_c} y\dot{y} + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \Big|_{x=x_c} \dot{y}^2 \right\} + \dots \\ &= S[x_c] + \delta S[x_c] + \delta^2 S[x_c] + \dots \end{aligned} \quad (4.1.5)$$

と展開できる。 $\delta S[x_c]$, $\delta^2 S[x_c]$ はそれぞれ1次, 2次の変分である。ラグランジアン(4.1.1)を使って具体的に計算すると

$$\begin{cases} \delta S[x_c] = (b(t)\dot{x}_c + 2c(t)x_c + e)y + (2a(t)\dot{x}_c + b(t)x_c + d)\dot{y} \\ \delta^2 S[x_c] = a(t)\dot{y}^2 + b(t)y\dot{y} + c(t)y^2 \end{cases} \quad (4.1.6)$$

となり, (4.1.4) は

$$S[x(t)] = S[x_c] + \delta S[x_c] + \delta^2 S[x_c] \quad (4.1.7)$$

と書けるが, 古典的軌道は $\delta S[x_c] = 0$ を満たすので

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= S[x_c] + \delta^2 S[x_c] \\ &= S_c[b, a] + \int_{t_a}^{t_b} dt [a(t)\dot{y}^2 + b(t)y\dot{y} + c(t)y^2] \end{aligned} \quad (4.1.8)$$

となる。すべての経路 $y(t)$ は $y = 0$ から出発して $y = 0$ に戻るなので, 経路についての積分は両端点の

時刻のみに依存し、ファインマン核は

$$\begin{aligned}
 K(b, a) &= \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{D}x(t) e^{(i/\hbar)S[b,a]} \\
 &= \int_0^1 \mathcal{D}y(t) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ S[x_c] + \int_{t_a}^{t_b} dt [a(t)\dot{y}^2 + b(t)y\dot{y} + c(t)y^2] \right\} \\
 &= \int_0^1 \mathcal{D}y(t) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \int_{t_a}^{t_b} dt [a(t)\dot{y}^2 + b(t)y\dot{y} + c(t)y^2] \right\} e^{(i/\hbar)S_c[b,a]} \\
 &= F(t_b, t_a) e^{(i/\hbar)S_c[b,a]} \tag{4.1.9}
 \end{aligned}$$

$$\text{ただし, } F(t_b, t_a) = \int_0^1 \mathcal{D}y(t) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \int_{t_a}^{t_b} dt [a(t)\dot{y}^2 + b(t)y\dot{y} + c(t)y^2] \right\} \tag{4.1.10}$$

と表され、 K は t_b, t_a の関数 $F(t_b, t_a)$ を除いて古典的軌道によって決定されることになる。つまり、(4.1.9) の左辺の項 $e^{(i/\hbar)S_c[b,a]}$ は古典軌道からの寄与で、 $F(t_b, t_a)$ は古典軌道のまわりの量子力学的な揺らぎを表している³。

4.2 フーリエ級数展開

4.2.1 1次元調和振動子のファインマン核

第3話で1次元調和振動子のファインマン核を求めた際、 $F(t)$ の具体的な形が不明であったが、ここではフーリエ展開を活用して $F(t)$ を具体的に求めていく。

(4.1.9) よりファインマン核は

$$\begin{aligned}
 K(b, a) &= \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) \right] \\
 &= F(T) e^{(i/\hbar)S_c[b,a]}, \quad (T = t_b - t_a) \\
 S_c[b, a] &= \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} \{ (x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b \} \\
 F(T) &= \int_0^1 \mathcal{D}y(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \frac{m}{2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) \right] \tag{4.2.1}
 \end{aligned}$$

と表せる。すべての経路 $y(t)$ は $t=0$ で $y(0)=0$ から出発して $t=T$ で $y(T)=0$ に到達する周期関数となるので、 $y(t)$ を基本周期 T のフーリエ正弦級数⁴で表す。なお、係数 a_n の個数は有限個の N と仮定する。

$$y(t) = \sum_n^N a_n \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right) \tag{4.2.2}$$

³作用（停留値）が最小（極小）になる条件は2次の変分が正であることが必要（H.Pの数学コーナー：「変分法談義第1話」参照）。詳細は省くが、このケースでは2次の変分が正となることが示される。

⁴奇関数はフーリエ正弦級数で表せる。ちなみに偶関数はフーリエ余弦級数で、どちらでもない関数はフーリエ正弦級数とフーリエ余弦級数の和で表される。

時刻 t_i におけるいろいろな経路を $y_i(t)$ とすると行列表記で

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \mathbf{J} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \quad (4.2.3)$$

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \sin \left[\frac{1 \cdot \pi}{T} \right] t_1 & \sin \left[\frac{2 \cdot \pi}{T} \right] t_1 & \cdots & \sin \left[\frac{N \cdot \pi}{T} \right] t_1 \\ \sin \left[\frac{1 \cdot \pi}{T} \right] t_2 & \sin \left[\frac{2 \cdot \pi}{T} \right] t_2 & \cdots & \sin \left[\frac{N \cdot \pi}{T} \right] t_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sin \left[\frac{1 \cdot \pi}{T} \right] t_N & \sin \left[\frac{2 \cdot \pi}{T} \right] t_N & \cdots & \sin \left[\frac{N \cdot \pi}{T} \right] t_N \end{pmatrix} \quad (4.2.4)$$

と表せる。運動エネルギーの項は⁵

$$\begin{aligned} \int_0^T dt \dot{y}^2 &= \sum_n \sum_m \frac{n\pi}{T} \frac{m\pi}{T} a_n a_m \int_0^T dt \cos \left(\frac{n\pi t}{T} \right) \cos \left(\frac{m\pi t}{T} \right) \\ &= T \cdot \frac{1}{2} \sum_n \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2 \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

同様にポテンシャルエネルギーの項は

$$\begin{aligned} \int_0^T dt y^2 &= \sum_n \sum_m a_n a_m \int_0^T dt \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right) \sin \left(\frac{m\pi t}{T} \right) \\ &= T \cdot \frac{1}{2} \sum_n a_n^2 \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

となる。経路を t における y の値の関数と考える代わりに、係数 a_n の関数と考えると、 $F(T)$ は次のようになる（注：係数 A は $1/A$ に書き換えた： $A = 1/\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}}$ ）

$$F(T) = \det \mathbf{J} \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_1}{A} \frac{da_2}{A} \cdots \frac{da_N}{A} \exp \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{imT}{2\hbar} \left[\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 \right\} \quad (4.2.7)$$

ただし、 $\det \mathbf{J}$ は変数変換にともなうヤコビアン（ヤコビ行列式）で

$$\int \int \cdots \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N = \det \mathbf{J} \int \int \cdots \int da_1 da_2 \cdots da_N$$

ガウス積分の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

を使って、(4.2.7) の一つの積分を実行すると

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_n}{A} \exp \left\{ \frac{imT}{2\hbar} \left[\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 \right\} \\ &= \frac{1}{A} \left\{ \frac{-\pi}{\frac{imT}{2\hbar} \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)} \right\}^{1/2} = \left\{ \frac{T}{\varepsilon (n^2\pi^2 - \omega^2 T^2)} \right\}^{1/2} = \left(\frac{N}{n^2\pi^2 - \omega^2 T^2} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

⁵ $\int_0^T dt \cos \left(\frac{n\pi t}{T} \right) \cos \left(\frac{m\pi t}{T} \right) = \frac{mT \cos n\pi \sin m\pi - nT \cos m\pi \sin n\pi}{(m^2 - n^2)\pi} = 0 \quad (m^2 \neq n^2)$

となる。ただし, $T = N\varepsilon$ の関係を使った。したがって, (4.2.7) は

$$\begin{aligned}
 F(T) &= \det \mathbf{J} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \prod_{n=1}^N \left(\frac{N}{n^2 \pi^2 - \omega^2 T^2} \right)^{1/2} \\
 &= \det \mathbf{J} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} N^{N/2} \prod_{n=1}^N \left(\frac{1}{1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2}} \right)^{1/2} \prod_{n=1}^N \frac{1}{n\pi} \\
 &= \det \mathbf{J} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \frac{N^{N/2}}{\pi^N} \prod_{n=1}^N \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-1/2} \prod_{n=1}^N \frac{1}{n}
 \end{aligned} \tag{4.2.9}$$

と展開でき, x の2次式の無限乗積の公式

$$\prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{n^2} \right) = \frac{\sin \pi x}{\pi x} \tag{4.2.10}$$

を使えば

$$\begin{aligned}
 F(T) &= \det \mathbf{J} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \frac{N^{N/2}}{\pi^N} \left(\frac{\omega T}{\sin \omega T} \right)^{1/2} \prod_{n=1}^N \frac{1}{n} = \det \mathbf{J} \frac{N^{N/2}}{\pi^N} \left(\frac{m\omega T}{2\pi i \hbar \varepsilon \sin \omega T} \right)^{1/2} \prod_{n=1}^N \frac{1}{n} \\
 &= \det \mathbf{J} \sqrt{N} \left(\frac{\sqrt{N}}{\pi} \right)^N \prod_{n=1}^N \frac{1}{n} \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2}
 \end{aligned} \tag{4.2.11}$$

$\omega \rightarrow 0$ のとき, $F(T)$ は自由粒子のそれに等しい。自由粒子の $F(T)$ は (3.1.12) より

$$F(T) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2} \tag{4.2.12}$$

$\omega \rightarrow 0$ で

$$\det \mathbf{J} \left(\frac{mN}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2} \frac{N^{N/2}}{\pi^N} \prod_{n=1}^N \frac{1}{n} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2}$$

が成り立ち, これから

$$\det \mathbf{J} \sqrt{N} \left(\frac{\sqrt{N}}{\pi} \right)^N \prod_{n=1}^N \frac{1}{n} = 1 \tag{4.2.13}$$

を得る。したがって, 求める $F(T)$ は

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \tag{4.2.14}$$

$K(b, a)$ は

$$K(b, a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega T} \{ (x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2 x_a x_b \} \right] \tag{4.2.15}$$

4.2.2 一定の外力を受けて運動している粒子のファインマン核

系のラグランジアンが

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} + fx \quad (m\ddot{x} - f = 0) \tag{4.2.16}$$

で表されるとする。ファインマン核は $y(t) = x(t) - x_c$ として

$$K(b, a) = F(T)e^{(i/\hbar)S_c[b,a]} \quad (4.2.17)$$

$$F(T) = \int_0^T \mathcal{D}y(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left(\frac{m}{2} \dot{y}^2 + fy \right) \right] \quad (4.2.18)$$

作用積分 S_c は (3.1.36) で $F \rightarrow -f$ とすればいいので

$$S_c = \frac{1}{2} \left[\frac{m}{T} (x_b - x_a)^2 + fT(x_b + x_a) - \frac{f^2 T^3}{12m} \right] \quad (4.2.19)$$

$F(t)$ を具体的に求めていこう。 $y(t)$ をフーリエ正弦級数に展開して

$$y(t) = \sum_n^N a_n \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right) \quad (4.2.20)$$

これから

$$\int_0^T dt \dot{y}^2 = \sum_n \sum_m \frac{n\pi}{T} \frac{m\pi}{T} a_n a_m \int_0^T dt \cos \left(\frac{n\pi t}{T} \right) \cos \left(\frac{m\pi t}{T} \right) = \frac{T}{2} \sum_n \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2 \quad (4.2.21)$$

$$\int_0^T dt fy = f \sum_n a_n \int_0^T dt \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right) = fT \sum_n a_n \left(\frac{1 - \cos n\pi}{n\pi} \right) = 0 \quad (4.2.22)$$

これを (4.2.18) の指数部に入れると

$$\int_0^T dt \left(\frac{m}{2} \dot{y}^2 + fy \right) = \frac{mT}{2} \sum_n \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2 \quad (4.2.23)$$

したがって (4.2.18) は

$$F(T) = \int_0^T \mathcal{D}(y) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{mT}{2} \sum_n \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2 \right] \quad (4.2.24)$$

となる。この積分計算の結果は (4.2.14) で $\omega \rightarrow 0$ としたものに等しいので

$$F(T) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar T \sin \omega T}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \quad (4.2.25)$$

したがって、ファインマン核は

$$\begin{aligned} K(b, a) &= F(T)e^{(i/\hbar)S_c[b,a]} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \left[\frac{m}{T} (x_b - x_a)^2 + fT(x_b + x_a) - \frac{f^2 T^3}{12m} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.2.26)$$

と得られる。

第5話 量子力学における摂動論

摂動論を使ってポテンシャルによる粒子の散乱を考える。1次ボルン近似からラザフォード散乱の微分断面積の公式を導く。

5.1 続いて起こる事象

$a \rightarrow b$ への確率振幅を与えるファインマン核 $K(b, a)$ は (2.3.26) で与えられ

$$K(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}x(t) e^{\frac{iS}{\hbar}} \quad (5.1.1)$$

で, $\int_a^b \mathcal{D}x(t)$ は a から b にいくすべての経路の和を意味した。時刻 t_a と t_b の間の時刻を t_c とすると, 作用は

$$\begin{aligned} S[b, a] &= \int_{t_a}^{t_b} dt L(x(t), \dot{x}(t), t) = \int_{t_a}^{t_c} dt L(x(t), \dot{x}(t), t) + \int_{t_c}^{t_b} dt L(x(t), \dot{x}(t), t) \\ &= S[b, c] + S[c, a] \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

と書く¹ことができるので, ファインマン核は

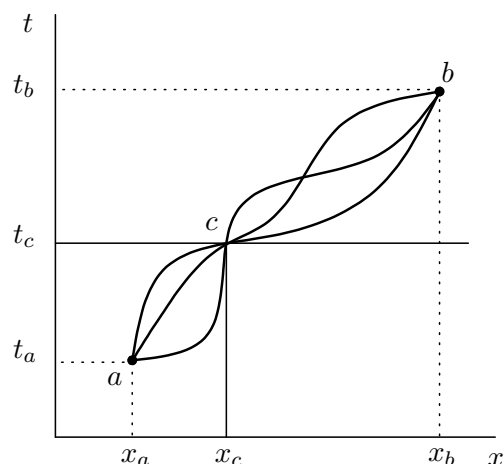
$$K(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}x(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[c, b] + \frac{i}{\hbar} S[a, c]} \quad (5.1.3)$$

と表せる。

さて, どの経路も a から c に至る経路と c から b に至る経路の2つに部分に分割することができることに注意しよう。 a から c に至るすべての経路について積分し (このとき $S[b, c]$ は定数と見なす), 次に c から b に至るすべての経路について積分し, 最後にその結果を途中の経過点である x_c のすべての可能な値について積分すればいいわけである。 ということファインマン核は

$$\begin{aligned} K(b, a) &= \int dx_c \left[\int_b^c \mathcal{D}x(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[c, b]} \int_c^a \mathcal{D}x(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[c, a]} \right] \\ &= \int dx_c K(b, c) K(c, a) \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

時刻 t_c において x_c を通る経路についての和をとり, その後で x_c についての和をとる。 c を経由して a から b に至る全確率振幅は $K(b, c)K(c, a)$ であるので, x_c の値についての和をとると, a から b に至る全確率振幅が得られる。



¹ 右側から左側へ事象の変化を書く慣わしに従う。

と表すことができます²。要約すれば、 a から b に至る粒子の振幅は

1. a から b に至る粒子の確率振幅は、 a から c に至りそれから b に至る確率振幅を x_c のすべての可能な値について足し合わせたものである。
2. a から c に至り、 c から b に至る確率振幅は、 a から c に至る確率振幅と c から b に至る確率振幅との積である。

ということから、「時間的に続いて起こる事象全体の確率振幅はそれぞれの事象の積である」という規則を得る。

上の議論を拡張すると、 a から d に行き、 d から c に、そして最後に c から b に行く粒子の確率振幅 $K(b, a)$ は

$$K(b, a) = \iint dx_c dx_d K(b, c) K(c, d) K(d, a) \tag{5.1.5}$$

と書くことができる。

5.2 ポテンシャルによる粒子の散乱

1次元空間を考える。ポテンシャル $V(x, t)$ の中で運動する粒子のラグランジアンは

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) \tag{5.2.1}$$

ファインマン核は

$$K_V(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) \right] \right\} \tag{5.2.2}$$

粒子の運動に対するポテンシャルの影響が小さいと見なせる場合³、(5.1.4)の指数関数部のポテンシャル $V(x, t)$ の部分を

$$\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V(x, t) \right] = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V(x, t) + \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \left[\int_{t_a}^{t_b} dt V(x, t) \right]^2 + \dots \tag{5.2.3}$$

とテイラー展開する。これを (5.2.2) に入れると

$$\begin{aligned} K_V(b, a) &= \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 \right) \left\{ 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} ds V(x, s) + \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \left[\int_{t_a}^{t_b} ds V(x, s) \right]^2 + \dots \right\} \\ &= \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 \right) - \frac{i}{\hbar} \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 \right) \int_{t_a}^{t_b} ds V(x, s) \\ &\quad - \frac{1}{2\hbar^2} \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 \right) \int_{t_a}^{t_b} ds V(x(s), s) \int_{t_a}^{t_b} ds' V(x(s'), s') + \dots \\ &= K_0(b, a) + K_1(b, a) + K_2(b, a) + \dots \end{aligned} \tag{5.2.4}$$

²通常量子力学での $\langle \chi | \phi \rangle = \sum_{i=all} \langle \chi | i \rangle \langle i | \phi \rangle$ を思いだそう。

詳細は量子力学コーナーのレポート「ブラケット算法について」を参照されたし。

³ポテンシャルが十分ゆっくり変化する関数であるとする。

となる。時間変数は s に書き換えた。ここで

$$K_0(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2\right) \quad (5.2.5)$$

$$K_1(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2\right) \int_{t_a}^{t_b} ds V(x(s), s) \quad (5.2.6)$$

$$K_2(b, a) = -\frac{1}{2\hbar^2} \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2\right) \int_{t_a}^{t_b} ds V(x(s), s) \int_{t_a}^{t_b} ds' V(x(s'), s') \quad (5.2.7)$$

K_0 は自由粒子のファインマン核でとくに取り上げる必要はないので、 $K_1(b, a)$ を診ていくことにしよう。変数 s についての積分と経路 $x(t)$ についての積分の順序を入れ替えて

$$\begin{aligned} K_1(b, a) &= -\frac{i}{\hbar} \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2\right) \int_{t_a}^{t_b} ds V(x, s) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} ds \left[\int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2\right) V(x(s), s) \right] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} ds F(s) \end{aligned} \quad (5.2.8)$$

$$F(s) = \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2\right) V[x(s), s] \quad (5.2.9)$$

と書く。 $F(s)$ は自由粒子の確率振幅をすべての経路について加え合わせたもので、それぞれの経路は時刻 s におけるポテンシャル $V[x(s), s]$ の重みづけがされている。ただし、この特定の V に効いてくる経路 $x(t)$ の寄与は、特定の時刻 $t = s$ における経路の位置のみで、時刻 s の前後では $F(s)$ の中の経路は自由粒子の経路である。

さて、前節の議論を使って、経路を $t = s$ 以前と $t = s$ 以後の2つの部分に分けよう。それぞれの経路は自由粒子の経路で表されるので、すべてのこのような経路についての和は $K_0(b, c)K_0(c, a)$ と書ける。これより $F(s) = F(t_c)$ は次のように表せる⁴。

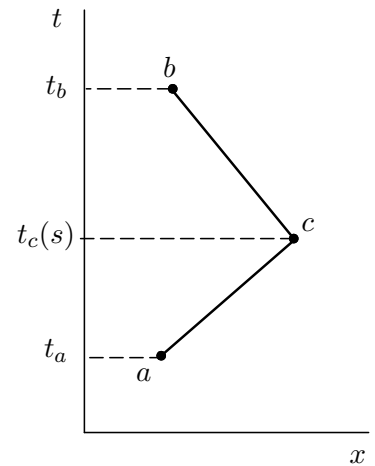
$$F(t_c) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K_0(b, c) V(x_c, t_c) K_0(c, a) \quad (5.2.10)$$

これを (5.2.8) に入れて

$$K_1(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt_c \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K_0(b, c) V(x_c, t_c) K_0(c, a) \quad (5.2.11)$$

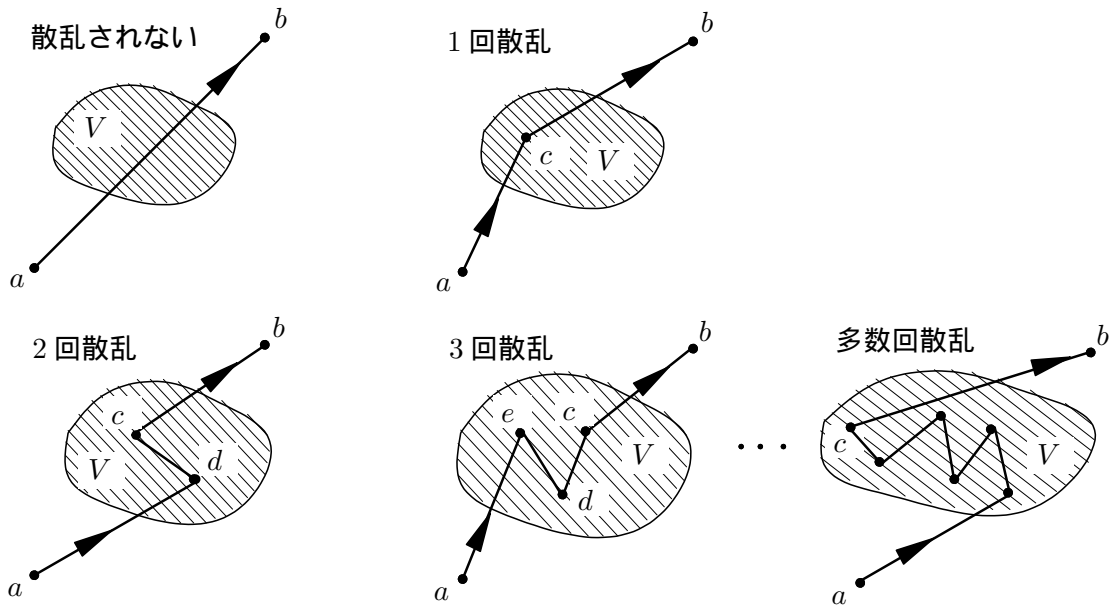
が得られる。 a から出発した粒子は点 $x_c, t_c = c$ まで自由粒子として運動し、時刻 t_c の一瞬にポテンシャル $V(x_c, t_c)$ によって散乱され、その後また自由粒子として点 c から最終点 b まで自由運動していくという経路に対する確率振幅は

$$K_0(b, c) \left[-\frac{i}{\hbar} V(x_c, t_c) dx_c dt_c \right] K_0(c, a) \quad (5.2.12)$$



⁴ $V(x_c, t_c)$ は経路にかかる重み

で表される。(5.2.11)はこのすべての経路について足し合わせたものであり、ポテンシャル V で粒子が1回散乱されたときの確率振幅を表す。



同じようにして、 a から出発した粒子は自由粒子として点 x_d, t_d まで動き、そこでポテンシャル $V(x_d, t_d)$ によって散乱される。それから自由粒子として点 d から c まで動き、そこでポテンシャル $V(x_c, t_c)$ によって散乱され、その後、再び自由粒子として最終点 b まで動くという経路に対する確率振幅は

$$K_0(b, c) \left[-\frac{i}{\hbar} V(x_c, t_c) dx_d dt_d \right] K_0(c, d) \left[-\frac{i}{\hbar} V(x_d, t_d) dx_d dt_d \right] K_0(d, a) \\ = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 K_0(b, c) V(c) K_0(c, d) V(d) K_0(d, a) \quad (5.2.13)$$

で、すべての経路について和をとった核 $K_2(b, a)$ の完全形は

$$K_2(b, a) = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int d\tau_c \int d\tau_d K_0(b, c) V(c) K_0(c, d) V(d) K_0(d, a) \quad (5.2.14)$$

となる。 $V(c)$ は $V(x_c, t_c)$ を簡略表示した。 $V(d)$ についても同じ。また、 $d\tau_d = dt_d dx_d$ で $\int d\tau_d$ 等は

$\int_{t_a}^{t_b} dt_d \int_{-\infty}^{\infty} dx_d$ を表す。なお、時間変数は暗黙のうちに $t_c > t_d$ を仮定しているが、 $K(b, a)$ は $t_b > t_a$ でのみ定義される、つまり

$$K(b, a) = 0 \quad [t_b < t_a] \quad (5.2.15)$$

と条件を付けることで時間順序の仮定をおく煩雑さを避けられる。

ところで、(5.2.7)での因子 $1/2$ は(5.2.14)で現れていないが、これは別に省略したのではなく、(5.2.7)の2重積分を調べればすぐわかる。

$$\int_{t_a}^{t_b} ds' \longrightarrow \int_{t_a}^s ds' + \int_s^{t_b} ds' \quad (t_a < s < t_b)$$

と2つに分けると

$$\begin{aligned} & \int_{t_a}^{t_b} ds \int_{t_a}^{t_b} ds' V[x(s), s] V[x(s'), s'] \\ &= \int_{t_a}^{t_b} ds \int_s^{t_b} ds' V(x(s), s) V(x(s'), s') + \int_{t_a}^{t_b} ds \int_{t_a}^s ds' V(x(s), s) V(x(s'), s') \end{aligned} \quad (5.2.16)$$

右辺第2項の積分順序を交換する。 s と s' の定義域は

$$\begin{cases} t_a \leq s \leq t_b \\ t_a \leq s' \leq s \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} s' \leq s \leq t_b \\ t_a \leq s' \leq t_b \end{cases} \quad (5.2.17)$$

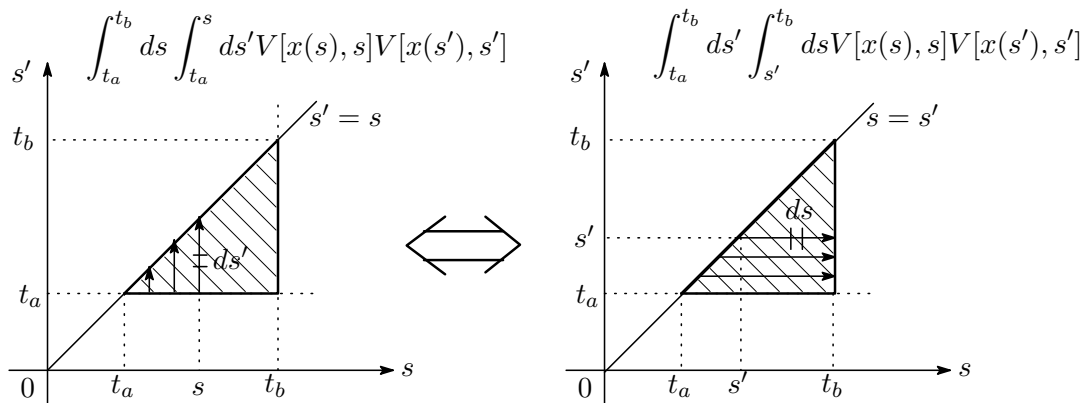
となる ([注]) , ので積分の順序交換による変数の定義域に注意すれば

$$\int_{t_a}^{t_b} ds \int_s^{t_b} ds' V[x(s), s] V(x(s'), s') = \int_{t_a}^{t_b} ds' \int_{s'}^{t_b} ds V[x(s), s] V[x(s'), s'] \quad (5.2.18)$$

と書ける。右辺の s と s' を入れ替えても積分の値は変わらないので, 結局 (5.2.16) の右辺第1項と第2項は等しく, それぞれ元の2重積分の値の半分であることがわかる。つまり, (5.2.7) の因子1/2は時間順序の仮定が考慮されていないことによる重複分の補正をしていることになる⁵。

[注] 積分変数の順序交換

2重積分の領域は図の三角形の斜線領域内。積分変数の順序を交換すると, 変数の定義域が変わることに注意されたし。



変数 s を固定し, それぞれの s に対して $t_a \leq s' \leq t_b$ の区間で変数 s' について積分する。次に $t_a \leq s \leq t_b$ の区間で変数 s で積分する。

変数 s' を固定し, それぞれの s' に対して $s' \leq s \leq t_b$ の区間で変数 s について積分する。次に $t_a \leq s' \leq t_b$ の区間で変数 s' で積分する。

⁵より高次の項についても同じ理由で分母の $n!$ という因子は打ち消されます。

これまでに得られた結果を使って (5.2.4) を書くと

$$\begin{aligned}
 K_V(b, a) &= K_0(b, a) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) \\
 &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int d\tau_c \int d\tau_d K_0(b, c) V(c) K_0(c, d) V(d) K_0(d, a) + \dots \\
 &= K_0(b, a) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c K_0(b, c) V(c) \left[K_0(c, a) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_d K_0(c, d) V(d) K_0(d, a) + \dots \right] \quad (5.2.19)
 \end{aligned}$$

となる。ここで右辺の [] 内の項は

$$K_V(c, a) = K_0(c, a) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_d K_0(c, d) V(d) K_0(d, a) + \dots \quad (5.2.20)$$

と書けるので, (5.2.4) は

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c K_0(b, c) V(c) K_V(c, a) \quad (5.2.21)$$

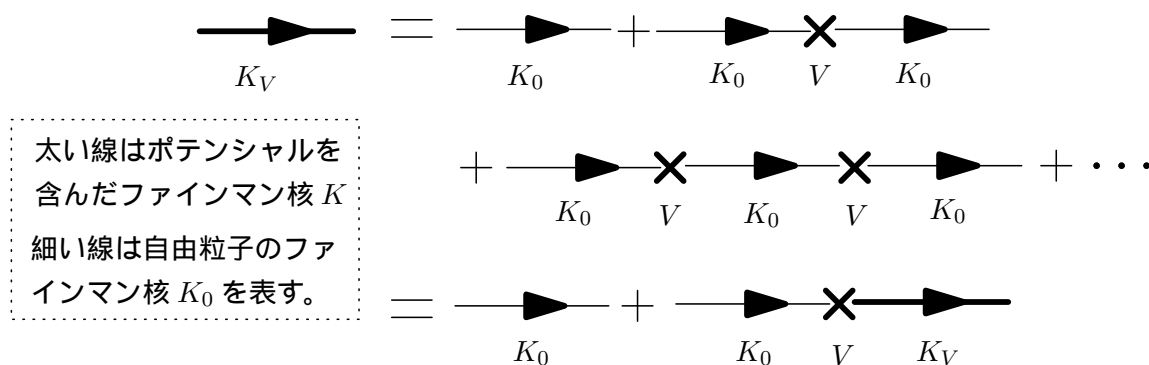
という積分方程式になる。この式の物理的意味は次の通りで, 右辺第1項は自由粒子のファインマン核。第2項はポテンシャル V により1回以上散乱され, 最後に点 c で散乱されて c から b へ遷移していくことを表している。なお, 点 c は a と b の間の任意の時間・空間ので起こりうるので $\int d\tau_c = \int_{t_a}^{t_b} dt_c \int_{-\infty}^{\infty} dx_c$ と積分をしている。なお, (5.2.19), (5.2.21) は

$$K_V = K_0 + K_0 V K_V = K_0 + K_0 V K_0 + K_0 V K_0 V K_0 + \dots \quad (5.2.22)$$

と記号的に表すことができる。ただし,

$$\left\{ \begin{aligned}
 K_0 V K_0 &= -\frac{i}{\hbar} \int d\tau_c K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) \\
 K_0 V K_0 V K_0 &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int d\tau_c \int d\tau_d K_0(b, c) V(c) K_0(c, d) V(d) K_0(d, a) \\
 &\quad \vdots \\
 K_0 V K_V &= -\frac{i}{\hbar} \int d\tau_c K_0(b, c) V(c) K_V(c, a)
 \end{aligned} \right. \quad (5.2.23)$$

これを下図のように図形で表したものをファインマンダイアグラム⁶という。



⁶ 森藤正人著「量子波のダイナミクス」吉岡書店, 2005年参照

第3話の(3.2.2)で波動関数とファインマン核との関係式

$$\psi(x_2, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 K(x_2, t_2; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) \quad (5.2.24)$$

を示した。これを次のように書く。

$$\psi(b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_a K_V(b, a) f(a) \quad (5.2.25)$$

$\psi(b)$, $f(a)$ はそれぞれ時刻 $t = t_b (> t_a)$, $t = t_a$ における波動関数。(5.2.19)を上式に入れると

$$\begin{aligned} \psi(b) &= \int dx_a K_0(b, a) f(a) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c \int dx_a K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) f(a) + \dots \\ &= \phi(b) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c K_0(b, c) V(c) \phi(c) \\ &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int d\tau_c \int d\tau_d K_0(b, c) V(c) K_0(c, d) V(d) \phi(d) + \dots \end{aligned} \quad (5.2.26)$$

と表せる。ただし

$$\phi(b) = \int dx_a K_0(b, a) f(a) \quad (5.2.27)$$

さて、ポテンシャル V が時間に依存しない弾性散乱（衝突前後で粒子のエネルギーが変わらない）を考えよう⁷。この場合、(5.2.26)をボルン展開と呼び、 $\psi(b)$ を右辺第2項までで表したものを第1ボルン近似⁸と呼んでいる。

ここで通常の量子力学でハミルトニアンが時間に依存しない定常的な散乱の取り扱いを見てみよう。詳細は「量子力学におけるグリーン関数()」のレポートを参照いただくとして、外向きの散乱波を $\psi^{(+)}(r)$ 、グリーン関数を $G_0^+(r, r')$ とすると散乱後の波動関数（外向き球面波）の形式解はグリーン関数を使って

$$\psi^{(+)}(r) = \psi_0(r) + \int dx' G_0^+(r, r') V(r') \psi^{(+)}(r') \quad (5.2.28)$$

と表され、これを逐次展開して

$$\begin{aligned} \psi^{(+)}(r) &= \psi_0(r) + \int dr' G_0^+(r, r') V(r') \psi_0(r') \\ &\quad + \int dr'' \int dr' G_0^+(r, r') V(r') G_0^+(r', r'') V(r'') \psi_0(r'') + \dots \end{aligned} \quad (5.2.29)$$

を得る。散乱ポテンシャルの影響は小さいと仮定し、(5.2.28)右辺の $\psi^{+}(r')$ を入射平面波 $\psi_0(r) = e^{ik \cdot r}$ で代用する近似が第1ボルン近似である。(5.2.22)に倣って(5.2.28), (5.2.29)を記号的に書けば

$$\psi^{(+)} = \psi_0 + G_0^+ V \psi^{(+)} = \psi_0 + G_0^+ V \psi_0 + G_0^+ V G_0^+ V \psi_0 + \dots \quad (5.2.30)$$

と簡潔に表せる。ここでグリーン関数とファインマン核を見比べると両者はほぼ同じものであることに気付かされる。事実、グリーン関数⁹ $G(x, t; x_0, t_0)$ は

$$G(x, t, x_0, t_0) = -i\theta(t - t_0)K(x, t; x_0, t_0), \quad \theta(t - t_0) = \begin{cases} 1 & t > t_0 \\ 0 & t < t_0 \end{cases} \quad (5.2.31)$$

⁷ $V(c) = V(x_c)$, etc となる。

⁸ 粒子はポテンシャルで1回だけ散乱される。

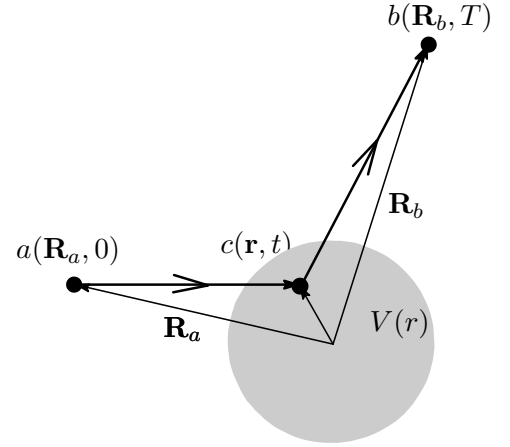
⁹ 正確には遅延グリーン関数という。先進グリーン関数は未来から過去に向かう。

で定義される¹⁰。

さて，第1ボルン近似の2項目の

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int d\tau_c K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) \quad (5.2.32)$$

を計算してみよう。計算に際して次の仮定をしておく。電子は自由電子として運動し，摂動ポテンシャル V の到達距離は短くかつ弱くて，入射電子は原点の近傍のみでポテンシャルの影響を受けて散乱される。また，電子のエネルギーは散乱の前後で変わらないとする。(5.2.32) に自由電子のファインマン核 K_0 を入れると次のように表せる。



$$\begin{aligned} K^{(1)}(b, a) &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3\mathbf{r} \int_0^T dt \left[\frac{m}{2\pi i \hbar (T-t)} \right]^{3/2} \exp \left[\frac{im |\mathbf{R}_b - \mathbf{r}|^2}{2\hbar (T-t)} \right] V(\mathbf{r}) \\ &\quad \times \left[\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right]^{3/2} \exp \left[\frac{im |\mathbf{R}_a - \mathbf{r}|^2}{2\hbar t} \right] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3\mathbf{r} \int_0^T dt \left[\frac{m^2}{2^2 \pi^2 \hbar^2 t (t-T)} \right]^{3/2} \exp \left[\frac{im}{2\hbar} \left(\frac{r_b^2}{T-t} + \frac{r_a^2}{t} \right) \right] \end{aligned} \quad (5.2.33)$$

ただし， $r_a = |\mathbf{R}_a - \mathbf{r}|$ ， $r_b = |\mathbf{R}_b - \mathbf{r}|$ である。(5.2.33) を t について積分する。この積分結果は公式¹¹

$$\text{公式: } \int_0^T \frac{d\tau}{\{(T-\tau)\tau\}^{3/2}} \exp \left(-\frac{a}{T-\tau} - \frac{b}{\tau} \right) = \sqrt{\frac{\pi}{T^3}} \frac{\sqrt{a} + \sqrt{b}}{\sqrt{ab}} \exp \left[-\frac{1}{T} (\sqrt{a} + \sqrt{b})^2 \right]$$

を使えば

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{5/2} T \int d^3\mathbf{r} \left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b} \right) \exp \left[\frac{im}{2\hbar T} (r_a + r_b)^2 \right] V(\mathbf{r}) \quad (5.2.34)$$

と得られる。次に， r_a, r_b の定義より

$$\begin{cases} r_a = \sqrt{(\mathbf{R}_a - \mathbf{r}) \cdot (\mathbf{R}_a - \mathbf{r})} = R_a \left(1 - \frac{2\mathbf{R}_a \cdot \mathbf{r}}{R_a^2} + \frac{r^2}{R_a^2} \right)^{1/2} \\ r_b = \sqrt{(\mathbf{R}_b - \mathbf{r}) \cdot (\mathbf{R}_b - \mathbf{r})} = R_b \left(1 - \frac{2\mathbf{R}_b \cdot \mathbf{r}}{R_b^2} + \frac{r^2}{R_b^2} \right)^{1/2} \end{cases} \quad (5.2.35)$$

仮定より，ポテンシャルが効いている領域 r は $r \ll R_a, R_b$ なので

$$\begin{cases} r_a \simeq R_a - \frac{\mathbf{R}_a \cdot \mathbf{r}}{R_a} = R_a + \mathbf{i}_a \cdot \mathbf{r} \simeq R_a, & (\mathbf{i}_a = -\mathbf{R}_a/R_a) \\ r_b \simeq R_b - \frac{\mathbf{R}_b \cdot \mathbf{r}}{R_b} = R_b - \mathbf{i}_b \cdot \mathbf{r} \simeq R_b, & (\mathbf{i}_b = \mathbf{R}_b/R_b) \\ (r_a + r_b)^2 \simeq (R_a + R_b + \mathbf{i}_a \cdot \mathbf{r} - \mathbf{i}_b \cdot \mathbf{r})^2 = (R_a + R_b)^2 + 2(R_a + R_b)(\mathbf{i}_a \cdot \mathbf{r} - \mathbf{i}_b \cdot \mathbf{r}) \end{cases} \quad (5.2.36)$$

¹⁰1次元自由粒子のグリーン関数は $G(x, t; x_0, t_0) = -i \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t_0)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_0)^2}{2(t-t_0)} \right]$ ， $(t > t_0)$ となることが知られている（例えば L.I. シッフ「量子力学（下）」吉岡書店（1972））。尚，グリーン関数の定義には逆符号や i を除く流儀もあるようである。ファインマン核とグリーン関数の関係は第6話でも取り上げている。

¹¹R.P. ファインマン，A.R. ヒップス：「量子力学と経路積分」みすず書房（2001）の付録参照。

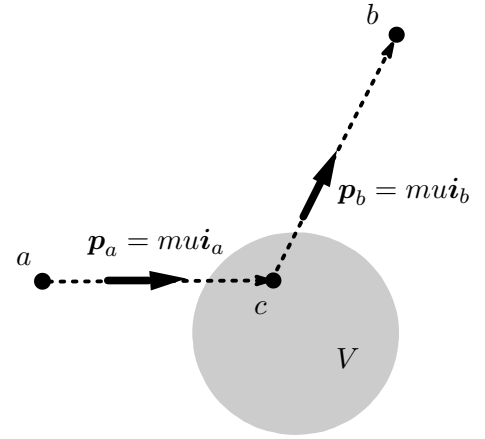
と近似できる。 i_a, i_b それぞれ $-R_a, R_b$ 方向の単位ベクトル。(5.2.36) を (5.2.34) に入れると

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{5/2} T \left(\frac{1}{R_a} + \frac{1}{R_b} \right) \exp \left[\frac{im}{2\hbar T} (R_a + R_b)^2 \right] \\ \times \int d^3 \mathbf{r} \exp \left[\frac{im}{\hbar T} (R_a + R_b) (\mathbf{i}_a \cdot \mathbf{r} - \mathbf{i}_b \cdot \mathbf{r}) \right] V(\mathbf{r}) \quad (5.2.37)$$

となる。

時間 T の間に a 点から飛来した電子が標的に衝突し b 点へ飛び去るまでの飛行距離は $r_a + r_b \simeq R_a + R_b$ で、いま弾性衝突を仮定しているので、この間の電子の速度 u 、エネルギー、運動量はそれぞれ

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{速度の大きさ} : u = \frac{R_a + R_b}{T} \\ \text{エネルギー} : \frac{mu^2}{2} \\ \text{運動量の大きさ} : mu \end{array} \right. \quad (5.2.38)$$



で与えられる¹²。衝突前後の運動量ベクトルをそれぞれ p_a, p_b とすると、単位ベクトル i_a, i_b を使って

$$\left\{ \begin{array}{l} p_a = mu i_a \\ p_b = mu i_b \end{array} \right. \quad (5.2.39)$$

と表せるので、(5.2.37) は

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{5/2} \frac{u}{T^{1/2} R_a R_b} \exp \left(\frac{im}{2\hbar} u^2 T \right) \\ \times \int d^3 \mathbf{r} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b) \cdot \mathbf{r} \right] V(\mathbf{r}) \quad (5.2.40)$$

と書ける。入射電子の始状態と終状態の運動量の変化、すなわち運動量の移行を

$$\mathbf{q} = \mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b \quad (5.2.41)$$

で表し、ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ をフーリエ変換した

$$v(\mathbf{q}) = \int d^3 \mathbf{r} e^{i/\hbar \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad (5.2.42)$$

を定義すると、(5.2.40) は

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{5/2} \frac{u}{T^{1/2} R_a R_b} \exp \left(\frac{im}{2\hbar} u^2 T \right) v(\mathbf{q}) \quad (5.2.43)$$

と表せる。第1ボルン近似でのファインマン核 K_V は

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) + K^{(1)}(b, a) \quad (5.2.44)$$

¹²飛行時間法：一定距離の飛行に要する時間をはかって粒子の速度を知る方法。

で K_0 は標的を素通りした自由電子の確率振幅, $K^{(1)}$ は標的に1回の衝突で散乱された電子の確率振幅。電子が a 点から b 点に到達する確率は $K_V(b, a)$ の絶対値の2乗で与えられるが, コリメーターで絞った入射ビームを標的に照射すれば¹³, 標的を素通りする電子はある特別の直線上に限定されるので, 散乱される電子が b 点に到達する確率は, 少なくとも1次のオーダーで $K^{(1)}(b, a)$ で2乗で与えられる。この確率を $P(b)$ とすると, 検出器の中に電子を見出す単位体積当たりの確率は

$$\frac{P(b)}{\text{単位体積}} = |K^{(1)}(b, a)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^5 \frac{u^2}{TR_a^2 R_b^2} |v(\mathbf{q})|^2 \quad (5.2.45)$$

で与えられる。ただし, この確率には電子の発射位置から標的までの距離 R_a や標的から検出器までの距離 R_b という実験装置のスケールに関する情報が含まれているので, 実験条件に依存することになる。やはり実験条件に依存しない表現が望ましい。そこで散乱断面積という概念を導入する。散乱断面積とは, 入射粒子が散乱される確率を標的の断面積として表わした量で, 各方向ごとの散乱確率を表わす量を微分断面積と呼んでいる。

いま, 標的がないとした場合, 点 d に電子を見出す確率は $K_0(d, a)$ の絶対値の2乗で与えられる。

$$K_0(d, a) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{im(R_a + R_b)^2}{2\hbar T} \right]$$

なので, この確率を $P(d)$ とすると, 単位体積当たりの確率は,

$$\frac{P(d)}{\text{単位体積}} = |K_0(d, a)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^3 \frac{1}{T^3} = \frac{u^2}{T(R_a + R_b)^2} \quad (5.2.46)$$

となり, (5.2.45) と (5.2.46) から

$$\frac{P(b)}{P(d)} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |v(\mathbf{q})|^2 \frac{(R_a + R_b)^2}{R_a^2 R_b^2} \quad (5.2.47)$$

が得られる。

点 a から出発した電子ビームが距離 R_a にある断面積 $d\sigma$ の小さな標的に衝突すれば, 散乱角 θ 方向の立体角 $d\Omega$ 内に散乱され, 散乱ビームは b の領域で面積 $R_b^2 d\Omega$ に広がるので, b 点に電子を見出す確率は b の近傍領域の面積 $R_b^2 d\Omega$ に反比例する。標的が存在しなければ電子ビームは d の領域で $[(R_a + R_b)/R_a]^2 d\sigma$ の面積に拡がり, d 点に電子を見出す確率は d の近傍領域の面積 $[(R_a + R_b)/R_a]^2 d\sigma$ に反比例する。

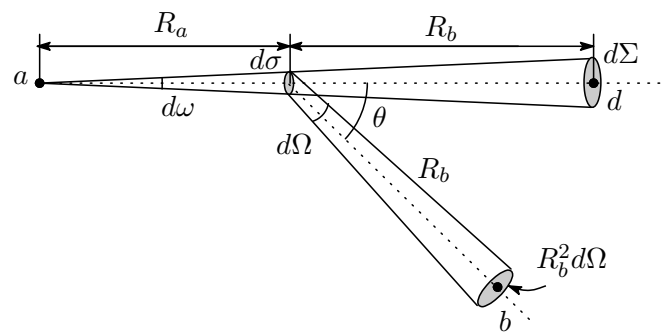
$$\begin{cases} P(b) \propto \frac{1}{R_b^2 d\Omega} \\ P(d) \propto \frac{1}{[(R_a + R_b)/R_a]^2 d\sigma} \end{cases} \longrightarrow \frac{P(b)}{P(d)} = \frac{[(R_a + R_b)^2]}{R_a^2 R_b^2} \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (5.2.48)$$

(5.2.47) と (5.2.48) より, 単位立体角当たりの断面積¹⁴は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |v(\mathbf{q})|^2 \quad (5.2.49)$$

¹³ただし, 極微な標的原子から見れば入射電子ビームは1つの線源から全方向に広がる電子からなるように見える。

¹⁴微分断面積という。



となることが分かる¹⁵

5.2.1 ラザフォード散乱

ポテンシャルが中心力 $V(\mathbf{r}) = V(r)$ である場合, (5.2.42) を極座標表示に書き換える。 $d^3\mathbf{r} = r^2 \sin\eta dr d\eta d\phi$ なので

$$\begin{aligned} v(\mathbf{q}) &= v(q) = \int d^3\mathbf{r} e^{i/\hbar \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(r) \\ &= \int_0^\infty dr r^2 V(r) \int_0^\pi d\eta \sin\eta \exp\left(\frac{i}{\hbar} qr \cos\eta\right) \int_0^{2\pi} d\phi \end{aligned} \quad (5.2.50)$$

ここで $\xi = \cos\eta$ とおくと $d\xi = -\sin\eta d\eta$ なので

$$\int_0^\pi d\eta \sin\eta e^{i/\hbar qr \cos\eta} = \int_{-1}^1 d\xi \exp\left(\frac{i}{\hbar} qr \xi\right) = \frac{2\hbar}{qr} \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right)$$

したがって (5.2.50) は

$$v(q) = \frac{4\pi\hbar}{q} \int_0^\infty dr r \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right) V(r) \quad (5.2.51)$$

となる。ポテンシャルとしてクーロンポテンシャル $V(r) = Ze^2/r$ をとると

$$v(q) = \frac{4\pi Ze^2\hbar}{q} \int_0^\infty dr \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right) \quad (5.2.52)$$

この積分は上限で振動して収束しないので, このような場合の常套手段として収束因子 $e^{-\varepsilon r}$ を掛けて積分し, そのあと $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限をとればよい。つまり,

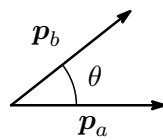
$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dr \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right) e^{-\varepsilon r} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\hbar q}{q^2 + \varepsilon^2 \hbar^2} = \frac{\hbar}{q}$$

したがって (5.2.51) は

$$v(q) = \frac{4\pi Ze^2\hbar^2}{q^2} \quad (5.2.53)$$

と求まります。これを (5.2.49) に入れます

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |v(\mathbf{q})|^2 \\ &= \frac{4Z^2 e^4 m^2}{q^4} \end{aligned} \quad (5.2.54)$$



$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= \mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b, \quad |\mathbf{p}_a| = |\mathbf{p}_b| = p \\ q^2 &= q^2 = (\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b)^2 \\ &= 2p^2(1 - \cos\theta) = 4p^2 \sin^2(\theta/2) \\ \therefore q &= 2p \sin(\theta/2) = 2mu \sin(\theta/2) \end{aligned}$$

となる。ここで, $q = 2p \sin(\theta/2) = 2mu \sin(\theta/2)$ という置き換え (θ はベクトル $\mathbf{i}_a, \mathbf{i}_b$ のなす角) をすると, よく知られたラザフォード散乱の微分断面積の公式が得られる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{16(mu^2/2)^2} \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} = \left(\frac{Ze^2}{4E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}, \quad (E = mu^2/2) \quad (5.2.55)$$

¹⁵通常の量子力学では微分断面積は散乱振幅を $f(\theta, \phi)$ とすると, $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2$ で与えられる。ボルン近似では散乱振幅は $f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r} e^{i/\hbar \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(r) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} v(\mathbf{q})$ となり, この結果は (5.2.49) と一致する。

第6話 ファインマン核の性質

第6話はファインマン核の性質を総括的にみていきます。ファインマン核は固有関数で展開できることを使って、調和振動子のエネルギーと波動関数を求めます。

6.1 ファインマン核の重要な性質

(5.2.24) に示すように時刻 t_0 の波動関数 $\psi(x_0, t_0)$ と時刻 t の波動関数 $\psi(x, t)$ はファインマン核 $K(x, t; x_0, t_0)$ を用いて

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 K(x, t; x_0, t_0) \psi(x_0, t_0) \quad (6.1.1)$$

と表された。2つの波動関数を結びつけるファインマン核 $K(x, t, x_0, t_0)$ をいわゆる時間発展演算子¹ $U(t, t_0)$ と関連付けよう。

シュレーディンガー表示での系の量子力学的状態を表す状態ベクトルを $|\psi(t)\rangle$ とし、初期の状態ベクトル $|\psi(t_0)\rangle$ を結びつける時間発展演算子 $U(t, t_0)$ を

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (6.1.2)$$

で定義する。状態関数の時間発展は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (6.1.3)$$

で表されるので、この式に (6.1.2) を入れると

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} |\psi(t_0)\rangle = H U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (6.1.4)$$

となる。(6.1.4) はすべての $|\psi(t_0)\rangle$ に対して成り立つので、

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = H U(t, t_0) \quad (6.1.5)$$

を得る。ハミルトニアンは時間に依存しない場合²、これを解いて

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (6.1.6)$$

¹時間推進演算子ともいわれる。

²ハミルトニアンが時間に依存する場合は $H(t)$ が時々刻々異なる演算子に変わっていくので単純に解けない。この場合は (6.1.5) を積分した $U(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' H(t') U(t')$ を考え、逐次近似で解を求めていくことになる。ただし $U(t, t_0) \equiv U(t)$ とした。

を得る。 $U(t, t_0)$ はユニタリ演算子であることは次のようにしてわかる。まず,

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (6.1.7)$$

となるが, 確率が保存されることから $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle$ が成り立ち

$$U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) = \mathbf{1} \quad (6.1.8)$$

$\mathbf{1}$ は単位演算子。また, (6.1.6) より $U(t_0, t) U(t, t_0) = U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$ で, これと (6.1.8) より

$$U(t, t_0)^\dagger = U(t_0, t), \quad U(t_0, t)^\dagger = U(t, t_0) \quad (6.1.9)$$

となるので (6.1.8) より

$$U(t_0, t) U^\dagger(t_0, t) = \mathbf{1} \quad (6.1.10)$$

t, t_0 は任意だから, 入れ替えて

$$U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) = \mathbf{1} \quad (6.1.11)$$

(6.1.8) と (6.1.11) より $U(t, t_0)$ はユニタリ演算子である。また, 時間発展演算子は (6.1.6) より次の結合則を満たす。

$$U(t, t_1) U(t_1, t_0) = U(t, t_0) \quad (6.1.12)$$

これは, 系の t_0 から t への時間発展はその途中の任意の時刻 t_1 への時間発展を経由して行われたものと同等であることを意味する。

さて, 波動関数 $\psi(x, t)$ はヒルベルト空間に張られた状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ の位置座標への射影成分ということなので, いわゆる x -表示 (位置表示) で

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle \quad (6.1.13)$$

と表される³。位置演算子を x , その固有ケットを $|x\rangle$ とすると

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{x} |x\rangle = x |x\rangle \\ \langle x' | x \rangle = \delta(x' - x) \quad (\text{直交条件}) \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| = \mathbf{1} \quad (\text{完全性の条件}) \end{array} \right. \quad (6.1.14)$$

完全性の条件を使って (6.1.13) は

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \langle x | \psi(t) \rangle = \langle x | U(t, t_0) \psi(t_0) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \langle x | U(t, t_0) | x_0 \rangle \langle x_0 | \psi(t_0) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \langle x | U(t, t_0) | x_0 \rangle \psi(x_0, t_0) \end{aligned} \quad (6.1.15)$$

³詳細は量子力学のコーナーの「座標表示と運動量表示」のレポートを参照されたし。

と表せる。(6.1.1) と (6.1.15) を較べればファインマン核は時間発展演算子の行列要素として次のように表すことができる。

$$K(x, t; x_0, t_0) = \langle x | U(t, t_0) | x_0 \rangle = \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle \quad (6.1.16)$$

これから $K(x, t; x_0, t_0)$ は $t - t_0$ の関数であることが分かる⁴。

さて、ファインマン核の性質を以下に示そう。

- ファインマン核はシュレーディンガー方程式を満たす⁵。(6.1.3) の左から $\langle x |$ を掛けると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | \psi(t) \rangle = \langle x | H | \psi(t) \rangle = \left\langle x \left| \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right| \psi(t) \right\rangle \quad (6.1.17)$$

となる。

$$\begin{cases} V(\mathbf{x}) |x\rangle = V(x) |x\rangle \longrightarrow \langle x | V(\mathbf{x}) = V(x) \langle x | & (\text{複素共役}^6) \\ \left\langle x \left| \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right| \psi(t) \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \langle x | \psi(t) \rangle & (x\text{-表示では } \mathbf{p} = -i\hbar \nabla) \end{cases} \quad (6.1.18)$$

を使えば

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | \psi(t) \rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \langle x | \psi(t) \rangle = H \langle x | \psi(t) \rangle \quad (6.1.19)$$

を得る。 $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$ を上式に入れて

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle &= H \langle x | U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ \therefore \left[H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] K(x, t; x_0, t_0) &= 0 \quad (t > t_0) \end{aligned} \quad (6.1.20)$$

- $t \rightarrow t_0$ の極限で

$$\lim_{t \rightarrow t_0} K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{t \rightarrow t_0} \langle x | U(t, t_0) | x_0 \rangle = \langle x | x_0 \rangle = \delta(x - x_0) \quad (\because U(t_0, t_0) = \mathbf{1}) \quad (6.1.21)$$

が成り立つ。

- ファインマン核は結合則を満たす。時間発展演算子の結合則 (6.1.6) を使うと

$$\begin{aligned} K(x, t, x_0, t_0) &= \langle x | U(t, t_0) | x_0 \rangle = \langle x | U(t, t_1) U(t_1, t_0) | x_0 \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \langle x | U(t, t_1) | x_1 \rangle \langle x_1 | U(t_1, t_0) | x_0 \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 K(x, t; x_1, t_1) K(x_1, t_1; x_0, t_0) \quad (t > t_1 > t_0) \end{aligned} \quad (6.1.22)$$

が得られる。一般に、任意の $t > t_n > t_{n-1} > \dots > t_1 > t_0$ に対して

$$K(x, t, x_0, t_0) = \int dx_1 dx_2 \dots dx_n K(x, t; x_n, t_n) K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) \dots K(x_1, t_1; x_0, t_0) \quad (6.1.23)$$

が成り立つ⁷。

⁴ただし、ハミルトニアンが時間をあらわに含まない場合。

⁵(3.2.6) も参照。

⁷(5.1.5) も参照。

- 時間発展演算子 $U(t, t_0)$ のユニタリー性を反映して

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(x, t; x', t') K(x', t'; x_0, t_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x | U(t, t') | x' \rangle \langle x' | U(t', t) | x_0 \rangle \\ &= \langle x | x_0 \rangle = \delta(x - x_0) \quad (t > t_0) \end{aligned} \quad (6.1.24)$$

が成り立つ。

- グリーン関数 $G(x, t; x_0, t_0)$ はファインマン核 $K(x, t, x_0, t_0)$ を用いて

$$G(x, t; x_0, t_0) \equiv -i\theta(t - t_0)K(x, t, x_0, t_0) \quad (6.1.25)$$

と定義される。グリーン関数 $G(x, t; x_0, t_0)$ の満たす方程式は (6.1.16) , (6.1.20) , (6.1.24) より

$$\begin{aligned} \left[H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] G(x, t; x_0, t_0) &= \left[H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \left[-i\theta(t - t_0)K(x, t; x_0, t_0) \right] \\ &= -i\theta(t - t_0) \left[H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] K(x, t; x_0, t_0) - \hbar \frac{\partial \theta(t - t_0)}{\partial t} K(x, t; x_0, t_0) \\ &= -\hbar \frac{\partial \theta(t - t_0)}{\partial t} \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle \\ &= -\hbar \delta(t - t_0) \langle x | x_0 \rangle \\ &= -\hbar \delta(t - t_0) \delta(x - x_0) \end{aligned} \quad (6.1.26)$$

となる。

6.2 ファインマン核を固有関数で展開

ハミルトニアンが時間をあらわに含まない系では、ファインマン核は (6.1.16) で示したように

$$K(x, t; x_0, t_0) = \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle \quad (6.2.1)$$

と表される。 H の固有ケットを $|n\rangle$, エネルギーを E_n とすると

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad \langle m | n \rangle = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \quad (6.2.2)$$

なので, (6.2.1) は

$$K(x, t; x_0, t_0) = \sum_{m,n} \langle x | m \rangle \langle m | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | n \rangle \langle n | x_0 \rangle \quad (6.2.3)$$

と展開できる。指数関数はべき級数に展開して $|n\rangle$ を掛けると

$$\begin{aligned} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |n\rangle &= \left(1 - iH(t-t_0)/\hbar - \frac{1}{2!} [H(t-t_0)/\hbar]^2 + \dots \right) |n\rangle \\ &= \left(1 - iE_n(t-t_0)/\hbar - \frac{1}{2!} [E_n(t-t_0)/\hbar]^2 + \dots \right) |n\rangle \\ &= e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |n\rangle \end{aligned} \quad (6.2.4)$$

となるので、ファインマン核 (6.2.3) は E_n の固有関数 $\psi_n(x)$ で展開できて

$$\begin{aligned} K(x, t; x_0, t_0) &= \sum_n^{\infty} \langle x | n \rangle \langle n | x_0 \rangle e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \\ &= \sum_n^{\infty} \psi_n(x) \psi_n^*(x_0) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \quad (t > t_0) \end{aligned} \quad (6.2.5)$$

と表せる。

6.2.1 自由粒子

ファインマン核を固有関数で展開した (6.2.5) から 1次元自由粒子のファインマン核の具体的表式がでてくることを確かめよう。自由粒子のハミルトニアンとエネルギー固有値 E に属する規格化された固有関数は

$$\begin{cases} H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \\ \psi_E = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{cases} \quad (6.2.6)$$

なので、ファインマン核は

$$K(x, t : x_0, t_0) = \sum_k^{\infty} e^{ik(x-x_0) - iE_k(t-t_0)/\hbar} \quad (6.2.7)$$

と表せる。固有値は連続なので k についての和を積分に置き換えて

$$K(x, t : x_0, t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-x_0) - i(\hbar^2 k^2/2m)(t-t_0)/\hbar} \quad (6.2.8)$$

となる。ここで積分変数 k を $k \rightarrow k - \frac{m}{\hbar(t-t_0)}(x-x_0)$ と置き換えると指数部は

$$\exp[-ik(x-x_0) - i(\hbar^2 k^2/2m)(t-t_0)/\hbar] \longrightarrow \exp[-ia\mathcal{K}^2 + ib\mathcal{K}] \quad (6.2.9)$$

$$\text{ただし } a = \frac{\hbar(t-t_0)}{2m}, \quad b = x-x_0, \quad \mathcal{K} = k - \frac{m(x-x_0)}{\hbar(t-t_0)}$$

となり、求める積分は

$$K(x, t : x_0, t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{K} e^{-ia\mathcal{K}^2 + ib\mathcal{K}} \quad (6.2.10)$$

と表せる。この積分 (ガウス積分) は公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iax^2 \pm ibx} = \sqrt{\frac{\pi}{ia}} e^{i\frac{b^2}{4a}} \quad (6.2.11)$$

を使えば容易にできて

$$K(x, t : x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar(t-t_0)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x-x_0)^2}{t-t_0}\right] \quad (6.2.12)$$

を得る。これは (3.1.9) で得た自由粒子のファインマン核と一致する。

6.2.2 調和振動子

おまけとして、この節の最後にファインマン核から調和振動子の波動関数が導かれる⁸ことをみていく。(6.2.5)より

$$\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega T}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{i m\omega}{2\hbar \sin \omega T} \{(x_1^2 + x_2^2) \cos \omega T - 2x_1 x_2\}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(i/\hbar)E_n T} \psi_n(t_2) \psi_n^*(t_1) \quad (6.2.13)$$

左辺に関係式

$$\begin{cases} \sin \omega T = \frac{1}{2i}(e^{i\omega T} - e^{-i\omega T}) = \frac{1}{2i}e^{i\omega T}(1 - e^{-2i\omega T}) \\ \cos \omega T = \frac{1}{2i}(e^{i\omega T} + e^{-i\omega T}) = \frac{1}{2}e^{i\omega T}(1 + e^{-2i\omega T}) \end{cases} \quad (6.2.14)$$

を代入すると

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-i\omega T/2} (1 - e^{-2i\omega T})^{-1/2} \times \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar} \left[(x_1^2 + x_2^2) \frac{1 + e^{2i\omega T}}{1 - e^{2i\omega T}} - 4x_1 x_2 \frac{e^{-i\omega T}}{1 - e^{2i\omega T}}\right]\right\} \quad (6.2.15)$$

となる。この式を $e^{-i\omega T}$ のべきで展開する。各パーツを $e^{-i\omega T}$ の幕で展開⁹すると

$$\begin{aligned} (1 - e^{-2i\omega T})^{-1/2} &= 1 + \frac{1}{2}e^{-2i\omega T} + \frac{3}{8}e^{-4i\omega T} + \dots \\ \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar} \left[(x_1^2 + x_2^2) \frac{1 + e^{2i\omega T}}{1 - e^{2i\omega T}} - 4x_1 x_2 \frac{e^{-i\omega T}}{1 - e^{2i\omega T}}\right]\right\} \\ &= e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2)} \left[1 + \frac{2m\omega}{\hbar} x_1 x_2 e^{-i\omega T} + \frac{2m^2\omega^2}{\hbar^2} x_1^2 x_2^2 e^{-2i\omega T} - \frac{m\omega}{\hbar} (x_1^2 + x_2^2) e^{-2i\omega T} + \dots\right] \end{aligned} \quad (6.2.16)$$

となる。これを (6.2.15) に代入して整理すると

$$\begin{aligned} K(x_2, t_2; x_1, t_1) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-i\omega T/2} \sum_{n=0}^{\infty} f_n(x_1, x_2) e^{-in\omega T} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} f_n(x_1, x_2) e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega T} \end{aligned} \quad (6.2.17)$$

となり、(6.2.13) は

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} f_n(x_1, x_2) e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega T} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(i/\hbar)E_n T} \psi_n(t_2) \psi_n^*(t_1) \quad (6.2.18)$$

と表すことができる。両辺の比較から調和振動子のエネルギー準位は

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (6.2.19)$$

⁸詳細は R.P. ファインマン, A.R. ヒップス「量子力学と経路積分」の第8章を参照されたい。

⁹ $x = e^{-i\omega T}$ においてべき展開し、その後変数 x を元に戻す。

で与えられることが分かる。

つぎに $n = 0, 1, 2$ までの波動関数を求めていく。

$$\begin{aligned} & \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)} e^{-i\omega T/2} \left[1 + \frac{2m\omega}{\hbar} x_1 x_2 e^{-i\omega T} + \left(\frac{2m^2\omega^2 x_1^2 x_2^2}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} (x_1^2 + x_2^2) + \frac{1}{2} \right) e^{-2i\omega T} + \dots \right] \\ & = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(i/\hbar)E_n T} \psi_n(t_2) \psi_n^*(t_1) \end{aligned} \quad (6.2.20)$$

で、両辺の $n = 0$ の項の比較から

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)} e^{-i\omega T/2} = e^{-(i/\hbar)E_0 T} \psi_0(x_2) \psi_0^*(x_1) \quad (6.2.21)$$

が成立し、基底状態のエネルギーと波動関数は

$$\begin{cases} E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \\ \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar} \end{cases} \quad (6.2.22)$$

と求まる。同様にして第1励起状態のエネルギーと波動関数は $n = 1$ の両辺を比較して

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \frac{2m\omega}{\hbar} x_1 x_2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)} e^{-3i\omega T/2} = e^{-(i/\hbar)E_1 T} \psi_0(x_2) \psi_0^*(x_1) \quad (6.2.23)$$

$$\begin{cases} E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega \\ \psi_1(x) = \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x \psi_0(x) \end{cases} \quad (6.2.24)$$

と求まる。次に、第2励起状態のエネルギーと波動関数だが

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)} \left(\frac{2m^2\omega^2}{\hbar^2} x_1^2 x_2^2 - \frac{m\omega}{\hbar} (x_1^2 + x_2^2) + \frac{1}{2} \right) e^{-(5/2)i\omega T} = e^{-(i/\hbar)E_2 T} \psi_0(x_2) \psi_0^*(x_1) \quad (6.2.25)$$

において、左辺()内の式を

$$\frac{2m^2\omega^2}{\hbar^2} x_1^2 x_2^2 - \frac{m\omega}{\hbar} (x_1^2 + x_2^2) + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x_1^2 - 1 \right) \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x_2^2 - 1 \right) \quad (6.2.26)$$

と表せば、両辺の比較より

$$\begin{cases} E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega \\ \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1 \right) \psi_0(x) \end{cases} \quad (6.2.27)$$

と求まる。

さて、ファインマン核から求めた波動関数がシュレーディンガーの波動方程式の厳密解と一致することをみていこう。 $\xi \equiv \sqrt{m\omega/\hbar} x$ において、いま求めた波動関数を次の形に書いておく。

$$\begin{cases} \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ \psi_1(x) = \sqrt{2}\xi\psi_0(x) \\ \psi_2(x) = \sqrt{2} \left(\xi^2 - \frac{1}{2} \right) \psi_0(x) \end{cases} \quad (6.2.28)$$

調和振動子のエネルギー固有値と波動関数は、シュレーディンガーの波動方程式を解いて

$$\begin{cases} E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, & (n = 0, 1, 2, \dots) \\ \psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} H_n(\xi) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \end{cases} \quad (6.2.29)$$

と求められる。 $H_n(\xi)$ はエルミート多項式で

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \dots \quad (6.2.30)$$

(6.2.28) と (6.2.29) を比較すると、ファインマン核から得られた波動関数はシュレーディンガーの波動方程式の解と一致することが分かる。

6.3 運動量表示 (p -表示) でのファインマン核

初期および終状態の波動関数の運動量空間への1次元フーリエ変換を

$$\begin{cases} \text{終状態} & \psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \varphi_p(t) e^{ipx/\hbar} \\ \text{初期状態} & \psi(x_0, t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \phi_{p_0}(t_0) e^{ip_0 x_0/\hbar} \end{cases} \quad (6.3.1)$$

とし、これを (6.1.1) の波動関数の時間発展の式

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 K(x, t; x_0, t_0) \psi(x_0, t_0)$$

に入れると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \varphi_p(t) e^{ipx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 dp_0 K(x, t; x_0, t_0) \phi_{p_0}(t_0) e^{ip_0 x_0/\hbar} \quad (6.3.2)$$

を得る。左から $e^{-ip'x/\hbar}$ を掛けて x で積分すると¹⁰

$$\begin{aligned} \text{左辺:} & \int_{-\infty}^{\infty} dp dx \varphi_p(t) e^{i(p-p')x/\hbar} = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dp \delta(p-p') \varphi_p(t) = 2\pi \varphi_{p'}(t) \\ \text{右辺:} & \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 dx_0 dx K(x, t; x_0, t_0) \phi_{p_0}(t_0) e^{-i(p'x-p_0x_0)/\hbar} \end{aligned} \quad (6.3.3)$$

となる。ここで

$$K(p', t; p_0, t_0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 dx K(x, t; x_0, t_0) e^{-i(p'x-p_0x_0)/\hbar} \quad (6.3.4)$$

という量を定義すると (6.3.2) は

$$\varphi_p(t) = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 K(p, t; p_0, t_0) \phi_{p_0}(t_0) \quad (6.3.5)$$

¹⁰ $\delta(p-p') = \frac{1}{2\pi} \int dx e^{i(p-p')x}$

と表される¹¹。この式は運動量空間での波動関数の時間発展を書き表している、 $K(k, t; p_0, p_0)$ は運動量表示でのファインマン核と呼ばれる。位置空間でのファインマン核 $K(x, t; x_0, t_0)$ とは次の関係で結ばれる。

$$\begin{aligned} K(p, t; p_0, t_0) &= \langle p | U(t, t_0) | p_0 \rangle \\ &= \int dx dx_0 \langle p | x \rangle \langle x | U(t, t_0) | x_0 \rangle \langle x_0 | p_0 \rangle \\ &= \int dx dx_0 \langle p | x \rangle K(x, t; x_0, t_0) \langle x_0 | p_0 \rangle \end{aligned} \quad (6.3.6)$$

位置表示と運動量表示のいわゆる変換関数

$$\begin{cases} \langle p | x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx} \\ \langle x_0 | p_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip_0 x_0} \end{cases} \quad (6.3.7)$$

を (6.3.6) に入れると

$$K(p, t; p_0, t_0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 dx K(x, t; x_0, t_0) e^{-i(px - p_0 x_0)/\hbar} \quad (6.3.8)$$

となり¹²、(6.3.4) と一致する。

¹¹ p' を p に書き換えた。

¹² 2次元フーリエ変換の関係

第7話 WKB近似 (1)

第2話の【補足】のところでシュレーディンガーの波動方程式の解を $\psi = Ae^{iS/\hbar}$ とおいて、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限をとると、シュレーディンガー方程式は古典力学のハミルトン・ヤコビの方程式になることを示しました。これは波動と粒子の運動の間には密接な関係があることを示唆しています。ここからはファインマンの経路積分から少し逸れ、2話にわたって量子力学の古典近似の話題から準古典近似と呼ばれるWKB近似の話をすることにします。

WKB近似は波動関数 $\psi = Ae^{iS/\hbar}$ をシュレーディンガー方程式に代入して得られる S の2階微分方程式を \hbar が小さいとして摂動展開し \hbar の1次近似で S を求めるという方法ですが、WKB近似の話は次回のお楽しみとして、ここではハミルトン・ヤコビ方程式で記述される古典力学での粒子の運動はある波の運動の幾何光学的な極限の場合に対応しているという話から始めることにします。こうすることで波動と粒子の運動の密接な関係が凡そイメージできるようになると思います。

7.1 ハミルトン・ヤコビの方程式

ハミルトニアン

$$H = H(q_i, p_i, t) \quad (7.1.1)$$

が与えられたとき、

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}, t\right) = 0, \quad p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} \quad (7.1.2)$$

をハミルトン・ヤコビの偏微分方程式といい、 S をハミルトンの主関数という。 S は作用積分で、ラグランジアンを L とすると

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L \quad (7.1.3)$$

で定義される。ハミルトニアンが時間を陽に含まない場合、

$$H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}\right) = E \quad (E: \text{定数}) \quad (7.1.4)$$

となるので、ハミルトン・ヤコビの方程式は次の解をもつ¹。

$$S = W - Et \quad (7.1.5)$$

W はハミルトンの特性関数と呼ばれる。

¹詳しいことはゴールドスタイン等、適当な解析力学のテキストを参照されたい。

7.2 ハミルトン・ヤコビ方程式と幾何光学

ハミルトニアンが運動の定数でエネルギー E に等しい系 (保存力学系) を考えると, ハミルトンの主関数 S と特性関数 W は (7.1.5) に示したように

$$S(\mathbf{x}, t) = W(\mathbf{x}) - Et, \quad \text{ただし } \mathbf{x} \equiv (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (7.2.1)$$

で結ばれる。便宜上, 1個の質点からなる系を考えると $\mathbf{x} \equiv (x, y, z)$ とおける。特性関数は時間を含まないで, 3次元空間で $W = \text{一定}$ の曲面はある定まった位置にある。(7.2.1) より, ある時刻 t において $S = \text{一定}$ の曲面を考えると, それは, $W = \text{一定}$ の曲面のなかの特定の一つと一致する²。しかし, $S = \text{一定}$ の値に対する W の値は (7.2.1) に従って時々刻々変わっていく。いま, 時刻 t において $S = a$ の面が $W = a$ の面と一致していたとしよう。この面 (*face*) を f_t と名付けておく。

$$f_t: \quad W(\mathbf{x}) = a + Et \quad (7.2.2)$$

$t + dt$ 時間後には $S = a$ の面は

$$f_{t+dt}: \quad W(\mathbf{x}) = a + E(t + dt) \quad (7.2.3)$$

の面に一致する。この面を f_{t+dt} と名付けておく。そうすると, $S = a$ の面は dt 時間の間に面 f_t から面 f_{t+dt} まで動いたことになる。このように, $S = \text{一定}$ となる曲面の時間的な運動は, 空間における波面³の伝搬に似ていて, $S = \text{一定}$ の面は空間を伝わる波面として特長づけることができる。

さて, 波面 f_t 上の点 \mathbf{x} に法線を立て波面 f_{t+dt} との交点までの距離を ds , 法線方向の単位ベクトルを \mathbf{n} とすると

$$\begin{aligned} W(\mathbf{x} + \mathbf{n}ds) - W(\mathbf{x}) &= E(t + dt) - Et \\ \therefore (\nabla W \cdot \mathbf{n})ds &= Edt \end{aligned} \quad (7.2.4)$$

を得る。単位法線ベクトルは

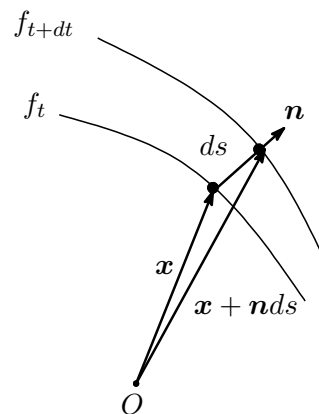
$$\mathbf{n} = \frac{\nabla W}{|\nabla W|} \quad (7.2.5)$$

で与えられるので, 波面 f_t が法線方向に動く速さ u は

$$u = \frac{ds}{dt} = \frac{E}{|\nabla W|} \quad (7.2.6)$$

となる。 ∇W の大きさはハミルトン・ヤコビの方程式⁴より

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z} \right)^2 \right] + V &= \frac{1}{2m} (\nabla W)^2 + V = E \\ \therefore |\nabla W| &= \sqrt{2m(E - V)} \end{aligned} \quad (7.2.7)$$



²時刻 t_0 において $W(\mathbf{x}) = S(\mathbf{x}, t_0) + Et_0 = \text{一定}$

³波面=等位相面。波源から等しい光路長を持つ「波」のことで, 光路長が等しいため、波面上の位相も等しくなる。

⁴ハミルトニアン $H = \frac{1}{2m} p^2 + V$ で, V はポテンシャルエネルギー。

と得られ、波面の動く速さ(位相速度)は

$$u = \frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}} = \frac{E}{\sqrt{2mT}}, \quad T = \frac{1}{2}mv^2 \quad \text{: 粒子の運動エネルギー} \quad (7.2.8)$$

で与えられる。粒子の運動量を p とすると $2mT = (mv)^2 = p^2$ なので、(7.2.8) は

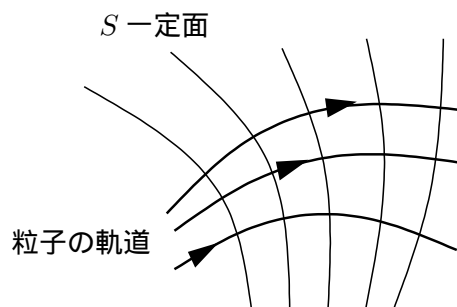
$$u = \frac{E}{p} = \frac{E}{mv} \quad (7.2.9)$$

となり、波面の伝播速度 u は粒子の速さ v に反比例することが分かる。

さて、粒子の運動方向は運動量 p の方向によって決まるが、これと $S = \text{一定}$ の面との関係を見てみよう。運動量はハミルトンの主関数から決まり、(7.1.2) より

$$p = \nabla S = \nabla W \quad (7.2.10)$$

という関係にあった。 p は軌道の接線方向を向いており、(7.2.10) より粒子は $S = \text{一定}$ ($W = \text{一定}$) の面に対して垂直方向に進むことが分かる⁵。この事情は光が等位相面に垂直な方向に進んでいくのと同様である。

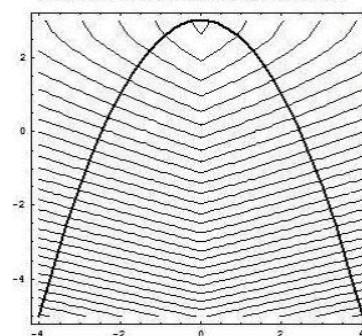


具体的に見ていこう。一様な重力場での2次元放物運動をとりあげる。鉛直上方に y 軸をとると、ハミルトニアンは時間を含まないの
でハミルトン・ヤコビ方程式は $S = W - Et$ の解をもち、 W は次の
方程式を満たす。

$$\frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 \right\} + mgy = E \quad (7.2.11)$$

詳細は省略するが⁶、変数分離法で W を求め、 W 一定の等高線を描いたのが左図である。太実線は粒子の軌道で、細実線は波面を表し、軌道と波面は直交している。いいかえると、力学的に可能な軌道は $W = \text{一定}$ の面に垂直な軌道を描くことで求めることができる。このように見てくると、古典力学の中にすでに粒子と波動の二重性が含まれているということが分かる。

放物運動粒子の軌跡と特性関数wの等高線



放物線の頂点付近では $v \rightarrow \text{遅い}$:
 $u \rightarrow \text{速い}$ (u と v は反比例) とい
う点に留意して下さい。

さて、ド・ブロイの物質波との関連性を見ておこう。物質波の振動数を ν 、ド・ブロイ波長を λ とすると

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (7.2.12)$$

で、アインシュタインの関係式 $E = h\nu$ を使えば、物質波の速さ(位相速度)は $\lambda\nu = E/p = E/mv$ となり、これは(7.2.9)と一致する。

⁵力学的に可能な軌道の組は $S = \text{一定}$ の面に垂直な軌道を描くことで求められる。

⁶詳しいことは江沢洋：解析力学，培風館(2012)等を参照されたい。

7.3 アイコナル近似

古典力学はある波の運動の幾何光学的な極限 ($\lambda \rightarrow 0$) の場合に対応していることを示す⁷。光学におけるスカラー波動方程式は ϕ をスカラー量として

$$\nabla^2 \phi - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0 \quad (7.3.1)$$

ここで c は真空中の光速, n は屈折率。 n が定数であれば, 次の平面波がこの解になる。

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \phi_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\omega}{c} \quad (7.3.2)$$

簡単のために k の方向は z 軸に沿っているとすれば,

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t = \frac{\omega}{c}(nz - ct) = k_0(nz - ct), \quad k_0 = \frac{\omega}{c}: \text{真空中の波数} \quad (7.3.3)$$

と書けるので (7.3.2) は

$$\phi(z, t) = \phi_0 e^{ik_0(nz - ct)} \quad (7.3.4)$$

と表せる。ところで屈折率 n が空間位置で変化する関数 $n(x)$ となる場合には, 残念ながら解は (7.3.2) で表せない。しかし, n の空間変化が緩やかであれば, 解は平面波に近い形をしていると考えられるので

$$\phi(\mathbf{x}, t) = A(\mathbf{x}) e^{ik_0(L(\mathbf{x}) - ct)} \quad (7.3.5)$$

とおく。ここで, $A(\mathbf{x}), L(\mathbf{x})$ は実関数とする。 $A(\mathbf{x})$ は振幅で, $L(\mathbf{x})$ は n が一定であれば nz になるはずの量で, 光学距離とかアイコナルと呼ばれる。 ϕ の空間微分と時間微分は

$$\begin{cases} \nabla \phi = \nabla A e^{ik_0(L - ct)} + ik_0(\nabla L)\phi \\ \nabla^2 \phi = [\nabla^2 A + 2ik_0 \nabla A \cdot \nabla L - Ak_0^2(\nabla L)^2 + iAk_0 \nabla^2 L] e^{-ik_0(L - ct)} \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -n^2 k_0^2 \phi \end{cases} \quad (7.3.6)$$

となるので, (7.3.1) に入れて整理すると

$$\left[\frac{1}{A} \nabla^2 A - k_0^2 ((\nabla L)^2 - n^2) \right] \phi + ik_0 \left(\nabla^2 L + 2 \frac{1}{A} \nabla A \cdot \nabla L \right) \phi = 0 \quad (7.3.7)$$

を得る。 A, L は実関数なので, 等式が成立するのは実部と虚部がそれぞれゼロの場合に限り, 次式が成立する。

$$\frac{1}{A} \nabla^2 A - k_0^2 [(\nabla L)^2 - n^2] = 0 \quad (7.3.8)$$

$$\nabla^2 L + 2 \frac{1}{A} \nabla A \cdot \nabla L = 0 \quad (7.3.9)$$

いま $n(x)$ は空間的に緩やかに変化し, 波長程度の距離の範囲で大きく変わらないとした。つまり, 媒質に何らかの空間変化が起こっているスケールに比べて波長が十分に小さいとしたわけで, これをア

⁷ゴールドスタイン: 古典力学, 吉岡書店 (1960), ランチョス: 解析力学と変分原理, 日刊工業新聞社 (1992)

イコナル近似と呼んでいる。そうすると(7.3.8)の式の中では、 $k_0^2 = 4\pi^2/\lambda_0^2$ の掛かっている項がドミナントに効いてきて、空間的变化を示す最初の項は無視できる。その結果

$$(\nabla L)^2 = n^2 \quad (7.3.10)$$

が得られる。この式は幾何光学でアイコナル方程式⁸と呼ばれる。この式を解いて得られる $L = \text{一定}$ の面は等位相面、すなわち波面を表す。光線は等位相面に垂直な方向に進むので、その進路もアイコナル方程式で決定される。また、(7.3.10)を解いて $L(x)$ が求まると、(7.3.9)より振幅 $A(x)$ を得ることができる。

アイコナル方程式は力学における W に対するハミルトン・ヤコビの方程式と同じ形をしていることを見ておこう。(7.2.7)で $\nabla W \rightarrow \nabla L$, $\sqrt{2m(E-V)} \rightarrow n$ とすれば⁹、特性関数 W はアイコナルと同じ役割を果たしていることがわかる。

$$\begin{cases} \text{eikonal eq.} & \longrightarrow \text{Hamilton} \cdot \text{Jacob eq.} \\ (\nabla L)^2 = n^2 & \longrightarrow \frac{1}{2m}(\nabla W)^2 + V = E \end{cases} \quad (7.3.11)$$

前にも述べたように粒子の軌跡は $W = \text{一定}$ の面に対して垂直方向に向かうが、これは光線が等位相面に垂直な方向に進むことと符合する。つまり、古典力学はある波の運動の幾何光学的な極限 ($\lambda \rightarrow 0$) の場合に対応していることになる。そこで、力学の波動論における方程式を求めていくことにしよう。 W がアイコナル L に対応しているならば、 $S = W - Et$ は(7.3.5)の波の全位相

$$k_0(L - ct) = 2\pi \left(\frac{L}{\lambda_0} - \nu t \right) \quad (7.3.12)$$

に比例しなければならない。

$$\begin{cases} \phi(\mathbf{x}, t) = A(\mathbf{x})e^{i2\pi(L/\lambda_0 - \nu t)} \\ \varphi(\mathbf{x}, t) = \varphi_0(\mathbf{x})e^{iS} = \varphi_0(\mathbf{x})e^{i(W - Et)} \end{cases}$$

粒子のエネルギー E と波の振動数 ν とは比例しなければならないので、比例定数を h とすると

$$E = h\nu \quad (7.3.13)$$

波長 (λ) と振動数 (ν)、位相速度 (u) の間の関係式

$$\lambda\nu = u \quad (7.3.14)$$

を使えば(7.2.9)と(7.3.13)より、波長は

$$\lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{h}{p} \quad (\because u = E/p) \quad (7.3.15)$$

で与えられることになる。これは(7.2.12)で示したド・ブロイ波長である。

さて、位相速度 $u (= c/n)$ の波の波動方程式は

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0 \quad (7.3.16)$$

⁸ スカラー波動方程式の $\lambda_0 \rightarrow 0$ とした極限より得られる。

⁹ n の穏やかな空間変化はポテンシャルエネルギーの穏やかな空間変化に対応する。

と表される。 ϕ は時間に関して $\phi \sim e^{-i\omega t}$ の形で変化するとして上式に入れると

$$\nabla^2 \phi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \phi = 0, \quad \text{ただし } (\omega/u)^2 = (2\pi/\lambda)^2 \quad (7.3.17)$$

を得る。これは時間を含まない波動方程式である。“力学の波動論”においても方程式(7.3.17)を満たす ψ が存在すると考えられ、この場合、波長 λ を

$$\lambda \rightarrow \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m(E-V)}} \quad (7.3.18)$$

とおきかえればいだろう¹⁰。その結果、 ψ は次の方程式を満たす。

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0 \quad (7.3.19)$$

これは波動力学におけるシュレーディンガー方程式にほかならない。

シュレーディンガー方程式からハミルトン・ヤコビの方程式がでてくることは第2話の【補足】のところで触れたが、もう一度別の観点からみていこう。波動関数を

$$\psi(\mathbf{x}, t) = A(\mathbf{x}, t) e^{iS(\mathbf{x}, t)/\hbar} \quad (7.3.20)$$

とおくと、空間微分と時間微分は次のようになる。

$$\begin{aligned} \nabla \psi &= \left(\nabla A + \frac{i}{\hbar} A \nabla S \right) e^{iS/\hbar} \\ \nabla^2 \psi &= \left(\nabla^2 A + \frac{i}{\hbar} \nabla A \cdot \nabla S + \frac{i}{\hbar} A \nabla^2 S \right) e^{iS/\hbar} + \frac{i}{\hbar} \left(\nabla A + \frac{i}{\hbar} A \nabla S \right) \cdot \nabla S e^{iS/\hbar} \\ &= \left[\nabla^2 A + \frac{2i}{\hbar} \nabla A \cdot \nabla S + \frac{i}{\hbar} A \nabla^2 S - \frac{A}{\hbar^2} (\nabla S)^2 \right] e^{iS/\hbar} \end{aligned} \quad (7.3.21)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} A \frac{\partial S}{\partial t} \right) e^{iS/\hbar} \quad (7.3.22)$$

これを時間に依存したシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi \quad (7.3.23)$$

に入れると、指数関数部は取り除いて

$$i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} - A \frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} (2\nabla A \cdot \nabla S + A \nabla^2 S) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 A + \frac{A}{2m} (\nabla S)^2 + VA \quad (7.3.24)$$

これを整理すると

$$A \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 A + \frac{A}{2m} (\nabla S)^2 + VA + i\hbar \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{m} \nabla A \cdot \nabla S + \frac{1}{2m} A \nabla^2 S \right) = 0 \quad (7.3.25)$$

¹⁰(7.3.15) から分かるように h は考えている系の特徴的な長さに比べて十分小さい、つまりド・ブロイ波長 $\lambda \rightarrow 0$ ということが条件になる。

A, S は実関数なので, 等式が成立するのは実部と虚数部がそれぞれゼロの場合に限ることから

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{A} \nabla^2 A - \frac{1}{\hbar^2} (\nabla S)^2 \right) - V \quad (7.3.26)$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{1}{m} \left(\nabla A \cdot \nabla S - \frac{1}{2} A \nabla^2 S \right) \quad (7.3.27)$$

が得られる。ここまでは近似を使わずに厳密に成り立つ式である。ここで

$$\left| \frac{1}{A} \nabla^2 A \right| \ll \frac{1}{\hbar^2} (\nabla S)^2 \quad (7.3.28)$$

であれば, (7.3.26) は

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{1}{2m} (\nabla S)^2 - V \longrightarrow \frac{\partial S}{\partial t} + H = 0, \quad H = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V \quad (7.3.29)$$

となり, ハミルトン・ヤコビ方程式となる。

(7.3.28) の意味するところを調べてみよう。 $p^2 = (\nabla S)^2 = (\hbar k)^2$ を (7.3.28) に入れると,

$$|\nabla^2 A/A| \ll k^2 = (2\pi/\lambda)^2 \quad (7.3.30)$$

で, これはド・ブロー波長が振幅 A の空間変化より十分小さいということの意味していることが分かる。この条件下では, シュレーディンガー方程式がハミルトン・ヤコビ方程式で近似される¹¹ことから, (7.3.28) は量子力学でのアイコナル近似といえることができる。

7.4 古典流体の運動方程式

(7.3.27) の両辺に $2A$ を乗じて整理すると

$$\begin{aligned} 2A \frac{\partial A}{\partial t} &= -\frac{1}{m} (2A \nabla A \cdot \nabla S - A^2 \nabla^2 S) \\ \therefore \frac{\partial}{\partial t} A^2 &= -\frac{1}{m} \nabla \cdot (A^2 \nabla S) = -\nabla \cdot (A^2 \mathbf{v}) \quad (\nabla S = m\mathbf{v}) \end{aligned} \quad (7.4.1)$$

となり, $\rho = A^2 (= |\psi|^2)$ とおくと次の連続の方程式となる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad \mathbf{J} = \rho \mathbf{v} = A^2 \frac{\nabla S}{m} \quad (7.4.2)$$

\mathbf{v} は流体粒子の速度, $\rho = A^2 (= |\psi|^2)$ は粒子の確率密度で \mathbf{J} は流れの密度を表す¹²と考えることができる。(7.3.29) の勾配をとると

$$\nabla \left[\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V \right] = \nabla \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \left(\frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \right) + \nabla V = 0 \quad (7.4.3)$$

¹¹ざっくりいえば (7.3.26) で $\hbar \rightarrow 0$ にしたシュレーディンガー方程式の古典近似がハミルトン・ヤコビ方程式となる。

¹²古典近似においては, ψ が記述するのはポテンシャル V にしたがって動く質量 m の古典粒子の流体である。

となり, 第1項と第2項はそれぞれ

$$\begin{cases} \nabla \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \nabla S = m \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} \\ \nabla \left(\frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \right) = \frac{1}{2} m \nabla (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) = m (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \end{cases} \quad (7.4.4)$$

と書ける¹³。時間と位置の関数である速度場の時間微分¹⁴は

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \quad (7.4.5)$$

と表されことから, (7.4.3) は

$$m \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] + \nabla V = 0 \longrightarrow m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla V \quad (7.4.6)$$

となり, 流体粒子は古典的運動方程式¹⁵に従うことが分かる。

$\psi(\mathbf{x}, t)$ がエネルギー E の定常状態 (古典粒子の流体の定常流) を表すとき, 振幅 A は時間に依存せず, $S(\mathbf{x}, t) = W(\mathbf{x}) - Et$ と表せるので

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial t} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial t} = -E \quad (\because S(\mathbf{x}, t) = W(\mathbf{x}) - Et) \end{cases} \quad (7.4.7)$$

が得られる。このとき (7.3.27) と (7.3.26) は

$$\nabla \cdot (A^2 \nabla S) = 0 \quad (7.4.8)$$

$$(\nabla S)^2 - 2m(E - V) = \hbar^2 \frac{\nabla^2 A}{A} \quad (7.4.9)$$

となり, $\hbar \rightarrow 0$ の古典近似をとれば (7.4.9) の右辺は0となってハミルトン・ヤコビ方程式となる¹⁶。

¹³2番目の式はベクトル解析の公式 $\nabla(A \cdot \mathbf{B}) = (A \cdot \nabla)\mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{A} + \mathbf{A} \times \text{rot}\mathbf{B} + \mathbf{B} \times \text{rot}\mathbf{A}$ を使う。いまの場合, $\text{rot}\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A} = 0$

¹⁴ラグランジュ微分ともいわれる。「流体力学講話・つまみ食い(その2)」第3節を参照。

¹⁵保存力場では $\mathbf{F} = -\nabla V$

¹⁶(7.3.29) 参照

第8話 WKB近似(2)

WKB近似は、波動の伝播の問題を解くために1912年にL. レイリー (Lord Rayleigh・英) によってもたらされ、1923年H. ジェフリーズ (Harold Jeffreys・英) はこれを初めてシュレーディンガー方程式に適用したといわれています。この方法はさらに1926年、G. ヴェンツェル (Gregor Wentze・独)、L. ブリルアン (Leon Nicolas Brillouin・仏)、H.A. クラマース (Hendrik Anthony Kramers・独) によって発展させられ、この手法は彼らの名の頭文字をとってWKB近似¹と呼ばれるようになりました。 $\hbar \rightarrow 0$ の極限で量子力学は古典力学に帰着することは第7話でいやというほど見てきました。WKB近似は \hbar を摂動展開パラメーターとみなして古典力学からの補正を取り込む手法で、 \hbar のべき級数展開の \hbar^2 より高次の項を無視する近似です。古典力学の部分に \hbar の次数が1つ高い寄与を取り入れていることから、準古典近似とか半古典近似と呼ばれています。

第8話では量子力学で取り扱われるWKB近似についての説明をしています。

8.1 WKB近似(準古典近似)

1次元の時間を含まないシュレーディンガー方程式の定常解を求めていこう。この場合、波動関数は位置 x と時間 t の関数に変数分離できて

$$\psi(x, t) = Ae^{iS(x, t)/\hbar} = Ae^{i(W(x) - Et)/\hbar} = \phi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (A: \text{定数}) \quad (8.1.1)$$

とあらわすことができる。 $\phi(x)$ は時間に依存しない波動関数で

$$\phi(x) = Ae^{iW(x)/\hbar} \quad (8.1.2)$$

これは定常状態における1次元シュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \phi(x) = E\phi(x) \quad (8.1.3)$$

を満たす。シュレーディンガー方程式を E と $V(x)$ の大小に応じて

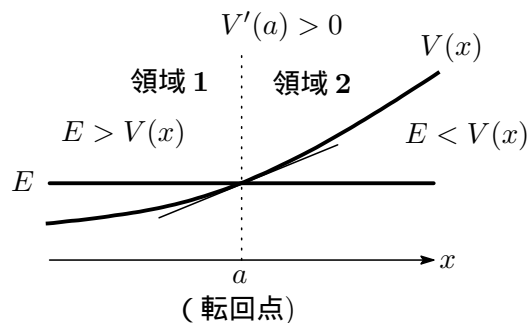
$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\phi = 0 \rightarrow \begin{cases} \frac{d^2\phi}{dx^2} + k^2\phi = 0, & k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m[E - V(x)]} & (E > V(x)) \\ \frac{d^2\phi}{dx^2} - \kappa^2\phi = 0, & \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m[V - E(x)]} & (E < V(x)) \end{cases} \quad (8.1.4)$$

と書いておく²。

¹W, K, B 各氏はジェフリーズの先駆的な仕事を知らなかったといわれています。本来は JWKB 近似とすべきところですが、しばしば J は省略されています。

² k と κ を間違わないように。

系の状態は左図のように E と $V(x)$ の大小によって2つの領域に分かれているとする。なお、 $E = V(x)$ となる点 $x = a$ は転回点と呼ばれるが、これについては後ほど触れる。



$E > V(x)$ の領域1 (古典的に到達可能な領域)

領域1での波動関数を求めよう。(8.1.2)を(8.1.4)の第1式に入れると、 $W(x)$ が満たす方程式として次式を得る。

$$(W')^2 - \hbar^2 k^2 - i\hbar W''(x) = 0 \tag{8.1.5}$$

原理的にはこの方程式を解いて $W(x)$ が求めればよいのだが、残念ながらこの微分方程式は容易に解けない。そこで $i\hbar W''(x)$ を \hbar を摂動パラメータとする摂動項と見做して ($i\hbar W''(x)$ を摂動と見做せるための条件は後で述べる) $W(x)$ を \hbar のべき級数に展開していく摂動法の手法で近似解を求めていくこととなる。処方箋に従って

$$W = W_0 + \hbar W_1 + \hbar^2 W_2 + \dots \tag{8.1.6}$$

とおき、これを(8.1.4)の第1式に入れ \hbar の同じ冪の項を取りだすと

$$\begin{cases} 0 \text{次}: W_0'^2 = 2m(E - V(x)) \\ 1 \text{次}: 2W_0' W_1' - iW_0'' = 0 \\ 2 \text{次}: 2W_0' W_2' + W_1'^2 - iW_1'' = 0 \\ \vdots \end{cases} \tag{8.1.7}$$

となる。0次の項から

$$W_0' = \pm \sqrt{2m(E - V(x))} = \pm \hbar k(x), \quad \therefore W_0(x) = \pm \hbar \int_a^x dx' k(x') \tag{8.1.8}$$

ただし、

$$k(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}/\hbar = p(x)/\hbar, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}: \text{局所運動量} \tag{8.1.9}$$

次に1次の項から

$$W_1' = \frac{i W_0''}{2 W_0'} = \frac{i k'(x)}{2 k(x)}, \quad \therefore W_1(x) = \frac{i}{2} \log k(x) \tag{8.1.10}$$

が得られるので、 \hbar の1次オーダーまでの近似解は

$$W = W_0 + \hbar W_1 = \pm \hbar \int_a^x dx' k(x') + \frac{i\hbar}{2} \log k(x) \tag{8.1.11}$$

となる。以上のことから、(8.1.4)の第1式の基本解は

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(\pm i \int_a^x dx' k(x')\right) \tag{8.1.12}$$

と得られ, 一般解は A_+, A_- を定数とする基本解の1次結合で表して

$$\phi(x) = \frac{A_+}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(i \int_a^x dx' k(x')\right) + \frac{A_-}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(-i \int_a^x dx' k(x')\right) \quad (8.1.13)$$

となる。表現を簡単にするために次の積分を定義すると

$$\eta(x, a) = \int_x^a dx' \frac{\sqrt{2m|E - V(x)|}}{\hbar} \quad (8.1.14)$$

領域 1 における WKB 近似の波動関数は

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \frac{A_+}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(i \int_a^x dx' k(x')\right) + \frac{A_-}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(-i \int_a^x dx' k(x')\right) \\ &= \frac{A_+}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\eta(x,a)} + \frac{A_-}{\sqrt{k(x)}} e^{i\eta(x,a)} \quad (x < a : E > V(x)) \end{aligned} \quad (8.1.15)$$

と表せる。(8.1.15) は \sin や \cos で表せる振動型の解で, 右辺第1項は x 軸の正の向きに進む波を, 第2項は負の向きに進む波を表す³。

領域 1 においては局所運動量 $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ は実数で, この領域は古典的に到達可能な領域と呼ばれる。

$E < V(x)$ の領域 2 (古典的に到達不可能な領域)

この領域では

$$W_0(x) = \pm i\hbar \int_a^x dx' \kappa(x'), \quad W_1(x) = \frac{i}{2} \log \kappa(x) \quad (8.1.16)$$

が得られ, \hbar の1次オーダーまでの近似解は

$$W = W_0 + \hbar W_1 = \pm i\hbar \int_a^x dx' \kappa(x') + \frac{i\hbar}{2} \log \kappa(x) \quad (8.1.17)$$

となる。(8.1.4) の第2式の基本解は

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(\pm \int_a^x dx' \kappa(x')\right) \quad (8.1.18)$$

したがって, 領域 2 における WKB 近似の波動関数は, (8.1.14) で定義した η を使うと

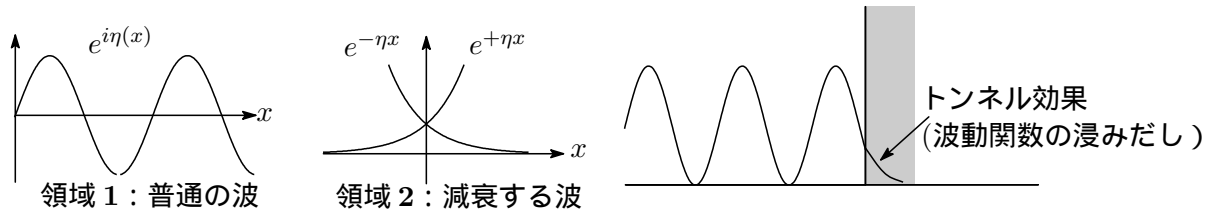
$$\phi(x) = \frac{B_+}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(\int_a^x dx' \kappa(x')\right) + \frac{B_-}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(-\int_a^x dx' \kappa(x')\right) \quad (8.1.19)$$

$$= \frac{B_+}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{\eta(a,x)} + \frac{B_-}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\eta(a,x)} \quad (x > a : E < V(x)) \quad (8.1.20)$$

と表せる。波動関数 (8.1.20) は領域 1 で見られた振動型の波動関数ではない点に注意されたい。 $\eta(a, x) \geq 0$ であり, いわゆる普通の“波”ではなく指数関数的に増大, 減衰する波とでもいうべきものである。

³ e^{ikx} は x 軸正の方向に進む進行波, e^{-ikx} は x 軸の負の方向に進む後退波を表す。いま, $\eta(x, a) = -\int_a^x dx' k(x')$ であることに注意しよう。

なぜそのようになるかという、領域2では運動量 $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ は純虚数になり古典力学的には粒子は存在しえない(このことから古典的に到達不可能な領域と呼ばれる)が、量子力学ではポテンシャルの壁を越えた波動関数の浸みだし(トンネル効果)がある、ということによる。



$i\hbar W''(x)$ が摂動と見做せるための条件

ここで $i\hbar W''(x)$ が摂動と見做せる条件について調べてみよう。その条件は (8.1.5) の第3項が十分小さいこと、つまり

$$W'(x)^2 \gg |\hbar W''(x)| \rightarrow 1 \gg \left| \frac{\hbar W''(x)}{W'(x)^2} \right| = \left| \left(\frac{\hbar}{W'(x)} \right)' \right| \quad (8.1.21)$$

が成り立つことである。

$$\frac{\hbar}{W'(x)} = \frac{\hbar}{W'_0(x) + \hbar W'_1(x) + \dots} = \frac{1}{\pm k(x) + \frac{i}{2} \frac{k'(x)}{k(x)} + \dots}$$

で、分母を第1項で近似すると、(8.1.21) の条件は

$$1 \gg \left| \frac{d}{dx} \frac{1}{k(x)} \right| = \left| \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{p(x)} \right| = \left| \hbar \frac{1}{p^2} \frac{dp}{dx} \right|, \quad p(x) = \hbar k(x) \quad (8.1.22)$$

と書ける。その点での局所的なド・ブロイ波長を $\lambda(x) = \frac{h}{p(x)}$ とすれば

$$\left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1 \rightarrow |d\lambda(x)| \ll |dx| \quad (8.1.23)$$

であり、粒子が距離 dx 進む間にド・ブロイ波長 $\lambda(x)$ はほとんど変化しないことを意味している。また、条件 (8.1.23) は

$$\left| \hbar \frac{1}{p^2} \frac{dp}{dx} \right| \ll 1 \rightarrow \left| \frac{\lambda}{2\pi} \cdot \frac{1}{p} \frac{dp}{dx} \right| \ll 1 \quad (8.1.24)$$

と表すことができ、これは距離 $\lambda/2\pi$ の間の、粒子の運動量変化の割合が1に比べてずっと小さいことを意味する。これらの条件は、(8.1.9) よりポテンシャル $V(x)$ は波長程度の距離ではほとんど変化しないということと同じである。

$E = V(x)$ (転回点)

$V(x) = E$ となる近傍では $p(x) \rightarrow 0$ 、波長 $\lambda(x) \rightarrow \infty$ となり、WKB近似の前提条件 (8.1.21) が成り立たない。 $V(x) = E$ となる点 $x = a$ は転回点と呼ばれ⁴、古典的にはエネルギー E で飛んできた粒

⁴古典的回帰点ともいう。

子の速度は転回点で0になり、粒子は逆方向に引き返す点である。転回点ではWKB近似は使えないが、転回点から数波長離れた領域ではWKB近似は成り立つ。WKB近似はポテンシャル $V(x)$ は波長程度の距離ではほとんど変化しないことが前提条件となっている。WKB近似が成立する x の領域を求めよう。ポテンシャル $V(x)$ を回帰点 $x = a$ の回りでテイラー展開し、1次までの項で近似(線形近似)すると

$$V(x) \simeq V(a) + (x - a)V'(a) = E + (x - a)V'(a) \tag{8.1.25}$$

このとき運動量は

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \simeq \sqrt{2m(a - x)V'(a)} \tag{8.1.26}$$

となる。(8.1.22)の条件は

$$1 \gg \left| \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{p(x)} \right| \rightarrow |x - a| \gg \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m|V'(a)|} \right)^{1/3} \tag{8.1.27}$$

となり、WKB近似がよい近似となる領域は

$$x \ll a - \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m|V'(a)|} \right)^{1/3}, \quad x \gg a + \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m|V'(a)|} \right)^{1/3} \tag{8.1.28}$$

8.2 WKBの接続公式

$E > V(x)$ の領域1と $E < V(x)$ の領域2における波動関数は

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{領域1: } \phi_1(x) = \frac{A_+}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\eta(x,a)} + \frac{A_-}{\sqrt{k(x)}} e^{i\eta(x,a)} \quad (x < a : E > V(x)) \\ \text{領域2: } \phi_2(x) = \frac{B_+}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{\eta(a,x)} + \frac{B_-}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\eta(a,x)} \quad (x > a : E < V(x)) \end{array} \right. \tag{8.2.1}$$

WKB近似は転回点近くの領域では成り立たないので、その領域ではシュレーディンガー方程式の正確な解を求め、その解を領域1と領域2の解につなぎ合わせる事が次の仕事になる。

転回点の近くでのポテンシャルを

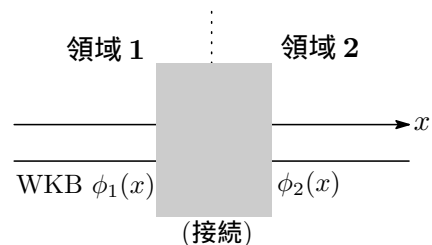
$$V(x) \simeq V(a) + (x - a)V'(a) = E + (x - a)V'(a) \tag{8.2.2}$$

と線形近似(直線近似)すると、シュレーディンガー方程式(8.1.3)は

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} - (x - a) \frac{2mV'(a)}{\hbar^2} \phi(x) = 0 \tag{8.2.3}$$

と書ける。ここで

$$y = \left(\frac{2mV'(a)}{\hbar^2} \right)^{1/3} (x - a) = V_a^{1/3} (x - a), \quad V_a = \frac{2mV'(a)}{\hbar^2} \tag{8.2.4}$$



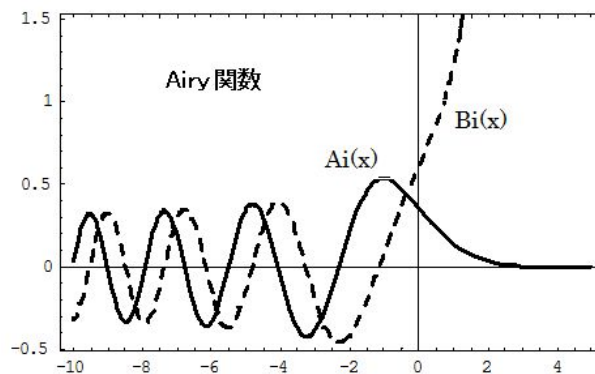
と変数変換すると、シュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2\phi(y)}{d^2y} - y\phi(y) = 0 \tag{8.2.5}$$

となる。この微分方程式の解は Airy 関数 $A_i(y)$, $B_i(y)$ ⁵として知られていて、次の積分で定義される⁶。

$$A_i(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3} + yt\right) dt \tag{8.2.6}$$

$$B_i(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left[\sin\left(\frac{t^3}{3} + yt\right) + \exp\left(-\frac{t^3}{3} + yt\right) \right] dt \tag{8.2.7}$$



(8.2.5) の一般解は

$$\phi(x) = C_1 A_i(y) + C_2 B_i(y) \quad (C_1, C_2: \text{任意定数}) \tag{8.2.8}$$

で与えられる。しかし、積分で定義された Airy 関数のままでは WKB 解とつなぎ合わせようとしても途方に暮れてしまう^^)；。Airy 関数の漸近形は次式で与えられることが知られていて、

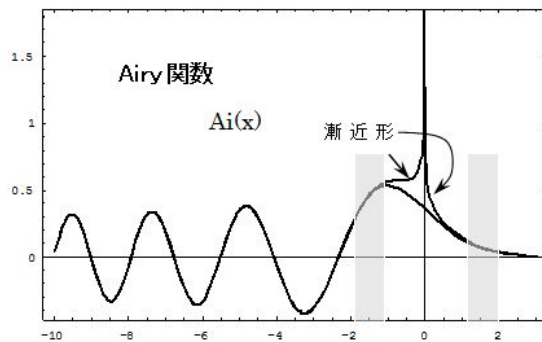
$$y < 0 \begin{cases} A_i(-y) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}y^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}y^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \\ B_i(-y) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}y^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}y^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \end{cases} \tag{8.2.9}$$

$$y > 0 \begin{cases} A_i(y) \simeq \frac{1}{2\sqrt{\pi}y^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}y^{3/2}\right) \\ B_i(y) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}y^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}y^{3/2}\right) \end{cases} \tag{8.2.10}$$

Airy 関数とその漸近形をグラフに重ね合わせて描くと下図になり、転回点から少し離れたところで漸近形の振る舞いは (8.2.5) の厳密解である Airy 関数と一致することが分かる。この事実を使い、WKB の解と Airy 関数の漸近形は転回点の付近で一致する(重なり合う)と考えれば、WKB の解とシュレーディンガー方程式の厳密解をつなぎ合わせる事ができる。

⁵ $A_i(y)$, $B_i(y)$ という表記は慣例上のもので特に意味はない。

⁶ 解 $A_i(y)$ の原点付近の振る舞いを見ると、 $y > 0$ の領域で y の増加に伴い指数関数的に 0 へと減衰し、トンネル効果による波動関数の浸みだしを彷彿とさせる様子が伺える。



漸近形を使うと(8.2.8)は

$$\left\{ \begin{array}{l} x < a : \phi_1(x) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{1/4}} \left\{ C_1 \sin \left[\frac{2}{3}(-y)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] + C_2 \cos \left[\frac{2}{3}(-y)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \right\} \\ \qquad \qquad \qquad = \frac{1}{2\sqrt{\pi}(-y)^{1/4}} \left\{ (C_2 - iC_1) \exp \left[\frac{2i}{3}(-y)^{3/2} + i\frac{\pi}{4} \right] \right. \\ \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \left. + (C_2 + iC_1) \exp \left[-\frac{2i}{3}(-y)^{3/2} - i\frac{\pi}{4} \right] \right\} \\ x > a : \phi_2(x) \rightarrow \frac{1}{2\sqrt{\pi}y^{1/4}} \left[C_1 \exp \left(-\frac{2}{3}y^{3/2} \right) + 2C_2 \exp \left(\frac{2}{3}y^{3/2} \right) \right] \end{array} \right. \quad (8.2.11)$$

と表せる。WKB 近似の適用領域(8.1.27)を y で表すと

$$|x - a| = |yV_a^{-1/3}| \gg \frac{1}{2} \left(2|V_a|^{-1} \right)^{1/3} \quad (8.2.12)$$

で、これから $|y| \gg 2^{-2/3} \simeq 0.63$ となり、Airy 関数の漸近形と十分重なり合うことが分かる。

漸近形の中にでてくる $\frac{2}{3}|y|^{3/2}$ という因子は

$$\frac{2}{3}|y|^{3/2} = \frac{2}{3}|V_a|^{1/2}|x - a|^{3/2} = \left| \int_a^x dx' |V_a(x' - a)|^{1/2} \right| \quad (8.2.13)$$

と表せる。転回点の近くでは(8.2.2)より

$$V_a(x - a) = \frac{2m}{\hbar^2} V_a'(a)(x - a) \simeq \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \quad (8.2.14)$$

と近似できるので(8.2.13)は

$$\begin{aligned} \frac{2}{3}|y|^{3/2} &= \left| \int_a^x dx' |V_a(x' - a)|^{1/2} \right| \simeq \int_a^x dx' \frac{\sqrt{2m|V(x) - E|}}{\hbar} \\ &= |\eta(a, x)| \begin{cases} -\eta(a, x), & (x < a) \\ \eta(a, x), & (x > a) \end{cases}, \quad k(x) = \kappa(x) = V_a^{1/3} \sqrt{|y|} \end{aligned} \quad (8.2.15)$$

である。(8.2.11) に (8.2.15) を入れると

$$\begin{cases} x < a : \phi_1(x) = \frac{V_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi k(x)}} \left[(C_2 + iC_1)e^{-i\eta(x,a)-i\pi/4} + (C_2 - iC_1)e^{\eta(x,a)+i\pi/4} \right] \\ x > a : \phi_2(x) = \frac{V_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi \kappa(x)}} \left[2C_2e^{\eta(a,x)} + C_1e^{-\eta(a,x)} \right] \end{cases} \quad (8.2.16)$$

となる。これと WKB 近似の解 (8.2.1) と比較して

$$\begin{cases} A_+ = \frac{V_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}(C_2 + iC_1)e^{-i\pi/4} & A_- = \frac{V_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}(C_2 - iC_1)e^{i\pi/4} \\ B_+ = \frac{V_a^{1/6}}{\sqrt{\pi}}C_2 & B_- = \frac{V_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}C_1 \end{cases} \quad (8.2.17)$$

を得る。これから

$$\begin{cases} A_+ = \left(\frac{1}{2}B_+ + iB_- \right) e^{-i\pi/4} \\ A_- = \left(\frac{1}{2}B_+ - iB_- \right) e^{i\pi/4} \end{cases} \quad (8.2.18)$$

これが求める接続条件となる。

領域 1 の WKB 近似解は

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= \frac{A_+}{\sqrt{k(x)}} e^{i\eta(a,x)} + \frac{A_-}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\eta(a,x)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{k}} \left(\frac{1}{2}B_+ + iB_- \right) e^{i(\eta-\pi/4)} + \frac{1}{\sqrt{k}} \left(\frac{1}{2}B_+ - iB_- \right) e^{-i(\eta-\pi/4)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left[B_+ \cos \left(\frac{\pi}{4} - \eta(a,x) \right) + 2B_- \sin \left(\frac{\pi}{4} - \eta(a,x) \right) \right] \end{aligned} \quad (8.2.19)$$

これが (8.2.1) の領域 2 における WKB 近似解

$$\phi_2(x) = \frac{B_+}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{\eta(a,x)} + \frac{B_-}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\eta(a,x)} \quad (x > a : E < V(x))$$

に接続する。領域 2 で波動関数が指数関数的に減少するためには $B_+ = 0$ でなければならない。つまり

$$\phi_2(x) = \frac{B_-}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\eta(a,x)} \quad (x > a) \quad (8.2.20)$$

でこれに接続する領域 1 の波動関数は

$$\phi_1(x) = \frac{2B_-}{\sqrt{k(x)}} \sin \left(\frac{\pi}{4} - \eta(a,x) \right) \quad (x < a) \quad (8.2.21)$$

となる。

さて、WKB 近似の基本的な考え方は以上のお話で理解できると思われるので、第8話はこのあたりでお開きとします。次回第9話は経路積分での WKB 近似を予定していますが、どうなることか ...

*HISTORY******

- 2015.01.23 : 第 8 話を追加
- 2014.12.05 : 第 7 話を追加
- 2014.11.15 : 第 6 話を追加
- 2014.11.03 : 第 5 話を追加。同時に第 3 話, 第 4 話を見直し, 若干加筆。
- 2014.08.21 : 第 4 話を追加。
- 2014.08.04 : Feynman の経路積分」(全 3 話) をアップ。

関連図書

- [1] R.P. ファインマン (江沢洋訳):「物理法則はいかにして発見されたか」, ダイヤモンド社 (S.52)
- [2] R.P. ファインマン, A.R. ヒップス (北原和夫訳):「量子力学と経路積分」, みすず書房 (2001)
- [3] 米満澄, 高野宏治:「経路積分ゼミナール」, アグネ技術センター (1999)
- [4] 森藤正人:「量子波のダイナミクス」, 吉岡書店 (2005)
- [5] ゴールドスタイン (野間進, 瀬川富士訳):「古典力学」, 吉岡書店 (1960)
- [6] 江沢洋:「解析力学」, 培風館 (2012)
- [7] メシア (小出昭一郎・田村二郎訳):「量子力学 1」, 東京図書 (1971)