

F E Y N M A N の経路積分

K E N Z O U

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	アイコナール近似	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(ほとぼし)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を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 を前向き時間とすると、 $-t$ は後ろ向き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) か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。

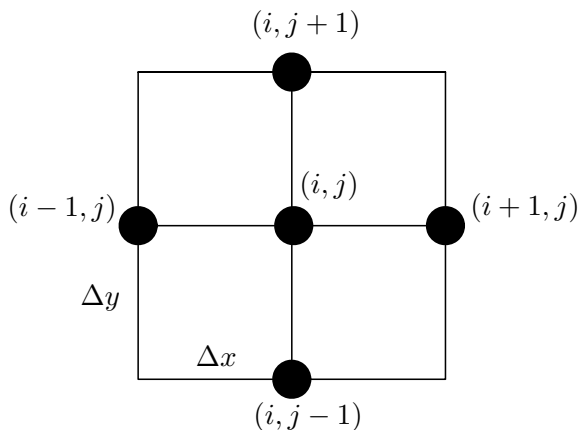
“場”というものを考えると、ある時刻の場が与えられた場合、次の瞬間の場は微分方程式を解くことで得られる。つまり、微分方程式は近接作用を表しているわけだね。このあたりの状況は次の差分方程式を考えるとわかりやすい。簡単のために2次元で考えてみよう。

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。各格子点での 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して取り組んだ。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

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

で表され、これが極値をとる経路、つまり

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

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、僕の手がどうしよう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う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。 $\hbar = 1.05 \times 10^{-34}$ m²Kg/s, $m = 9.11 \times 10^{-31}$ Kg なので $\eta \sim 10^{-2}\sqrt{\varepsilon}$ [m]。仮に $\varepsilon \sim 10^{-10}$ [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

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

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、ジェー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。ジェー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ー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。

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

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

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

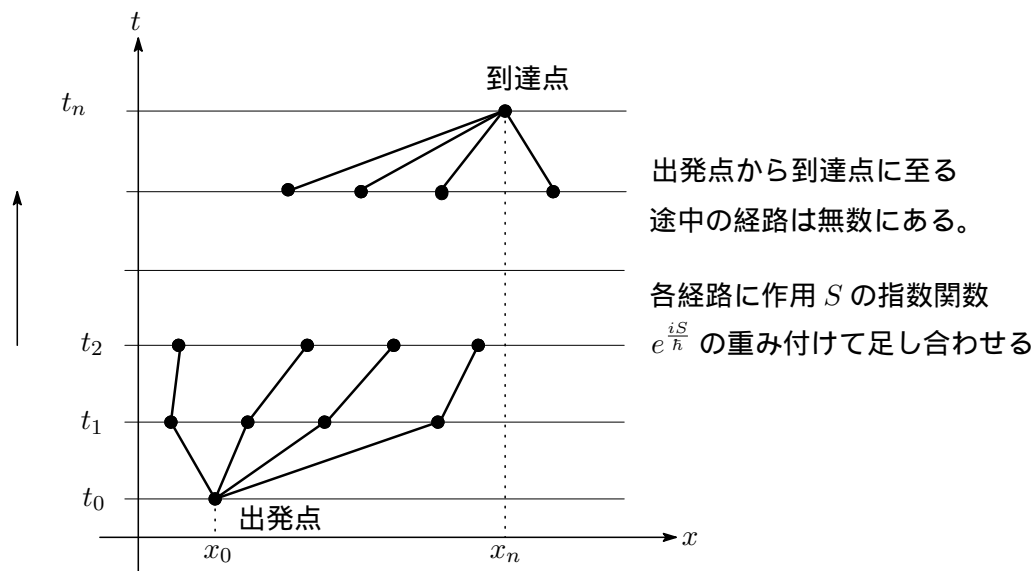
を定義した。これを使うと (2.3.21) は

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

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

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

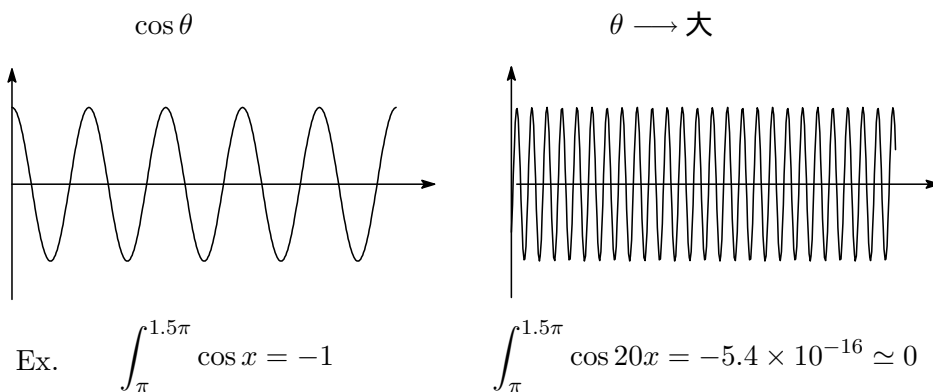
⁸R.P.Feynman, Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics 20,367, Rev. of Mod. Phys(1948)



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、



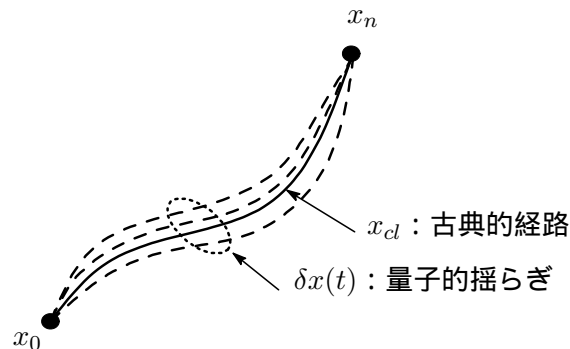
積分 $\int \mathcal{D}x(t) e^{iS/\hbar}$ は、ほとんどの経路については打ち消し合って0になってしまうが、唯一積分に寄与するのは S が最小となるような経路 (作用積分 $\int L dt$ が停留値となる古典経路) だけということになる。つまり、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限では作用積分が停留値をとる古典経路 x_{cl} だけが (2.3.26) に寄与する。しかし、量子論では、 \hbar はゼロでない有限の値をもつので、実現される経路としては

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

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: そういえば, 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。」

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

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。

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

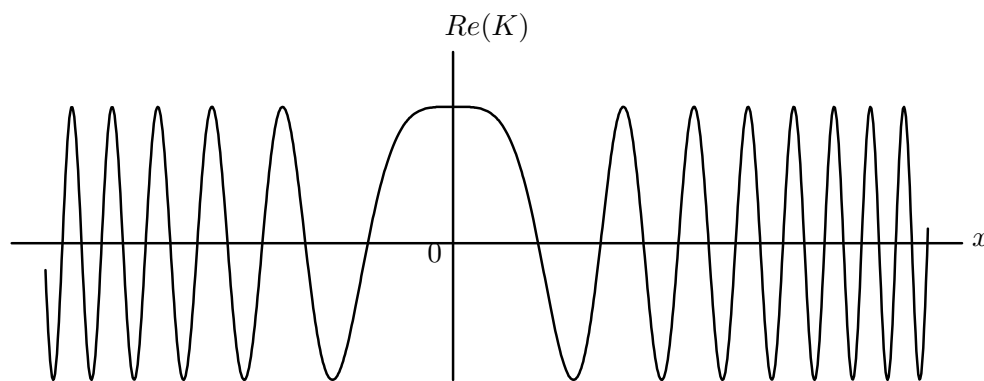
- コニー：量子力学を習うと「古典的軌道という概念は捨てなさい」ということをまず叩き込まれ、その後、雲をつかむような話へとつながっていくわけだけど、ファインマンの経路積分ではイメージしやすい古典的軌道が復活してくるのね。そうすると、時間だけの関数 $F(t)$ は一体何を意味するのかしら。

- 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 $e^{iS/\hbar}$ 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。

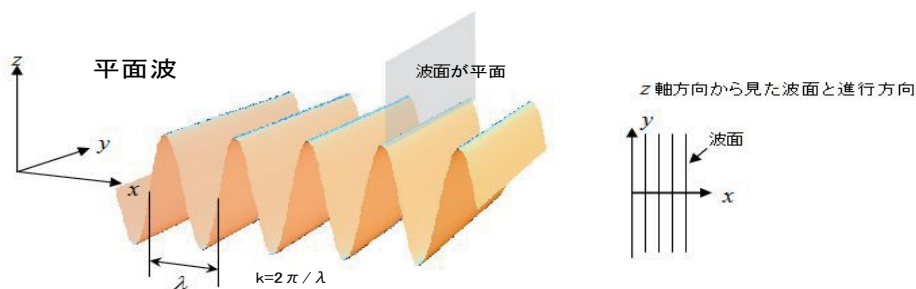
- コニー: つまり, ファインマン核の具体的表式がわかっているならば, 任意の時刻での波動関数 $\psi(x, t)$ はファインマン核と初期時刻での波動関数の積を積分した (3.2.2) で求められるということね。

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

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

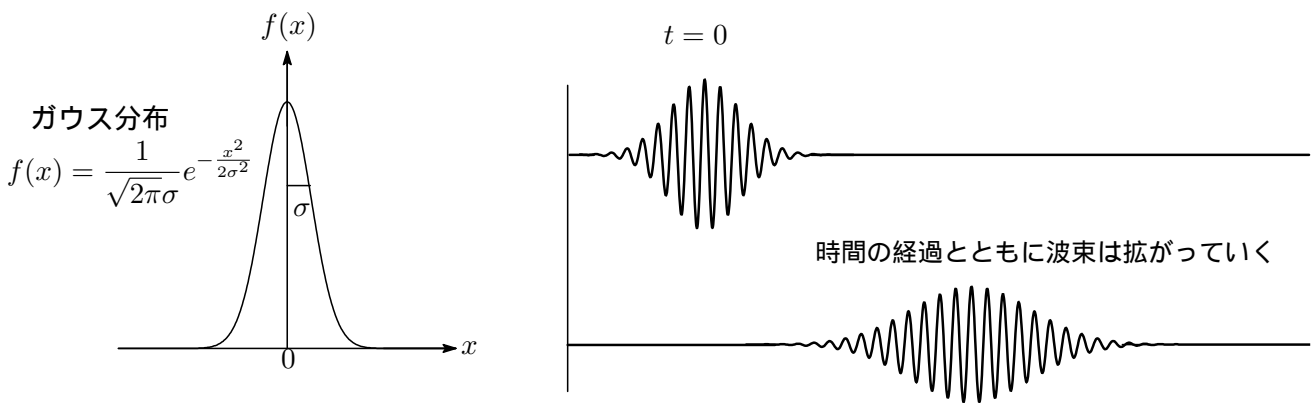
と得られ⁹、先出のレポートの結果と一致する。波束は時間の経過とともに崩れていく¹⁰。

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

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

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

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

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。