自由粒子と経路積分

大 高 成 介*

Free Particle and Path Integral

Shigeyuki OOTAKA

In the present paper, we shall try to the simplification of calculation for the Path Integral. It can now be made by noting the action S and classical action S_{cl}.

§1 Introduction

ポテンシャル $V(x,t)$の中を1次元運動している粒子に関するシュレデンガー方程式は次のように与えられる.

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial t}=\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2+V(x,t)\right]\phi(x,t) \tag{1-1}$$

$\phi(x',t')$ を用いて$\phi(x,t)$ を展開することができる.すなわち,

$$\phi(x,t)=\int K(x,t,x',t')\phi(x',t')\,dx' \tag{1-2}$$

作用関数が

$$S=\int_{t'}^{t}L(\dot{x},x,t)\,dt$$

$$=\int_{t'}^{t}\left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x,t)\right]dt \tag{1-3}$$

なる形をもつとき，(1-2)と(1-3)を用いて，$K(x,t,x',t')$は次の形に書くことができる．

$$K(x,t,x',t')=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{A}\int\int\cdots\int\exp\left[i\frac{S}{\hbar}\right]\frac{dx_1}{A}\frac{dx_2}{A}\cdots\frac{dx_{N-1}}{A} \tag{1-4}$$

この積分を経路積分またはkernelといい，R.P.Feynman[1, 2]によって見出された．この経路積分は量子論と古典的論の関係を明白に示している．すなわち，2点(x,t)と(x',t')をつなぐ古典力学の軌跡は作用Sが最小となるときの関数の与える軌道である．いま，これを$\bar{x}(t)$と書くことにする．この$\bar{x}(t)$少しずつずらすことによって，(x,t)と(x',t')をむすぶ連続的に分布しているあらゆる軌道の集まりを得ることができる．ただし，これらの軌道は時刻tとt'の間の領域内にあるものとする．従って，量子論的な$K(x,t,x',t')$は，このような軌道に対応する古典的作用関数Sを含んでいる被積分関数すべての和であることを意味する[図Aを参照]．

§2　自由粒子に対するFeynman Kernel

経路積分的観点から古典的軌道を考えると以下のことが判る．$\hbar$が非常に小さい場合には，(1-4)の位相が大きいから，(1-4)の被積分関数は積分変数の変化と共に非常にはやく振動し，そのため積分は非常に小さくなる．ただし，作用関数が極値をとっている場合は例外であって，この時には変数がかわっても作用関数はあまり変化しないので，被積分関数はほとんど変化しない．従って，$\hbar\to 0$の極限では作用関数の極値を与える軌道$\bar{x}(t)$だけが(1-4)に寄与する．この$\bar{x}(t)$はまさに古典力学で得られる軌道であって，(1-4)を考慮すると$\hbar\to 0$の極値で粒子の存在確率がゼロでないのは古典力学の軌道の上だけであることが判る．このことを考慮すると，古典軌道に基づく経路部分とそうでない経路部分に分離することは，物理的理解およびより簡単な計算を実行するためにも重要である．

任意の経路をx(t)，古典経路(軌道)を$\bar{x}(t)$とすれば，作用$S(x,x)$は次のようになる．

$$\begin{aligned} S(x,x) &= S(\dot{\bar{x}}+\delta x,\bar{x}+\delta x)\\ &= S(\dot{\bar{x}},\bar{x})+\frac{\partial S}{\partial \dot{x}}\delta \dot{x}+\frac{\partial S}{\partial x}\delta x\\ &= S_{cl}+\delta S \end{aligned} \tag{2-1}$$

ただし，S_{cl}は古典軌道$\bar{x}(t)$に対する作用$S(\dot{\bar{x}},\bar{x})$とする．これを(1-4)に代入すると

$$K(b,a)=\left\{\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{A}\int\int\cdots\int\exp\left[i\frac{\delta S}{\hbar}\right]\frac{dx_1}{A}\frac{dx_2}{A}\cdots\frac{dx_{N-1}}{A}\right\}e^{(i/\hbar)S_{cl}} \tag{2-2}$$

が得られる.

自由粒子に対するkernelを求めるために,まずδS を計算する.

$$\delta S=\delta\int_{t_a}^{t_b}\frac{m\dot{x}^2}{2}dt$$
$$=\int_{t_a}^{t_b}(m\dot{x}\delta\dot{x})dt=0 \tag{2-3}$$

ここで,$\delta x(t_b)=\delta x(t_a)=0,\quad \ddot{x}=0$ を用いた.次に,(2-2)に(2-3)を代入すれば,

$$K(b,a)=\left\{\lim_{\Delta t\to 0}\int\int\cdots\int\frac{dx_1}{A}\frac{dx_2}{A}\cdots\frac{dx_{N-1}}{A}\right\}\frac{e^{(i/\hbar)S_{cl}}}{A} \tag{2-4}$$

となる.さらに,(2-4)に(a6),(c2),(c4)を代入すれば,

$$K(b,a)=\frac{e^{(i/\hbar)S_{cl}}}{A}$$
$$=\left(\frac{2\pi i\hbar(t_b-t_a)}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\right]$$

が得られる.明らかに,(2-2)の方法のほうが**A-b**のFeynmanの方法よりもはるかに計算が容易になる.

参考文献

1. R.P.Feynman,A.R.Hibbs:Quantum Mechanics and Path Integrals(McGraw-Hill Book,1965)
2. 大貫義郎・鈴木増雄・柏 太郎:現代の物理学12　経路積分の方法(岩波,1992)

APPENDIX

A-a　自由粒子 $L=\frac{m\dot{x}^2}{2}$ の古典運動に対する作用 S_{cl}

作用Sが極値となる条件［古典軌道を通る条件］は

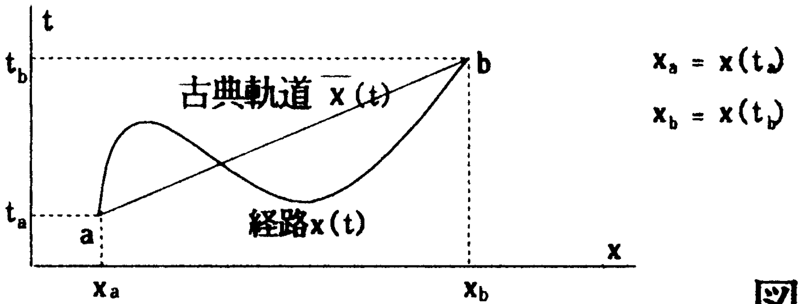
$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)-\frac{\partial L}{\partial x}=0 \tag{a1}$$

で，この式に

$$\frac{\partial L}{\partial x}=0 \qquad \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}=m\ddot{x} \tag{a2}$$

を代入すれば，

$$m\ddot{x}=0 \qquad \dot{x}=constant \tag{a3}$$



図A

したがって，古典軌道 $\dot{x}$ は次のように表すことができる．

$$\dot{x}=\frac{x_b-x_a}{t_b-t_a} \tag{a4}$$

自由粒子の古典運動に対するLagrangianを L_{cl} とすれば，

$$L_{cl}=\frac{1}{2}m\left(\frac{x_b-x_a}{t_b-t_a}\right)^2 \tag{a5}$$

となるから，自由粒子の古典運動に対する作用を S_{cl} は

$$S_{cl}=\int_{t_a}^{t_b}L_{cl}dt=\frac{1}{2}m\frac{(x_b-x_a)^2}{t_b-t_a} \tag{a6}$$

となる．

A-b Feynmanの方法による自由粒子のkernel計算

$$K(b,a)=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{A}\int\int\cdots\int e^{iS/\hbar}\frac{dx_1}{A}\frac{dx_2}{A}\cdots\frac{dx_{N-1}}{A}$$
$$=\lim_{\varepsilon\to 0}\int\int\cdots\int A^{-N}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\frac{m}{2}\dot{x}^2dt\right]dx_1dx_2\ldots dx_{N-1} \tag{b1}$$
$$=\lim_{\varepsilon\to 0}\int\int\cdots\int\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-N/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\sum_{i=1}^{N}(x_i-x_{i-1})^2\right]dx_1dx_2\ldots dx_{N-1}$$

ただし，

$$\frac{t_b-t_a}{N}\equiv\varepsilon,\quad x_N\equiv x_b,\quad x_0\equiv x_a,\quad A\equiv\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \tag{b2}$$

$$K_2=\int\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-2/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\{(x_2-x_1)^2+(x_1-x_0)^2\}\right]dx_1 \tag{b3}$$

$$(x_2-x_1)^2+(x_1-x_0)^2$$
$$=\frac{(x_2-x_0)^2}{2}+2\left(x_1-\frac{x_2+x_0}{2}\right)^2 \tag{b4}$$

(b4)を(b3)に代入すれば，

$$K_2=\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-2/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\cdot 2\varepsilon}(x_2-x_0)^2\right]\int\exp\left[\frac{im}{\hbar\varepsilon}\left(x_1-\frac{x_2+x_0}{2}\right)^2\right]dx_1 \tag{b5}$$

となり，これにガウス積分の公式

$$\int e^{-ax^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{b6}$$

を適用すれば，次式を得る．

$$K_2=\left(\frac{2\pi i\hbar 2\varepsilon}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\cdot 2\varepsilon}(x_2-x_0)^2\right] \tag{b7}$$

$$K_3 = \int\int dx_1 dx_2 \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-3/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\{(x_3 - x_2)^2 + (x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2\}\right]$$

$$= \int dx_2 \left(\frac{2\pi i\hbar 2\varepsilon}{m}\right)^{-1/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\cdot 2\varepsilon}(x_2 - x_0)^2\right] \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-1/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}(x_3 - x_2)^2\right]$$

$$= \int dx_2 \left(\frac{2\pi i\hbar 2\varepsilon}{m}\right)^{-1/2} \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-1/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar 2\varepsilon}\{(x_2 - x_0)^2 + 2(x_3 - x_2)^2\}\right] \quad \text{(b8)}$$

$$(x_2 - x_0)^2 + 2(x_3 - x_2)^2$$

$$= \frac{2(x_3 - x_0)^2}{3} + 3\left(x_2 - \frac{2x_3 + x_0}{3}\right)^2 \quad \text{(b9)}$$

(b9)を(b8)に代入すれば，公式(b6)より

$$K_3 = \int dx_2 \left(\frac{2\pi i\hbar 2\varepsilon}{m}\right)^{-1/2} \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-1/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar 3\varepsilon}(x_3 - x_0)^2\right] \exp\left[\frac{3im}{2\hbar 2\varepsilon}\left(x_2 - \frac{2x_3 + x_0}{3}\right)^2\right]$$

$$= \left(\frac{2\pi i\hbar 3\varepsilon}{m}\right)^{-1/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar 3\varepsilon}(x_3 - x_0)^2\right] \quad \text{(b10)}$$

(b7)，(b10)から

$$K_2 = \left(\frac{2\pi i\hbar 2\varepsilon}{m}\right)^{-1/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\cdot 2\varepsilon}(x_2 - x_0)^2\right]$$

$$K_3 = \left(\frac{2\pi i\hbar 3\varepsilon}{m}\right)^{-1/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\cdot 3\varepsilon}(x_3 - x_0)^2\right]$$

となるから，(b1)は次のようになる．

$$K(b,a)=\left(\frac{2\pi i\hbar\cdot N\varepsilon}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\cdot N\varepsilon}(x_N-x_0)^2\right]$$
$$=\left(\frac{2\pi i\hbar\cdot(t_b-t_a)}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\right]$$
$$=\left(\frac{2\pi i\hbar\cdot(t_b-t_a)}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{i}{\hbar}S_{cl}\right] \tag{b11}$$

これが自由粒子のKernelである.

A-c

$L=\frac{m}{2}\dot{x}^2-v(x,t)$の場合, $Ref.1[p76\sim]$によれば,

$$\phi(x,t)=\left(\frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty}d\eta\ e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}}\right)\phi(x,t)=\left(\frac{1}{A}\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2}\right)\phi(x,t) \tag{c1}$$

$\varepsilon\to0$ で一番左の辺と一番右の辺が一致するためには,

$$A=\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \tag{c2}$$

と選ばなければならない.

次に, (c1)で $\eta=0$ の場合を考えると

$$\frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty}d\eta=1 \tag{c3}$$

が成立し, これを一般化すると

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\eta_1}{A}\frac{d\eta_2}{A}\cdots\cdots\frac{d\eta_{N-1}}{A}=1 \tag{c4}$$

となる.

(平成8年12月9日受理)