

第3章 電磁場の量子化

この章では、まず古典電磁気学の復習を行い (§3.1)、次に古典電磁波の方程式を正準形式 (ハミルトン形式) に書き直し (§3.2)、それを量子化する (§3.3)。

3.1 古典電磁気学の復習

- ここでは、まず SI 単位系の Maxwell 方程式から出発し、
- 次にスカラーポテンシャル ϕ 、ベクトルポテンシャル \mathbf{A} を導入し、 ϕ, \mathbf{A} に対する方程式を得る。
- 次に Gauge 変換

$$\phi \rightarrow \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \quad (3.1)$$

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \text{grad} \chi \quad (3.2)$$

について議論する。特に、Coulomb gauge $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ と Lorentz gauge $\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$ について言及する。

SI 単位系 (皆さんがよく知っている”普通の”単位系) で Maxwell 方程式を書くと

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \left(\mathbf{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) \quad \text{ちなみに } \epsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2} \quad (3.5)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad \text{となる。} \quad (3.6)$$

$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ より、あるベクトル場 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ を用いて

$$\underline{\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} \quad (3.7)$$

と書くことができる。これを、Faraday の法則に代入。

$$\nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0 \quad (3.8)$$

これより、あるスカラー場 $\phi(\mathbf{r}, t)$ を用いて

$$\underline{\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\nabla \phi} \quad (3.9)$$

と書くことができる。ここまでで、Maxwell eq. の第 2,4 式を用いた。

そこで上の (3.7), (3.9) 式を Maxwell eq. の第 1,3 式に代入すると

$$\text{第 1 式} \quad \nabla \cdot \left(-\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = -\nabla^2 \phi - \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{A}) = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.10)$$

” Gauss の法則の電磁ポテンシャル表現 ”

$$\text{第 3 式;} \quad \left(\nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) = \mu_0 \mathbf{j} \quad (3.11)$$

$$\longrightarrow \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(-\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = \mu_0 \mathbf{j}$$

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A} + \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \mu_0 \mathbf{j} \quad (3.12)$$

” Ampère-(Maxwell) の法則の電磁ポテンシャル表現 ”

この 2 つの方程式が ϕ, \mathbf{A} の満たす方程式になる。

次に gauge 変換について議論する。ここでスカラー場 $\chi(\mathbf{r}, t)$ に対して

$$\boxed{\phi' = \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi} \quad (3.13) \quad \text{とおくと、}$$

$$\nabla \times \mathbf{A}' = \nabla \times \mathbf{A} + \nabla \times (\nabla \chi) = \mathbf{B} \quad (3.14)$$

$$= 0$$

$$-\left(\nabla \phi' + \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} \right) = -\left(\nabla \phi - \nabla \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \nabla \chi \right)$$

↙ cancel ↗

$$= -\left(\nabla \phi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = \mathbf{E} \quad (3.15)$$

より、 (ϕ', \mathbf{A}') と (ϕ, \mathbf{A}) は同じ (\mathbf{E}, \mathbf{B}) を与える。

このことは、同等な物理を記述する電磁ポテンシャル中に余計な自由度があることを意味する。このような自由度を gauge 自由度といい、 \square を gauge 変換という。この自由度をいかして、以下、都合のよいように gauge をとる。次の2つが popular である。

$$(1) \text{ Lorentz gauge } \quad \nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$$

$$\text{このとき、Ampère 則 } \quad \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{j} \quad (3.16)$$

$$\text{Gauss 則 } \quad \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \phi = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.17)$$

これを用いると、双極子放射などの扱いが便利。これらは、

ϕ ; ρ のある地点での時間変動が速さ c を持つ波動の形で周りの空間に伝わる様子を表す。

\mathbf{A} ; \mathbf{j} のある地点での時間変動が速さ c を持つ波動の形で周りの空間に伝わる様子を表す。

$$(2) \text{ Coulomb gauge } \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$$

$$\text{このとき、Gauss 則 } \rightarrow -\nabla^2 \phi = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.18)$$

$$\rightarrow \phi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \quad (3.19)$$

ρ が t に依存していたとしても、静電場のとおり関係が ϕ と ρ のあいだに成立。

つまり、各瞬間の ρ が ϕ を決定。

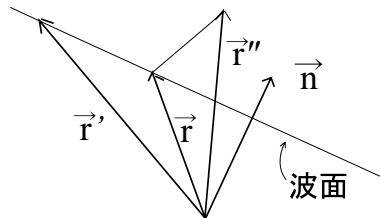
$$\text{Ampère 則 } \rightarrow \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{j} - \underbrace{\frac{1}{c^2} \nabla \frac{\partial \phi}{\partial t}} \quad (3.20)$$

これらの時間変動が速さ c の波動の形で周りの空間に伝わる様子を表すのが \mathbf{A} 。

電磁波は全て \mathbf{A} で表される。

$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ は、 \mathbf{A} が横波であることを表す。

例. \mathbf{A} が平面波であるとき、波の進行方向を x 軸にとると



$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0(x - ct) \quad (3.21)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} = 0 \quad (3.22)$$

A_x は x について定数 進行波の A_x 成分はゼロ。

Coulomb gauge は一見ごちゃごちゃしているが、真空中の電磁波を量子化する際は便利。

真空 : $\rho = 0, \mathbf{j} = 0$

$$\longrightarrow \phi = 0, \quad \underline{\underline{\nabla \cdot \mathbf{A} \text{ かつ } \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A} = 0}} \quad (3.23)$$

あとはこちらだけ扱えばよい。

3.2 電磁波の正準方程式

(まだ古典電磁気学)

電磁波の方程式をハミルトンの運動方程式

$$\dot{P} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q}, \quad \dot{Q} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P} \quad (3.24)$$

の形に書き直す。このような形式を得られれば、正準量子化が可能になる。以下、

- まず周期的境界条件の下で、 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ を基準振動で展開する。そして各基準振動の運動方程式から、調和振動子と等価であることを示す。
- 次に電磁場のエネルギー密度の表式を、各基準振動の座標 (振幅) で書き表す。
- 基準振動の運動方程式と、エネルギー密度の表式から、基準振動に対する正準方程式を導く。

$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ を基準振動で展開しよう。そのためには $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ に対して境界条件を課す必要がある。ここでは周期的境界条件 (periodic boundary condition) を採ることにする。

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(x + L, y, z, t) &= \mathbf{A}(x, y, z, t) \\ \mathbf{A}(x, y + L, z, t) &= \mathbf{A}(x, y, z, t) \\ \mathbf{A}(x, y, z + L, t) &= \mathbf{A}(x, y, z, t) \end{aligned} \quad (3.25)$$

このとき、基準振動は次の形をもつ。

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{a}(t)e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ \mathbf{k} &= \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z) \quad n_\mu (\mu = x, y, z) \text{ は整数} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Coulomb gauge の条件 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ より $\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\mathbf{k}(t) = 0$ を得る。

ここで、与えられた \mathbf{k} に対して

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k},1} \cdot \mathbf{k} = 0, \quad \mathbf{e}_{\mathbf{k},2} \cdot \mathbf{k} = 0, \quad \mathbf{e}_{\mathbf{k},1} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k},2} = 0 \quad (3.27)$$

となる実単位ベクトル $\mathbf{e}_{\mathbf{k},1}, \mathbf{e}_{\mathbf{k},2}$ を用いて

$$\mathbf{a}_{\mathbf{k},\gamma}(t) = q_{\mathbf{k},\gamma}(t)\mathbf{e}_{\mathbf{k},\gamma} \quad \text{と書く。} \quad (3.28)$$

基準振動は \mathbf{k} と γ (偏光方向、まとめて $\lambda (= \lambda(\mathbf{k}, \gamma))$ と書く) で指定される。

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A} = 0 \quad (3.29)$$

の $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ に $q_\lambda \mathbf{e}_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ を代入。

$$\frac{1}{c^2} \frac{d^2 q_\lambda}{dt^2} + k^2 q_\lambda = 0 \quad \text{基準振動に対する運動方程式} \quad (3.30)$$

確かに調和振動子と等価である。

さて、 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ の一般解は基準振動の重ね合わせで書くことができる。

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\lambda} \mathbf{e}_\lambda q_\lambda(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \text{勿論これは} \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\gamma} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\gamma} q_{\mathbf{k},\gamma}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (3.31)$$

を意味するが、 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ は実数なので

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k},\gamma}^* q_{\mathbf{k},\gamma}^*(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \mathbf{e}_{-\mathbf{k},\gamma} q_{-\mathbf{k},\gamma}(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.32)$$

を満たさなくてはならない。偏光ベクトル $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\gamma}$ は実ベクトルとし、

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k},\gamma}^* = \mathbf{e}_{-\mathbf{k},\gamma} \quad (3.33)$$

$$q_{\mathbf{k},\gamma}^* = q_{-\mathbf{k},\gamma} \quad (3.34)$$

を満たすとすれば $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ は実数ベクトル。ここで、 \mathbf{k} 空間を2つに分けて、(例えば $k_x > 0$ と $k_x < 0$)

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\gamma} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\gamma} q_{\mathbf{k},\gamma}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}>0} \sum_{\gamma} (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\gamma} q_{\mathbf{k},\gamma}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \mathbf{e}_{-\mathbf{k},\gamma} q_{-\mathbf{k},\gamma}(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}>0} \sum_{\gamma} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\gamma} (q_{\mathbf{k},\gamma}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + q_{\mathbf{k},\gamma}^*(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (3.35)$$

などと書くと、全ての $q_{\mathbf{k},\gamma}(t)$ は独立なので都合がよい。これを $\lambda = (\mathbf{k}, \gamma)$ を用いて

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\lambda>0} \mathbf{e}_\lambda \left\{ q_\lambda(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + q_\lambda^*(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right\} \quad \left(\sum_{\lambda>0} = \sum_{\mathbf{k}>0} \sum_{\gamma} \right) \quad (3.36)$$

と書くことにする。以下、エネルギー

$$U = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d\mathbf{r} \mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2\mu_0} \int d\mathbf{r} \mathbf{B}^2(\mathbf{r}, t) \quad (3.37)$$

を基準振動 q_λ で書く。そのために、 \mathbf{E}, \mathbf{B} を基準振動の重ね合わせで書く。

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\lambda>0} \mathbf{e}_\lambda \left\{ \dot{q}_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \dot{q}_\lambda^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right\} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} \int \mathbf{E}^2 d\mathbf{r} &= \frac{1}{V} \int \sum_{\lambda>0} \mathbf{e}_\lambda \left\{ \dot{q}_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \dot{q}_\lambda^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right\} \times \sum_{\lambda'>0} \mathbf{e}_{\lambda'} \left\{ \dot{q}_{\lambda'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} + \dot{q}_{\lambda'}^* e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \right\} d\mathbf{r} \\ \lambda' &= (\mathbf{k}', \gamma'), \quad \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \text{ より、} \\ &= \sum_{\lambda>0} \sum_{\lambda'>0} \frac{\mathbf{e}_\lambda \cdot \mathbf{e}_{\lambda'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}}{(\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\gamma,\gamma'})} (\dot{q}_\lambda \dot{q}_{\lambda'}^* + \dot{q}_{\lambda'} \dot{q}_\lambda^*) \\ &= 2 \sum_{\lambda>0} \dot{q}_\lambda \dot{q}_\lambda^* \end{aligned} \quad (3.39)$$

$q_\lambda(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (R_\lambda(t) + iI_\lambda(t))$ (R_λ, I_λ はそれぞれ実) とすると、

$$\int \frac{\varepsilon_0 \mathbf{E}^2}{2} d\mathbf{r} = \varepsilon_0 \sum_{\lambda>0} \dot{q}_\lambda \dot{q}_\lambda^* = \frac{\varepsilon_0}{2} \sum_{\lambda>0} (\dot{R}_\lambda^2 + \dot{I}_\lambda^2) \quad (3.40)$$

一方、 $\mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{A}$, $\nabla \times (\mathbf{e}_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) = (i\mathbf{k} \times \mathbf{e}_\lambda) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ より

$$\mathbf{B} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\lambda>0} (i\mathbf{k} \times \mathbf{e}_\lambda) \left\{ q_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - q_\lambda^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right\} \quad (3.41)$$

これより、

$$\int \mathbf{B}^2 d\mathbf{r} = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \sum_{\lambda>0} (i\mathbf{k} \times \mathbf{e}_\lambda) \left\{ q_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - q_\lambda^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right\} \times \sum_{\lambda'>0} (i\mathbf{k}' \times \mathbf{e}_{\lambda'}) \left\{ q_{\lambda'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} - q_{\lambda'}^* e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \right\}$$

この場合も $\lambda = \lambda'$ のときしか残らない

$$\begin{aligned} &= - \sum_{\lambda>0} (i\mathbf{k} \times \mathbf{e}_\lambda)^2 \{-q_\lambda q_\lambda^* - q_\lambda^* q_\lambda\} \\ &= 2 \sum_{\lambda>0} k^2 q_\lambda q_\lambda^* \\ \longrightarrow \int \frac{\mathbf{B}^2}{2\mu_0} d\mathbf{r} &= \sum_{\lambda>0} \frac{k^2}{\mu_0} q_\lambda q_\lambda^* = \sum_{\lambda>0} \frac{k^2}{2\mu_0} (R_\lambda^2 + I_\lambda^2) \end{aligned} \quad (3.42)$$

まとめると、

$$U = \int \left(\frac{\varepsilon_0 \mathbf{E}^2}{2} + \frac{\mathbf{B}^2}{2\mu_0} \right) d\mathbf{r} = \sum_{\lambda>0} \left[\frac{\varepsilon_0 \dot{R}_\lambda^2}{2} + \frac{k^2 R_\lambda^2}{2\mu_0} \right] + \sum_{\lambda>0} \left[\frac{\varepsilon_0 \dot{I}_\lambda^2}{2} + \frac{k^2 I_\lambda^2}{2\mu_0} \right] \quad (3.43)$$

電磁場のエネルギーは基準振動の振幅を座標と見立てると調和振動子と同じ形。 R_λ の部分と I_λ の部分は同じ形をしているので、まず R_λ の部分に注目。上の表式を正準形式に直す。 R_λ に共役な運動量として $\Pi_{R\lambda} = \varepsilon_0 \dot{R}_\lambda$ とおくと、 $\bar{U} = \bar{U}_R + \bar{U}_I$ より、

$$\bar{U}_R = \sum_{\lambda>0} \left(\frac{\Pi_{R\lambda}^2}{2\varepsilon_0} + \frac{k^2}{2\mu_0} R_\lambda^2 \right) \quad (3.44)$$

これより得られる正準方程式

$$\dot{R}_\lambda = \frac{\partial \bar{U}_R}{\partial \Pi_{R\lambda}}, \quad \dot{\Pi}_{R\lambda} = -\frac{\partial \bar{U}_R}{\partial R_\lambda} \quad (3.45)$$

は、

$$\begin{aligned} \dot{R}_\lambda &= \frac{\Pi_{R\lambda}}{\varepsilon_0}, & \dot{\Pi}_{R\lambda} &= -\frac{k^2 R_\lambda}{\mu_0} \\ \rightarrow \ddot{R}_\lambda &= -\frac{k^2}{\varepsilon_0 \mu_0} R_\lambda = -c^2 k^2 R_\lambda \end{aligned} \quad (3.46)$$

を与えるが、これは(3.30)の運動方程式(の実部)を与える。今まで R_λ の部分をやったが、 I_λ を含む部分についても同様に、 I_λ に対する一般化された運動量を $\Pi_{I\lambda} = \varepsilon_0 \dot{I}_\lambda$ とすればよい(以下略)。

まとめ 電磁波の基準振動に対する運動方程式

$\ddot{R}_\lambda = -c^2 k^2 R_\lambda, \ddot{I}_\lambda = -c^2 k^2 I_\lambda$ は、次のような正準形式から導くことができる。

$$\mathcal{H} = \sum_{\lambda>0} \left[\left(\frac{\Pi_{R\lambda}^2}{2\varepsilon_0} + \frac{k^2}{2\mu_0} R_\lambda^2 \right) + \left(\frac{\Pi_{I\lambda}^2}{2\varepsilon_0} + \frac{k^2}{2\mu_0} I_\lambda^2 \right) \right] \quad (3.47)$$

$$\dot{R}_\lambda = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Pi_{R\lambda}}, \quad \dot{\Pi}_{R\lambda} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial R_\lambda}, \quad \dot{I}_\lambda = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Pi_{I\lambda}}, \quad \dot{\Pi}_{I\lambda} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial I_\lambda} \quad (3.48)$$

3.3 電磁場の量子化

古典的な正準方程式が得られたのでこれに交換関係

$$[\Pi_{R\lambda}, R_\lambda] = \frac{\hbar}{i}, \quad [\Pi_{I\lambda}, I_\lambda] = \frac{\hbar}{i} \quad (3.49)$$

を要請して量子化する。さて、今の系は1次元調和振動子と等価である。

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad (3.50)$$

$$\text{これに対して } \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{x}), \quad \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad (3.51)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}), \quad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (3.52)$$

$$\text{とおけば、} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad \hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega \frac{\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}}{2} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{復習}) \quad (3.53)$$

今の場合 $m \rightarrow \varepsilon_0$, $\omega \rightarrow c|k|$ とおけば等価なので、

$$\begin{aligned} \hat{a}_\lambda &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\varepsilon_0 c|k|}} \left(i\hat{\Pi}_{R\lambda} + \varepsilon_0 c|k|\hat{R}_\lambda \right) \\ \hat{a}_\lambda^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\varepsilon_0 c|k|}} \left(-i\hat{\Pi}_{R\lambda} + \varepsilon_0 c|k|\hat{R}_\lambda \right) \\ \hat{b}_\lambda &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\varepsilon_0 c|k|}} \left(i\hat{\Pi}_{I\lambda} + \varepsilon_0 c|k|\hat{I}_\lambda \right) \\ \hat{b}_\lambda^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\varepsilon_0 c|k|}} \left(-i\hat{\Pi}_{I\lambda} + \varepsilon_0 c|k|\hat{I}_\lambda \right) \end{aligned} \quad (3.54)$$

とおけば、

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\lambda>0} \hbar c|k| \left(\hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\lambda>0} \hbar c|k| \left(\hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_\lambda + \frac{1}{2} \right) \quad (3.55)$$

これで、量子化された電磁波は量子化された調和振動子(ボソン)の集まりであることがわかる。この場合のボソンを光子という。以下は、少々形式的な書き直し。 $\lambda > 0$ に対して

$$\begin{cases} \hat{c}_\lambda &= \frac{\hat{a}_\lambda + i\hat{b}_\lambda}{\sqrt{2}} \left(\longrightarrow \hat{c}_\lambda^\dagger = \frac{\hat{a}_\lambda^\dagger - i\hat{b}_\lambda^\dagger}{\sqrt{2}} \right) \\ \hat{c}_{-\lambda} &= \frac{\hat{a}_\lambda - i\hat{b}_\lambda}{\sqrt{2}} \left(\longrightarrow \hat{c}_{-\lambda}^\dagger = \frac{\hat{a}_\lambda^\dagger + i\hat{b}_\lambda^\dagger}{\sqrt{2}} \right) \end{cases} \quad (3.56)$$

とすると、

$$\lambda \geq 0 \quad [\hat{c}_\lambda, \hat{c}_{\lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda, \lambda'} \quad (3.57)$$

を満たす。これを用いると、

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \sum_{\lambda>0} \left[\hbar c |k| \left\{ \hat{c}_\lambda^\dagger \hat{c}_\lambda + \frac{1}{2} \right\} + \hbar c |k| \left\{ \hat{c}_{-\lambda}^\dagger \hat{c}_{-\lambda} + \frac{1}{2} \right\} \right] \\ &= \sum_{\lambda} \hbar c |k| \left\{ \hat{c}_\lambda^\dagger \hat{c}_\lambda + \frac{1}{2} \right\}\end{aligned}\quad (3.58)$$

と書ける。 $\hat{c}_\lambda^\dagger \hat{c}_\lambda$ は λ という 1 粒子状態にいるフォトンの粒子数演算子を表す。そのフォトンのエネルギーは $\hbar c |k|$ で得られる。

これでハミルトニアン の 正準量子化 は 終了。あとは、物理量を全て演算子として書き直せば電磁場の量子化の手続きは全て終了。

例として、ベクトルポテンシャルを \hat{c}_λ , \hat{c}_λ^\dagger で書き表そう。

(3.54) の表式から、

$$(\hat{a}_\lambda + \hat{a}_\lambda^\dagger) + i(\hat{b}_\lambda + \hat{b}_\lambda^\dagger) = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 c |k|}{\hbar}} (\hat{R}_\lambda + i\hat{I}_\lambda) \quad (3.59)$$

$$\begin{aligned}(\hat{c}_\lambda + \hat{c}_{-\lambda}^\dagger) &= \sqrt{\frac{\varepsilon_0 c |k|}{\hbar}} (\hat{R}_\lambda + i\hat{I}_\lambda) \\ &= \sqrt{2} \hat{q}_\lambda\end{aligned}\quad (3.60)$$

$$\longrightarrow \hat{q}_\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 c |k|}} (\hat{c}_\lambda + \hat{c}_{-\lambda}^\dagger) \quad (3.61)$$

p.75 のベクトルポテンシャルの表式において $q_\lambda \rightarrow \hat{q}_\lambda$, $q_\lambda^* \rightarrow \hat{q}_\lambda^\dagger$ とおけば、

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{A}} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 c |k| V}} \sum_{\lambda>0} \mathbf{e}_\lambda \left[(\hat{c}_\lambda + \hat{c}_{-\lambda}^\dagger) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + (\hat{c}_{-\lambda} + \hat{c}_\lambda^\dagger) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 c |k| V}} \sum_{\lambda>0} \mathbf{e}_\lambda \left[\hat{c}_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \hat{c}_\lambda^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right]\end{aligned}\quad (3.62)$$

と書ける。

第4章 経路積分

目次

- §4.1 変分法 (解析力学のための数学的準備)
- §4.2 解析力学 (変分原理による古典力学の再定式化)
(Lagrangian, action の導入)
- §4.3 経路積分 (Schrödinger 方程式とは異なる量子力学の形式)
- §4.4 経路積分と古典極限 (経路積分が古典極限で解析力学に帰着することを示す)
- §4.5 自由粒子 (経路積分から Schrödinger 方程式が導かれることを示す)

4.1 変分法

汎関数 関数とは? $x \in R \rightarrow f(x) \in R$ 実数に実数を対応させるもの
 汎関数とは? $u(x) \rightarrow I[u] \in R$ 関数に実数を対応させるもの

例 1

$$I[u] = \int_{x_0}^{x_1} u^2(x) dx \quad (4.1)$$

例 2

$$I[u] = \int_{x_0}^{x_1} \dot{u}^2(x) dx \quad (4.2)$$

例 3 $F(X, Y, Z)$ を 3 変数関数とする。

$$I[u] = \int_a^b \underbrace{F(x, u(x), u'(x))}_{\text{~~~~~}} dx \quad (4.3)$$

以下、この手の汎関数について考える。

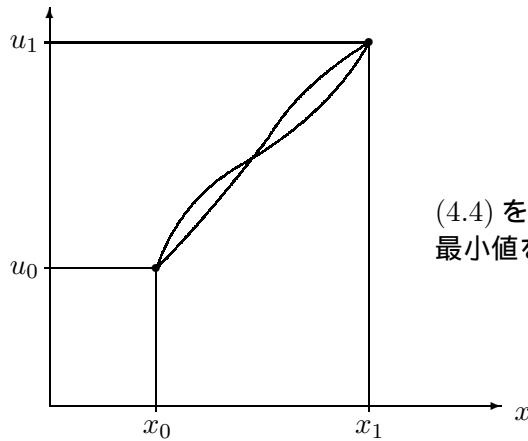
変分問題 以下のような問題を考える。

$x \in [x_0, x_1]$ で定義される関数 $u(x)$ のうち、固定端の境界条件

$$u(x_0) = u_0, \quad u(x_1) = u_1, \dots \quad (u_0, u_1, \dots : \text{与えられたある定数}) \quad (4.4)$$

を満たすものについて考える。 $F(X, Y, Z)$ を関数形の与えられた 3 変数関数であるとして、汎関数を次のように定義する。

$$I[u] = \int_{u_0}^{u_1} F(x, u(x), u'(x)) dx \quad (4.5)$$



(4.4) を満たす関数のうち $I[u]$ の最大値または最小値を与えるものを求めよ。

このタイプの問題の例

例 1

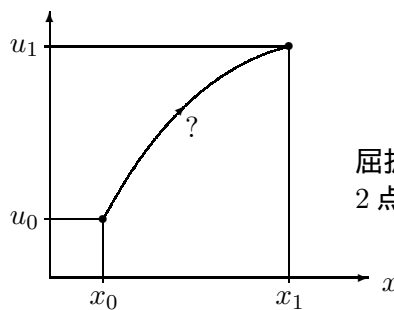
$$F(x, u(x), u'(x)) = \sqrt{1 + \{u'(x)\}^2} \quad (4.6)$$

$$I[u] = \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{1 + \{u'(x)\}^2} dx \quad (4.7)$$

は、曲線の長さ。

2 点 $(x_0, u_0), (x_1, u_1)$ を結ぶ曲線のうち長さが最も短いものは？

例 2 幾何光学



屈折率が $n(u)$ (関数形は既知) で与えられるとき、2 点 A, B を通る光の経路を求めよ。

フェルマーの原理によると A から最短で B に至る経路を求めればよい。 $P(x, u)$ から $P'(x + \Delta x, u + \Delta u)$ までの距離は

$$\sqrt{1 + \{u'(x)\}^2} \Delta x \quad (4.8)$$

これを光速 $\frac{c}{n(u)}$ で割ると時間 $\frac{n(u)}{c} \sqrt{1 + \{u'(x)\}^2} \Delta x$ を得る。

A から B まで至る時間は

$$\frac{1}{c} \int_{x_0}^{x_1} n(u) \sqrt{1 + \{u'(x)\}^2} dx \quad (4.9)$$

よって元の問題は (4.4) を満たし

$$I[u] = \int_{x_0}^{x_1} n(u) \sqrt{1 + \{u'(x)\}^2} dx \quad (4.10)$$

を最小にする $u(x)$ を求めよ、という変分問題として定式化されたことになる。

この他にも変分問題に帰着する問題は多いから p.82 にある問題の解法を知ることは重要なのである。

オイラー (Euler) 方程式

(4.4) の下で、関数 $u_0(x)$ が $I[u]$ の最小値を与えるとする。

$u_1(x)$ は (4.4) を満たす関数であるとすると

$$I[u_1] \geq I[u_0] \quad (4.11)$$

が成立する。 $u_1(x)$ として「 $u_0(x)$ から少しだけずれた関数」であるものを考える。

$$u_1(x) = u_0(x) + \underbrace{\varepsilon \eta(x)} \quad (4.12)$$

ε は微小量で、 $\eta(x_0) = \eta(x_1) = 0$ 、 $\eta(x)$ は有界であるとする。

$$\begin{aligned} \Delta I = I[u_1] - I[u_0] &= \int_{x_0}^{x_1} dx \{F(x, u_0 + \varepsilon \eta, u'_0 + \varepsilon \eta') - F(x, u_0, u'_0)\} \\ &= \int_{x_0}^{x_1} dx \left(\frac{\partial F(x, Y, Z)}{\partial Y} \Big|_{Y=u_0, Z=u'_0} \varepsilon \eta + \frac{\partial F(x, Y, Z)}{\partial Z} \Big|_{Y=u_0, Z=u'_0} \varepsilon \eta' + O(\varepsilon^2) \right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

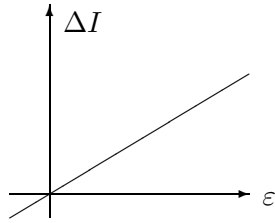
右辺の ε に比例する項を第 1 変分といい δI と表す。

$$\frac{\delta I}{\varepsilon} = \int_{x_0}^{x_1} dx \left(\frac{\partial F(x, Y, Z)}{\partial Y} \Big|_{Y=u_0(x), Z=u'_0(x)} \eta(x) + \frac{\partial F(x, Y, Z)}{\partial Z} \Big|_{Y=u_0(x), Z=u'_0(x)} \eta'(x) \right) \quad (4.14)$$

以下、誤解の心配がなければ

$$\left(\quad \right) \rightarrow \frac{\partial F(x, u, u')}{\partial u} \Big|_{u=u_0} \eta + \frac{\partial F(x, u, u')}{\partial u'} \Big|_{u=u_0} \eta' \quad (4.15)$$

もし $\delta I/\varepsilon \neq 0$ だとすると



となるので「 $I[u_0]$ が最小」の条件に反する。
よって $\delta I/\varepsilon = 0$ 。

さて、 $\delta I/\varepsilon$ を書き直す。() の第2項を部分積分して、

$$\int_{x_0}^{x_1} dx \frac{\partial F(x, u, u')}{\partial u'} \Big|_{u=u_0} \eta' = \left[\frac{\partial F(x, u, u')}{\partial u'} \Big|_{u=u_0} \eta \right]_{x_0}^{x_1} - \int_{x_0}^{x_1} dx \eta(x) \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F(x, u, u')}{\partial u'} \Big|_{u=u_0} \right) \quad (4.16)$$

第1項はゼロ ($\eta(x_0) = \eta(x_1) = 0$)。よって、

$$\frac{\delta I}{\varepsilon} = \int_{x_0}^{x_1} dx \eta(x) \left\{ \frac{\partial F(x, u, u')}{\partial u} \Big|_{u=u_0} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F(x, u, u')}{\partial u'} \Big|_{u=u_0} \right) \right\} \quad (4.17)$$

$\eta(x)$ が $\eta(x_0) = \eta(x_1) = 0$ を満たす、有界な任意の関数であるから、 $\{ \} = 0$

$$\frac{\partial F(x, u, u')}{\partial u} \Big|_{u=u_0} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F(x, u, u')}{\partial u'} \Big|_{u=u_0} \right) = 0 \quad (4.18)$$

が成り立つ。これを Euler 方程式という。

p.79 の例1 に対して Euler 方程式を求める。

$$\frac{\partial F(u')}{\partial u} = 0, \quad \frac{\partial F(u')}{\partial u'} = \frac{u'(x)}{\sqrt{1 + [u'(x)]^2}} \quad (4.19)$$

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{u'(x)}{\sqrt{1 + [u'(x)]^2}} \right) = 0 \quad (4.20)$$

これが Euler 方程式。2階の微分方程式で積分定数は2つ。境界条件(4.4)から決まる。

$$\begin{aligned} \rightarrow u'(x) &= \text{定数} \\ \rightarrow u(x) &= ax + b \quad \text{答えは直線} \end{aligned} \quad (4.21)$$

4.2 解析力学

古典力学はある変分問題として定式化できる。

例として、ポテンシャル $V(t, x)$ の下での粒子の一次元運動 $x(t)$ を考える。時刻 $t = t_0$ で x_0 , $t = t_1$ で x_1 にいるものとしてその軌道 ($x(t)$ の関数形) は勿論運動方程式

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = - \frac{\partial V}{\partial x} \quad (4.22)$$

を解くことで得られる。これは次のような変分問題における Euler 方程式に他ならない。

$x(t_0) = x_0$, $x(t_1) = x_1$ を満たす粒子の軌道 $x(t)$ は、汎関数

$$S[x] = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}(t, x(t), x'(t)) dt \quad (4.23)$$

$$\mathcal{L}(t, x(t), x'(t)) = \frac{1}{2} m (x'(t))^2 - V(t, x(t)) \quad (4.24)$$

の最小値を与える。

この変分問題の Euler 方程式

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x'} = 0 \quad \text{は}$$

$$- \frac{\partial V}{\partial x} - m \frac{d^2 x}{dt^2} = 0 \quad (4.25)$$

つまり運動方程式に他ならない。

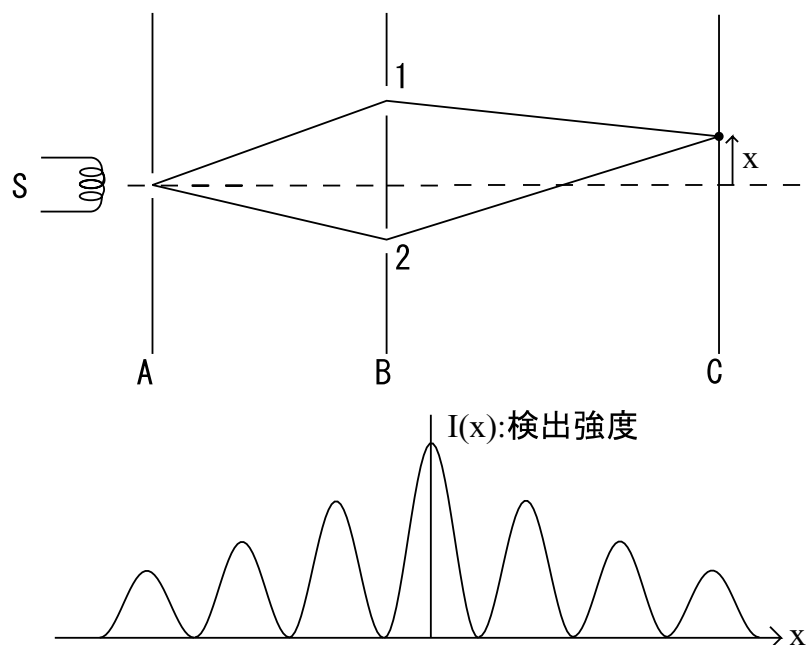
用語 \mathcal{L} をラグランジアン、 $S[x]$ を作用という。

例 重力下の粒子

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \left(\frac{dZ(t)}{dt} \right)^2 - mgZ(t) \quad (4.26)$$

調和振動子

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (4.27)$$



4.3 経路積分 (Schrödinger 方程式とは異なる量子力学の形式)

ここでは二重スリットの思考実験から話を始めて、経路積分法の考え方を述べる。

電子線源 S からはエネルギーの揃った (よって電子波の振動数、波長の揃った) 電子が放出される。Screen B にある 2 つの穴を通して Screen C にある検出器に至る。何度も繰り返しこの実験を行ったときの検出頻度 $I(x)$ は、上図のように干渉パターンを持つ。

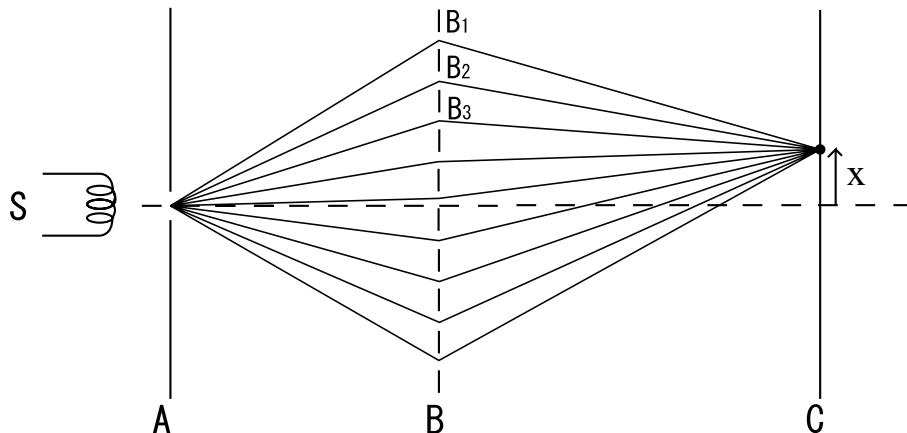
電子を波として見たとき、Screen C 上の点 x に電子が至る確率 $P(x)$ は、確率振幅 $\phi(x)$ を用いて

$$P(x) = |\phi(x)|^2 \quad (4.28)$$

と表されるが、 $\phi(x)$ は Screen B 上の穴 1 を電子が通過したときの確率振幅 $\phi_1(x)$ と Screen B 上の穴 2 を電子が通過したときの確率振幅 $\phi_2(x)$ の和で与えられる。

$$\phi(x) = \phi_1(x) + \phi_2(x) \quad (4.29)$$

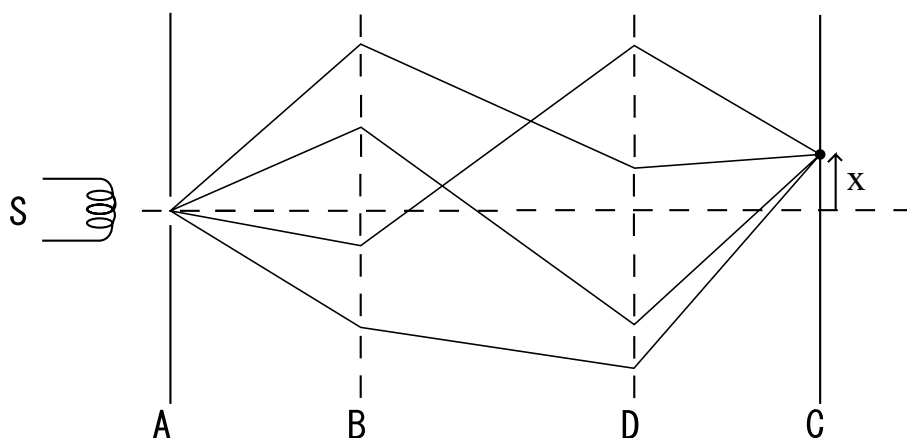
次に Screen B に多くの穴を開け B_1, B_2, \dots と名づける。



$\phi_i(x)$ を電子が穴 B_i を通るときの確率振幅とすると

$$\phi(x) = \sum_i \phi_i(x) \quad (4.30)$$

次にもう1つ Screen D を置き、多くの穴 D_1, D_2, \dots を開けると

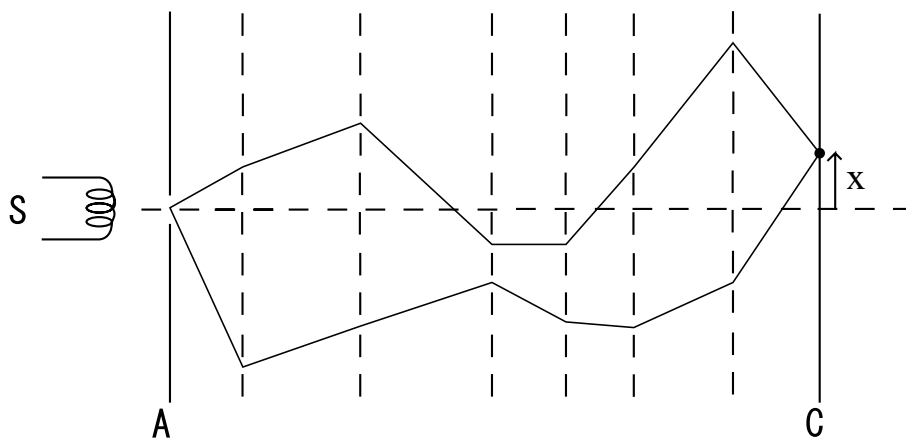


電子のとり得る経路は左図にあるような折れ線の集合

$$\phi(x) = \sum_{\text{折れ線}} \phi_{\text{折れ線}}(x) \quad (4.31)$$

もっと Screen をたくさん置いても同じ。

$$\phi(x) = \sum_{\text{折れ線}} \phi_{\text{折れ線}}(x) \quad (4.32)$$



スクリーンをもっと密に、かつ各スクリーンにもっと穴を開けると、電子のとる経路は曲線になる。

$$\phi(x) = \sum_{\text{曲線}} (\text{各曲線における確率振幅}) \quad (4.33)$$

そしてこの状況は A と C の間に全く Screen がないときと同じ。
各曲線における確率振幅がどのように決まるかが問題。

- $\hbar \rightarrow 0$ で古典極限と一致
- Schrödinger 方程式と consistent

でなければならない。(以下、1次元運動を考える。)

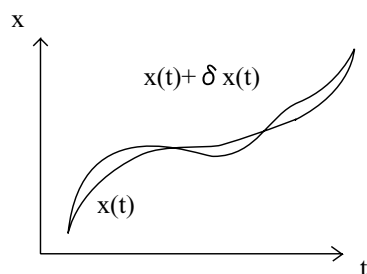
用語と記号

- a から b に行く = 時刻 t_a に地点 x_a を出発し、時刻 t_b に地点 x_b に到着
- 経路 = $x(t)$
- 核 = a から b に行く確率振幅 $K(a, b)$ 。これは初期状態 (t_a, x_a) を限定した波動関数 $\psi(t_b, x_b)$ とも見なせる。
- $\phi[x(t)]$ = 経路 $x(t)$ に対する確率振幅

$$K(a, b) = \sum_{x(t); a \text{ から } b \text{ に行く全ての経路}} \phi[x(t)] \quad (4.34)$$

経路積分 (Feynman)

$$\phi[x(t)] = \text{定数} \times e^{iS[x(t)]/\hbar} \quad (4.35)$$



定数は、 $K(a, b)$ における「全ての経路の和」の発散を抑えるための規格化因子。

古典極限： $\hbar \rightarrow 0$

経路 $x(t)$ が少しずれただけで $e^{iS[x(t)]/\hbar}$ の位相は激しく振動。

例外

$$\underline{S[x(t) + \delta x(t)] - S[x(t)] = 0} \quad (4.36)$$

が $\mathcal{O}((\delta x(t))^2)$ で成立する経路の周辺。

$\delta S = 0$ より、Euler 方程式

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = 0 \quad (4.37)$$

$\delta S[x(t)]/\hbar \neq 0$ のとき、 $x(t)$ の近くの経路からの確率振幅は互いに打ち消しあう。

よって $K(a, b)$ に対して $\delta S[x(t)]/\hbar = 0$ を満たす経路の近くの寄与が残る。

「経路の和」について (… 少々数学的)

$$K(a, b) = \text{定数} \times \sum_{\text{a から b に行く経路の和}} e^{iS[x(t)]/\hbar} \quad (4.38)$$

ここをどう計算するか？

1. 時間を離散化 $t_0 = t_a, t_N = t_b, t_i = t_0 + i\varepsilon$
2. 各時刻 t_i に対して x_i を与える ← これで経路がひとつ定まる。
3. 経路についての積分として

$$\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_2}{A} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_{N-1}}{A} \quad (4.39)$$

を実行 (x_0, x_N は固定されているので含めない)。ここで定数 A は (この方法が) Schrödinger 方程式と consistent になるように定める。

4. 作用

$$\begin{aligned}
 S[x(t)] &= \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(t, x(t), x'(t)) dt \quad \text{も} \\
 &= \sum_{i=0}^{N-1} \varepsilon \mathcal{L} \left(\frac{t_i + t_{i+1}}{2}, \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} \right)
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

と修正。

まとめると

$$K(a, b) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1}{A} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_{N-1}}{A} \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} \mathcal{L} \left(\frac{t_i + t_{i+1}}{2}, \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} \right) \right] \tag{4.41}$$

実際に計算するとき用いるのはこの右辺。

4.4 自由粒子

ここでは、自由粒子の場合に $K(a, b)$ を求める。さらにその結果を用いて Schrödinger 方程式を導く。

$$K(a, b) = \frac{1}{A^N} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1}{A} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_{N-1}}{A} \prod_{i=0}^{N-1} \exp \left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar} (x_{i+1} - x_i)^2 \right] \tag{4.42}$$

これはガウス積分からなるので実行可。 $\alpha = -\frac{im}{\varepsilon\hbar}$ とおけば

$$K(a, b) = \frac{1}{A^N} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \prod_i \exp \left[\frac{\alpha}{2} (x_{i+1} - x_i)^2 \right] \tag{4.43}$$

計算のあらすじ まず、 x_1 に関わる部分を取り出す。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \exp \left[-\frac{\alpha(x_2 - x_1)^2}{2} - \frac{\alpha(x_1 - x_0)^2}{2} \right]$$

$\int dx_1$ を実行して、

$$\underline{\underline{\sqrt{\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)} \exp \left[-\frac{\alpha}{4} (x_2 - x_0)^2 \right]}} \tag{4.44}$$

を得る。次に、 x_2 に関わる部分を取り出す。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\alpha}{4}(x_2 - x_0)^2\right] \exp\left[-\frac{\alpha}{2}(x_3 - x_2)^2\right]$$

$\int dx_2$ を実行して、

$$\underline{\underline{\sqrt{\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \left(\frac{4\pi}{3\alpha}\right) \exp\left[-\frac{\alpha}{6}(x_3 - x_0)^2\right]}}} \quad (4.45)$$

を得る。次に、 x_3 に関わる部分を取り出す。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \sqrt{\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \left(\frac{4\pi}{3\alpha}\right) \exp\left[-\frac{\alpha}{6}(x_3 - x_0)^2\right] \exp\left[-\frac{\alpha}{2}(x_4 - x_3)^2\right]}$$

$\int dx_3$ を実行して、

$$\underline{\underline{\sqrt{\left(\frac{2\pi}{2\alpha}\right) \left(\frac{4\pi}{3\alpha}\right) \left(\frac{6\pi}{4\alpha}\right) \exp\left[-\frac{\alpha}{8}(x_4 - x_0)^2\right]}}} \quad (4.46)$$

を得る。これをくり返していき、 $\int dx_{N-1}$ を実行すると

$$\underline{\underline{\left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{\frac{N-1}{2}} N^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\alpha}{2N}(x_N - x_0)^2\right]}} \quad (4.47)$$

を得る。規格化因子 A^{-N} をかけて

$$K(a, b) = \left[\left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{A} \right]^N \left(\frac{2\pi N}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\alpha}{2N}(x_N - x_0)^2\right] \quad (4.48)$$

$\alpha = -\frac{im}{\varepsilon\hbar}$, $x_N = x_b$, $x_0 = x_a$, $N\varepsilon = t_b - t_a$ を用いて

$$\underline{\underline{\left[\left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{A} \right]^N \left(\frac{i2\pi\hbar(t_b - t_a)}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{im(x_b - x_a)^2}{\hbar(t_b - t_a)}\right]}} \quad (\text{計算終わり}) \quad (4.49)$$

最後に、この結果を用いて自由粒子の波動関数が従う Schrödinger 方程式を導く。 (x_a, t_a) を固定して $K(a, b)$ を t_b , x_b の関数と見なすと

$$\begin{aligned}
\frac{\partial K}{\partial x_b} &= \frac{im(x_b - x_a)}{\hbar(t_b - t_a)} K \\
\frac{\partial^2 K}{\partial x_b^2} &= \left\{ -\frac{m^2(x_b - x_a)^2}{\hbar^2(t_b - t_a)^2} + \frac{im}{\hbar(t_b - t_a)} \right\} K \\
\frac{\partial K}{\partial t_b} &= \left\{ -\frac{1}{2(t_b - t_a)} - \frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)^2} \right\} K
\end{aligned} \tag{4.50}$$

これらより

$$i\hbar \frac{\partial K}{\partial t_b} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 K}{\partial x_b^2} \tag{4.51}$$

が導かれる。

4.5 経路積分法と Schrödinger 方程式

(自由粒子に限らない粒子の場合に経路積分法から Schrödinger 方程式を導く)

その準備として核 (Kernel) のたたみこみ公式について説明する。まず始めに規格化因子を気にしない方法。p.89 より、

$$K(a, b) = \sum_{\substack{\text{a から b に行く経路の和}}} e^{iS[x(t)]/\hbar} \tag{4.52}$$

この部分だが、これを

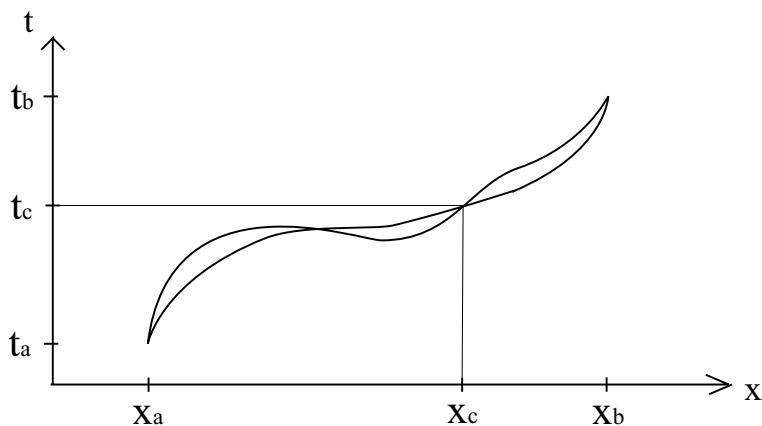
$$\int dx_c \sum_{\substack{\text{a から c に行く経路の和}}} \sum_{\substack{\text{c から b に行く経路の和}}}$$

と書きなおすことができる。

さらに

$$\begin{aligned}
S[x] &= \int_{t_a}^{t_b} dt \mathcal{L}(t, x(t), x'(t)) \\
&= \int_{t_a}^{t_c} dt \mathcal{L}(t, x(t), x'(t)) + \int_{t_c}^{t_b} dt \mathcal{L}(t, x(t), x'(t))
\end{aligned} \tag{4.53}$$

とわけることができるので



$$\begin{aligned}
 K(a, b) &= \sum_{\text{a から b に行く経路の和}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L} dt \right] \\
 &= \int dx_c \underbrace{\sum_{\text{a から c に行く経路の和}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_c} \mathcal{L} dt \right]}_{K(a, c)} \underbrace{\sum_{\text{c から b に行く経路の和}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_c}^{t_b} \mathcal{L} dt \right]}_{K(c, b)} \\
 &= \int dx_c K(a, c) K(c, b) \tag{4.54}
 \end{aligned}$$

つまり、

$$\boxed{K(a, b) = \int dx_c K(a, c) K(c, b)} \tag{4.55}$$

核に対するたたみこみの公式が成立する。

規格化因子が気になる人は (4.41) に基づいて考えればよい。 (t_j, x_j) を (t_c, x_c) に対応させると

$$\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1}{A} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_{N-1}}{A} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_j \left(\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1}{A} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_{j-1}}{A} \right) \left(\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_{j+1}}{A} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_{N-1}}{A} \right) \tag{4.56}$$

のように分割すると、

$$\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} \mathcal{L} \left(\frac{t_i + t_{i+1}}{2}, \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} \right)$$

は

$$\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{j-1} \mathcal{L} \left(\frac{t_i + t_{i+1}}{2}, \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} \right) + \frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=j}^{N-1} \mathcal{L} \left(\frac{t_i + t_{i+1}}{2}, \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} \right)$$

と書けるので、

$$\begin{aligned}
 K(a, b) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_j \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1}{A} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_{j-1}}{A} \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{j-1} \mathcal{L} \left(\frac{t_i + t_{i+1}}{2}, \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} \right) \right] \\
 &\quad \times \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_{j+1}}{A} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_{N-1}}{A} \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=j}^{N-1} \mathcal{L} \left(\frac{t_i + t_{i+1}}{2}, \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} \right) \right] \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K(a, c) K(c, b)
 \end{aligned} \tag{4.57}$$

$t_0 < t' < t$ として、

$$K(x_0, t_0; x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(x_0, t_0; x', t') K(x', t'; x, t) \tag{4.58}$$

左辺を $\psi(x, t)$ として、 $t_0 \rightarrow t, t \rightarrow t + \varepsilon$ とすると

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi(x', t') K(x', t'; x, t) \tag{4.59}$$

89 ページと同様の離散化を行うと ($N = 1$ の分割に相当)

$$\begin{aligned}
 K(x', t; x, t + \varepsilon) &\simeq \frac{1}{A} \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \mathcal{L} \left(t + \frac{\varepsilon}{2}, \frac{x + x'}{2}, \frac{x - x'}{\varepsilon} \right) \right] \\
 &= \frac{1}{A} \exp \left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x - x')^2 \right] \exp \left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V \left(\frac{x + x'}{2}, t + \frac{\varepsilon}{2} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{4.60}$$

ここで、 $\eta = x' - x$ とすると

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp \left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \eta^2 \right] \exp \left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V \left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{\varepsilon}{2} \right) \right] \psi(x + \eta, t) \tag{4.61}$$

この右辺を ε についての展開の形で求めたい (ε の 1 次まで)

ここで $\lambda = \frac{m}{2\hbar\varepsilon}$ とおこう。

$$\exp \left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V \left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{\varepsilon}{2} \right) \right] = 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V \left(x + \frac{\eta}{2}, t \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \tag{4.62}$$

より

$$\psi(x, t + \varepsilon) \simeq \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{i\lambda\eta^2} \left\{ 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V \left(x + \frac{\eta}{2}, t \right) \right\} \psi(x + \eta, t) \tag{4.63}$$

この右辺を評価するため下線部を η について展開 (数学的補遺 p.95)

$$\begin{aligned} \underline{\hspace{2cm}} &= 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, t) \psi(x, t) \quad \text{”}\eta\text{について0次”} \\ &+ \quad \text{”}\eta\text{について1次(どうせ寄与しないので書かない)”} \\ &+ \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\eta^2}{2} - \left\{ \frac{i\varepsilon}{8\hbar} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \psi(x, t) \right\} \eta^2 \quad \text{”}\eta\text{について2次”} \end{aligned} \quad (4.64)$$

公式に代入すると higher order $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ (以下無視)

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \frac{1}{A} (1 + i) \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} \left\{ \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, t) \right) \psi(x, t) + \frac{i}{4\lambda} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\lambda^2}\right) \right\} \quad (4.65)$$

$\lambda = \frac{m}{2\hbar\varepsilon}$ で元に戻して

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \frac{(1 + i)}{A} \sqrt{\frac{\pi\hbar\varepsilon}{m}} \left\{ \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, t) \right) \psi(x, t) + \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right\} \quad (4.66)$$

さて、両辺が $\varepsilon \rightarrow 0$ で等しいためには

$$A = (1 + i) \sqrt{\frac{\pi\hbar\varepsilon}{m}} \quad (4.67)$$

でなければならない。さらに

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\psi(x, t + \varepsilon) - \psi(x, t)}{\varepsilon} \\ &= -\frac{i}{\hbar} V(x, t) \psi(x, t) + \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (4.68)$$

両辺に $i\hbar$ をかけて

$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = V(x, t) \psi(x, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (4.69)$	を得る。
---	------

数学的補遺

実パラメーター λ を含む積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\lambda x^2} f(x)$$

は $\lambda \gg 1$ のとき、次のように展開される。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\lambda x^2} f(x) = (1+i)\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} \left\{ f(0) + \frac{i}{4\lambda} f''(0) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\lambda^2}\right) f^{(4)}(0) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\lambda^3}\right) f^{(6)}(0) + \dots \right\} \quad (4.70)$$

$e^{i\lambda x^2}$ は x が大きくなるにつれて激しく振動する関数。

よって積分への主な寄与は $|x| \lesssim \mathcal{O}(\lambda^{-1/2})$ (つまり原点近傍) からくる。そこで $f(x)$ を原点まわりでの Taylor 級数にして積分を評価する。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\lambda x^2} f(x) &= f(0) \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\lambda x^2} + f'(0) \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{i\lambda x^2} + \frac{f''(0)}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{i\lambda x^2} + \dots \\ &\quad \left(= \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}}(1+i) \right) \quad (=0) \quad \left(= \frac{i}{4\lambda} \times \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}}(1+i) \right) \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}}(1+i) \left\{ f(0) + \frac{i}{4\lambda} f''(0) + \dots \right\} \quad (4.71) \end{aligned}$$

λ の負べきの展開になっている。