経路積分表示 part 1：1粒子の場合

永井佑紀

平成 19 年 10 月 25 日

読む論文に「作用」が出てきても驚かないように、経路積分についてまとめた。断熱定理による摂動展開において時間発展演算子 U が重要な役割を果たした[1]。経路積分と摂動展開による方法の違いは、時間発展演算子をどのように表現するかという違いである。なお、有限温度のときに虚時間を導入するのだが、これも摂動展開のときと同じで時間発展演算子と密度行列演算子の類似性が重要になっている。このノートでは、一番単純な場合である 1 粒子系について考える。次以降のノートで、ボソン系、フェルミオン系について考える。そのノートでは Green 関数と経路積分の関係を見ようと思っている。

1　経路積分表示とは

1.1　見てきたかのような説明

教科書によくある説明[2]としての経路積分表示は、電子の干渉実験が起点として説明される。電子の干渉実験とは、「電子の通り道に二つスリットがある板を置くと、電子はその二つを通り抜け、板の向こう側にあるスクリーンに干渉模様を作る」というようなものである。この干渉実験を拡張するとすれば、スリットを二つから三つにしたり、スリット付き板を増やしたりという方法があるだろう。スリットを増やせば通り道が増え、板を増やせば通り道のバリエーションが増えるだろう。ここで、スリットの数をどんどん増やすとその板は穴だらけになり、スリット数無限個で事実上板は消失する。そして、板を通り道にびっしり敷き詰めていくと、板の数無限個で空間を埋め尽くす。したがって、スリットの数無限個、板の数無限個においては、そこに出来上がるのは自由空間である。それでもやはりスリットと板の話が成り立つのならば、「電子は同時にあらゆる場所を通ってスクリーンに衝突する」。

さて、上の説明は確かにもっともらしい。しかし、この記述は電子を粒子として考えたためにひねり出された説明であり、電子が波であるとすれば Schrodinger 方程式に従う波動として電子の干渉実験を理解できるのだから、「あらゆる経路を通る電子」という不思議なものを考えなくてもよいのではないか、とも考えられる。

1.2　経路積分表示の御利益

「あらゆる経路を通る電子」という描像のもとに量子力学を再定式化したとき、従来の方法に比べて何か御利益がなければ実際の計算で使おうと思わない。経路積分表示は何が嬉しいのだろうか。それを考えるためには、従来の方法で何が大変だったかを考えればよい。従来の方法として断熱定理による摂動論を考える。今までのノート[3]において計算で何が面倒だったかを考えると、T 積が思い当たる。これは、ハミルトニアンが演算子であることが原因であり、もとをただせばハミルトニアン中の x や p が演算子であることに起因している[4]。結論から言えば、経路積分法とは「ハミルトニアン中の x や p を演算子ではなく数として扱うような方法」

$$H(\hat{p},\hat{x}) \to H(p,x) \tag{1}$$

[1] ノート「物理量の計算と摂動展開」参照。
[2] 式を使わない直観的な説明、という意味である。
[3] 「相互作用表示と時間発展演算子」「断熱定理の証明」「物理量の計算と摂動展開」ノート等。
[4] ここでの x は三次元であれば $\boldsymbol{r}$ を意味する位置座標である。

である[5]。本来演算子であるものを数として扱うことの副作用として、あらゆる経路を考慮しなければならないことになるのである。1 粒子での経路積分表示をボソン系やフェルミオン系に拡張する際の指針として、「演算子を数として扱う」を採用する。その結果、フェルミオン系では「グラスマン数」という不思議な数が出てくることになる。

2　1 粒子の場合：絶対零度

2.1　基本方針

「ハミルトニアン中の $\hat{x}$ や $\hat{p}$ を演算子ではなく数として扱う」ということを実現するために何をすればよいか。これは、ハミルトニアンが常に $\hat{x}$ の固有状態と $\hat{p}$ の固有状態に挟まれていれば実現できる。つまり、$\hat{x}$ の固有状態と $\hat{p}$ の固有状態：

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (2)$$
$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (3)$$

で挟めばよい。ここで、$\hat{p}$ の固有状態を x で表わすと

$$\langle x|p\rangle = \phi_{\mathbf{k}}(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{D/2}}e^{ikx} \quad (4)$$

と書ける。ここで D は次元である。また、有用な関係式として、完全性関係

$$\int d^D x|x\rangle\langle x| = \hat{1} \quad (5)$$
$$\int d^D p|p\rangle\langle p| = \hat{1} \quad (6)$$

をここに書いておく。

2.2　導出

t から t' への時間発展を示す時間発展演算子 U は

$$U(t',t) = e^{-(i/\hbar)H(t'-t)} \quad (7)$$

と書ける[6]。時刻 t である位置 x にいた電子が時刻 t' に位置 x' に存在する確率は、

$$\langle x',t'|U(t',t)|x,t\rangle \equiv U(x',t',;x,t) \quad (8)$$

と書ける。この $U(x',t',;x,t)$ はあらゆる x,x' の組で定義できるので、$U(t',t)$ を x,x' をラベルとする連続無限次元の行列とみなしたときの行列要素と考えることができる。同様に、$|x,t\rangle$ は x をラベルとする連続無限次元のベクトル $|t\rangle$ の要素と考えることができる。

さて、ここで $t'-t$ を小さな時間間隔に分割し $t'-t = N\Delta t$、$U(t',t)$ を書きなおすと

$$U(t',t) = U(t',t_{N-1})U(t_{N-1},t_{N-2})\cdots U(t_2,t_1)U(t_1,t) \quad (9)$$

となる。$U(t_k,t_{k-1})$ は Δt が十分に小さければ

$$U(t_k,t_{k-1}) = e^{-(i/\hbar)H\Delta t} = 1 - \frac{i}{\hbar}H\Delta t \quad (10)$$

[5] ここで演算子であるとわかるように $\hat{p}$、$\hat{x}$ とした。
[6] Schrodinger 方程式を形式的に積分した結果。

と書ける。よって、

$$\langle x(t_k), t_k|U(t_k, t_{k-1})|x(t_{k-1}), t_{k-1}\rangle = \langle x(k)|\left(1-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)|x(k-1)\rangle \tag{11}$$

となり、ハミルトニアンが x の固有状態に作用する形になる。ここで $|x(k)\rangle \equiv |x(t_k), t_k\rangle$ とした。これで基本方針にあるように演算子 $\hat{x}$ を数 x で表わせそうだ。

求めたいものは、$U(x', t', ; x, t)$ である。したがって、

$$\langle x', t'|U(t', t)|x, t\rangle = \langle x', t'|U(t', t_{N-1})U(t_{N-1}, t_{N-2})\cdots U(t_2, t_1)U(t_1, t)|x, t\rangle \tag{12}$$

を計算すればよい。式 (11) のような形にしたいので、$x(t_k)$ の完全系を挟むと、

$$\begin{aligned}
\langle x', t'|U(t', t)|x, t\rangle &= \int d^Dx(N-1)\langle x', t'|U(t', t_{N-1})|x(N-1)\rangle\langle x(N-1)|U(t_{N-1}, t_{N-2})\cdots U(t_2, t_1)U(t_1, t)|x, t\rangle \quad (13)\\
&= \int d^Dx(N-1)\int d^Dx(N-2)\cdots d^Dx(1)\\
&\quad \times\langle x', t'|U(t', t_{N-1})|x(N-1)\rangle\langle x(N-1)|U(t_{N-1}, t_{N-2})|x(N-2)\rangle\langle x(N-2)|\\
&\quad \cdots\times|x(2)\rangle U(t_2, t_1)|x(1)\rangle\langle x(1)|U(t_1, t)|x, t\rangle \quad (14)\\
&= \int d^Dx(N-1)\int d^Dx(N-2)\cdots d^Dx(1)\\
&\quad \times U(x', t'; x(N-1), t_{N-1})U(x(N-1), t_{N-1}; x(N-2), t_{N-2})\\
&\quad \cdots\times U(x(2), t_2; x(1), t_1)U(x(1), t_1; x, t) \quad (15)
\end{aligned}$$

となる。ここで、式 (11) に $\hat{p}$ の固有状態による完全系を挿入すると

$$\begin{aligned}
\langle x(k)|U(t_k, t_{k-1})|x(k-1)\rangle &= \int d^Dp(k)\langle x(k)|p(k)\rangle\langle p(k)|U(t_k, t_{k-1})|x(k-1)\rangle \quad (16)\\
&= \int d^Dp(k)\langle x(k)|p(k)\rangle\langle p(k)|\left(1-\frac{i}{\hbar}H(\hat{p}(k), \hat{x}(k))\Delta t\right)|x(k-1)\rangle \quad (17)
\end{aligned}$$

となることに着目する。完全系を挟むことで、ハミルトニアンが $\hat{x}$ の固有状態と $\hat{p}$ の固有状態に挟まれている。したがって上式は

$$\langle x(k)|U(t_k, t_{k-1})|x(k-1)\rangle = \int d^Dp(k-1)\langle x(k)|p(k-1)\rangle\langle p(k-1)|x(k-1)\rangle\left(1-\frac{i}{\hbar}H(p(k-1), x(k-1))\Delta t\right)$$

となり、ハミルトニアンを演算子を使わずに書くことができる。この式は $\hat{p}$ の固有状態の x 表示を用いてさらに変形することができて、

$$\begin{aligned}
\langle x(k)|U(t_k, t_{k-1})|x(k-1)\rangle &= \int d^Dp(k-1)\frac{1}{(2\pi\hbar)^D}e^{i\frac{p(k-1)}{\hbar}x(k)}e^{-i\frac{p(k-1)}{\hbar}x(k-1)}\left(1-\frac{i}{\hbar}H(p(k-1), x(k-1))\Delta t\right)\\
&= \int\frac{d^Dp(k-1)}{(2\pi\hbar)^D}\exp\left[i\frac{p(k-1)}{\hbar}\left(x(k)-x(k-1)\right)-\frac{i}{\hbar}H(p(k-1), x(k-1))\Delta t\right] \quad (18)
\end{aligned}$$

となる。$t' = t_N$、$t = t_0$ とし、この式を式 (15) に代入すると、

$$\begin{aligned}
\langle x', t'|U(t', t)|x, t\rangle &= \int\frac{d^Dp(N-1)}{(2\pi\hbar)^D}\cdots\int\frac{d^Dp(0)}{(2\pi\hbar)^D}\int d^Dx(N-1)\cdots d^Dx(1)\\
&\quad \times\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{k=0}^{N-1}\left(p(k)\left(x(k+1)-x(k)\right)-\Delta tH(p(k), x(k))\right)\right] \quad (19)
\end{aligned}$$

となる。最後に、$\Delta t\to 0$、$N\to\infty$ という極限を取る。このとき、

$$\lim_{\Delta t\to 0}\frac{x(t_k+\Delta t)-x(t_k)}{\Delta t} = \dot{x}(t_k) \tag{20}$$

と

$$\sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \to \int_t^{t'} dt \tag{21}$$

となり、無限個の k による無限個の $p(k)$、$x(k)$ による多重積分を $\mathcal{D}p(t)$、$\mathcal{D}x(t)$ と書くと、式 (19) は

$$\begin{aligned} \langle x', t'|U(t', t)|x, t\rangle &= \int_{x(t)=x, x(t')=x'} \mathcal{D}p(t'')\mathcal{D}x(t'') \\ &\quad \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'} \left(p(t'')\dot{x}(t'') - H(p(t''), x(t''))\right) dt''\right] \end{aligned} \tag{22}$$

という汎関数積分の形で表わされる。

2.3 経路積分と作用と古典力学

得られた式 (37) の指数関数の肩の被積分関数を見てみると、

$$p(t'')\dot{x}(t'') - H(p(t''), x(t'')) \tag{23}$$

という、実は昔どこかで見たような形をしている。これは、解析力学で出てきたラグランジアン：

$$L(x, \dot{x}; p) = p\dot{x} - H(p, x) \tag{24}$$

である。また、その積分は「作用」(action)：

$$S = \int dt L(x(t), \dot{x}(t); p(t)) \tag{25}$$

である。よって、指数関数の肩の部分は $(i/\hbar)S$ で表わされていることがわかる。汎関数積分中の被積分関数はある指定された経路における関数であるから、「ある経路 $x(t'')$、$p(t'')$ に対する振幅は

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar}S(x(t''), p(t''))\right] \tag{26}$$

で与えられる」ことを意味している。

最終的に得られる (x, t) から (x', t') への遷移確率は、あらゆる経路に対して $\exp\left[\frac{i}{\hbar}S(x(t''), p(t''))\right]$ の重みを付けて足し合わせたものになっている。一番積分に寄与する経路は、多少経路をずらしても S が変化しないような経路である。通常は経路をずらすと S が大きく変化し位相が大きく変化し、そのような経路すべてを足し合わせていくと位相平均をとることになり積分に大きな寄与をしない。特に、$\hbar \to 0$ の極限を取ると、ほんの少しでも経路をずらせば位相が非常に変わってしまうので、寄与できる経路は S の変分が $\delta S = 0$ となる経路のみである。これは、解析力学における最小作用の原理にほかならない。

実際、ハミルトニアンを

$$H(t) = \frac{p^2(t)}{2m} + V(x(t)) \tag{27}$$

として $S(x(t''), p(t''))$ の変分を取ると

$$\begin{aligned} \delta S(x(t''), p(t'')) &= \delta \int_t^{t'} p(t'')\dot{x}(t'') - \frac{p^2(t'')}{2m} - V(x(t'')) && (28) \\ &= \int_t^{t'} \delta p(t'') \left(\dot{x}(t'') - \frac{p(t'')}{m}\right) + \delta x(t'') \left(-\dot{p}(t'') - V'(x(t''))\right) && (29) \end{aligned}$$

となる[7]。よって、

$$\begin{aligned} p &= m\dot{x} && (30) \\ -\frac{dV}{dx} &= \dot{p} && (31) \\ &= m\ddot{x} && (32) \end{aligned}$$

という、ニュートンの運動方程式が得られる[8]。

3　1粒子の場合：有限温度

有限温度の場合、重要なのは時間発展演算子ではなく、密度行列演算子である[9]。つまり、物理量 A の期待値は

$$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\,[\rho A] \tag{33}$$

と書ける。以前のノートでの摂動展開において、時間発展演算子に虚時間を導入するとうまくいったことを思い出そう。$\tau = it$ という虚時間を導入すれば $\exp[-\beta H]$ を計算することができていた。したがって、計算すべき量は

$$\langle x' | e^{-H\tau/\hbar} | x \rangle \tag{34}$$

であり、計算したあとに $\tau = \beta\hbar$ とすればよい。計算は実時間の場合を変数変換：

$$\begin{aligned} \int dt'' &\rightarrow -i \int \tau' && (35) \\ \dot{x}(t'') &\rightarrow i\dot{x}(\tau') && (36) \end{aligned}$$

とすれば

$$\begin{aligned} \langle x' | e^{-H\tau/\hbar} | x \rangle &= \int_{x(0)=x, x(\tau)=x'} \mathcal{D}p(\tau')\mathcal{D}x(\tau') \\ &\quad \times \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\tau} \left(-ip(\tau')\dot{x}(\tau') - H(p(\tau'), x(\tau')) \right) d\tau' \right] && (37) \end{aligned}$$

となる。系の状態和は

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H} \tag{38}$$

であり、Tr は基底によらないので、

$$Z = \int dx \langle x | e^{-H\beta} | x \rangle \tag{39}$$

となる。

参考文献

J. M. ザイマン「現代量子論の基礎」　丸善プラネット株式会社

A. M. ザゴスキン「多体系の量子論＜技法と応用＞」　シュプリンガー・フェアラーク東京

永長直人「物性論における場の量子論」　岩波書店

---

[7] $p\frac{dx}{dt} = \frac{d}{dt}(px) - \frac{dp}{dt}x$ を用いた。

[8] ポテンシャルの微分にマイナス符号をつけると力である。

[9] 「物理量の計算と摂動展開」ノート参照。