

経路積分法と演算子法の比較

2016/3/23(水)

埼玉大学理学部物理学科 素粒子研究室

荒井玲於奈

指導教員:谷井 義彰 教授

概要

経路積分は、R. P. Feynman によって創始された量子化の手法である。その概念を大ざっぱに述べるならば、粒子の位置 $q(t)$ が時空で辿る経路を、取り得る全てについて足し合わせる、というようなものである。もう少し数学的にアプローチすれば、これは汎関数の積分になる。つまり、経路 $q(t)$ を作用汎関数 $S[q(t)]$ の引数として見たとき、 $q(t)$ の取り得る全ての関数形を考え、それを連続的に足し合わせる、ということである。例えば、粒子がある始状態 $|q', t'\rangle$ から終状態 $|q, t\rangle$ へ至る遷移確率振幅は経路積分の表式で

$$K(q, t; q', t') = \int \mathcal{D}q(t) e^{iS[q(t)]/\hbar} = \int \mathcal{D}q(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int dt L(t) \right]$$

と書ける。これらの式の詳しい議論は本論に譲るが、このように、経路積分では、その著しい特徴として、量子力学において頻繁に用いられる演算子という概念が現れない。

Feynman はこの経路積分の考え方を、自身の論文 Space-Time Approach to Non-relativistic Quantum Mechanics (1948) で述べている。それまでは、Schrödinger による、正準形式を演算子に置き換える手法、すなわち正準量子化が広く用いられていた。現在も正準量子化は極めて有効な量子化の手法ではあるが、経路積分法は量子力学に対して、正準量子化とは異なる知見をもたらした。その一つとして、解析力学における最小作用の原理と、量子力学との関連性を挙げることができるだろう。これは、経路積分における位相 $e^{iS/\hbar}$ において、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限を考えることで見ることができる。このとき、経路積分においては、鞍点法を考えることにより、作用が最も小さくなる項の寄与が大きくなることがわかる。これはまさに最小作用の原理を表しており、経路積分の表式では、量子力学から古典力学への移行が自然に行われる。

しかし、経路積分は、その性質上無限次元の積分を扱うことになり、現在でも数学的に正当な方法では定式化できていない。また、一見演算子形式とまるで異なっているため、両者が等価な方法だとはとても信じがたい。そこで、本論文では、このような疑問の下、演算子法と経路積分法の比較を行った。

第1章では、まず解析力学における Hamilton 形式から出発し、正準量子化を経て演算子を導入する。その後演算子法を概観し、とくに時間発展演算子 U を議論する。

第2章では、最初に位相空間 (q, p) における経路積分を導出する。その際、演算子は通常の変数に変換しなければならないので、そのときに元々の演算子の順序が問題となる。この順序についての解決法として、Weyl 順序と呼ばれる正規化された順序を導入し、中点処方と呼ばれる方法との関連を見る。結果として、一般のハミルトニアンの場合における位相空間内の経路積分表示を得ることができる。その後、ハミルトニアンの形を仮定し、それにより位相空間内の運動量積分を実行する。その結果、配位空間における Feynman の経路積分を得る。この配位空間の経路積分が、二連井戸型ポテンシャルの計算において使う表式となる。

第3章では、前章までの経路積分の知識を生かし、二連井戸型ポテンシャルの基底エネルギーを導出することを目指す。計算に当たっては、WKB 法で古典経路まわりの展開を行う。その際、インスタントンと呼ばれる非常に重要な概念を導入する。また、分配関数からエネルギーを計算するので、周期的境界条件が課された Feynman 核を経路積分で計算することになる。

第4章では、演算子形式で二連井戸型ポテンシャルの基底エネルギーを求めることを目指す。前章と同様 WKB 法を用いるため、まず最初に WKB 法のまとめを行い、次に二連井戸型ポテンシャルの WKB 解を構成する。その後、基底エネルギーが調和振動子からほとんどずれないことを使って、逐次近似による解を構成する。こうして作った2つの解が比例することを使い、基底エネルギーの調和振動子からのずれを導く。最後に、この結果が、経路積分法による計算結果と完全に一致することを見る。

目次

第 1 章	演算子形式による量子力学	2
1.1	正準量子化	2
1.2	Heisenberg 描像	5
1.3	相互作用表示	7
第 2 章	経路積分	9
2.1	位相空間における経路積分	9
2.2	Weyl 順序	12
2.3	配位空間における経路積分	14
第 3 章	経路積分による二連井戸型ポテンシャルの評価	18
3.1	二連井戸型ポテンシャル	18
3.2	経路積分と分配関数	19
3.3	停留経路とインスタントン	20
3.4	A の計算	26
3.5	行列式の比の計算	31
第 4 章	演算子形式による二連井戸型ポテンシャルの評価	39
4.1	WKB 法	39
4.2	WKB 解の構成	40
4.3	逐次近似による解の構成	42
第 5 章	まとめ	45
付 録 A	波動方程式 (3.84) の厳密解を用いた方法	46

第1章 演算子形式による量子力学

この章では、演算子形式による量子力学を概観し、正準量子化による量子化を行う。

1.1 正準量子化

一般化座標が¹ q^m ($m = 1, 2, \dots, N$) である力学系のラグランジアンが、 $q^m(t)$ とその時間微分 $\dot{q}^m(t) = dq^m/dt$ の関数として $L = L(q, \dot{q})$ で与えられているものとする。 q^m に共役な運動量 p_m は

$$p_m = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^m} \quad (1.1)$$

で定義される。またこの系のハミルトニアンは Legendre 変換

$$H(q, p) = \sum_{m=1}^N p_m \dot{q}^m - L \quad (1.2)$$

で定義される。以下の式では和の規約を用い、あらわな \sum は省略する。このとき、(1.2) より $L = p_m \dot{q}^m - H$ であって、これに最小作用の原理を適用することを考える。作用 S は

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L = \int_{t_1}^{t_2} dt (p_m \dot{q}^m - H) \quad (1.3)$$

であるから、その変分をとれば¹

$$\begin{aligned} 0 &= \delta S \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\dot{q}^m \delta p_m + p_m \delta \dot{q}^m - \frac{\partial H}{\partial q^m} \delta q^m - \frac{\partial H}{\partial p_m} \delta p_m \right) \end{aligned} \quad (1.4)$$

となる。ここで第2項目を部分積分すると、端点の変分はゼロ² として

$$\int_{t_1}^{t_2} dt p_m \frac{d(\delta q^m)}{dt} = - \int_{t_1}^{t_2} dt \dot{p}_m \delta q^m \quad (1.5)$$

とできる。よって作用の変分は

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\left(\dot{q}^m - \frac{\partial H}{\partial p_m} \right) \delta p_m - \left(\dot{p}_m + \frac{\partial H}{\partial q^m} \right) \delta q^m \right] = 0 \quad (1.6)$$

のように計算される。正準形式では q, p は独立であると考えるので、上式が恒等的に成り立つためには

$$\dot{q}^m = \frac{\partial H}{\partial p_m}, \quad \dot{p}_m = - \frac{\partial H}{\partial q^m} \quad (1.7)$$

¹変数を例えば q なら $q \rightarrow q + \delta q$ としてその差をとれば良い。ハミルトニアンは $H(q + \delta q, p + \delta p) - H(q, p)$ としてテイラー展開すれば良い。

² $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ の意。

でなければならない。これを Hamilton の正準方程式という。

次に、ある力学変数 $F = F(q(t), p(t), t)$ を考えよう。ただし、 q, p は q^m, p_m の略記である。これを時間で全微分すれば

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial q^m} \dot{q}^m + \frac{\partial F}{\partial p_m} \dot{p}_m \quad (1.8)$$

となり、さらに上で導出した正準方程式を用いれば

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial q^m} \frac{\partial H}{\partial p_m} - \frac{\partial F}{\partial p_m} \frac{\partial H}{\partial q^m} \quad (1.9)$$

となる。これはとくに F が陽に時間によらない場合、

$$\dot{F} = \{F, H\}_P \quad (1.10)$$

と書ける。これは F に対する古典的運動方程式である。ただしここで Poisson 括弧

$$\{A, B\}_P \equiv \frac{\partial A}{\partial q^m} \frac{\partial B}{\partial p_m} - \frac{\partial B}{\partial q^m} \frac{\partial A}{\partial p_m} \quad (1.11)$$

を用いた。またこの Poisson 括弧は正準座標 q^m, p_m に対しては

$$\{q^m, p_n\}_P = \delta_n^m, \quad \{q^m, q^n\}_P = \{p_m, p_n\}_P = 0 \quad (1.12)$$

が満たされる。

この古典形式に対して量子化を行うには、Poisson 括弧 (1.12) に対応して、演算子 \hat{q}, \hat{p} を考え、それに正準交換関係

$$[\hat{q}^m, \hat{p}_n] = i\hbar \delta_n^m, \quad [\hat{q}^m, \hat{q}^n] = [\hat{p}_m, \hat{p}_n] = 0 \quad (1.13)$$

を課せば良い。これを正準量子化という。このとき、ハミルトニアンも対応した演算子 \hat{H} になり、系を記述する状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ の時間発展演算子の役割を果たす。したがって、 $|\psi(t)\rangle$ と \hat{H} は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) |\psi(t)\rangle \quad (1.14)$$

を満たす。

演算子 \hat{q}, \hat{p} は抽象的な演算子という概念ではあるが、具体的には行列として考えることができる。その際、 $|q\rangle, |p\rangle$ などはそのベクトル空間の基底ベクトルとして捉えることができる。多くの場合、 \hat{q} を対角化するような基底が用いられ、それを q -表示と呼ぶ。そのとき、 \hat{q} は

$$\hat{q}^m |q\rangle = q^m |q\rangle \quad (1.15)$$

を満たす。ここでベクトル $|q\rangle$ は普通

$$\langle q|q'\rangle = \prod_{m=1}^N \delta(q^m - q'^m) \quad (1.16)$$

のように規格化する。この q -表示において、 \hat{p} は q の微分のような役割をする。すなわち

$$\hat{p}_m |q\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial q^m} |q\rangle \quad (1.17)$$

のようになる．これを正準交換関係 (1.13) から導出してみよう． \hat{p}_m はエルミートなので， \hat{p}_m からユニタリー演算子

$$\hat{U}(a) = \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \sum_{m=1}^N a^m \hat{p}_m\right) \quad (1.18)$$

を構成できる．ここで a^m は N 個の実数である．このとき，Baker-Hausdorff の公式

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \underbrace{[\hat{A}, [\hat{A}, \dots [\hat{A}, \hat{B}] \dots]]}_{n \text{ 個}} \quad (1.19)$$

において， $\hat{A} = -\sum_m a^m \hat{p}_m / i\hbar$, $\hat{B} = \hat{q}_m$ とすると， $[\hat{A}, \hat{B}] = a^m$ となるから，多重交換子は実数 a^m との交換子になって落ちるので，

$$\hat{U}(a)^{-1} \hat{q}^m \hat{U}(a) = \hat{q}^m + a^m \quad (1.20)$$

が成り立つ．また \hat{p} 同士は交換するので明らかに

$$\hat{U}(a) \hat{U}(b) = \hat{U}(a + b) \quad (1.21)$$

も成り立つ．

ところで，それぞれの \hat{q}^m は可換であるから，同時に対角化できる．そこで， \hat{q}^m の同次固有状態のうちの 1 つを $|\psi_0\rangle$ とし，その固有値を q_0^m とする．すなわち，

$$\hat{q}^m |\psi_0\rangle = q_0^m |\psi_0\rangle \quad (1.22)$$

である．このとき， $\hat{U}(q - q_0) |\psi_0\rangle \propto |q\rangle$ であることが示せる．

$$\begin{aligned} \hat{q}^m \hat{U}(q - q_0) |\psi_0\rangle &= \hat{U}(q - q_0) \hat{U}(q - q_0)^{-1} \hat{q}^m \hat{U}(q - q_0) |\psi_0\rangle \\ &= \hat{U}(q - q_0) (\hat{q}^m + q^m - q_0^m) |\psi_0\rangle \\ &= q^m \hat{U}(q - q_0) |\psi_0\rangle. \end{aligned} \quad (1.23)$$

そこで簡単に

$$\hat{U}(q - q_0) |\psi_0\rangle = |q\rangle \quad (1.24)$$

ととる．

運動量演算子 \hat{p}_m が $|q\rangle$ にどのように作用するかを調べるために， $\hat{U}(a)$ を $|q\rangle$ に作用させてみると，

$$\begin{aligned} \hat{U}(a) |q\rangle &= \hat{U}(a) \hat{U}(q - q_0) |\psi_0\rangle \\ &= \hat{U}(a + q - q_0) |\psi_0\rangle = |a + q\rangle \end{aligned} \quad (1.25)$$

となる．それで a を微小量 $a^m = \epsilon^m$ とおけば，上式の両辺を ϵ の 1 次までで

$$\left(1 + \frac{1}{i\hbar} \epsilon^m \hat{p}_m\right) |q\rangle = \left(1 + \epsilon^m \frac{\partial}{\partial q^m}\right) |q\rangle \quad (1.26)$$

と展開できる．よって ϵ の 1 次の係数を見れば

$$\hat{p}_m |q\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial q^m} |q\rangle \quad (1.27)$$

がわかる．このようにして (1.17) が得られる．

状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ も非常に抽象的な概念なので、初等量子力学ではもっぱら、波動関数 $\psi(q, t)$ という概念が用いられる。これは状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ の q -表示への射影

$$\psi(q, t) = \langle q | \psi(t) \rangle \quad (1.28)$$

である。波動関数 $\psi(q, t)$ の時間発展は、(1.14) に左から $\langle q |$ を掛けることでわかる。その際、 $\langle q |$ への演算子の作用は、通常の演算子 \hat{q} のエルミート共役のように作用することに注意する。その結果、Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = H \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q}, q \right) \psi(q, t) \quad (1.29)$$

が得られる。以上が Schrödinger 描像による量子力学の概要である。

(1.2) の処方ではハミルトニアンをつくるとき、 p と q の積の形が現れるときは注意が必要である。量子力学では \hat{p} と \hat{q} は交換しないので、積の順序を明確にしなければならない。積の順序については、第 2 章で再び議論する。

1.2 Heisenberg 描像

次に Heisenberg 描像での量子力学を見ていこう。Schrödinger 描像では、力学変数 \hat{q}, \hat{p} は時間に依存せず、状態ベクトルが時間に依存していた。Heisenberg 描像では、今度は状態ベクトルは時間に依存せず、力学変数が時間に依存する。そのため、力学変数を $\hat{q}^m(t), \hat{p}_m(t)$ とし、状態ベクトルを単に $|\phi\rangle$ と書こう。この 2 つの描像は、同等な量子力学を構成するので、ユニタリー変換で結びついている。一般に演算子のユニタリー変換は、交換関係 (1.13) を保存するからである。したがって、Schrödinger 描像と Heisenberg 描像との間には、次のような関係がある。

$$\begin{cases} \hat{q}^m(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{q}^m \hat{U}(t), \\ \hat{p}_m(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{p}_m \hat{U}(t), \end{cases} \quad (1.30)$$

$$|\phi\rangle = \hat{U}^\dagger(t) |\psi(t)\rangle. \quad (1.31)$$

ただし、 $\hat{U}(t)$ は時間に依存するユニタリー演算子であり、

$$\hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) = 1 \quad (1.32)$$

を満たす。

(1.31) を変形すると、

$$\hat{U}(t) |\phi\rangle = |\psi(t)\rangle \quad (1.33)$$

が得られるが、これを Schrödinger 方程式 (1.14) に代入すると、形式的に

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t) = \hat{H}(\hat{q}, \hat{p}) \hat{U}(t) \quad (1.34)$$

と書ける。ここで偏微分は $\hat{U}(t)$ が時間にしかよらないことから全微分に直した。Heisenberg 描像での一般の物理量

$$\hat{F}(t) = \hat{U}^\dagger(t) F(\hat{q}, \hat{p}) \hat{U}(t) \quad (1.35)$$

を考えよう。両辺を微分して (1.34) を使えば

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\hat{F}(t) &= \left(\frac{d}{dt}\hat{U}^\dagger(t)\right)F(\hat{q},\hat{p})\hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t)F(\hat{q},\hat{p})\left(\frac{d}{dt}\hat{U}(t)\right) \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger(t)\hat{H}(\hat{q},\hat{p})\hat{U}(t)\hat{F}(t) + \frac{1}{i\hbar}\hat{F}(t)\hat{U}^\dagger(t)\hat{H}(\hat{q},\hat{p})\hat{U}(t) \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(\hat{q},\hat{p})\hat{F}(t) + \frac{1}{i\hbar}\hat{F}(t)\hat{H}(\hat{q},\hat{p}) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t),\hat{H}(\hat{q},\hat{p})]
\end{aligned} \tag{1.36}$$

を得る。ここでハミルトニアンがどちらの描像で見ても同じことを使った。よって

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{F}(t) = [\hat{F}(t),\hat{H}(\hat{q},\hat{p})] \tag{1.37}$$

となる。実際 $\hat{F}(t)$ としてハミルトニアン $\hat{H}(t)$ を考えれば、(1.37) の右辺はゼロとなるので、ハミルトニアンはあらわに時間 t を含まない限り時間に依存しない。したがって (1.34) の形式解は

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{1.38}$$

と書ける。一般には $\hat{U} = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}$ となるが、ここでは $t_0 = 0$ ととった。

Heisenberg 演算子 $\hat{q}(t)$ を対角化する表示を考える。

$$\hat{q}(t)|q,t\rangle = q(t)|q,t\rangle. \tag{1.39}$$

ここで $|q,t\rangle$ は時間とともに変化する座標系で、 $|q,0\rangle = |q\rangle$ となっている。このとき

$$|q,t\rangle = \hat{U}^\dagger(t)|q\rangle \tag{1.40}$$

と定義されている。(1.28) で定義した Schrödinger の波動関数は

$$\psi(q,t) = \langle q|\psi(t)\rangle = \langle q,t|\psi\rangle \tag{1.41}$$

で与えられる。これはやはり、Heisenberg の状態ベクトル $|\psi\rangle$ の動く座標系 $|q,t\rangle$ への射影と見なすことができる。

最後に、(1.31) を使えば、異なった時刻の Schrödinger 描像での状態を次のようにユニタリー演算子で関係付けることができる。すなわち

$$|\psi\rangle = \hat{U}^\dagger(t)|\psi(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t')|\psi(t')\rangle \tag{1.42}$$

において中辺と右辺を見れば

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t')|\psi(t')\rangle, \tag{1.43}$$

$$\hat{U}(t,t') = \hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t') = e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar} \tag{1.44}$$

となっている。このユニタリー演算子を時間推進演算子と呼ぶ。

このことから、 q -表示での遷移確率振幅 (時刻 t_0 において q_0 にあった粒子が時刻 t で $q(t)$ に見出される確率振幅) は、(1.39) で導入した $|q,t\rangle$ を用いると

$$\langle q,t|q_0,t_0\rangle \tag{1.45}$$

と表される。

1.3 相互作用表示

粒子の散乱や、状態の遷移などの計算では、相互作用描像と呼ばれる表示が便利である。多くの場合、始状態と終状態では粒子は自由粒子のように振舞っており、相互作用を除いた自由ハミルトニアン固有状態となっている。そこで、系のハミルトニアンが

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (1.46)$$

と分けられるとしよう。ここで \hat{H}_0 が自由ハミルトニアン、 \hat{H}_1 が相互作用ハミルトニアンである。相互作用描像は、 \hat{H}_0 で作られるユニタリー演算子

$$\hat{U}_0(t) = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad (1.47)$$

で、Schrödinger 描像とつながっている。そこで、この描像の状態と演算子に添え字 I を付けて表すと

$$\begin{cases} \hat{q}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{q} \hat{U}_0(t), \\ \hat{p}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{p} \hat{U}_0(t), \end{cases} \quad (1.48)$$

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.49)$$

となる。相互作用描像では、演算子も状態ベクトルも時間と共に変化する。

相互作用描像での状態ベクトルに関する運動方程式は、状態ベクトルの Schrödinger 方程式 (1.14) より

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}_0 |\psi(t)\rangle + \hat{H}_1 |\psi(t)\rangle \quad (1.50)$$

となる。左からユニタリー演算子 (1.47) のエルミート共役をかけると、これは \hat{H}_0 と可換なことに注意して

$$i\hbar \hat{U}_0^\dagger(t) \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}_0 \hat{U}_0^\dagger(t) |\psi(t)\rangle + \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{H}_1 |\psi(t)\rangle \quad (1.51)$$

である。一方、(1.49) の両辺を時間微分すると

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{U}_0^\dagger(t) |\psi(t)\rangle \right) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle \right) \\ &= -\hat{H}_0 \hat{U}_0^\dagger(t) |\psi(t)\rangle + i\hbar \hat{U}_0^\dagger(t) \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (1.52)$$

となるので、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = \hat{H}_1(t) |\psi_I(t)\rangle, \quad (1.53)$$

$$\hat{H}_1(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{H}_1 \hat{U}_0(t) \quad (1.54)$$

が得られる。またこの描像での任意の演算子

$$\hat{F}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) F(\hat{q}, \hat{p}) \hat{U}_0(t) \quad (1.55)$$

は、(1.37) の導出と同様にして

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{F}_I(t) = [\hat{F}_I(t), \hat{H}_0(t)], \quad (1.56)$$

$$\hat{H}_0(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{H}_0 \hat{U}_0(t) = \hat{H}_0 \quad (1.57)$$

を満たす。また、このとき、 \hat{F}_I として $\hat{H}_0(t)$ を (1.56) に代入してみればわかるように \hat{H}_0 の時間依存性はない。これらの式を Schrödinger 描像や Heisenberg 描像の場合と比較してみると、自由粒子の伝播部分は (1.56) で表されるように演算子の変化で取り入れられ、相互作用による変化の部分のみが Schrödinger 描像の場合と同じく状態ベクトルの変化として表される。つまり、 $|\psi_I\rangle$ が相互作用の変化部分を表し、 \hat{F}_I が自由粒子の変化部分を表す。これが、この量子力学系が相互作用描像と呼ばれる所以である。

第2章 経路積分

量子力学における経路積分は、Feynman により見いだされた。それは配位空間における経路積分であったが、この章では演算子形式の量子力学との対応を見るために、まず位相空間における経路積分を導出する。次に、ハミルトニアンを仮定することで位相空間における運動量積分を実行し、配位空間の経路積分を求める。

2.1 位相空間における経路積分

Schrödinger の波動関数がある時刻 t' でわかっているとき、時刻 t での波動関数は (1.42) より

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t') |\psi(t')\rangle \\ &= \int dq' \hat{U}(t, t') |q'\rangle \langle q' | \psi(t') \rangle \end{aligned} \quad (2.1)$$

である。これに左から $\langle q |$ をかけて

$$\langle q | \psi(t) \rangle = \int dq' \langle q | \hat{U}(t, t') | q' \rangle \langle q' | \psi(t') \rangle \quad (2.2)$$

とすれば、形式的に

$$\psi(q, t) = \int dq' K(q, t; q', t') \psi(q', t') \quad (2.3)$$

と書くことができる。この K を Feynman 核という。結局これは推進演算子の行列要素

$$K(q, t; q', t') = \langle q | \hat{U}(t, t') | q' \rangle \quad (2.4)$$

を意味しているに過ぎない。

Feynman 核がわかれば、あらゆる物理量が計算できるので、これは Schrödinger 方程式を解くことと同等である。したがって、演算子形式で Schrödinger 方程式を解くように、Feynman 核を経路積分で書くことを考える。

(1.39) で導入した動く座標を使えば、(2.4) と (1.40) から

$$K(q, t; q', t') = \langle q, t | q', t' \rangle \quad (2.5)$$

と書けることがわかる。

時間間隔 $t - t'$ を N 等分し、 k 番目の時刻を t_k とすると、最初の時刻が t' 、最後の時刻が t なので

$$\begin{cases} t_k = t' + \epsilon k, \\ \epsilon = \frac{t - t'}{N} \end{cases} \quad (2.6)$$

という関係になる。そして時刻 t_k の座標を単に q_k と書くと、 q_k を順次決定することで、状態の遷移 $|q', t'\rangle \rightarrow |q, t\rangle$ の経路を与えることになる。

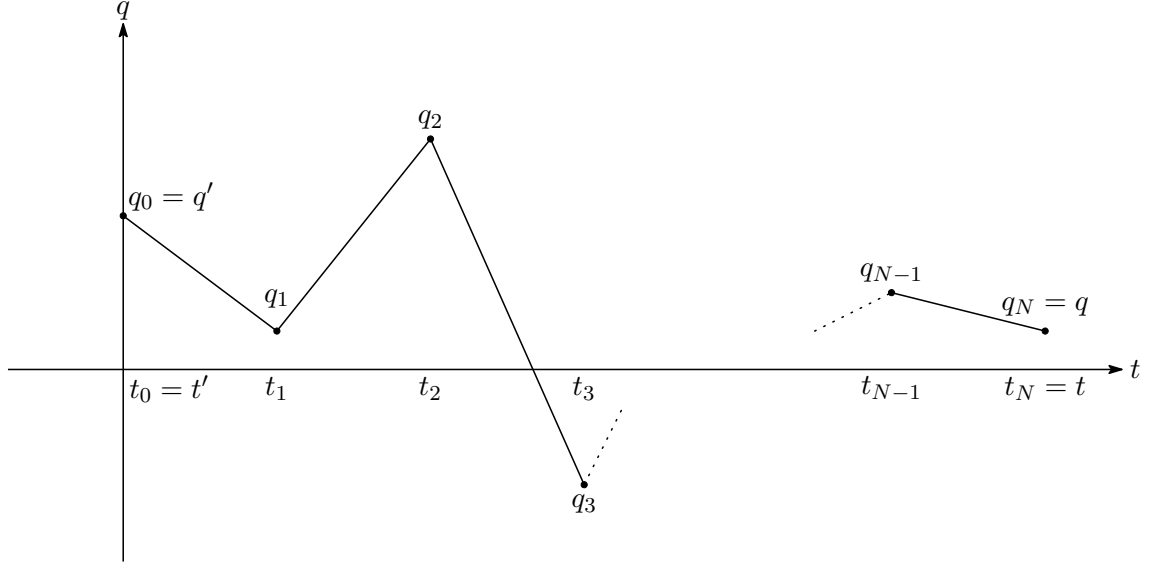


図 2.1: $q' \rightarrow q$ の経路

q -表示の各時刻における基底ベクトルの完全性

$$\int dq_k |q_k, t_k\rangle \langle q_k, t_k| = 1 \quad (2.7)$$

を (2.5) に次々挟んでいくと, Feynman 核は

$$\langle q, t | q', t' \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \cdots \int \prod_{k=1}^{N-1} (dq_k \langle q_{k+1}, t_{k+1} | q_k, t_k \rangle) \langle q_1, t_1 | q_0, t_0 \rangle \quad (2.8)$$

のように $(N-1)$ 重積分の $N \rightarrow \infty$ 極限になる. ただし, $t_0 = t', q_0 = q', t_N = t, q_N = q$ と定義する. 次に, 微小時間の核

$$\begin{aligned} \langle q_{k+1}, t_{k+1} | q_k, t_k \rangle &= \langle q_{k+1} | e^{-i\epsilon \hat{H}/\hbar} | q_k \rangle \\ &\cong \langle q_{k+1} | (1 - i\epsilon \hat{H}(\hat{p}, \hat{q})/\hbar) | q_k \rangle \end{aligned} \quad (2.9)$$

を運動量積分の形で表そう. まずは簡単のために, \hat{H} の中の \hat{p} が常に \hat{q} の左側にある場合を考えると, \hat{q} は (1.15) によって演算子から数 q_k に置き換えることができる.

その後, 運動量の完全性の式を用いる. q -表示と p -表示は Fourier 変換

$$|p\rangle = \int dq e^{ipq/\hbar} |q\rangle, \quad (2.10)$$

$$|q\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{-ipq/\hbar} |p\rangle \quad (2.11)$$

で結びついているので, この定義では, $|p_k\rangle$ の完全性は

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_k |p_k\rangle \langle p_k| = 1 \quad (2.12)$$

と表される. これですじつすが合うためには

$$\langle p | p' \rangle = \prod_m 2\pi\hbar \delta(p_m - p'_m) \quad (2.13)$$

と規格化されていなければならない。さらに、これらの定義を使えば

$$\begin{aligned}\langle q|p\rangle &= \langle q|\int dq' e^{ipq'/\hbar}|q'\rangle \\ &= \int dq' e^{ipq'/\hbar} \delta(q-q') = e^{ipq/\hbar}\end{aligned}\quad (2.14)$$

となることもわかる。結局 (2.9) は

$$\begin{aligned}\langle q_{k+1}, t_{k+1}|q_k, t_k\rangle &= \langle q_{k+1}|e^{-i\epsilon\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})}|q_k\rangle \\ &= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \langle q_{k+1}|p_k\rangle \langle p_k|e^{-i\epsilon\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})}|q_k\rangle \\ &= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \langle q_{k+1}|p_k\rangle e^{-i\epsilon\hat{H}(p_k, q_k)} \langle p_k|q_k\rangle \\ &= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} e^{ip_k q_{k+1}/\hbar} e^{-i\epsilon\hat{H}(p_k, q_k)/\hbar} e^{-ip_k q_k/\hbar} \\ &= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp\left[i\{p_k(q_{k+1} - q_k) - \epsilon\hat{H}(p_k, q_k)\}/\hbar\right]\end{aligned}\quad (2.15)$$

と書き表せる。 \hat{H} の中でもし \hat{p} が \hat{q} の右にあれば、順番が1つずれるだけなので、上式で H を $H(p_k, q_{k+1})$ と変更すれば良い。一般に (2.9) は

$$\begin{cases} \langle q_{k+1}, t_{k+1}|q_k, t_k\rangle = \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp[iA(p_k, q_{k+1}, q_k)/\hbar], \\ A(p_k, q_{k+1}, q_k) = p_k(q_{k+1} - q_k) - \epsilon H_k \end{cases}\quad (2.16)$$

と書け、 H_k は数変数 p_k, q_{k+1}, q_k の関数

$$H_k = H(p_k, q_{k+1}, q_k)\quad (2.17)$$

となる。 \hat{H} の中の演算子 \hat{p} や \hat{q} の順序が与えられると (2.17) の構造が定まる。演算子の並び方が複雑になると、まず交換関係 (1.13) を用いて \hat{H} を適当に書き変えてから上記の手続きをすれば良いが、(2.8) における $N \rightarrow \infty$ の極限操作がこの問題をややこしくする。この点に関する一般論には深入りせず、ここでは中点処方と呼ばれる便利な方法を紹介する。

中点処方では (2.17) の H_k として、 \hat{H} の中の \hat{p} を p_k に、 \hat{q} を $(q_{k+1} + q_k)/2$ に置き換えたもの

$$H_k = H\left(p_k, \frac{q_{k+1} + q_k}{2}\right)\quad (2.18)$$

を採る。この処方に対応する \hat{H} の \hat{p} と \hat{q} の並び方は Weyl の順序と呼ばれ、 \hat{p} と \hat{q} が左右対称に並んでいるものである。Weyl の順序と中点処方の関係は次節で詳しく述べることにする。任意の演算子順序は交換関係を使えば Weyl の順序の線形結合で書けるので、中点処方は十分に一般的なものである。

さて、(2.16) を (2.8) に代入すれば、以下の表式を得る。

$$\begin{aligned}\langle q, t|q', t'\rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \cdots \int \prod_{k=1}^{N-1} (dq_k \underbrace{\langle q_{k+1}, t_{k+1}|q_k, t_k\rangle}_{\int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp[iA(p_k, q_{k+1}, q_k)/\hbar]}) \underbrace{\langle q_1, t_1|q_0, t_0\rangle}_{\int \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \exp[iA(p_0, q_1, q_0)/\hbar]} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^{N-1} \int dq_i \prod_{j=0}^{N-1} \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} A(p_k, q_{k+1}, q_k)\right]\end{aligned}\quad (2.19)$$

この極限をとった式をシンボリックに次のように書く．

$$K(q, t; q', t') \equiv \langle q, t | q', t' \rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t)=q} \mathcal{D}q \mathcal{D}p e^{iA[p, q]/\hbar}, \quad (2.20)$$

$$A[p, q] = \int_{t'}^t d\tau [p(\tau) \dot{q}(\tau) - H(p(\tau), q(\tau))] \quad (2.21)$$

これが位相空間における経路積分表示である．これはあくまで形式的に書いただけで，正確には (2.19) が定義である．

関数 $q(\tau), p(\tau), (t' \leq \tau \leq t)$ を決めることは，位相空間内の粒子の辿る経路を決めることに相当する．これは作用 A が q, p の汎関数であることを意味し，経路積分 (2.20) は，位相空間内のあらゆる経路を足し合わせることを意味している．そのため，経路積分は汎関数積分とも呼ばれる．

2.2 Weyl 順序

この節では，演算子の Weyl 順序の定義を紹介し，ハミルトニアン演算子の Weyl 順序と，ハミルトニアンの中点処方が対応付けられることを証明する．

l 個の \hat{p} と m 個の \hat{q} の積が次に説明するような順序で並べられているとき，これらを Weyl 化された積と呼び $(\hat{p}^l, \hat{q}^m)_W$ と書くことにする．

まず簡単な例を見よう．

$$\begin{aligned} (\hat{p}, \hat{q}^3)_W &= \frac{1}{4}(\hat{q}^3 \hat{p} + \hat{q}^2 \hat{p} \hat{q} + \hat{q} \hat{p} \hat{q}^2 + \hat{p} \hat{q}^3), \\ (\hat{p}^2, \hat{q}^2)_W &= \frac{1}{6}(\hat{q}^2 \hat{p}^2 + \hat{q} \hat{p} \hat{q} \hat{p} + \hat{q} \hat{p}^2 \hat{q} + \hat{p} \hat{q}^2 \hat{p} + \hat{p} \hat{q} \hat{p} \hat{q} + \hat{p}^2 \hat{q}^2). \end{aligned}$$

一般には

$$(\alpha \hat{p} + \beta \hat{q})^N = \sum_{\substack{l, m \\ l+m=N}} \frac{N!}{l!m!} \alpha^l \beta^m (\hat{p}^l, \hat{q}^m)_W \quad (2.22)$$

で定義される．すなわち，(2.23) の左辺を展開したときの $\alpha^l \beta^m$ の係数の $l!m!/N!$ 倍が Weyl 積 $(\hat{p}^l, \hat{q}^m)_W$ である．

一般のハミルトニアンは，Heisenberg の交換関係を使って演算子を適当に並び替えて

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) = \sum_{l, m} h_{lm} (\hat{p}^l, \hat{q}^m)_W \quad (2.23)$$

と書ける．これはハミルトニアンがエルミートである要請からもわかることである．エルミート共役をとると演算子の順序が入れ替わるが，ハミルトニアンはエルミートだから，もとに戻らなくては行けない．すなわち， \hat{p} と \hat{q} は上記の例のように対称な形になっていなければならないのである．そして実際これが (2.18) のように中点処方のハミルトニアンになるためには，

$$\langle q | \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) | q' \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \sum_{l, m} h_{lm} p^l \left(\frac{q+q'}{2} \right)^m \quad (2.24)$$

でなければならない．これを理解するためには，まず (2.25) の左辺に $|p\rangle$ の完全系を挿入する．

$$\begin{aligned} \langle q | \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) | q' \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \langle q | p \rangle \langle p | \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) | q' \rangle \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ipq/\hbar} \langle p | \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) | q' \rangle. \end{aligned} \quad (2.25)$$

中点処方ということはこのハミルトニアンを,

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) \rightarrow H\left(p, \frac{q+q'}{2}\right) = \sum_{l,m} h_{lm} p^l \left(\frac{q+q'}{2}\right)^m \quad (2.26)$$

と置き換えるということなので,

$$\begin{aligned} \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ipq/\hbar} \langle p | \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) | q' \rangle &\rightarrow \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ipq/\hbar} H\left(p, \frac{q+q'}{2}\right) \langle p | q' \rangle \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \sum_{l,m} h_{lm} p^l \left(\frac{q+q'}{2}\right)^m \end{aligned} \quad (2.27)$$

となる. ゆえに, (2.25) の等号が成り立てば, ハミルトニアンが Weyl 積になっている場合は中点処方を使うことが正当化できる.

では (2.25) が成り立つことを示そう. そのために, (2.25) の両辺を変形する.

$$\begin{aligned} \langle q | \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) | q' \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \sum_{l,m} h_{lm} p^l \left(\frac{q+q'}{2}\right)^m \\ \iff \sum_{l,m} h_{lm} \langle q | (\hat{p}^l, \hat{q}^m)_W | q' \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \sum_{l,m} h_{lm} p^l \left(\frac{q+q'}{2}\right)^m. \end{aligned} \quad (2.28)$$

したがって各々の l, m に対して

$$\langle q | (\hat{p}^l, \hat{q}^m)_W | q' \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} p^l \left(\frac{q+q'}{2}\right)^m \quad (2.29)$$

となることがわかる. これに $(N!/l!m!)\alpha^l\beta^m$ をかけて再び和をとれば, それは (2.23) の形になるので

$$\langle q | (\alpha\hat{p} + \beta\hat{q})^N | q' \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2}\right)^N \quad (2.30)$$

を得る. すなわち, (2.25) を証明するには (2.31) を証明すれば良い.

(2.31) を帰納法を用いて証明する. まず, $N=1$ のときの (2.31) の左辺は

$$\langle q | \alpha\hat{p} + \beta\hat{q} | q' \rangle = \left(-i\hbar\alpha \frac{\partial}{\partial q} + \beta q\right) \delta(q - q') \quad (2.31)$$

となり, 右辺は

$$\begin{aligned} \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2}\right) &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \alpha p e^{ip(q-q')/\hbar} + \beta \frac{q+q'}{2} \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \\ &= -i\hbar\alpha \frac{\partial}{\partial q} \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} + \beta \frac{q+q'}{2} \delta(q - q') \\ &= \left(-i\hbar\alpha \frac{\partial}{\partial q} + \beta q\right) \delta(q - q') \end{aligned} \quad (2.32)$$

となるので, $N=1$ のときには成り立つ.

次に, $N=n$ のとき (2.31) が成り立つと仮定し, $N=n+1$ のときを考える. このとき左辺は

$$\begin{aligned} \langle q | (\alpha\hat{p} + \beta\hat{q})^{n+1} | q' \rangle &= \left(-i\hbar\alpha \frac{\partial}{\partial q} + \beta q\right) \langle q | (\alpha\hat{p} + \beta\hat{q})^n | q' \rangle \\ &= \left(-i\hbar\alpha \frac{\partial}{\partial q} + \beta q\right) \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2}\right)^n \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2} - i\hbar\alpha \frac{\partial}{\partial q} + \beta \frac{q-q'}{2}\right) \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2}\right)^n \end{aligned} \quad (2.33)$$

と計算される．ここで，最後の行で括弧内に q の微分があるのは，Leibniz 則で微分を分配した結果である．さらに後ろの 2 つの項について考えていく．まず微分の項は

$$-\int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} i\hbar\alpha \frac{\partial}{\partial q} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2} \right)^n = -\int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \frac{i\hbar n\alpha\beta}{2} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2} \right)^{n-1} \quad (2.34)$$

である．次に $\beta(q-q')/2$ の項は

$$\begin{aligned} \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \beta \frac{q-q'}{2} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2} \right)^n &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \beta \frac{q-q'}{2} e^{ip(q-q')/\hbar} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2} \right)^n \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \left\{ -\frac{i\hbar\beta}{2} \frac{\partial}{\partial p} e^{ip(q-q')/\hbar} \right\} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2} \right)^n \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \frac{i\hbar\beta}{2} \frac{\partial}{\partial p} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2} \right)^n \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \frac{i\hbar n\alpha\beta}{2} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2} \right)^{n-1} \end{aligned} \quad (2.35)$$

となる．ここで，2 行目から 3 行目に行くのに部分積分を行い，表面項は落とした．上の 2 つの項の計算から，これらの項は相殺することがわかる．ゆえに残りの項をまとめれば

$$\langle q | (\alpha\hat{p} + \beta\hat{q})^{n+1} | q' \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q-q')/\hbar} \left(\alpha p + \beta \frac{q+q'}{2} \right)^{n+1} \quad (2.36)$$

となる．よって $N = n+1$ で成り立つことが示された．ゆえに，全ての N で (2.31) が成り立ち，(2.25) も成り立つ．

2.3 配位空間における経路積分

2.1 節では，演算子形式のハミルトニアンから出発して，位相空間における経路積分公式を導出した．実際の物理の問題では，ハミルトニアンが

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{p}}^\top W(\hat{\mathbf{q}}) \hat{\mathbf{p}} + V(\hat{\mathbf{q}}) \quad (2.37)$$

のような特別な形をしている場合が多い．ただし $\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}$ は n 成分をもったベクトルで， W は $n \times n$ の対称行列とする．また，(2.38) の演算子積は Weyl 積とする．特に W が $\hat{\mathbf{q}}$ によらない定数行列の場合を標準形と呼ぶ．(2.19) で求めた経路積分は 1 自由度の場合の公式であるが， n 自由度の場合への拡張は簡単で次のようになる．

$$K(\mathbf{q}, t_F; \mathbf{q}', t_I) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^{N-1} \int d\mathbf{q}_i \prod_{j=0}^{N-1} \int \frac{d\mathbf{p}_j}{(2\pi\hbar)^n} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} A_k(\mathbf{p}_k, \mathbf{q}_{k+1}, \mathbf{q}_k) \right]. \quad (2.38)$$

ただし

$$\begin{cases} A_k = \mathbf{p}_k \cdot (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) - \epsilon H_k(\mathbf{p}_k, \bar{\mathbf{q}}_k), \\ H_k = \frac{1}{2} \mathbf{p}_k^\top W(\bar{\mathbf{q}}_k) \mathbf{p}_k + V(\bar{\mathbf{q}}_k), \\ \bar{\mathbf{q}}_k = \frac{1}{2}(\mathbf{q}_{k+1} + \mathbf{q}_k) \end{cases} \quad (2.39)$$

である．ハミルトニアンが (2.38) のような場合は，(2.39) における運動量積分が実行できる．この節では運動量積分を実行し，Feynman の経路積分，または配位空間の経路積分の表式を求めよう．

(2.38) に現れる W の逆行列 $M(=W^{-1})$ は質量次元を持つので、これは質量行列と呼ぶべきものである。これを使って変数変換

$$\mathbf{p}_k \rightarrow \mathbf{p}_k + \frac{1}{\epsilon} M(\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) \quad (2.40)$$

を行うと、 A_k は (2.40) の \mathbf{p}_k を置き換えて

$$\begin{aligned} A_k &= \left[\mathbf{p}_k + \frac{1}{\epsilon} M(\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) \right] \cdot (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) \\ &\quad - \frac{\epsilon}{2} \left[\mathbf{p}_k + \frac{1}{\epsilon} M(\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) \right]^\top W(\bar{\mathbf{q}}_k) \left[\mathbf{p}_k + \frac{1}{\epsilon} M(\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) \right] - \epsilon V(\bar{\mathbf{q}}_k) \\ &= \mathbf{p}_k^\top (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) + \frac{1}{\epsilon} (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)^\top M^\top (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) - \frac{\epsilon}{2} \mathbf{p}_k^\top W(\bar{\mathbf{q}}_k) \mathbf{p}_k \\ &\quad - \frac{1}{2\epsilon} (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)^\top M^\top W M (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) - \frac{1}{2} (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)^\top M^\top W \mathbf{p}_k \\ &\quad - \frac{1}{2} \mathbf{p}_k^\top W M (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) - \epsilon V(\bar{\mathbf{q}}_k) \end{aligned} \quad (2.41)$$

となる。ここで、 $WM=1$ であり、 $W^\top=W, M^\top=M$ であることを用いれば

$$A_k = -\frac{\epsilon}{2} \mathbf{p}_k^\top W \mathbf{p}_k + \frac{1}{2\epsilon} (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)^\top M (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) - \epsilon V(\bar{\mathbf{q}}_k) \quad (2.42)$$

となる。次に、Gauss の積分公式

$$\prod_{i=1}^n \int d\mathbf{p}_i \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\epsilon}{2} \mathbf{p}^\top W \mathbf{p} \right) = \left(\frac{2\pi}{i\epsilon} \right)^{n/2} [\det W]^{-1/2} \quad (2.43)$$

を用いて (2.39) の運動量積分を実行するのだが、その前にこの積分公式を証明する。

まず、対称行列 W を対角化する直交行列を S とすると

$$W \rightarrow W' = S^\top W S = \begin{pmatrix} w_1 & & \\ & \ddots & \\ & & w_n \end{pmatrix} = (w_i \delta_{ij}) \quad (2.44)$$

となる。ここで添え字 i の和はとっていない。このときベクトル \mathbf{p} は

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}' = S^\top \mathbf{p} \quad (2.45)$$

と変換する。よって積分変数 p_i がこの変換を受けるので、積分は p'_i で行うことになる。そのために、この変数変換に伴うヤコビアン

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial p_1}{\partial p'_1} & \cdots & \frac{\partial p_1}{\partial p'_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial p_n}{\partial p'_1} & \cdots & \frac{\partial p_n}{\partial p'_n} \end{vmatrix} \quad (2.46)$$

を計算する必要がある。 \mathbf{p} の変換則から $p_i = S_{ij} p'_j$ であるので

$$\frac{\partial p_i}{\partial p'_k} = S_{ij} \frac{\partial p'_j}{\partial p'_k} = S_{ij} \delta_{jk} = S_{ik} \quad (2.47)$$

と計算でき、ヤコビアンは

$$J = \begin{vmatrix} S_{11} & \dots & S_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{n1} & \dots & S_{nn} \end{vmatrix} = |\det S| = 1 \quad (2.48)$$

となる。最後の等号は

$$1 = \det I = \det(S^\top S) = \det S^\top \det S = (\det S)^2 \quad (2.49)$$

より従う。よって $\mathbf{p}'^\top W' \mathbf{p}' = p'_i w_i \delta_{ij} p'_j = w_i p'^2_i$ であるから

$$\prod_{i=1}^n \int dp_i \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\epsilon}{2} \mathbf{p}^\top W \mathbf{p}\right) = \prod_{i=1}^n \int dp'_i \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\epsilon}{2} \sum_{j=1}^n w_j p'^2_j\right) \quad (2.50)$$

となる。ここで、この積分の収束性を保証するためには、固有値 w_j が微小な負の虚数部分を持っているとしなければならない。すなわち、正の微小量 δ を用いて

$$w_j \rightarrow w_j - i\delta \quad (2.51)$$

として、積分実行後に $\delta \rightarrow 0$ とする。その結果、

$$\prod_{i=1}^n \lim_{\delta \rightarrow 0} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{i\epsilon(w_i + i\delta)}} = \left(\frac{2\pi\hbar}{i\epsilon}\right)^{n/2} \frac{1}{\sqrt{\prod_{i=1}^n w_i}} \quad (2.52)$$

を得、さらに、行列式の巡回対称性より

$$\prod_{i=1}^n w_i = \det W' = \det(S^\top W S) = \det(SS^\top W) = \det W \quad (2.53)$$

となるので、

$$\prod_{i=1}^n \int dp_i \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\epsilon}{2} \mathbf{p}^\top W \mathbf{p}\right) = \left(\frac{2\pi\hbar}{i\epsilon}\right)^{n/2} [\det W]^{-1/2} \quad (2.54)$$

となる。

さて、この公式を (2.39) に用いれば

$$\begin{aligned} K(\mathbf{q}, t_F; \mathbf{q}', t_I) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^{N-1} \int dq_j^i \prod_{k=0}^{N-1} \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \left(\frac{2\pi\hbar}{i\epsilon}\right)^{n/2} [\det W(\bar{\mathbf{q}}_k)]^{-1/2} \\ &\quad \times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{l=0}^{N-1} \left\{ \frac{1}{2\epsilon} (\mathbf{q}_{l+1} - \mathbf{q}_l)^\top M(\mathbf{q}_{l+1} - \mathbf{q}_l) - \epsilon V(\bar{\mathbf{q}}_l) \right\}\right] \end{aligned} \quad (2.55)$$

を得る。今度は、公式

$$\det W = \exp[\text{Tr}(\log W)] \quad (2.56)$$

を用いると

$$[\det W(\bar{\mathbf{q}}_k)]^{-1/2} = \exp\left[-\frac{1}{2} \text{Tr} \log W(\bar{\mathbf{q}}_k)\right] = \exp\left[-\frac{1}{2} \text{Tr} \log M^{-1}(\bar{\mathbf{q}}_k)\right] = \exp\left[\frac{1}{2} \text{Tr} \log M(\bar{\mathbf{q}}_k)\right] \quad (2.57)$$

と書けるから、結局

$$K(\mathbf{q}, t_F; \mathbf{q}', t_I) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^{N-1} \int d\mathbf{q}_j^i \left(\frac{1}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{nN/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} A_k \right], \quad (2.58)$$

$$A_k = \frac{1}{2\epsilon} (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)^\top M(\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) - \epsilon V(\bar{\mathbf{q}}_k) - \frac{i\hbar}{2} \text{Tr} \log M(\bar{\mathbf{q}}_k) \quad (2.59)$$

となる。

(2.59) を、配位空間での経路積分または Feynman の経路積分と呼び、シンボリックに

$$\begin{cases} K(\mathbf{q}, t_F; \mathbf{q}', t_I) = \int \cdots \int \mathcal{D}\mathbf{q} \exp[iA(t_F, t_I)/\hbar], \\ A(t_F, t_I) = \int_{t_I}^{t_F} dt \left[\frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}^\top(t) M \dot{\mathbf{q}}(t) - V(\mathbf{q}(t)) - i\hbar \frac{\delta(0)}{2} \text{Tr} \log M(\mathbf{q}(t)) \right] \end{cases} \quad (2.60)$$

と書く。ただし、 $\epsilon = (t_F - t_I)/N = T/N$ として

$$\begin{cases} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N}{T} (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) = \dot{\mathbf{q}}(t), \\ \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon = \int_{t_I}^{t_F} dt, \\ \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\epsilon} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N}{T} = \delta(0) \end{cases} \quad (2.61)$$

であると定義する。また、積分測度 $\mathcal{D}\mathbf{q}$ は、

$$\mathcal{D}\mathbf{q} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{nN/2} \prod_{k=1}^{N-1} \prod_{i=1}^n d\mathbf{q}_k^i \quad (2.62)$$

と定義した。(2.61) の A の中の最後の項は Lee-Yang 項と呼ばれるもので、系の質量行列が座標 \mathbf{q} に依存するときには見落としてはならない。

これにより配位空間における Feynman 核の経路積分表示が求まった。次章では、いよいよ経路積分の手法をポテンシャル問題に応用し、演算子法でも同じポテンシャルを考え、両者の具体的な比較を行ってゆく。

第3章 経路積分による二連井戸型ポテンシャルの評価

ここでは、二連井戸型ポテンシャルの基底エネルギーを経路積分によって評価する．求めた結果を，次章の演算子形式での結果と比較する．

3.1 二連井戸型ポテンシャル

WKB 法を用いて，二連井戸型ポテンシャルの基底エネルギーを求める．具体的なポテンシャルの形は

$$V(q) = \frac{1}{g^2} U(gq), \quad (3.1)$$

$$U(x) = \frac{\omega^2}{8a^2} (x^2 - a^2)^2 \quad (3.2)$$

すなわち

$$V(q) = \frac{\omega^2}{8a^2g^2} (g^2q^2 - a^2)^2 \quad (3.3)$$

である．これをグラフに表すと図 3.1 のようになる．このポテンシャルは，例えば $q = a/g$ 近傍で

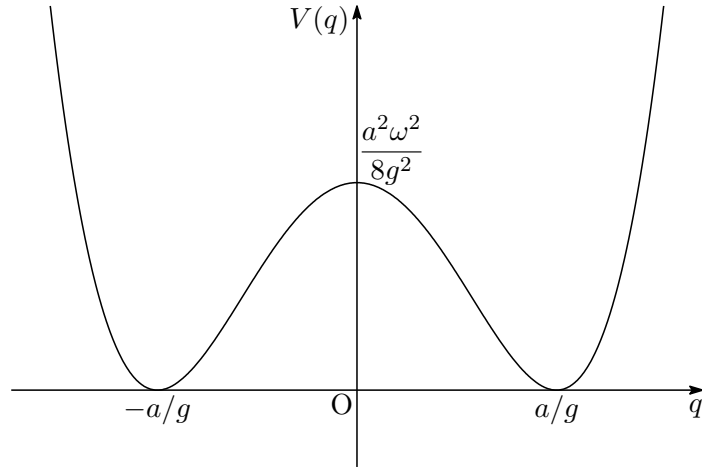


図 3.1: 二連井戸型ポテンシャル

$$V(q) \cong \frac{1}{2} \omega^2 \left(q - \frac{a}{g} \right)^2 \quad (3.4)$$

のように振舞う．したがって， $g \rightarrow 0$ の極限で 2 つのポテンシャル間の山が無限に高くなり，2 つの独立な調和振動子に分離して，エネルギーは縮退する． g をゆっくり大きくすれば，山の間でトンネル効果起きて縮退は解ける．この縮退が解けたことによる基底エネルギーの調和振動子からのずれを，経路積分を使って定量的に求める．

3.2 経路積分と分配関数

経路積分で基底エネルギー E_0 を求めるには、まず分配関数 $Z(\beta)$ との対応を見ることである。分配関数の定義は

$$Z(\beta) = e^{-W(\beta)} = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (3.5)$$

$$= \sum_n \langle \psi_n | e^{-\beta \hat{H}} | \psi_n \rangle = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}}) \quad (3.6)$$

であり、そのとき

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (3.7)$$

である。それで、 $Z(\beta)$ を使えば、基底エネルギーは次のように計算できる。

$$E_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} W(\beta). \quad (3.8)$$

証明:

$$W(\beta) = -\log \left(\sum_n e^{-\beta E_n} \right) = -\log \left(e^{-\beta E_0} + \sum_{n \neq 0} e^{-\beta E_n} \right) \quad (3.9)$$

と書けるので、

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} W(\beta) &= -\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log \left(e^{-\beta E_0} + \sum_{n \neq 0} e^{-\beta E_n} \right) \\ &= E_0 - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log \left(1 + \sum_{n \neq 0} e^{-\beta(E_n - E_0)} \right) \\ &= E_0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

である。ここで $n \neq 0$ のとき $E_n > E_0$ であることを使った。(証明終)

よって E_0 は (3.8) で計算できる。次に、(3.6) を経路積分表示に書き換えよう。

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \sum_n \langle \psi_n | e^{-\beta \hat{H}} | \psi_n \rangle \\ &= \sum_n \int dq_0 \langle \psi_n | q_0 \rangle \langle q_0 | e^{-\beta \hat{H}} | \psi_n \rangle \\ &= \sum_n \int dq_0 \langle q_0 | e^{-\beta \hat{H}} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | q_0 \rangle \\ &= \int dq_0 \langle q_0 | e^{-\beta \hat{H}} | q_0 \rangle \\ &= \int dq_0 \langle q_0 | e^{-i\hat{H}(-i\beta\hbar)/\hbar} e^{i\hat{H}\cdot 0/\hbar} | q_0 \rangle \\ &= \int dq_0 \langle q_0, -i\beta\hbar | q_0, 0 \rangle = \int dq_0 K(q_0, -i\beta\hbar; q_0, 0). \end{aligned} \quad (3.11)$$

これは、周期的境界条件 $q_1 = q_F = q_0$ を課した場合の Feynman 核である。したがって、分配関数は経路積分で書ける。

$$Z(\beta) = \int \mathcal{D}q e^{iS[q]/\hbar}. \quad (3.12)$$

ここで q_0 の積分 dq_0 は $\mathcal{D}q$ に含めた．そのとき作用は

$$S[q] = \int_0^{-i\beta\hbar} dt L = \int_0^{-i\beta\hbar} dt \left\{ \frac{1}{2} \dot{q}^2 - V(q) \right\} \quad (3.13)$$

である．さらに，虚時間 $\tau = it$ を導入すると

$$S = i \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left\{ \frac{1}{2} \dot{q}^2 + V(q) \right\} \quad (3.14)$$

となる．このとき， $\dot{q} = dq/d\tau$ の定義に置き換わっており，周期的境界条件 $q(0) = q(\beta\hbar)$ が付くことに注意する．この作用を指数の肩に乗せて，分配関数は

$$Z(\beta) = \int \mathcal{D}q(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left(\frac{\dot{q}^2}{2} + V(q) \right) \right] \quad (3.15)$$

となり， $x = gq$ とすると

$$Z(\beta) = \left(\prod_{\tau \in [0, \beta\hbar]} \frac{1}{g} \right) \int \mathcal{D}x \exp \left[-\frac{1}{g^2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left(\frac{\dot{x}^2}{2} + U(x) \right) \right] \quad (3.16)$$

となる．ただし $x(0) = x(\beta\hbar)$ ．定数 $\prod_{\tau \in [0, \beta\hbar]} g^{-1}$ は変数変換 $q \rightarrow x$ に伴うヤコビアンであり，連続無限の積で今は $g \ll 1$ なので発散しているように見えるが，後に分母分子に現れる形式となり無視できる．

この経路積分を WKB 法で求めるということは， \hbar を十分小さいと見なすことである．すると，(3.16) の積分で最も寄与が大きい経路は，指数の作用関数が最も小さい停留経路ということになる．そこで，次節では (3.16) の積分に現れる作用関数の停留経路を求め，停留経路まわりの鞍点法を使って (3.16) を計算していく．

3.3 停留経路とインスタントン

(3.16) に現れる作用の停留経路を求めるため，作用の変分を考え，それをゼロとおくことから始めよう．

$$\delta \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left(\frac{\dot{x}^2}{2} + U(x) \right) = 0. \quad (3.17)$$

すると，Newton 方程式に似た，以下の方程式が導かれる．

$$-\ddot{x} + \frac{\partial U}{\partial x} = 0. \quad (3.18)$$

停留経路はこの方程式の解である．この微分方程式は， $-U$ なるポテンシャル中を運動する粒子の Newton 方程式と同じ形をしている．よって (3.18) の解は，図 3.2 のような逆さにしたポテンシャル中の粒子の運動と解釈して求めることができる．

まず，方程式から，

$$x(\tau) = \pm a \quad (3.19)$$

が解であることは明らかである．これは粒子が $x = \pm a$ の頂点に静止している解で，不安定に見えるが，その安定性は作用関数が極小になっているかどうかで判断しなければならない．実際にこの解を作用へ入れてみると， $S[\pm a] = 0$ になることがわかり， $U(x) \geq 0$ かつ $\dot{x}^2 \geq 0$ より $S \geq 0$ であることが言えるので，解 (3.19) は確かに作用の停留経路になっている．

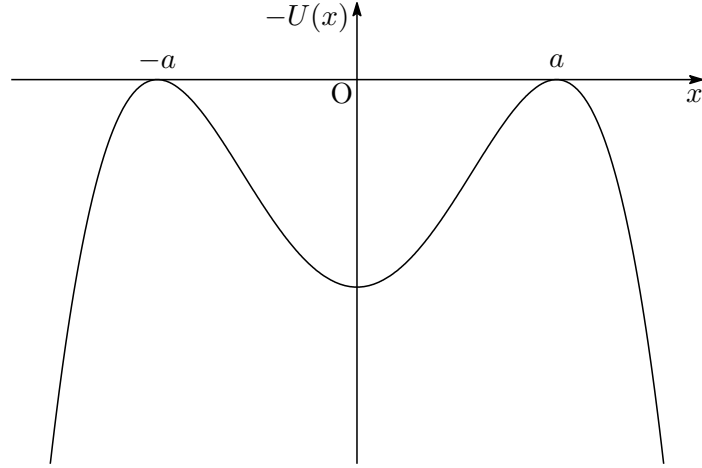


図 3.2: $U(x)$ を反転させたポテンシャル $-U(x)$

次に考えられる解は、一方の山頂 ($x = \pm a$) から出発して反対の山頂 ($x = \mp a$) に到達する解である。古典運動の類推で、最初の山頂で静止していたとすると、その全エネルギーはゼロである。したがって、方程式 (3.18) のエネルギー積分の結果は次のようになる。

$$\frac{1}{2}\dot{x}^2 = U(x) = \frac{\omega^2}{8a^2}(x^2 - a^2)^2. \quad (3.20)$$

最後に $\beta \rightarrow \infty$ とするから、最初から時間間隔が無限大の解を考える。まず $\tau = 0$ で $-a$ を出発し、 $\tau \rightarrow \infty$ で a に到達する解は、常に $\dot{x} > 0$ なので、(3.20) を

$$\dot{x} = \frac{\omega}{2a}(x^2 - a^2) \quad (3.21)$$

と変形して、変数分離を行うことで求まる。その結果は

$$x(\tau) = a \tanh \left[\frac{\omega}{2}(\tau - \tau_0) \right] \quad (3.22)$$

となる。それで解のグラフは図 3.3 のようになる。これは $\tau = \tau_0$ で折れ曲がりを持つキंक解であり、ポテンシャル中の粒子運動で言えば、 τ_0 は粒子が谷の底を通過する時刻である。そのため、今の境界条件と照らし合わせれば、 $\tau_0 > 0$ である。

作用は \dot{x}^2 とポテンシャルの項から成るが、後に見るように \dot{x}^2 のみで書ける。 \dot{x}^2 を計算すると

$$\dot{x}^2 = \frac{a^2 \omega^2}{4 \cosh^4 [\omega(\tau - \tau_0)/2]} \quad (3.23)$$

となって、そのグラフは図 3.4 に示してある。グラフからわかるように、作用への寄与はほとんど $\tau = \tau_0$ 近傍からのものである。したがってこの寄与をデルタ関数のようにほとんど瞬間的なものと見なし、これをインスタントンができたと表現することにする。また、このような瞬間的な寄与をする解をインスタントン解と呼ぶ。

次に a から $-a$ へ向かう解を考えよう。この場合 (3.21) にマイナスが付き、

$$\dot{x} = -\frac{\omega}{2a}(x^2 - a^2) \quad (3.24)$$

となる。これを解いて

$$x(\tau) = -a \tanh \left[\frac{\omega}{2}(\tau - \tau_0) \right] \quad (3.25)$$

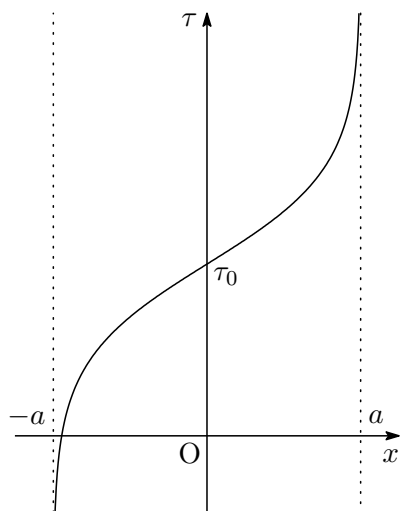


図 3.3: キンク解

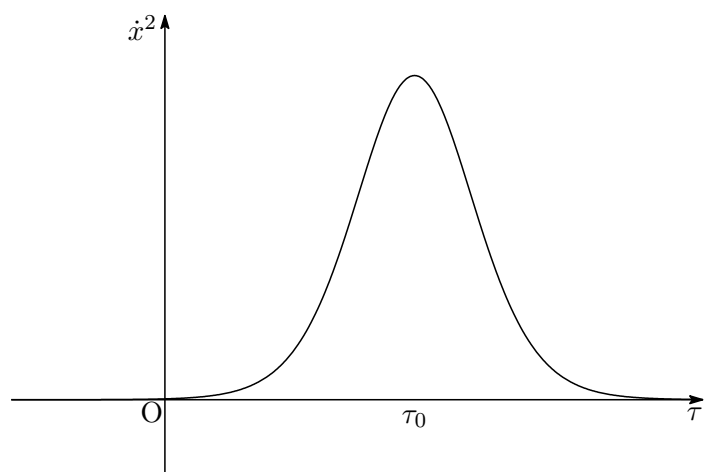


図 3.4: 作用関数への寄与

を得る。これは (3.22) と折れ曲がり逆の反キंक解であり、作用関数への寄与はキंक解と全く同じである。ゆえに、これを反インスタントンと呼ぶ。

これで作用の停留経路は求まったが、(3.16) の経路積分では $x(0) = x(\beta\hbar)$ の周期的境界条件を満たしていなければならない。今求めた停留経路は、 $x = \pm a$ の経路を除いてこの境界条件を満たしていない。境界条件を満たすためには、 $\mp a \rightarrow \pm a$ のような行きっぱなしの解ではなく、また元の山に戻る必要がある。そのためには、各々の解の積

$$x(\tau) = \pm a \tanh \left[\frac{\omega}{2}(\tau - \tau_0) \right] \tanh \left[\frac{\omega}{2}(\tau - \bar{\tau}_0) \right] \quad (3.26)$$

を考えれば良い。これはインスタントンと反インスタントンが対で現れることを意味する。この理由は数式を見るよりもこの解の図 3.5 を見れば明らかだろう。この解は方程式 (3.18) を厳密に満たすわけで

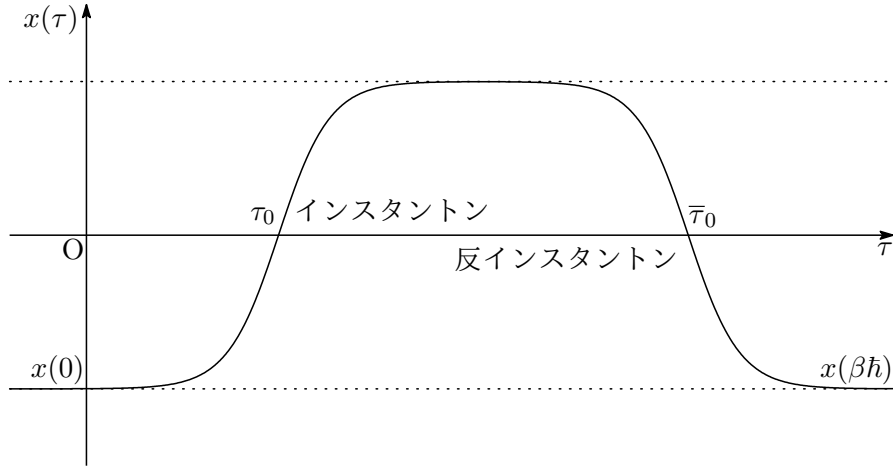


図 3.5: インスタントン反インスタントン対

はないが、それでも近似的には停留経路と呼んでも良い。それで、このような経路を準停留経路と呼ぼう。準停留経路は (3.26) だけではなく、もっとたくさんのインスタントン反インスタントン対を考えてもよい。そこで、 $x_0^{(2n)}$ を n 個のインスタントンと反インスタントンの対からなる (3.18) の近似解とする。停留経路ではないにしろ、これら準停留経路も足し上げておかねば近似の精度は悪くなると考えられる。したがって、経路積分 (3.16) の計算では、準停留経路の寄与は全て取り入れて計算することにする。

$n = 1$ の場合、すなわち、インスタントン反インスタントン対からの分配関数への寄与を詳しく調べる。図 3.6 のような停留経路のまわりの展開を考えることになる。停留経路を図のように時間領域 I の部分と II の部分に分け、経路積分が無限多重積分であることを使って I と II の積の形に書く。つまり、 $\tau \in [0, \beta\hbar]$ の経路を、I と II の部分に分割して考えるということである。

$$\mathcal{D}x(\tau) = \prod_{\tau \in [0, \beta\hbar]} dx(\tau) = \left(\prod_{\tau \in \text{I}} dx(\tau) \right) \left(\prod_{\tau \in \text{II}} dx(\tau) \right). \quad (3.27)$$

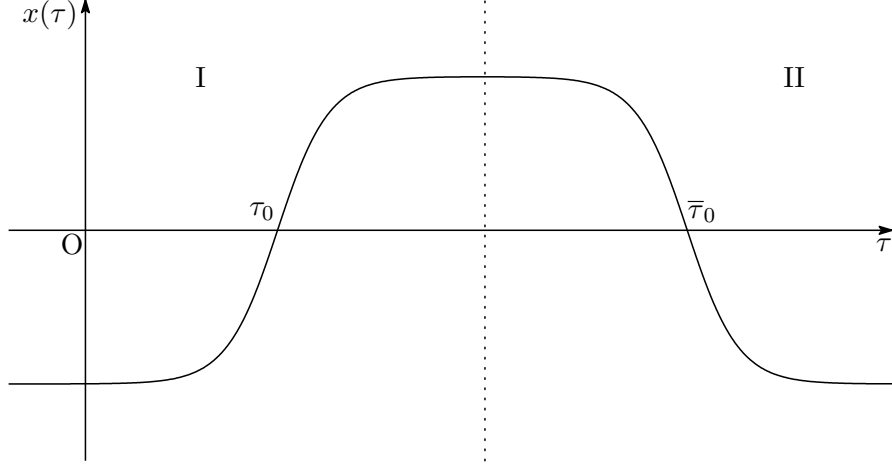


図 3.6: 領域 I と領域 II への分割

したがって、この場合の分配関数は経路積分表示で次のように書ける．

$$\begin{aligned}
 Z_2 &= \int \mathcal{D}x(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau L(\tau) \right] \\
 &= \int \prod_{\tau \in [0, \beta\hbar]} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau L(\tau) \right] \\
 &= \int \prod_{\tau \in \text{I}} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\text{I}} d\tau L(\tau) \right] \int \prod_{\tau \in \text{II}} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\text{II}} d\tau L(\tau) \right]. \quad (3.28)
 \end{aligned}$$

ただし

$$[0, \beta\hbar] = \text{I} + \text{II}, \quad L(\tau) = \frac{1}{g^2} \left(\frac{\dot{x}^2}{2} + U(x) \right) \quad (3.29)$$

である．次に、I と II のそれぞれにインスタントンがない場合の経路積分をかけて同じもので割ると

$$\begin{aligned}
 Z_2 &= \int_{(1)} \prod_{\tau \in \text{I}} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\text{I}} d\tau L(\tau) \right] \int_{(1)} \prod_{\tau \in \text{II}} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\text{II}} d\tau L(\tau) \right] \\
 &\quad \times \frac{\int_{(0)} \prod_{\tau \in \text{I}} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\text{I}} d\tau L(\tau) \right] \int_{(0)} \prod_{\tau \in \text{II}} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\text{II}} d\tau L(\tau) \right]}{\int_{(0)} \prod_{\tau \in [0, \beta\hbar]} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau L(\tau) \right]} \\
 &= \left\{ \int_{(1)} \prod_{\tau \in \text{I}} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\text{I}} d\tau L(\tau) \right] \int_{(0)} \prod_{\tau \in \text{II}} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\text{II}} d\tau L(\tau) \right] \right\} \\
 &\quad \times \left\{ \int_{(0)} \prod_{\tau \in \text{I}} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\text{I}} d\tau L(\tau) \right] \int_{(1)} \prod_{\tau \in \text{II}} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\text{II}} d\tau L(\tau) \right] \right\} \\
 &\quad \times \left\{ \int_{(0)} \prod_{\tau \in [0, \beta\hbar]} dx(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau L(\tau) \right] \right\}^{-1} \quad (3.30)
 \end{aligned}$$

となる。これらの経路積分の右下の数字 (1) と (0) は、インスタントンがある停留経路 (3.22), (3.25) まわりの経路積分, (反) インスタントンのない停留経路 (3.19) まわりの経路積分の意味である。この式を見ると, 第1因子はインスタントン1個の分配関数 Z_1 , 第2因子は反インスタントンの分配関数 \bar{Z}_1 , 第3因子はゼロインスタントンの分配関数 Z_0 である。また, 反インスタントンとインスタントンの作用への寄与は同じであり, 実際上 $\bar{Z}_1 = Z_1$ として良い。こうしてインスタントン反インスタントン対の分配関数 Z_2 は, 1個のインスタントンの分配関数 Z_1 と, ゼロインスタントンの分配関数 Z_0 の経路積分に書き換えられる。だが, Z_1 と \bar{Z}_1 の寄与を等しくおくと, $\tau_0 < \bar{\tau}_0$ の時間順序を区別できない。さらに, 後に τ_0 は積分として足し上げるので, $\tau_0 < \bar{\tau}_0$ を区別せずに足し上げることになってしまう。そうすると明らかに数えすぎになってしまうので, その入れ換えの総数 $2!$ で割っておく必要がある。この議論により,

$$Z_2 \rightarrow \frac{1}{2!} \frac{Z_1^2}{Z_0} = \frac{1}{2!} \frac{Z_1^2}{Z_0^2} Z_0 = \frac{1}{2!} A^2 Z_0, \quad (3.31)$$

$$A = \frac{Z_1}{Z_0} = \frac{\int_{(1)} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau L(\tau) \right]}{\int_{(0)} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau L(\tau) \right]} \quad (3.32)$$

としなければならない。

上の議論を n 個の対の場合に拡張すれば, 容易に次式になることがわかる。

$$Z_{2n} = \frac{1}{(2n)!} A^{2n} Z_0. \quad (3.33)$$

したがって分配関数は

$$Z(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} Z_{2n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} A^{2n} Z_0 = Z_0 \cosh A \quad (3.34)$$

で与えられる。

Z_0 は停留経路 $x = \pm a$ まわりに展開して求めた分配関数であるから, 調和振動子の分配関数で近似できる。したがって

$$Z_0 = \sum_{m=0}^{\infty} \exp \left[-\beta \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \right] \quad (3.35)$$

となる。すると, 求めたい基底エネルギーは (3.8) より

$$\begin{aligned} E_0 &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} W(\beta) \\ &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} (-\log Z_0 - \log \cosh A) \\ &= -\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log Z_0 - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log \cosh A \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log \frac{e^A + e^{-A}}{2} \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} A - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log(1 + e^{-2A}) + \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log 2 \end{aligned} \quad (3.36)$$

と計算される。 A の定義 (3.32) より, $A > 0$ であるから, $0 < e^{-2A} < 1$ 。よって

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log(1 + e^{-2A}) = 0 \quad (3.37)$$

となる。ゆえに

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} A \equiv \frac{\hbar\omega}{2} + \epsilon \quad (3.38)$$

となって、基底エネルギー E_0 は調和振動子からのずれ

$$\epsilon = - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} A \quad (3.39)$$

を計算すれば求まることになる。

3.4 A の計算

(3.32) で定義された A を再び書くと、

$$A = \frac{Z_1}{Z_0} = \frac{\int_{(1)} \mathcal{D}x \exp \left[-\frac{1}{g^2 \hbar} \int_0^{\beta \hbar} d\tau \left(\frac{1}{2} \dot{x}^2 + U(x) \right) \right]}{\int_{(0)} \mathcal{D}x \exp \left[-\frac{1}{g^2 \hbar} \int_0^{\beta \hbar} d\tau \left(\frac{1}{2} \dot{x}^2 + U(x) \right) \right]} \quad (3.40)$$

である。分子の経路積分を実行するのに

$$x(\tau) = x_0(\tau - \tau_0) + g\xi(\tau - \tau_0) \quad (3.41)$$

とおき、 g の冪で展開する。ただし $x_0(\tau - \tau_0)$ は停留経路 (3.22) を改めて書き直したものであり、とくに $x_0(\tau)$ は、(3.22) で $\tau_0 = 0$ としたものを表すとする。分母は、ゼロインスタントンの経路積分であるから、

$$x(\tau) = a + g\xi(\tau) \quad (3.42)$$

とおいて、 g で展開する。1-インスタントンの計算のために、 $U(x)$ を x_0 まわりで展開すると

$$U(x) = U(x_0) + U'(x_0)g\xi + \frac{1}{2}U''(x_0)g^2\xi^2 \quad (3.43)$$

となる。このとき 1-インスタントンについては

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\dot{x}^2 + U(x) &= \frac{1}{2}(\dot{x}_0 + g\dot{\xi})^2 + U(x_0) + U'(x_0)g\xi + \frac{1}{2}U''(x_0)g^2\xi^2 \\ &= \frac{1}{2}\dot{x}_0^2 + U(x_0) + g\dot{x}_0\dot{\xi} + gU'(x_0)\xi + \frac{1}{2}g^2\xi^2 + \frac{1}{2}g^2U''(x_0)\xi^2 \end{aligned} \quad (3.44)$$

であり、それで、

$$\frac{1}{g^2} \int_0^{\beta \hbar} d\tau \left(\frac{1}{2} \dot{x}_0^2 + U(x_0) \right) \equiv S_0, \quad (3.45)$$

$$\frac{1}{g^2} \int_0^{\beta \hbar} d\tau (g\dot{x}_0\dot{\xi} + gU'(x_0)\xi) = \frac{1}{g^2} \int_0^{\beta \hbar} g(-\ddot{x}_0 + U'(x_0))\xi = 0 \quad (3.46)$$

である。最初の式は停留作用 S_0 で、2 番目の式の初めの等号は部分積分、最後の等号は Euler-Lagrange 方程式によるものである。(3.44) の残りの項は

$$\begin{aligned} \frac{1}{g^2} \int_0^{\beta \hbar} d\tau \left(\frac{1}{2}g^2\xi^2 + \frac{1}{2}g^2U''(x_0)\xi^2 \right) &= \int_0^{\beta \hbar} d\tau \frac{1}{2}(\dot{\xi}^2 + U_0\xi^2) \\ &= \int_0^{\beta \hbar} d\tau \frac{\xi}{2}(-\partial_\tau^2 + U_0)\xi \end{aligned} \quad (3.47)$$

となる．ただし $U_0 \equiv U''(x_0)$ とした．0-インスタントンでは

$$U(a) = 0, \quad U'(a) = 0, \quad U''(a) = \omega^2 \quad (3.48)$$

であるから

$$\frac{1}{2}\dot{x}^2 + U(x) = \frac{1}{2}g^2\dot{\xi}^2 + \frac{1}{2}\omega^2\xi^2 \quad (3.49)$$

と計算される．よって 1-インスタントンの場合と同様に

$$\begin{aligned} \frac{1}{g^2} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left(\frac{1}{2}\dot{x}^2 + U(x) \right) &= \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{1}{2}(\dot{\xi}^2 + \omega^2\xi^2) \\ &= \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{\xi}{2}(-\partial_\tau^2 + \omega^2)\xi \end{aligned} \quad (3.50)$$

となる．したがって (3.40) は

$$A = e^{-S_0/\hbar} \frac{\int \mathcal{D}\xi \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{\xi}{2}(-\partial_\tau^2 + U_0)\xi \right]}{\int \mathcal{D}\xi \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{\xi}{2}(-\partial_\tau^2 + \omega^2)\xi \right]} \quad (3.51)$$

となる．(3.51) の経路積分は，例えば分子については次のような方程式の固有値¹が求まれば，2 次形式の Gauss 積分に帰着させて計算できる．

$$(-\partial_\tau^2 + U_0(\tau))\psi_n(\tau) = E_n\psi_n(\tau) \quad (3.52)$$

これはポテンシャル $U_0(\tau)$ を伴った Schrödinger 方程式である．具体的な関数形は， $U''(x)$ に $x_0(\tau)$ を代入すれば求まり，

$$U_0(\tau) = U''(x_0(\tau)) = \frac{\omega^2}{2} \left(3 \tanh^2 \frac{\omega\tau}{2} - 1 \right) \quad (3.53)$$

となる．このポテンシャルを図 3.7 に示しておく．しかし，方程式 (3.52) はゼロ固有値の解を持ってい

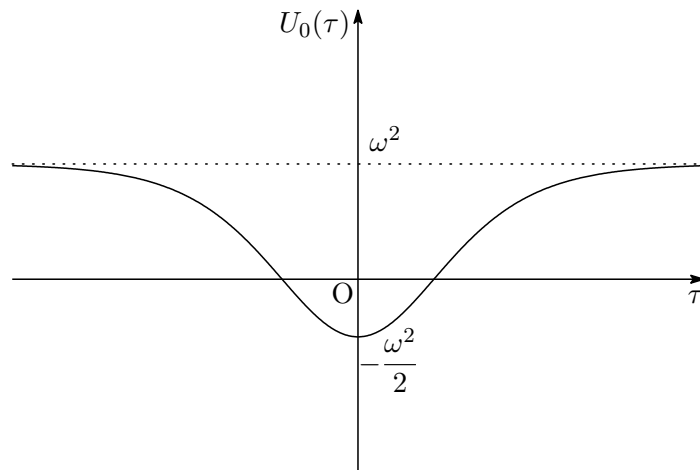


図 3.7: ポテンシャル $U_0(\tau)$

¹ここに現れる E_n は最初に考えていたものとは異なる．この方程式は時間を空間と見立てた Schrödinger 方程式のような形をしており，そのためこの E は本当のエネルギーではなく，エネルギーの次元も持っていない．

るため、そのまま計算するには問題がある．そこで、ゼロ固有値の解を詳しく調べるため、そのような解の存在の証明から始めよう．

古典経路 $x_0(\tau)$ は (3.18) の解であるから

$$-\ddot{x}_0(\tau) + U'(x_0(\tau)) = 0 \quad (3.54)$$

を満たす．これをさらに τ で微分すると

$$\begin{aligned} -\ddot{\ddot{x}}_0(\tau) + U''(x_0(\tau))\dot{x}_0(\tau) &= 0 \\ \iff (-\partial_\tau^2 + U_0)\dot{x}_0 &= 0 \end{aligned} \quad (3.55)$$

となるので、

$$\psi_0(\tau) \propto \dot{x}_0(\tau) \quad (3.56)$$

ととれば、 $\psi_0(\tau)$ は固有値ゼロの解である．それで ψ_0 を規格化して

$$\int d\tau \psi_0^2(\tau) = 1 \quad (3.57)$$

を満たすものにとる．すなわち

$$\psi_0(\tau) = \frac{\dot{x}_0}{\sqrt{\int d\tau \dot{x}_0^2}} = \frac{\dot{q}_0}{\sqrt{\int d\tau \dot{q}_0^2}} \quad (3.58)$$

である．ここで、(3.20) より

$$\frac{1}{2}\dot{x}_0^2 = U(x_0) \quad (3.59)$$

なので

$$\frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \dot{x}_0^2 = \int_0^{\beta\hbar} d\tau U(x_0(\tau)) \quad (3.60)$$

となる．これを $q_0(\tau)$ で表せば

$$\frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \dot{q}_0^2 = \int_0^{\beta\hbar} d\tau V(q_0) \quad (3.61)$$

である．作用は

$$S_0 = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left(\frac{\dot{q}_0^2}{2} + V(q_0) \right) = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \dot{q}_0^2 \quad (3.62)$$

と書ける．以上よりゼロ固有値の解は

$$\psi_0(\tau) = \frac{\dot{q}_0}{\sqrt{S_0}} \quad (3.63)$$

となる．

次に、(3.52) の解 $\{\psi_n\}$ を使って $\xi(\tau)$ を次のように展開する．

$$\xi(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n \psi_n(\tau). \quad (3.64)$$

これで、(3.51) の分子の経路積分の積分変数を $\xi(\tau)$ から ξ_n へ変換することができる．さらに、 $\{\psi_n\}$ は正規直交

$$\int d\tau \psi_n(\tau) \psi_m(\tau) = \delta_{nm} \quad (3.65)$$

であるとする、変換 (3.64) はユニタリー変換であるということが出来る。 $\xi(\tau)$ を無限次元のベクトルとして、その大きさの 2 乗は

$$\begin{aligned}
\|\xi(\tau)\|^2 &= \int d\tau \xi(\tau) \xi(\tau) \\
&= \int d\tau \sum_{n,m} \xi_n \xi_m \psi_n(\tau) \psi_m(\tau) \\
&= \sum_{n,m} \xi_n \xi_m \delta_{nm} \\
&= \sum_n \xi_n \xi_n = \|\xi_n\|^2
\end{aligned} \tag{3.66}$$

となる。よって、変換 (3.64) はベクトルの大きさを変えないので、ユニタリー変換である。これより、 $\xi(\tau) \rightarrow \xi_n$ の変数変換 (3.64) に伴うヤコビアンは 1 であることがわかるので、積分測度 $\mathcal{D}\xi$ は次のように書ける。

$$\mathcal{D}\xi = \prod_{\tau \in [0, \beta\hbar]} d\xi(\tau) = \prod_{n=0}^{\infty} d\xi_n. \tag{3.67}$$

この変換により

$$\begin{aligned}
\int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{\xi}{2} (-\partial_\tau^2 + U_0) \xi &= \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{1}{2} \sum_{n,m} \xi_n \psi_n (-\partial_\tau^2 + U_0) \xi_m \psi_m \\
&= \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{1}{2} \sum_{n,m} E_m \xi_n \xi_m \psi_n \psi_m \\
&= \frac{1}{2} \sum_{n,m} E_m \xi_n \xi_m \delta_{nm} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} E_n \xi_n^2
\end{aligned} \tag{3.68}$$

となるから、(3.51) の分子の経路積分は

$$\begin{aligned}
\int \mathcal{D}\xi \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \frac{\xi}{2} (-\partial_\tau^2 + U_0) \xi \right] &= \prod_{n=0}^{\infty} \int d\xi_n \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} E_n \xi_n^2 \right] \\
&= \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{E_n}} \int d\xi_0 \exp \left[-\frac{E_0}{2\hbar} \xi_0^2 \right] \\
&= \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{E_n}} \int d\xi_0
\end{aligned} \tag{3.69}$$

となる。最後の等号では $E_0 = 0$ であることを使った。このように、ゼロ固有値の部分は Gauss 積分にならず、それどころか発散しているように見える。この意味を探るため、(3.41) 及び (3.64) で定義される変換の式をもう一度書くと、

$$\begin{aligned}
x(\tau) &= x_0(\tau - \tau_0) + g\xi(\tau - \tau_0) \\
&= x_0(\tau - \tau_0) + g \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(\tau - \tau_0) \xi_n
\end{aligned} \tag{3.70}$$

となっている。とくにゼロ固有値のモードについて、 ψ_0 の具体的な形 (3.63) を使って分離すると

$$x(\tau) = x_0(\tau - \tau_0) + \frac{1}{\sqrt{S_0}} \dot{x}_0(\tau - \tau_0) \xi_0 + g \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(\tau - \tau_0) \xi_n \tag{3.71}$$

となる．すると，初めの2項は $x_0(\tau - \tau_0 + \xi_0/\sqrt{S_0})$ を展開して1次までとったものと見なせる．このとき，(3.45) から $1/\sqrt{S_0} \sim O(g)$ に注意すれば， g が小さいとき

$$x(\tau) = x_0 \left(\tau - \tau_0 + \frac{\xi_0}{\sqrt{S_0}} \right) + g \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n \left(\tau - \tau_0 + \frac{\xi_0}{\sqrt{S_0}} \right) + O(g^2) \quad (3.72)$$

と書くことができる．ここで ψ_n の展開部分は $O(g^2)$ に吸収されている．これより， ξ_0 は τ_0 の変化に相当すると結論できる．つまり， ξ_0 の積分は異なった時刻にできたインスタントンの足し上げの役割を果たす．よって

$$d\xi_0 = \sqrt{S_0} d\tau_0 \quad (3.73)$$

とできるから

$$\begin{aligned} \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{E_n}} \int d\xi_0 &= \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{E_n}} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_0 \sqrt{S_0} \\ &= \sqrt{S_0\beta\hbar} \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{E_n}} \end{aligned} \quad (3.74)$$

と計算される．つまり， ξ_0 の積分による発散は

$$\int d\xi_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \sqrt{S_0\beta\hbar} \quad (3.75)$$

と解釈できたわけである．

(3.51) の分母についても同様に固有値方程式を考えよう．

$$(-\partial_\tau^2 + \omega^2)\psi_n^0(\tau) = E_n^0\psi_n^0(\tau). \quad (3.76)$$

これを使えば

$$\int \mathcal{D}\xi \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{\xi}{2} (-\partial_\tau^2 + \omega^2) \xi \right] = \prod_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{E_n^0}} \quad (3.77)$$

を得る．以上から， A は

$$\begin{aligned} A &= e^{-S_0/\hbar} \sqrt{S_0\beta\hbar} \frac{\prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{2\pi\hbar/E_n}}{\prod_{n=0}^{\infty} \sqrt{2\pi\hbar/E_n^0}} \\ &= e^{-S_0/\hbar} \beta\hbar \sqrt{\frac{S_0}{2\pi\hbar}} \left(\frac{\prod_{n=0}^{\infty} E_n^0}{\prod_{n=1}^{\infty} E_n} \right)^{1/2} \\ &= \beta e^{-S_0/\hbar} \sqrt{\frac{S_0\hbar}{2\pi}} \left(\frac{\det(-\partial_\tau^2 + \omega^2)}{\det'(-\partial_\tau^2 + U_0)} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (3.78)$$

となる．ここで， \det' はゼロモードを除いた行列式を表す．こうして，エネルギーのずれ ϵ は

$$\epsilon = -\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} A = -e^{-S_0/\hbar} \sqrt{\frac{S_0\hbar}{2\pi}} \left(\frac{\det \hat{H}_0}{\det' \hat{H}} \right)^{1/2} \quad (3.79)$$

と書ける．ただし

$$\begin{cases} \hat{H} = -\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau), \\ \hat{H}_0 = -\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \omega^2 \end{cases} \quad (3.80)$$

である．

3.5 行列式の比の計算

(3.79) の行列式の比を計算するために、次の行列式を考えよう。

$$\Delta(E) = \frac{\det(E - \hat{H})}{\det(E - \hat{H}_0)} = \frac{\prod_{n=0}^{\infty} (E_n - E)}{\prod_{n=0}^{\infty} (E_n^0 - E)}. \quad (3.81)$$

これを Fredholm 行列式という。これを用いると

$$\begin{aligned} -\lim_{E \rightarrow 0} \frac{\Delta(E)}{E} &= -\lim_{E \rightarrow 0} \frac{1}{E} (E_0 - E) \frac{\prod_{n=1}^{\infty} (E_n - E)}{\prod_{n=0}^{\infty} (E_n^0 - E)} \\ &= \lim_{E \rightarrow 0} \frac{\prod_{n=1}^{\infty} (E_n - E)}{\prod_{n=0}^{\infty} (E_n^0 - E)} \\ &= \frac{\prod_{n=1}^{\infty} E_n}{\prod_{n=0}^{\infty} E_n^0} = \frac{\det' \hat{H}}{\det \hat{H}_0} \end{aligned} \quad (3.82)$$

となるので、

$$\left(\frac{\det \hat{H}_0}{\det' \hat{H}} \right)^{1/2} = \lim_{E \rightarrow 0} \left(\frac{E}{-\Delta(E)} \right)^{1/2} = \left(\frac{1}{-\Delta'(0)} \right)^{1/2} \quad (3.83)$$

によって (3.79) が計算できる。ここで、2 番目の等号は微分の定義そのものであることに注意する。

それではまず、

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau) \right) \psi(\tau) = E \psi(\tau) \quad (3.84)$$

なる波動方程式の 1 次元の散乱問題を考えよう。\$U_0(\tau)\$ は、\$\tau \to \pm\infty\$ で \$\omega^2\$ に近づくから、解も \$\tau \to \pm\infty\$ で \$e^{\pm ik\tau}\$ (\$k^2 = E - \omega^2\$) に近づくはずである。そこで、次のような境界条件を見たす解を \$f_{\pm}(\tau, E)\$ としよう。

$$\lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} \left[f_{\pm}(\tau, E) e^{\mp ik\tau} \right] = 1 \quad (3.85)$$

次に、\$f_{\pm}(\tau, E)\$ の \$\tau\$ の反対方向の漸近形を

$$\lim_{\tau \rightarrow \mp\infty} f_{\pm}(\tau, E) = e^{\mp ik\tau} A_{\pm}(E) + e^{\pm ik\tau} F_{\pm}(E) \quad (3.86)$$

とすると、

$$F_+(E) = F_-(E) = \Delta(E) \quad (3.87)$$

となることが示せる。

最初に、解の集合 \$\{f_+(\tau, E), f_-(\tau, E')\}\$ のロンスキアン

$$W = \begin{vmatrix} f_+(\tau, E) & f_-(\tau, E') \\ f'_+(\tau, E) & f'_-(\tau, E') \end{vmatrix} = f_+(\tau, E) \frac{\partial}{\partial \tau} f_-(\tau, E') - f_-(\tau, E') \frac{\partial}{\partial \tau} f_+(\tau, E) \quad (3.88)$$

を考える。これを \$\tau\$ で微分すると

$$\frac{\partial W}{\partial \tau} = f_+(\tau, E) \frac{\partial^2 f_-(\tau, E')}{\partial \tau^2} - f_-(\tau, E') \frac{\partial^2 f_+(\tau, E)}{\partial \tau^2} \quad (3.89)$$

となる。それで波動方程式 (3.84) を使えば

$$\frac{\partial W}{\partial \tau} = (E - E') f_+(\tau, E) f_-(\tau, E') \quad (3.90)$$

を得る。したがって $E = E'$ のとき

$$\frac{\partial W}{\partial \tau} = 0 \quad (3.91)$$

となる。つまり、 $E = E'$ のとき W は τ に依存しない。ゆえに、ロンスキアンには、 τ のどの値の関数形をも代入することができる。

1. $\tau \rightarrow \infty$ のとき

$$f_+(\tau, E) \rightarrow e^{ik\tau}, \quad (3.92)$$

$$f_-(\tau, E) \rightarrow e^{ik\tau} A_-(E) + e^{-ik\tau} F_-(E). \quad (3.93)$$

よって

$$W = -2ikF_-(E). \quad (3.94)$$

2. $\tau \rightarrow -\infty$ のとき

$$f_+(\tau, E) \rightarrow e^{-ik\tau} A_+(E) + e^{ik\tau} F_+(E), \quad (3.95)$$

$$f_-(\tau, E) \rightarrow e^{-ik\tau}. \quad (3.96)$$

よって

$$W = -2ikF_+(E). \quad (3.97)$$

以上 (3.94) 及び (3.97) より

$$F_+(E) = F_-(E) \equiv F(E) \quad (3.98)$$

を得る。これで (3.87) の前半が証明された。

次に、関数

$$G(\tau, \tau'; E) = \frac{if_+(\tau_>, E)f_-(\tau_<, E)}{2kF(E)} \quad (3.99)$$

を考えよう。ここで、記号 $\tau_>, \tau_<$ は、次のように定義されている。

$$\begin{aligned} \tau > \tau' \text{ のとき } & \tau_> = \tau & \tau_< = \tau', \\ \tau < \tau' \text{ のとき } & \tau_> = \tau' & \tau_< = \tau. \end{aligned} \quad (3.100)$$

この関数 G は、演算子 $\hat{H} - E$ の Green 関数になっている。

証明: Green 関数の定義は

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau) - E \right) G(\tau, \tau'; E) = \delta(\tau - \tau') \quad (3.101)$$

である。したがって、この関数の左辺が、デルタ関数の定義

$$\int d\tau \delta(\tau - \tau') = 1 \quad (3.102)$$

$$\int d\tau \delta(\tau - \tau') f(\tau) = f(\tau') \quad (3.103)$$

を満たすことを言えば良い。まず、(3.99) で定義された Green 関数が、次のようにも書けることに注意する。

$$G(\tau, \tau'; E) = \frac{i}{2kF(E)} [\theta(\tau - \tau') f_+(\tau, E) f_-(\tau', E) + \theta(\tau' - \tau) f_+(\tau', E) f_-(\tau, E)] \quad (3.104)$$

よって

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau) - E\right) G(\tau, \tau'; E) &= \frac{i}{2kF(E)} \left[\left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau) - E\right) (\theta(\tau - \tau') f_+(\tau, E) f_-(\tau', E)) \right. \\ &\quad \left. + \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau) - E\right) (\theta(\tau' - \tau) f_+(\tau', E) f_-(\tau, E)) \right] \end{aligned} \quad (3.105)$$

となる．それぞれの項に微分を作用させ，階段関数の微分がデルタ関数になることを使えば

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau) - E\right) G(\tau, \tau'; E) &= \frac{i}{2kF} \left[2\delta(\tau - \tau') \left\{ f_+(\tau', E) \frac{\partial f_-(\tau, E)}{\partial \tau} - f_-(\tau', E) \frac{\partial f_+(\tau, E)}{\partial \tau} \right\} \right. \\ &\quad \left. + \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \delta(\tau - \tau') \right\} \{ f_+(\tau', E) f_-(\tau, E) - f_+(\tau, E) f_-(\tau', E) \} \right] \end{aligned} \quad (3.106)$$

となる．さらに，この式の両辺を積分すれば

$$\begin{aligned} &\int d\tau \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau) - E\right) G(\tau, \tau'; E) \\ &= \frac{i}{2kF} \int d\tau 2\delta(\tau - \tau') \left\{ f_+(\tau', E) \frac{\partial f_-(\tau, E)}{\partial \tau} - f_-(\tau', E) \frac{\partial f_+(\tau, E)}{\partial \tau} \right\} \\ &\quad + \frac{i}{2kF} \int d\tau \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \delta(\tau - \tau') \right\} \{ f_+(\tau', E) f_-(\tau, E) - f_+(\tau, E) f_-(\tau', E) \} \\ &= \frac{i}{2kF} \int d\tau \delta(\tau - \tau') \left\{ f_+(\tau', E) \frac{\partial f_-(\tau, E)}{\partial \tau} - f_-(\tau', E) \frac{\partial f_+(\tau, E)}{\partial \tau} \right\} \\ &\quad + \frac{i}{2kF} [\delta(\tau - \tau') \{ f_+(\tau', E) f_-(\tau, E) - f_+(\tau, E) f_-(\tau', E) \}]_{\tau=-\infty}^{\tau=\infty} \\ &= \frac{i}{2kF} \left\{ f_+(\tau', E) \frac{\partial f_-(\tau', E)}{\partial \tau'} - f_-(\tau', E) \frac{\partial f_+(\tau', E)}{\partial \tau'} \right\} \\ &= \frac{i}{2kF} W \\ &= \frac{i}{2kF} (-i2kF) = 1 \end{aligned} \quad (3.107)$$

となる．ゆえに，(3.101) の左辺は (3.102) を満たす．

また， $\tau > \tau', \tau < \tau'$ のそれぞれで，

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau) - E\right) G(\tau, \tau', E) = 0 \quad (3.108)$$

は波動方程式 (3.84) から満たされる．したがって，積分

$$\int d\tau f(\tau) \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau) - E\right) G(\tau, \tau'; E) \quad (3.109)$$

の寄与が $\tau = \tau'$ のみであることは明らかである．ゆえに， $f(\tau) \rightarrow f(\tau')$ とすることができて

$$\begin{aligned} \int d\tau f(\tau) \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau) - E\right) G(\tau, \tau'; E) &= f(\tau') \int d\tau \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U_0(\tau) - E\right) G(\tau, \tau'; E) \\ &= f(\tau') \end{aligned} \quad (3.110)$$

が得られる．これで (3.103) も満たされていることがわかった．以上より，(3.101) が成り立ち， $G(\tau, \tau'; E)$ は演算子 $\hat{H} - E$ の Green 関数である．(証明終)

量子力学の演算子形式を使うと

$$G(\tau, \tau'; E) = \langle \tau | \frac{1}{\hat{H} - E} | \tau' \rangle \quad (3.111)$$

とも書ける．(3.81) で定義された Fredholm 行列式の対数をとると

$$\begin{aligned} \log \Delta(E) &= \log \det(E - \hat{H}) - \log \det(E - \hat{H}_0) \\ &= \text{Tr} \log(E - \hat{H}) - \text{Tr} \log(E - \hat{H}_0) \end{aligned} \quad (3.112)$$

となる．ここで，両辺を E で微分するために，次の式を証明しよう．

$$\frac{\partial}{\partial x} \text{Tr} \log(x - A) = \text{Tr} \frac{1}{x - A} \quad (3.113)$$

ただし A は行列である．

証明: $x - A = e^B$ とおく．それで B を対角化する行列を S とすると， D をその対角化された行列として，次式が書き下せる．

$$D \equiv S^{-1}BS = S^{-1} \log(x - A)S \quad (3.114)$$

そのとき

$$\begin{aligned} S^{-1}(x - A)S &= S^{-1}e^BS \\ &= S^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} B^k S \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \underbrace{(S^{-1}BS)(S^{-1}BS) \cdots (S^{-1}BS)}_{k \text{ 個}} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (S^{-1}BS)^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} D^k = e^D \end{aligned} \quad (3.115)$$

であり，上式の対数をとると

$$D = \log\{S^{-1}(x - A)S\} \quad (3.116)$$

である．(3.114) と (3.116) から

$$S^{-1} \log(x - A)S = \log\{S^{-1}(x - A)S\} \quad (3.117)$$

がわかるので，

$$\begin{aligned} \text{Tr} \log(x - A) &= \text{Tr}\{S^{-1} \log(x - A)S\} \\ &= \text{Tr} \log\{S^{-1}(x - A)S\} \end{aligned} \quad (3.118)$$

となる．定義から $S^{-1}(x - A)S$ は対角行列なので，その対数は対角成分の対数である．よって微分はトレースの対角成分ごとに行うことができ

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \text{Tr} \log(x - A) &= \text{Tr}\{S^{-1}(x - A)S\}^{-1} \\ &= \text{Tr}\{S^{-1}(x - A)^{-1}S\} \\ &= \text{Tr} \frac{1}{x - A} \end{aligned} \quad (3.119)$$

となる。これで (3.113) が示された。(証明終)

この公式を (3.112) に適用すれば

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial E} \log \Delta(E) &= \text{Tr} \frac{1}{E - \hat{H}} - \text{Tr} \frac{1}{E - \hat{H}_0} \\
&= - \left[\text{Tr} \frac{1}{\hat{H} - E} - \text{Tr} \frac{1}{\hat{H}_0 - E} \right] \\
&= - \int d\tau \left(\langle \tau | \frac{1}{\hat{H} - E} | \tau \rangle - \langle \tau | \frac{1}{\hat{H}_0 - E} | \tau \rangle \right) \\
&= - \int d\tau \{ G(\tau, \tau; E) - G_0(\tau, \tau; E) \}
\end{aligned} \tag{3.120}$$

を得る。ただし $G_0(\tau, \tau'; E)$ は

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \omega^2 - E \right) G_0(\tau, \tau'; E) = \delta(\tau - \tau') \tag{3.121}$$

で定義される。この Green 関数の式は調和振動子における Feynman の境界条件に相当し、

$$G_0(\tau, \tau'; E) = \frac{i}{2k} \left[\theta(\tau - \tau') e^{ik(\tau - \tau')} + \theta(\tau' - \tau) e^{ik(\tau' - \tau)} \right] \tag{3.122}$$

である。また、この自由場におけるロンスキアン $W_0[e^{ik\tau}, e^{-ik'\tau}]$ に関して、

$$W_0 = -i(k + k') e^{i(k - k')\tau}, \tag{3.123}$$

$$\frac{\partial W_0}{\partial \tau} = (E - E') e^{i(k - k')\tau} \tag{3.124}$$

も計算できる。このとき (3.120) の評価を考えよう。

Heaviside の階段関数が $\theta(0) = 1/2$ と定義されているとすると、それぞれの Green 関数の表式から

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial E} \log \Delta(E) &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \left(\frac{i f_+(\tau, E) f_-(\tau, E)}{2k F(E)} - \frac{i}{2k} \right) \\
&= - \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{E' \rightarrow E} \frac{i}{2k} \frac{1}{E - E'} \int_{-T}^T d\tau \left(\frac{E - E'}{F(E)} f_+(\tau, E) f_-(\tau, E') - (E - E') e^{i(k - k')\tau} \right) \\
&= - \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{E' \rightarrow E} \frac{i}{2k} \frac{1}{E - E'} \int_{-T}^T d\tau \left(\frac{1}{F(E)} \frac{\partial W}{\partial \tau} - \frac{\partial W_0}{\partial \tau} \right) \\
&= - \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{E' \rightarrow E} \frac{i}{2k} \frac{1}{E - E'} \left[\frac{1}{F(E)} W[f_+(\tau, E), f_-(\tau, E')] - W_0[e^{ik\tau}, e^{-ik'\tau}] \right]_{-T}^T
\end{aligned} \tag{3.125}$$

が得られる。これをさらに計算するため、ロンスキアン W の $\tau \rightarrow \pm\infty$ の表式を求めると

$$W \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} i(k' - k) A_-(E') e^{i(k + k')\tau} - i(k' + k) F(E') e^{i(k - k')\tau}, \tag{3.126}$$

$$W \xrightarrow{\tau \rightarrow -\infty} -i(k' - k) A_+(E) e^{-i(k + k')\tau} - i(k' + k) F(E) e^{i(k - k')\tau} \tag{3.127}$$

となる。したがって、 $\tau \rightarrow \pm\infty$ に合わせて $\tau = \pm T$ を代入して (3.126), (3.127) を用いることができる。また、 W_0 に関してはとくに極限の表式は必要ない。これらを (3.125) に代入して整理すると、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial E} \log \Delta(E) &= - \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{E' \rightarrow E} \frac{i^2}{k + k'} \frac{1}{2k F(E)} e^{i(k + k')T} \{ A_-(E') + A_+(E) \} \\
&\quad - \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{E' \rightarrow E} \frac{i^2(k + k')}{2k F(E)} e^{i(k - k')T} \frac{F(E) - F(E')}{E - E'}
\end{aligned} \tag{3.128}$$

が得られる。このとき、計算の途中で、 $E - E' = k^2 - k'^2$ を用いた。これで E' の極限を実行すると第 2 項は $F(E)$ の微分となり

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial E} \log \Delta(E) &= \lim_{T \rightarrow \infty} e^{2ikT} \frac{A_-(E) + A_+(E)}{4k^2 F(E)} + \frac{F'(E)}{F(E)} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} e^{2iT\sqrt{E-\omega^2}} \frac{A_-(E) + A_+(E)}{4k^2 F(E)} + \frac{\partial}{\partial E} \log F(E)\end{aligned}\quad (3.129)$$

と計算できる。この式の両辺を $E: \infty \rightarrow E$ で積分する。そこで変数を被らないように ϵ に置き換えて

$$\int_{\infty}^E d\epsilon \frac{\partial}{\partial \epsilon} \log \Delta(\epsilon) = \int_{\infty}^E d\epsilon \lim_{T \rightarrow \infty} e^{2iT\sqrt{\epsilon-\omega^2}} \frac{A_-(\epsilon) + A_+(\epsilon)}{4(\epsilon - \omega^2)F(\epsilon)} + \int_{\infty}^E d\epsilon \frac{\partial}{\partial \epsilon} \log F(\epsilon) \quad (3.130)$$

とする。境界条件を考えると、 $E \rightarrow \infty$ で f_{\pm} は自由波になり、反射波はなくなるので

$$F(\infty) = 1, \quad (3.131)$$

$$A_-(\infty) = A_+(\infty) = 0 \quad (3.132)$$

となることがわかる。また、定義式 (3.81) より

$$\Delta(\infty) = \lim_{E \rightarrow \infty} \frac{\prod_n (E_n - E)}{\prod_n (E_n^0 - E)} = \lim_{E \rightarrow \infty} \frac{\prod_n (E_n/E - 1)}{\prod_n (E_n^0/E - 1)} = 1 \quad (3.133)$$

も計算できる。よって

$$\log \Delta(E) = \int_{\infty}^E d\epsilon \lim_{T \rightarrow \infty} e^{2iT\sqrt{\epsilon-\omega^2}} \frac{A_-(\epsilon) + A_+(\epsilon)}{4(\epsilon - \omega^2)F(\epsilon)} + \log F(E) \quad (3.134)$$

となる。右辺第 1 項は、不定積分公式

$$\int dx e^{a\sqrt{x}} = \frac{2e^{a\sqrt{x}}(a\sqrt{x} - 1)}{a^2} \quad (3.135)$$

を用いて部分積分すると

$$\begin{aligned}& \int_{\infty}^E d\epsilon \lim_{T \rightarrow \infty} e^{2iT\sqrt{\epsilon-\omega^2}} \frac{A_-(\epsilon) + A_+(\epsilon)}{4(\epsilon - \omega^2)F(\epsilon)} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \left[\frac{2e^{2iT\sqrt{\epsilon-\omega^2}}(2iT\sqrt{\epsilon - \omega^2} - 1)}{(2iT)^2} \frac{A_-(\epsilon) + A_+(\epsilon)}{4(\epsilon - \omega^2)F(\epsilon)} \right]_{\infty}^E \\ & \quad - \int_{\infty}^E d\epsilon \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2e^{2iT\sqrt{\epsilon-\omega^2}}(2iT\sqrt{\epsilon - \omega^2} - 1)}{(2iT)^2} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left\{ \frac{A_-(\epsilon) + A_+(\epsilon)}{4(\epsilon - \omega^2)F(\epsilon)} \right\} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2e^{2iT\sqrt{E-\omega^2}}(2iT\sqrt{E - \omega^2} - 1)}{(2iT)^2} \frac{A_-(E) + A_+(E)}{4(E - \omega^2)F(E)} = 0\end{aligned}\quad (3.136)$$

となる。以上より

$$\log \Delta(E) = \log F(E) \iff \Delta(E) = F(E) \quad (3.137)$$

が示された。これを後に使う。

波動方程式 (3.84) の解は、(3.22) の解 $q_0(\tau)$ の微分で表される。これを見るため、

$$q_0(\tau) = \frac{1}{g} x_0(\tau) = \frac{a}{g} \tanh \frac{\omega\tau}{2} \quad (3.138)$$

と書くと、その $\tau \rightarrow \infty$ の漸近形は

$$\begin{aligned} \frac{a}{g} \tanh \frac{\omega\tau}{2} &= \frac{a}{g} \frac{e^{\omega\tau/2} - e^{-\omega\tau/2}}{e^{\omega\tau/2} + e^{-\omega\tau/2}} = \frac{a}{g} \frac{1 - e^{-\omega\tau}}{1 + e^{-\omega\tau}} \\ &\xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} \frac{a}{g} - \frac{2a}{g} e^{-\omega\tau} \end{aligned} \quad (3.139)$$

となる。よってその微分は

$$\dot{q}_0(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} \frac{2a\omega}{g} e^{-\omega\tau} \quad (3.140)$$

となる。一方、 $f_+(\tau, 0) \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} e^{-\omega\tau}$ なので

$$f_+(\tau, 0) = \frac{g}{2a\omega} \dot{q}_0(\tau) \quad (3.141)$$

と選ぶことができる。 $f_-(\tau, 0)$ も同様に

$$q_0(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow -\infty} \frac{2a}{g} e^{\omega\tau} - \frac{a}{g}, \quad (3.142)$$

$$\dot{q}_0(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow -\infty} \frac{2a\omega}{g} e^{\omega\tau}, \quad (3.143)$$

$$f_-(\tau, 0) \xrightarrow{\tau \rightarrow -\infty} e^{\omega\tau} \quad (3.144)$$

となることがわかる。なので、結局

$$f_-(\tau, 0) = \frac{g}{2a\omega} \dot{q}_0(\tau) \quad (3.145)$$

ととれば良い。また、 $E = 0$ で波はポテンシャルを透過できないので、

$$A_{\pm}(0) = 1 \quad (3.146)$$

となるはずである。これで、 $f_{\pm}(\tau, 0)$ はその反対方向の漸近形をも満たしていることが確認できる。

次に、ロンスキアン W の満たす方程式 (3.90) を E で微分し、 $E = E' = 0$ とおけば、

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial E} \frac{\partial W}{\partial \tau} \right|_{E=E'=0} &= \left. \frac{\partial^2}{\partial E \partial \tau} W[f_+(\tau, E), f_-(\tau, E')] \right|_{E=E'=0} \\ &= f_+(\tau, 0) f_-(\tau, 0) = \frac{g^2}{4a^2\omega^2} \dot{q}_0^2(\tau) \end{aligned} \quad (3.147)$$

が得られる。さらに、この式を $\tau \in [-\infty, \infty]$ で積分すると

$$\int d\tau \left. \frac{\partial^2}{\partial E \partial \tau} W[f_+(\tau, E), f_-(\tau, E')] \right|_{E=E'=0} = \frac{g^2}{4a^2\omega^2} \int d\tau \dot{q}_0^2(\tau) \quad (3.148)$$

となる。両辺を順番に計算していこう。まず左辺は、(3.125) を整理したのと同様に

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial E} \left[i(k' - k) e^{i(k'+k)T} \{A_-(E') + A_+(E)\} \right. \\ &\quad \left. - i(k' + k) \{e^{i(k'-k)T} F(E') - e^{-i(k-k')T} F(E)\} \right] \Big|_{E=E'=0} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial E} \left[i(i\omega - k) e^{i(k+i\omega)T} \{1 + A_+(E)\} + i(i\omega + k) e^{-i(k-i\omega)T} F(E) \right] \Big|_{E=0} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \left[\frac{\partial k}{\partial E} (-i) e^{i(k+i\omega)T} \{1 + A_+(E)\} + i(i\omega - k) \frac{\partial}{\partial E} e^{i(k+i\omega)T} \{1 + A_+(E)\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial E} \{i(i\omega + k) e^{-i(k-i\omega)T}\} F(E) + i(i\omega + k) e^{-i(k-i\omega)T} F'(E) \right] \Big|_{E=0} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \left[\frac{-i}{2i\omega} e^{-2\omega T} \cdot 2 + i \cdot 2i\omega F'(0) \right] = -2\omega F'(0) \end{aligned} \quad (3.149)$$

と計算される．次に右辺は，単に (3.62) を負の時間方向に並進させただけのものであるから，結局古典作用 S_0 である．したがって

$$-2\omega F'(0) = \frac{g^2}{4a^2\omega^2} S_0 \iff F'(0) = \Delta'(0) = -\frac{g^2}{8a^2\omega^3} S_0 \quad (3.150)$$

を得る．これより，欲しかった行列式の比が

$$\left(\frac{\det \hat{H}_0}{\det' \hat{H}} \right)^{1/2} = \frac{2a\omega}{g} \sqrt{\frac{2\omega}{S_0}} \quad (3.151)$$

と求まる．以上から，エネルギーのずれ (3.79) は

$$\epsilon = -\frac{2a\omega}{g} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\pi}} e^{-S_0/\hbar} \quad (3.152)$$

と与えられる．

第4章 演算子形式による二連井戸型ポテンシャルの評価

この章では、前章で導いた結果を、演算子形式、すなわち Schrödinger 方程式を用いて導出することを目指す。そのことによって、Feynman による経路積分と、Schrödinger による演算子形式とが等価であることを具体的に示す。問題設定や考えるポテンシャルは、もちろん前章と同様である。

4.1 WKB 法

前章の経路積分は WKB 法で評価した。したがって、演算子形式でも WKB 法を用いる。そこでここでは、1次元の演算子形式の WKB 法についてまとめよう。

WKB 法は、量子力学と古典力学との結びつきがよくわかる近似である。そのためには、まず波動関数の形を

$$\psi(x, t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x, t) \right] \quad (4.1)$$

とおこう。ここで S は作用の次元を持つ。これが Schrödinger 方程式を満たすためには

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \quad (4.2)$$

とならなければならない。これは $\hbar \rightarrow 0$ の極限で、Hamilton-Jacobi 方程式

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) = H \left(x, \frac{\partial S}{\partial x}, t \right) \quad (4.3)$$

になっており、量子力学から古典力学への移行を表す。

次に、波動関数 (4.1) が定常状態の Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (4.4)$$

を満たす場合を考えよう。これより S の満たすべき方程式

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 - i\hbar \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - 2m[E - V(x)] = 0 \quad (4.5)$$

が導かれる。ここで \hbar を小さいとして、 S を \hbar/i の幂で展開しよう。

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} S_n \left(\frac{\hbar}{i} \right)^n = S_0 + S_1 \left(\frac{\hbar}{i} \right) + S_2 \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 + \cdots \quad (4.6)$$

WKB 法とは、この展開で $O(\hbar^2)$ の項を無視する近似である。それでこの展開式を (4.5) に代入すると

$$\left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \right)^2 - 2m[E - V(x)] + \left(\frac{\hbar}{i} \right) \left[2 \left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial S_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} \right] + O(\hbar^2) = 0 \quad (4.7)$$

となる。 \hbar の各幂を等しくおくことで、 S_0, S_1, \dots を順次決定していくことができる。今は \hbar の 1 次までとるので、上式から S_0, S_1 の満たす方程式は

$$\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2 = 2m[E - V(x)] = [p(x)]^2, \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial x} = -\frac{1}{2} \frac{S_0''}{S_0'} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \log \left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \right) \quad (4.9)$$

となることがわかる。よって、これを解いて

$$S_0 = \pm \int dx p(x), \quad (4.10)$$

$$S_1 = -\frac{1}{2} \log p(x) + C \quad (4.11)$$

を得る。ただし C は積分定数であり、 $E > V(x)$ のときは $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$ として定義する。これにより、波動関数 (4.1) の一般形は次のように近似できる。

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int dx p(x) \right] + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int dx p(x) \right]. \quad (4.12)$$

また、 $E < V(x)$ のときは、 $p(x) = i\rho(x) = i\sqrt{2m[V(x) - E]}$ として

$$\psi(x) = \frac{D_1}{\sqrt{\rho(x)}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int dx \rho(x) \right] + \frac{D_2}{\sqrt{\rho(x)}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int dx \rho(x) \right] \quad (4.13)$$

である。これらの波動関数に含まれている積分は、問題によって考える適当な領域で行うものとする。これら WKB 法の波動関数を使って、次節で前章のポテンシャルを考えていく。

4.2 WKB 解の構成

前章で考えたポテンシャルをもう一度書くと、

$$V(q) = \frac{\omega^2}{8a^2g^2}(g^2q^2 - a^2)^2 \quad (4.14)$$

である。また、このポテンシャルに関する Schrödinger 方程式は、粒子の質量を 1 とおいて

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dq^2} \psi(q) + V(q)\psi(q) = E\psi(q) \quad (4.15)$$

となる。以前見たように、このポテンシャルは $q \sim \pm a/g$ 近傍で調和振動子型ポテンシャル

$$V(q) = \frac{1}{2} \omega^2 \left(q \mp \frac{a}{g} \right)^2 \quad (4.16)$$

になることに注意しよう。(4.14) は偶関数ポテンシャルであるから、井戸の右側だけを考えれば十分である。したがって今後は $q \geq 0$ であるとする。さらに、 $q = a/g$ 近傍の Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dq^2} \psi(q) + \frac{1}{2} \omega^2 \left(q - \frac{a}{g} \right)^2 \psi(q) = E\psi(q) \quad (4.17)$$

となっている。

今、前節の議論を元にすれば、 $0 \leq q < a/g$ の範囲における (4.15) の WKB 解は次のように書ける。

$$\psi(q) = \frac{1}{\sqrt{\rho(q)}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^q dq' \rho(q') \right] + \frac{1}{\sqrt{\rho(q)}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^q dq' \rho(q') \right]. \quad (4.18)$$

ただし、

$$\rho(q) = \sqrt{2[V(q) - E]} \quad (4.19)$$

である。前章と同様に基底エネルギーを考えると、 g が十分小さくそのエネルギーは調和振動子の基底エネルギー $\hbar\omega/2$ から大きくずれないとすると、 $E \sim O(\hbar)$ であり、 \hbar も十分小さいので、 $\sqrt{\rho(q)}$ の中では E を無視し、指数の中では E の 1 次まで保持する。すると

$$\psi(q) \cong \frac{1}{(2V)^{1/4}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^q dq' \left(\sqrt{2V} - \frac{E}{\sqrt{2V}} \right) \right] + \frac{1}{(2V)^{1/4}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^q dq' \left(\sqrt{2V} - \frac{E}{\sqrt{2V}} \right) \right] \quad (4.20)$$

となる。前章でも見たように、この系における古典的な全エネルギーはゼロなので、古典解¹ に対して

$$E = \frac{1}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 + V(q) = -\frac{1}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V(q) = 0 \quad (4.21)$$

がわかる。ここでも、虚時間 $\tau = it$ を用いた。よって、古典作用は

$$S_0 = \int d\tau \dot{q}^2(\tau) = \int_{-a/g}^{a/g} dq \dot{q} = \int_{-a/g}^{a/g} dq \sqrt{2V} = 2 \int_0^{a/g} dq \sqrt{2V} \quad (4.22)$$

と書ける。これ² を使えば、(4.20) の指数の中の第 1 項について

$$\begin{aligned} \int_0^q dq' \sqrt{2V} &= \int_0^{a/g} dq' \sqrt{2V} + \int_{a/g}^q dq' \sqrt{2V} \\ &= \frac{1}{2} S_0 + \int_{a/g}^q dq' \omega \left| \frac{a}{g} - q' \right| \\ &= \frac{1}{2} S_0 - \frac{1}{2} \omega \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 \end{aligned} \quad (4.23)$$

を得る。ここで、後半の積分は $q \lesssim a/g$ としてポテンシャルを (4.16) で近似した。(4.20) の指数の中の第 2 項については

$$\begin{aligned} \int_0^q dq' \frac{1}{\sqrt{2V}} &= \frac{2ag}{\omega} \int_0^{q < a/g} \frac{dq'}{|(a/g - q')(a/g + q')|} \\ &= \frac{1}{\omega} \int_0^q dq' \left(\frac{1}{a/g - q'} + \frac{1}{a/g + q'} \right) \\ &= -\frac{1}{\omega} \log \frac{a/g - q}{a/g + q} \end{aligned} \quad (4.24)$$

となる。さらに対数の中の分母を $q = a/g$ のまわりで展開すると

$$\begin{aligned} \int_0^q dq' \frac{1}{\sqrt{2V}} &= -\frac{1}{\omega} \log \left[\frac{g}{2a} \left(\frac{a}{g} - q \right) + O \left\{ \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 \right\} \right] \\ &\cong -\frac{1}{\omega} \log \left[\frac{g}{2a} \left(\frac{a}{g} - q \right) \right] \end{aligned} \quad (4.25)$$

¹この解の範囲は、前章で見たように $-a/g < q < a/g$ である。

² $\dot{q} = dq/d\tau$ と定義。

となる。以上より、 $q \lesssim a/g$ の WKB 解は

$$\begin{aligned} \psi(q) = & \frac{1}{\sqrt{\omega(a/g - q)}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{1}{2} S_0 - \frac{1}{2} \omega \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 + \frac{E}{\omega} \log \left(\frac{g}{2a} \left(\frac{a}{g} - q \right) \right) \right\} \right] \\ & - \frac{1}{\sqrt{\omega(a/g - q)}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{1}{2} S_0 - \frac{1}{2} \omega \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 + \frac{E}{\omega} \log \left(\frac{g}{2a} \left(\frac{a}{g} - q \right) \right) \right\} \right] \end{aligned} \quad (4.26)$$

と求まる。エネルギーのずれを前章と同様に ϵ と書けば

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} + \epsilon \quad (4.27)$$

である。これを使って (4.26) は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} \psi(q) = & \frac{1}{\sqrt{\omega(a/g - q)}} e^{S_0/2\hbar} \exp \left[-\frac{\omega}{2\hbar} \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 + \left(\frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right) \log \left\{ \frac{g}{2a} \left(\frac{a}{g} - q \right) \right\} \right] \\ & + \frac{1}{\sqrt{\omega(a/g - q)}} e^{-S_0/2\hbar} \exp \left[\frac{\omega}{2\hbar} \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 - \left(\frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right) \log \left\{ \frac{g}{2a} \left(\frac{a}{g} - q \right) \right\} \right] \\ \cong & \left\{ \sqrt{\frac{g}{2a\omega}} e^{S_0/2\hbar} \exp \left[-\frac{\omega}{2\hbar} \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 \right] + \frac{1}{a/g - q} \sqrt{\frac{2a}{g\omega}} e^{-S_0/2\hbar} \exp \left[\frac{\omega}{2\hbar} \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 \right] \right\} \{1 + O(\epsilon)\}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

4.3 逐次近似による解の構成

次に、 ϵ と \hbar が小さいということから逐次近似を使って解を構成してみよう。 $\epsilon = 0$ で、(4.17) の解は

$$\psi_1(q) = \exp \left[-\frac{\omega}{2\hbar} \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 \right] \quad (4.29)$$

である。もちろん、(4.17) は 2 階の微分方程式なので、独立な解がもう 1 つ存在し、それは初等関数では書けないが、 $|a/g - q| \gg \sqrt{\hbar/\omega}$ の近似では

$$\phi_1(q) \cong \frac{1}{a/g - q} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \exp \left[\frac{\omega}{2\hbar} \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 \right] \quad (4.30)$$

と書ける。

証明: 基底エネルギー $E = \hbar\omega/2$ に対する方程式 (4.17) で、

$$\xi = \sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} \left(q - \frac{a}{g} \right) \quad (4.31)$$

とおくと、 $|\xi| \gg 1$ であり、方程式は

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (1 - \xi^2)\psi = 0 \quad (4.32)$$

と変形できる。この式に

$$\phi_1(q) \cong \frac{1}{a/g - q} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \exp \left[\frac{\omega}{2\hbar} \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 \right] = -\frac{1}{\xi} e^{\xi^2/2} \quad (4.33)$$

を代入すると

$$\begin{aligned}\frac{d^2\phi_1}{d\xi^2} + (1 - \xi^2)\phi_1 &= \frac{e^{\xi^2/2}}{\xi} \left(-\frac{2}{\xi^2} + 1 - \xi^2 - 1 + \xi^2 \right) \\ &= \frac{e^{\xi^2/2}}{\xi} \times O(\xi^{-2}) \cong 0\end{aligned}\quad (4.34)$$

となる．よって， $\phi_1(q)$ は $|a/g - q| \gg \sqrt{\hbar/\omega}$ で近似的に方程式 (4.17) を満たす．(証明終)
さて，解 $\{\psi_1, \phi_1\}$ に対するロンスキアン W は

$$\begin{aligned}W &= \psi_1 \frac{d\phi_1}{dq} - \phi_1 \frac{d\psi_1}{dq} \\ &= -2\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} + \frac{1}{(a/g - q)^2} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \\ &= \sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} \left(-2 + \frac{\hbar}{\omega} \frac{1}{(a/g - q)^2} \right) \cong -2\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}\end{aligned}\quad (4.35)$$

と計算される．したがって，方程式 (4.15) の解も $q = a/g$ 近傍で ψ_1, ϕ_1 のようになると考えられるので，(4.15) を変形した式

$$\left(-\frac{d^2}{dq^2} + \frac{2V(q)}{\hbar^2} - \frac{\omega}{\hbar} \right) \psi(q) = \frac{2\epsilon}{\hbar^2} \psi(q) \quad (4.36)$$

の左辺に対する Green 関数は近似的に

$$\begin{aligned}G(q, q') &= \frac{1}{W} \{ \theta(q - q') \psi_1(q) \phi_1(q') + \theta(q' - q) \psi_1(q') \phi_1(q) \} \\ &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \{ \theta(q - q') \psi_1(q) \phi_1(q') + \theta(q' - q) \psi_1(q') \phi_1(q) \}\end{aligned}\quad (4.37)$$

と定義できる．これらは 3.5 節の議論を元に行っている．すると，方程式 (4.15) の解は逐次近似で次のように書ける．

$$\psi(q) = \psi_1(q) + \int dq' G(q, q') \frac{2\epsilon}{\hbar^2} \psi(q'). \quad (4.38)$$

前節で考えた WKB 解と整合するためには $q < a/g$ であって，すると $a/g - q \gg \sqrt{\hbar/\omega}$ ．つまり q は負の無限大の方向に十分に小さくなくてはならず，(4.34) の積分全体にわたって $q' > q$ とできる．ゆえに逐次近似の 1 次で

$$\begin{aligned}\psi(q) &= \psi_1(q) + \int_{-\infty}^{\infty} dq' \left(-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \psi_1(q') \phi_1(q) \right) \frac{2\epsilon}{\hbar^2} \psi_1(q') \\ &= \psi_1(q) - \frac{\epsilon}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \phi_1(q) \int_{-\infty}^{\infty} dq' \psi_1^2(q') \\ &= \psi_1(q) - \frac{\epsilon \sqrt{\pi}}{\hbar \omega} \phi_1(q) \\ &= \exp \left[-\frac{\omega}{2\hbar} \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 \right] - \frac{\epsilon}{\hbar \omega} \sqrt{\frac{\pi \hbar}{\omega}} \frac{1}{a/g - q} \exp \left[\frac{\omega}{2\hbar} \left(\frac{a}{g} - q \right)^2 \right]\end{aligned}\quad (4.39)$$

となる．これで逐次近似で解を構成することができた．

(4.28) と (4.39) は両方基底状態を表す解なので，比例しなければならない．第 1 項を比較すればその比例係数がわかり，

$$\sqrt{\frac{g}{2a\omega}} e^{S_0/2\hbar} \quad (4.40)$$

となる．したがって第2項を比較することで ϵ が求まる．

$$\begin{aligned}
 & -\sqrt{\frac{g}{2a\omega}} e^{S_0/2\hbar} \frac{\epsilon}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{\omega}} = \sqrt{\frac{2a}{g\omega}} e^{-S_0/2\hbar} \\
 \Longleftrightarrow \quad & \epsilon = -\frac{2a\omega}{g} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\pi}} e^{-S_0/\hbar}.
 \end{aligned} \tag{4.41}$$

これは経路積分法で求めた結果 (3.152) と一致する．

第5章 まとめ

今回の計算により，具体的な例ではあるが，経路積分法と演算子法が改めて等価であることが示された．経路積分は冒頭でも述べた通り，数学的な定義がまだ不明確ではあるが，しかし演算子法との一致は，その妥当性を示しているとも言える．そのため，物理で扱う分には，当面の間，数学的な定義の問題は棚上げしても差し支えないだろう．経路積分法は，演算子を伴わない面や，古典系との対応が見やすいなど，演算子法に比べて優れている面もたくさんあり，多くの研究分野で盛んに用いられている．したがって，これからの研究でも重要な研究分野であることは間違いないと思われる．ここでの計算は研究で扱われるものに比べて非常に基本的なものではあるが，経路積分の練習問題としては十分なものであり，有意義な研究が行えたと考える．

付 録 A 波動方程式 (3.84) の厳密解を用いた方法

波動方程式 (3.84) を厳密に解いて, (3.86) で定義されている $F_{\pm}(E) = F(E)$ を直接求めることができる. この方法でも, $F'(0)$ を計算でき, エネルギーのずれ (3.152) を導出できる. ここでは, すでに $\Delta(E) = F(E)$ は示されている前提で議論を進める.

解くべき方程式をもう一度書くと,

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \frac{\omega^2}{2} \left(3 \tanh^2 \frac{\omega \tau}{2} - 1 \right) \right] \psi(\tau) = E \psi(\tau) \quad (\text{A.1})$$

である. 両辺を ω^2 で割ると,

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial (\omega \tau)^2} + \frac{1}{2} \left(3 \tanh^2 \frac{\omega \tau}{2} - 1 \right) \right] \psi = \frac{E}{\omega^2} \psi \equiv \mu \psi \quad (\text{A.2})$$

となる. そこで, $\tanh^2(\omega \tau/2)$ を指数関数で書き, $\omega \tau = \theta$ とおくと

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{4e^{\theta} - e^{2\theta} - 1}{(e^{\theta} + 1)^2} \right] \psi = \mu \psi \quad (\text{A.3})$$

と変形できる. 次に, 変数変換 $e^{\theta} = x$ を施せば,

$$\left[x^2 \frac{d^2}{dx^2} + x \frac{d}{dx} + \frac{4x - x^2 - 1}{(x + 1)^2} + \mu \right] \psi = 0 \quad (\text{A.4})$$

が得られる.

ここで, ゼロ固有値の解 (3.56) を思い出そう. この解を, 余計な因子は無視して具体的に書けば

$$\psi_0(\tau) \sim \frac{1}{\cosh^2(\omega \tau/2)} \sim \frac{e^{\omega \tau}}{(e^{\omega \tau} + 1)^2} = \frac{x}{(x + 1)^2} \quad (\text{A.5})$$

である. それで ψ を,

$$\psi = \frac{x}{(x + 1)^2} \phi \quad (\text{A.6})$$

と分離し, 方程式 (A.4) に代入する. すると,

$$x^2 \frac{d^2 \phi}{dx^2} - \frac{x(x - 3)}{x + 1} \frac{d\phi}{dx} + \mu \phi = 0 \quad (\text{A.7})$$

が得られる. これは次のように級数展開することで解ける.

$$\phi = x^{\gamma} \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+\gamma}. \quad (\text{A.8})$$

(A.7) に $(x + 1)$ を掛けた式にこの展開を代入して整理すると

$$(\gamma^2 + 2\gamma + \mu) + \sum_{n=0}^{\infty} [\{(n + \gamma + 1)(n + \gamma + 3) + \mu\} a_{n+1} + \{(n + \gamma)(n + \gamma - 2) + \mu\} a_n] x^{n+\gamma+1} = 0 \quad (\text{A.9})$$

となる。上式は項別にゼロにならないといけないので、

$$\gamma^2 + 2\gamma + \mu = 0, \quad (\text{A.10})$$

$$a_{n+1} = -\frac{(n+\gamma)(n+\gamma-2)+\mu}{(n+\gamma+1)(n+\gamma+3)+\mu}a_n \quad (\text{A.11})$$

という式が得られる。

まず (A.10) を γ について解くと、

$$\gamma = -1 \pm \sqrt{1-\mu} \equiv \gamma_{\pm} \quad (\text{A.12})$$

となる。したがって、 γ の根号の前の符号の違いにより、独立な 2 種類の解が得られることになる。それぞれの解について、 $a_n \rightarrow a_n^{\pm}$ において展開係数を区別することにする。この記法で、(A.11) の漸化式を順に解いていくと

$$a_1^{\pm} = \frac{4(\sqrt{1-\mu} \mp 1)}{2\sqrt{1-\mu} \pm 1} a_0^{\pm}, \quad (\text{A.13})$$

$$a_2^{\pm} = \frac{(2\sqrt{1-\mu} \mp 1)(\sqrt{1-\mu} \mp 1)}{(2\sqrt{1-\mu} \pm 1)(\sqrt{1-\mu} \pm 1)} a_0^{\pm}, \quad (\text{A.14})$$

$$a_n^{\pm} = 0, \quad n \geq 3 \quad (\text{A.15})$$

となることがわかる。これにより ϕ は γ の部分を除けば x の 2 次の項までしか存在しない。この結果をまとめると、 a_0^{\pm} を任意定数 c_1, c_2 に置き換えて、 ϕ は

$$\begin{aligned} \phi(x) = & c_1 \left[\frac{(2\sqrt{1-\mu}+1)(\sqrt{1-\mu}+1)}{(2\sqrt{1-\mu}-1)(\sqrt{1-\mu}-1)} x^2 + \frac{4(\sqrt{1-\mu}+1)}{2\sqrt{1-\mu}-1} x + 1 \right] \frac{x^{-\sqrt{1-\mu}}}{x} \\ & + c_2 \left[\frac{(2\sqrt{1-\mu}-1)(\sqrt{1-\mu}-1)}{(2\sqrt{1-\mu}+1)(\sqrt{1-\mu}+1)} x^2 + \frac{4(\sqrt{1-\mu}-1)}{2\sqrt{1-\mu}+1} x + 1 \right] \frac{x^{\sqrt{1-\mu}}}{x} \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

となる。

以上より ψ は、変数を τ に戻して

$$\begin{aligned} \psi(\tau) = & c_1 \left[\frac{(2\sqrt{\omega^2-E}+\omega)(\sqrt{\omega^2-E}+\omega)}{(2\sqrt{\omega^2-E}-\omega)(\sqrt{\omega^2-E}-\omega)} e^{2\omega\tau} + \frac{4(\sqrt{\omega^2-E}+\omega)}{2\sqrt{\omega^2-E}-\omega} e^{\omega\tau} + 1 \right] \frac{e^{-\sqrt{\omega^2-E}\tau}}{(e^{\omega\tau}+1)^2} \\ & + c_2 \left[\frac{(2\sqrt{\omega^2-E}-\omega)(\sqrt{\omega^2-E}-\omega)}{(2\sqrt{\omega^2-E}+\omega)(\sqrt{\omega^2-E}+\omega)} e^{2\omega\tau} + \frac{4(\sqrt{\omega^2-E}-\omega)}{2\sqrt{\omega^2-E}+\omega} e^{\omega\tau} + 1 \right] \frac{e^{\sqrt{\omega^2-E}\tau}}{(e^{\omega\tau}+1)^2} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

$$\equiv c_1 f_1 + c_2 f_2 \quad (\text{A.18})$$

と求まる。最後に、境界条件を考慮して F を導出していく。

境界条件 (3.85) を、 $\omega^2 > E$ の場合書き換える。まず k の定義から

$$k = i\sqrt{\omega^2 - E} \quad (\text{A.19})$$

であり、それゆえ

$$ik\tau = -\sqrt{\omega^2 - E}\tau \quad (\text{A.20})$$

である。よって、(3.85) は

$$\lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} \left[f_{\pm}(\tau, E) e^{\pm\sqrt{\omega^2-E}\tau} \right] = 1 \quad (\text{A.21})$$

と書き換えることができる．同様に (3.86) は

$$\lim_{\tau \rightarrow \mp \infty} f_{\pm}(\tau, E) = e^{\pm \sqrt{\omega^2 - E} \tau} A_{\pm}(E) + e^{\mp \sqrt{\omega^2 - E} \tau} F_{\pm}(E) \quad (\text{A.22})$$

と書き換えられる．例として f_+ を考えよう．(A.18) と同様に，

$$f_+ = c_1 f_1 + c_2 f_2 \quad (\text{A.23})$$

とおくと，条件 (A.21) を満たすためには

$$c_1 = \frac{(2\sqrt{\omega^2 - E} - \omega)(\sqrt{\omega^2 - E} - \omega)}{(2\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)(\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)}, \quad c_2 = 0 \quad (\text{A.24})$$

でなければならないことがわかる．この時点で f_+ は

$$f_+(\tau, E) = \left[e^{2\omega\tau} + \frac{4(\sqrt{\omega^2 - E} - \omega)}{2\sqrt{\omega^2 - E} + \omega} e^{\omega\tau} + \frac{(2\sqrt{\omega^2 - E} - \omega)(\sqrt{\omega^2 - E} - \omega)}{(2\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)(\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)} \right] \frac{e^{-\sqrt{\omega^2 - E}\tau}}{(e^{\omega\tau} + 1)^2} \quad (\text{A.25})$$

となっている．それで f_+ の $\tau \rightarrow -\infty$ 極限を考えると

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} f_+(\tau, E) = \frac{(2\sqrt{\omega^2 - E} - \omega)(\sqrt{\omega^2 - E} - \omega)}{(2\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)(\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)} e^{-\sqrt{\omega^2 - E}\tau} \quad (\text{A.26})$$

となる．よって，条件 (A.22) と比較すれば

$$F_+(E) = \frac{(2\sqrt{\omega^2 - E} - \omega)(\sqrt{\omega^2 - E} - \omega)}{(2\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)(\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)} \quad (\text{A.27})$$

を得る． f_- でも同様のことを行えば，上式と等しい F_- を得る．以上から

$$F(E) = \frac{(2\sqrt{\omega^2 - E} - \omega)(\sqrt{\omega^2 - E} - \omega)}{(2\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)(\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)} \quad (\text{A.28})$$

が言える．

この F を E で微分して $E = 0$ とおくと

$$F'(E = 0) = - \frac{3\omega(\omega^2 - E)}{(2\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)^2(\sqrt{\omega^2 - E} + \omega)^2\sqrt{\omega^2 - E}} \Big|_{E=0} = - \frac{1}{12\omega^2} \quad (\text{A.29})$$

となる．これを (3.150) と比較するため，古典作用 S_0 の値を評価する．(4.22) の V に (4.14) のポテンシャルの形を入れて計算すれば

$$\begin{aligned} S_0 &= 2 \int_0^{a/g} dq \sqrt{2V} \\ &= 2 \int_0^{a/g} dq \frac{\omega}{2ag} |g^2 q^2 - a^2| \\ &= - \frac{\omega}{ag} \int_0^{a/g} dq (g^2 q^2 - a^2) = \frac{2a^2\omega}{3g^2} \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

となることがわかる．これを用いて，(A.29) は

$$F'(0) = - \frac{1}{12\omega^2} \cdot \frac{3g^2}{2a^2\omega} \cdot S_0 = - \frac{g^2}{8a^2\omega^3} S_0 \quad (\text{A.31})$$

となる．これは (3.150) と一致している．ゆえに，直接 (3.84) を解くことでもエネルギーのずれ (3.152) を求められることが示された．

謝辞

このたびの卒業研究で，初めての論文執筆となり，埼玉大学素粒子研究室の方々には大変お世話になりました．とくに，指導教員である谷井義彰教授には，幾度もの質問対応や添削などの多大な助力を賜り，厚く御礼申し上げます．また，ともに経路積分について学んだ久保宗弘くん，ともに議論をいただいた斉藤悠人先輩，関口和孝先輩にも，この場を借りて感謝を述べさせていただきます．本当にありがとうございました．

参考文献

- [1] S. Coleman, *Aspects of Symmetry* (Cambridge Univ. Press, 1993).
- [2] R. P. Feynman, A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (Mcgraw-Hill, 1965).
- [3] 崎田文二, 吉川圭二, 経路積分による多自由度の量子力学 (岩波書店, 1993).
- [4] 猪木慶治, 川合光, 量子力学 II (講談社, 2001).