経路積分による量子力学と物性論における幾何学的位相

(総合科目「物理と数学３」)

東京大学大学院工学系研究科　物理工学　初貝 安弘[1]

目 次

[1]hatsugai@pothos.t.u-tokyo.ac.jp, tel. 03-5841-6809

第 I 部
古典解析力学

解析力学による古典力学を復習しよう。

1 ラグランジアンとハミルトニアン

1.1 最小作用の原理

自由度 s の系は一般化座標 $q^i,\ i=1,\cdots,s$ (まとめて $q=\{q^i\}$ と書く。) により指定されるが、初期時刻 t_I での位置を q_I, 最終時刻 t_F での位置を q_F と定めたときの運動 $q(t)$ は次の作用と呼ばれる汎関数 $S[q(t)]$ が最小となるように定まる。これを最小作用の原理と呼ぶ。

最小作用の原理

$$\delta S[q_c(t)] = 0$$

ここで

$$\begin{aligned} S[q(t)] &= \int_{t_I}^{t_F} dt\, L(q,\dot q,t) \\ q(t_I) &= q_I \\ q(t_F) &= q_F \end{aligned}$$

この $L(q,\dot q,t)$ はラグランジュ関数と呼ばれる。変分法の一般論からこれは次の s 個のオイラーラグランジュ方程式と同値となる。[2]

---

[2]ラグランジアンを $L(q,u,t)$ と書いたとき q^i と u^i は独立に変化できず $u^i(t)=\dot q^i(t)$ の関係があるのは当然である。そこでこれを拘束条件とみなしてラグランジュの未定変数 $\lambda_i(t)$ を導入することにより $q^i(t), u^i(t)$ を独立な t の関数とみなした変分原理は次のようになる。

$$\begin{aligned} 0 &= \delta \int_{t_I}^{t_F} dt \left\{ L(q,u,t) - \lambda_i (u^i - \dot q^i) \right\} \\ &= \int_{t_I}^{t_F} dt \left\{ \frac{\partial L}{\partial q^i}\delta q^i + \frac{\partial L}{\partial u^i}\delta u^i - \lambda_i \delta u^i + \lambda_i \delta \dot q^i \right\} \\ &= \int_{t_I}^{t_F} dt \left\{ \left(\frac{\partial L}{\partial q^i} - \dot\lambda_i \right)\delta q^i + \left(\frac{\partial L}{\partial u^i} - \lambda_i \right)\delta u^i + \lambda_i(t)\delta q^i(t) \Big|_{t_I}^{t_F} \right. \end{aligned}$$

これより

$$\begin{aligned} \lambda_i &= \frac{\partial L}{\partial u^i} \\ \dot\lambda_i &= \frac{\partial L}{\partial q^i} \\ u^i &= \dot q^i \end{aligned}$$

これは次のようにオイラーラグランジュ方程式に等しい。

$$\dot\lambda_i = \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q^i} = \frac{\partial L}{\partial q^i}$$

$$\frac{\delta L}{\delta q^i} = \frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = 0,\ i = 1, \cdots, s$$

これが運動方程式となり、その解が古典系のたどる世界線 $q = q_c(t)$ をあたえる。
ここで $\dot{q}$ は含まない任意の関数 $W = W(q(t), t)$ に対して

$$\begin{aligned} L' =& L + \dot{W} \\ \dot{W} =& \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial q_j}\dot{q}_j \end{aligned}$$

としたとき、次の事実に注意すれば

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q^i}\dot{W} - \frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{q}^i}\dot{W} =& \frac{\partial^2 W}{\partial q^i \partial t} + \frac{\partial^2 W}{\partial q^i \partial q^j}\dot{q}^j - \frac{d}{dt}\frac{\partial W}{\partial q^i} \\ =& \frac{\partial^2 W}{\partial q^i \partial t} + \frac{\partial^2 W}{\partial q^i \partial q^j}\dot{q}^j - \frac{\partial^2 W}{\partial t \partial q^j} - \frac{\partial^2 W}{\partial q^i \partial q^j}\dot{q}^j = 0 \end{aligned}$$

対応する運動方程式は不変となる。

$$\frac{\delta L'}{\delta q^i} = 0$$

このとき対応する作用は

$$S' = S + \int_{t_I}^{t_F} dt\, \frac{dW}{dt} = S + W(q_F, t_F) - W(q_I, t_I)$$

となり $q(t)$ の関数型に変化分が依存しないことからも運動方程式の不変性は見て取れる。

1.2 ハミルトニアンと正準方程式

前節での運動方程式を書き直すことを考えよう。まず q, $\dot{q}$, t の関数としてのラグランジアン $L(q, \dot{q}, t)$ に対して[3]

$$dL = \frac{\partial L}{\partial q}dq + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}d\dot{q} + \frac{\partial L}{\partial t}dt$$

[3] $L(q, u, t)$ に対して

$$dL = \frac{\partial L}{\partial q}dq + \frac{\partial L}{\partial u}du + \frac{\partial L}{\partial t}dt$$

の意味である。

ここでいわゆるルジャンドル変換で独立変数を

$$
\begin{aligned}
(q, \dot{q}, t) \to& (q, p, t) \\
p =& \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}
\end{aligned}
$$

と変換して

$$
H = p\dot{q} - L
$$

なるハミルトニアンを定義すれば

$$
\begin{aligned}
dH =& dp\dot{q} + pd\dot{q} - dL \\
=& dp\dot{q} + pd\dot{q} - \frac{\partial L}{\partial q}dq - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}d\dot{q} - \frac{\partial L}{\partial t}dt \\
=& \dot{q}dp - \frac{\partial L}{\partial q}dq - \frac{\partial L}{\partial t}dt
\end{aligned}
$$

また $H(p, q, t)$ に注意して

$$
dH = \frac{\partial H}{\partial q}dq + \frac{\partial H}{\partial p}dp + \frac{\partial H}{\partial t}dt
$$

よって

$$
\begin{aligned}
\dot{q} =& \frac{\partial H}{\partial p} \\
\frac{\partial L}{\partial q} =& -\frac{\partial H}{\partial q} \\
\frac{\partial L}{\partial t} =& -\frac{\partial H}{\partial t}
\end{aligned}
$$

ここで運動方程式 $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}$ よりつぎのハミルトンの運動方程式(正準方程式)がでる。

正準方程式

$$
\begin{aligned}
\dot{q}_i =& \frac{\partial H}{\partial p_i} \\
\dot{p}_i =& -\frac{\partial H}{\partial q_i}
\end{aligned}
$$

よって古典系がたどる世界線上 $q = q_c(t), p = p_c(t)$ で

$$
\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial H}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial t} = -\dot{p}\dot{q} + \dot{q}\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}
$$

とくに H があらわに時間に依存しないとき

$$\frac{dH}{dt} = 0$$

であり、エネルギー

$$E = H(q_c(t), p_c(t))$$

は保存する。($\dot{E} = 0$)

2 正準変換と不変式

2.1 正準変換

正準方程式は $q(t), p(t)$ の汎関数として次の変分原理から導かれることに注意しよう。[4]

$$\delta \int_{t_i}^{t_f} dt \left(p\dot{q} - H(q,p) \right) = 0$$
$$\delta q(t_i) = \delta q(t_f) = 0$$

よって変数変換

$$(q,p) \to (\bar{q}, \bar{p})$$
$$H(q,p) \to \bar{H}(\bar{q}, \bar{p})$$

を考えたとき

$$\delta \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{H}(\bar{q},\bar{p}) \right) = 0$$

が導かれれば正準方程式は

$$\dot{\bar{q}} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}}, \ \dot{\bar{p}} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}}$$

[4]

$$\begin{aligned}\delta \int_{t_i}^{t_f} dt \left(p\dot{q} - H(q,p) \right) &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\delta p \dot{q} + p \delta \dot{q} - \frac{\partial H}{\partial q}\delta q - \frac{\partial H}{\partial p}\delta p \right) \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \left(\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p} \right) \delta p - \left(\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial q} \right) \delta q \right\} + p\delta q \Big|_{t_i}^{t_f}\end{aligned}$$

より境界条件をもちいて正準方程式がでる。

と同型となる。

このためにはつぎの条件が十分である。[5]

$$
\begin{aligned}
p\dot{q} - H =& \bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{H} + \frac{dW}{dt} \\
\delta\bar{q}(t_f) =& \delta\bar{q}(t_i) = 0
\end{aligned}
$$

ここで W は $W = W(q, \bar{q}, t)$ と $q, \bar{q}$ の関数である。

このとき

$$
\begin{aligned}
\frac{dW}{dt} =& \frac{\partial W}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial W}{\partial \bar{q}}\dot{\bar{q}} + \frac{\partial W}{\partial t} \\
p\dot{q} - H =& \bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{H} + \frac{\partial W}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial W}{\partial \bar{q}}\dot{\bar{q}} + \frac{\partial W}{\partial t}
\end{aligned}
$$

より任意関数である $\dot{q}, \dot{\bar{q}}$ の係数を比べて

$$
p = \frac{\partial W}{\partial q},\ \bar{p} = -\frac{\partial W}{\partial \bar{q}},\ H = \bar{H} - \frac{\partial W}{\partial t}
$$

となる。

次に

$$
W' = W(q, \bar{q}, t) + \bar{q}\bar{p}
$$

とすれば ($\bar{q} \to \bar{p}$ のルジャンドル変換)

$$
\begin{aligned}
dW' =& dW + d\bar{q}\bar{p} + \bar{q}d\bar{p} \\
=& \frac{\partial W}{\partial q}dq + \frac{\partial W}{\partial \bar{q}}d\bar{q} + \frac{\partial W}{\partial t}dt + \bar{p}d\bar{q} + \bar{q}d\bar{p} \\
=& \frac{\partial W}{\partial q}dq + \frac{\partial W}{\partial t}dt + \bar{q}d\bar{p}
\end{aligned}
$$

つまり W' は $q, \bar{p}, t$ の関数とみなせる。

$$
W' = W'(q, \bar{p}, t)
$$

このとき

$$
\begin{aligned}
\frac{dW}{dt} =& \frac{dW'}{dt} - \dot{\bar{q}}\bar{p} - \dot{\bar{p}}\bar{q} \\
=& \frac{\partial W'}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial W'}{\partial \bar{p}}\dot{\bar{p}} + \frac{\partial W'}{\partial t} - \dot{\bar{q}}\bar{p} - \dot{\bar{p}}\bar{q}
\end{aligned}
$$

---

[5] W を $W = W(q, \bar{q}, t)$ と $q, \bar{q}$ の関数として

$$
\int_{t_i}^{t_f} dt \left(p\dot{q} - H(q,p) \right) - \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{H}(\bar{q}, \bar{p}) \right) = \int_{t_i}^{t_f} dt\, \frac{dW}{dt} = W(q(t_f), \bar{q}(t_f), t_f) - W(q(t_i), \bar{q}(t_i), t_i)
$$

よって

$$
\begin{aligned}
p\dot{q} - H =& \bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{H} + \frac{\partial W'}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial W'}{\partial \bar{p}}\dot{\bar{p}} + \frac{\partial W'}{\partial t} - \dot{\bar{q}}\bar{p} - \dot{\bar{p}}\bar{q} \\
=& -\bar{H} + \frac{\partial W'}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial W'}{\partial \bar{p}}\dot{\bar{p}} + \frac{\partial W'}{\partial t} - \dot{\bar{p}}\bar{q} \\
(p - \frac{\partial W'}{\partial q})\dot{q} =& (\frac{\partial W'}{\partial \bar{p}} - \bar{q})\dot{\bar{p}} + H - \bar{H} + \frac{\partial W'}{\partial t}
\end{aligned}
$$

$\dot{q}, \dot{\bar{p}}$ は独立な関数だから

$$
\begin{aligned}
p =& \frac{\partial W'}{\partial q} \\
\bar{q} =& \frac{\partial W'}{\partial \bar{p}} \\
H =& \bar{H} - \frac{\partial W'}{\partial t}
\end{aligned}
$$

次に

$$
W'' = W(q, \bar{q}, t) - qp
$$

とすれば ($q \to p$ のルジャンドル変換)

$$
\begin{aligned}
dW'' =& dW - dqp - qdp \\
=& \frac{\partial W}{\partial q}dq + \frac{\partial W}{\partial \bar{q}}d\bar{q} + \frac{\partial W}{\partial t}dt - pdq - qdp \\
=& \frac{\partial W}{\partial \bar{q}}d\bar{q} + \frac{\partial W}{\partial t}dt - qdp
\end{aligned}
$$

つまり W'' は $\bar{q}, p, t$ の関数とみなせる。

$$
W'' = W''(\bar{q}, p, t)
$$

このとき

$$
\begin{aligned}
\frac{dW}{dt} =& \frac{dW''}{dt} + q\dot{p} + p\dot{q} \\
=& \frac{\partial W''}{\partial \bar{q}}\dot{\bar{q}} + \frac{\partial W''}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial W''}{\partial t} + q\dot{p} + p\dot{q}
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
p\dot{q} - H =& \bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{H} + \frac{\partial W''}{\partial \bar{q}}\dot{\bar{q}} + \frac{\partial W''}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial W''}{\partial t} + q\dot{p} + p\dot{q} \\
\bar{H} - H - \frac{\partial W''}{\partial t} =& (\bar{p} + \frac{\partial W''}{\partial \bar{q}})\dot{\bar{q}} + (\frac{\partial W''}{\partial p} + q)\dot{p}
\end{aligned}
$$

$\dot{\bar{q}}, \dot{p}$ は独立な関数だから

$$\begin{aligned}\bar{p} =& -\frac{\partial W''}{\partial \bar{q}}\\ q =& -\frac{\partial W''}{\partial p}\\ H =& \bar{H} - \frac{\partial W''}{\partial t}\end{aligned}$$

ひきつづいて

$$W''' = W''(\bar{q}, p, t) + \bar{p}\bar{q}$$

とすれば ($p \to \bar{p}$ のルジャンドル変換)

$$\begin{aligned}dW''' =& dW'' + \bar{p}d\bar{q} + \bar{q}d\bar{p}\\ =& \frac{\partial W''}{\partial \bar{q}}d\bar{q} + \frac{\partial W''}{\partial p}dp + \frac{\partial W''}{\partial t}dt + \bar{p}d\bar{q} + \bar{q}d\bar{p}\\ =& \frac{\partial W''}{\partial p}dp + \frac{\partial W''}{\partial t}dt + \bar{q}d\bar{p}\end{aligned}$$

つまり W''' は $\bar{p}, p, t$ の関数とみなせる。

$$W''' = W'''(p, \bar{p}, t)$$

このとき

$$\begin{aligned}\frac{dW}{dt} =& \frac{dW''}{dt} + q\dot{p} + p\dot{q}\\ =& \frac{dW'''}{dt} - \bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{q}\dot{\bar{p}} + q\dot{p} + p\dot{q}\\ =& \frac{\partial W'''}{\partial t} + \frac{\partial W'''}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial W'''}{\partial \bar{p}}\dot{\bar{p}} - \bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{q}\dot{\bar{p}} + q\dot{p} + p\dot{q}\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}p\dot{q} - H =& \bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{H} + \frac{\partial W'''}{\partial t} + \frac{\partial W'''}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial W'''}{\partial \bar{p}}\dot{\bar{p}} - \bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{q}\dot{\bar{p}} + q\dot{p} + p\dot{q}\\ =& \bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{H} + \frac{\partial W'''}{\partial t} + \frac{\partial W'''}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial W'''}{\partial \bar{p}}\dot{\bar{p}} - \bar{p}\dot{\bar{q}} - \bar{q}\dot{\bar{p}} + q\dot{p} + p\dot{q}\\ -H =& -\bar{H} + \frac{\partial W'''}{\partial t} + \frac{\partial W'''}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial W'''}{\partial \bar{p}}\dot{\bar{p}} - \bar{q}\dot{\bar{p}} + q\dot{p}\\ =& -\bar{H} + \frac{\partial W'''}{\partial t} + (\frac{\partial W'''}{\partial p} + q)\dot{p} + (\frac{\partial W'''}{\partial \bar{p}} - \bar{q})\dot{\bar{p}}\end{aligned}$$

$\dot{\bar{p}}, \dot{p}$ は独立な関数だから

$$
\begin{aligned}
q =& -\frac{\partial W'''}{\partial p} \\
\bar{q} =& \frac{\partial W'''}{\partial \bar{p}} \\
H =& \bar{H} - \frac{\partial W'''}{\partial t}
\end{aligned}
$$

以上まとめて

正準変換

$$
pdq - \bar{p}d\bar{q} - (H - \bar{H})dt = dW
$$

特に W が時間に依存しないとき ($\frac{\partial W}{\partial t} = 0$)

$$
\begin{aligned}
\bar{H} =& H \\
pdq - \bar{p}d\bar{q} =& dW
\end{aligned}
$$

- $W = W(q, \bar{q})$ として

$$
p = \frac{\partial W}{\partial q},\ \bar{p} = -\frac{\partial W}{\partial \bar{q}},\ \bar{H} = H + \frac{\partial W}{\partial t}
$$

- $W' = W'(q, \bar{p}) = W + \bar{q}\bar{p}$ として

$$
p = \frac{\partial W'}{\partial q},\ \bar{q} = \frac{\partial W'}{\partial \bar{p}},\ \bar{H} = H + \frac{\partial W'}{\partial t}
$$

- $W'' = W''(\bar{q}, p) = W - qp$ として

$$
\bar{p} = -\frac{\partial W''}{\partial \bar{q}},\ q = -\frac{\partial W''}{\partial p},\ \bar{H} = H + \frac{\partial W''}{\partial t}
$$

- $W''' = W'''(\bar{p}, p) = W'' + \bar{q}\bar{p} = W + \bar{q}\bar{p} - qp$ として

$$
q = -\frac{\partial W'''}{\partial p},\ \bar{q} = \frac{\partial W'''}{\partial \bar{p}},\ \bar{H} = H + \frac{\partial W'''}{\partial t}
$$

なお正準変換 $(q,p)\to(\bar{q},\bar{p})$ に対して位相空間の体積要素は不変である。[6]

リウヴィルの定理

$$\frac{\partial(\bar{q},\bar{p})}{\partial(q,p)} = \frac{\partial(\bar{q}_1,\cdots\bar{q}_f,\bar{p},\cdots,\bar{p})}{\partial(q_1,\cdots q_f,p,\cdots,p)} = 1$$

2.2 ポアッソン括弧

[7] q,p の関数 $u(q,p),v(q,p)$ に対してポアッソン括弧を次のように定義する。

ポアッソン括弧

$$\begin{aligned}\{u,v\} =& -\{v,u\} = \frac{\partial u}{\partial q^i}\frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p^i}\frac{\partial v}{\partial q_i}\\ =&\epsilon_{\alpha\beta}\frac{\partial u}{\partial x_i^\alpha}\frac{\partial v}{\partial x_i^\beta}\\ x_i^1 =&q^i,\ x_i^2 = p_i\end{aligned}$$

例えば

$$\{q^i,q^j\} =0,\ \{p_i,p_j\} = 0,\ \{q^i,p_j\} = \delta_{ij}$$

まとめて

$$\{x_i^\alpha,x_j^\beta\} =\epsilon_{\alpha\beta}\delta_{ij}$$

ポアッソン括弧は次の性質を満たす。[8]

---

[6]

$$\frac{\partial(\bar{q},\bar{p})}{\partial(q,p)} = \frac{\dfrac{\partial(\bar{q},\bar{p})}{\partial(q,\bar{p})}}{\dfrac{\partial(q,p)}{\partial(q,\bar{p})}} = \frac{\dfrac{\partial(\bar{q})}{\partial(q)}}{\dfrac{\partial(p)}{\partial(\bar{p})}} = \frac{\dfrac{\partial^2 W'}{\partial\bar{p}\partial q}}{\dfrac{\partial^2 W'}{\partial q\partial\bar{p}}} = q$$

[7] B. S. DeWitt, Rev. of Mod. Phys. 3, 377, (1957)

[8]

$$\begin{aligned}\{\{f_a,f_b\},f_c\} =&\{\epsilon_{\alpha\beta}\frac{\partial f_a}{\partial x_i^\alpha}\frac{\partial f_b}{\partial x_i^\beta},f_k\} = \epsilon_{\gamma\delta}\epsilon_{\alpha\beta}\frac{\partial}{\partial x_j^\gamma}\left(\frac{\partial f_a}{\partial x_i^\alpha}\frac{\partial f_b}{\partial x_i^\beta}\right)\frac{\partial f_c}{\partial x_j^\delta}\\ =&\epsilon_{\gamma\delta}\epsilon_{\alpha\beta}\left(\frac{\partial^2 f_a}{\partial x_i^\alpha\partial x_j^\gamma}\frac{\partial f_b}{\partial x_i^\beta} + \frac{\partial f_a}{\partial x_i^\alpha}\frac{\partial^2 f_b}{\partial x_i^\beta\partial x_j^\gamma}\right)\frac{\partial f_c}{\partial x_j^\delta}\end{aligned}$$

Jacobi の恒等式

$$\{\{f_1, f_2\}, f_3\} + \{\{f_2, f_3\}, f_1\} + \{\{f_3, f_1\}, f_2\} = 0$$

一般の物理量 $F(q,p,t)$ の時間変化は正準方程式をつかって

$$\begin{aligned}\frac{dF}{dt} &= \frac{\partial F}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial F}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial F}{\partial t}\\ &= \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}\end{aligned}$$

となる。

ここで $x = (q,p) \to \bar{x} = (\bar{q}, \bar{p}$ が正準変換であり変換の母関数 W が時間によらないとすれば[9]

$$\begin{aligned}\epsilon_{\alpha\beta}(x^\alpha dx^\beta - \bar{x}^\alpha d\bar{x}^\beta) &= \epsilon_{\alpha\beta}(x_i^\alpha dx_i^\beta - \bar{x}_i^\alpha d\bar{x}_i^\beta)\\ &= dV\end{aligned}$$

と書ける。ただし V は $\bar{x}$ の関数とする。(x 依存性は正準変換の関係式をつかって $\bar{x}$ について解いたと考えよう) よって

$$\begin{aligned}\frac{\partial V}{\partial \bar{x}_j^\beta} &= \epsilon_{\eta\gamma} x_k^\eta \frac{\partial x_k^\gamma}{\partial \bar{x}_j^\beta} - \epsilon_{\eta\beta}\bar{x}_j^\eta\\ \frac{\partial^2 V}{\partial \bar{x}_i^\alpha \partial \bar{x}_j^\beta} &= \epsilon_{\eta\gamma}\frac{\partial x_k^\eta}{\partial \bar{x}_i^\alpha}\frac{\partial x_k^\gamma}{\partial \bar{x}_j^\beta} + \epsilon_{\eta\gamma} x_k^\eta \frac{\partial^2 x_k^\gamma}{\partial \bar{x}_i^\alpha \partial \bar{x}_j^\beta} - \epsilon_{\eta\beta}\delta_{ij}\delta_{\alpha\eta}\\ &= [\![\bar{x}_i^\alpha, \bar{x}_j^\beta]\!] + \epsilon_{\eta\gamma} x_k^\eta \frac{\partial^2 x_k^\gamma}{\partial \bar{x}_i^\alpha \partial \bar{x}_j^\beta} - \epsilon_{\alpha\beta}\delta_{ij} \qquad (*)\end{aligned}$$

ここでラグランジュ括弧 $[\![u, v]\!]$ は次のように定義される。

$$\begin{aligned}[\![u, v]\!] &= \frac{\partial q^i}{\partial u}\frac{\partial p_i}{\partial v} - \frac{\partial p_i}{\partial u}\frac{\partial q^i}{\partial v}\\ &= \epsilon_{\alpha\beta}\frac{\partial x_i^\alpha}{\partial u}\frac{\partial x_i^\beta}{\partial v} = -[\![v, u]\!]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\epsilon_{abc}\{\{f_a, f_b\}, f_c\} &= \epsilon_{abc}\epsilon_{\alpha\beta}\epsilon_{\gamma\delta}\left(\frac{\partial^2 f_a}{\partial x_i^\alpha \partial x_j^\gamma}\frac{\partial f_b}{\partial x_i^\beta} + \frac{\partial f_a}{\partial x_i^\alpha}\frac{\partial^2 f_b}{\partial x_i^\beta \partial x_j^\gamma}\right)\frac{\partial f_c}{\partial x_j^\delta}\\ &= 2\epsilon_{abc}\epsilon_{\alpha\beta}\epsilon_{\gamma\delta}\frac{\partial^2 f_a}{\partial x_i^\alpha \partial x_j^\gamma}\frac{\partial f_b}{\partial x_i^\beta}\frac{\partial f_c}{\partial x_j^\delta} = 0\end{aligned}$$

9

$$\begin{aligned}(\bar{p}d\bar{q} - \bar{q}d\bar{p}) - (pdq - qdp) &= 2(\bar{p}d\bar{q} - pdq) - d(\bar{p}\bar{q} - pq)\\ &= dV\\ &= \epsilon_{\alpha\beta}(x^\alpha dx^\beta - \bar{x}^\alpha d\bar{x}^\beta)\\ V &= -2W - \bar{p}\bar{q} + pq\end{aligned}$$

(*) でのさいごの関係式で $(i,\alpha) \rightleftarrows (j,\beta)$ として辺々引いて

$$[\![\bar{x}_i^\alpha, \bar{x}_j^\beta]\!] = \epsilon_{\alpha\beta}\delta_{ij}$$

ポアッソン括弧とラグランジュ括弧には次の関係があるので[10]

$$\{\bar{x}_i^\alpha, \bar{x}_k^\gamma\}[\![\bar{x}_j^\beta, \bar{x}_k^\gamma]\!] = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}$$

正準変換後の変数もまた

$$\{\bar{x}_i^\alpha, \bar{x}_j^\beta\} = \epsilon_{\alpha\beta}\delta_{ij}$$

を満たす。これよりポアッソン括弧は正準変換で不変つまりどの正準変数で計算してもよいことがしめせる。[11]

$$\overline{\{u,v\}} \equiv \epsilon_{\alpha\beta}\frac{\partial u}{\partial \bar{x}_i^\alpha}\frac{\partial v}{\partial \bar{x}_i^\beta} = \{u,v\}$$

2.3 無限小変換

前前節での正準変換をここでの表記に書き直すと[12]

10

$$\begin{aligned}
\{\bar{x}_i^\alpha, \bar{x}_k^\gamma\}[\![\bar{x}_j^\beta, \bar{x}_k^\gamma]\!] =& \epsilon_{\eta\xi}\frac{\partial \bar{x}_i^\alpha}{\partial x_n^\eta}\frac{\partial \bar{x}_k^\gamma}{\partial x_n^\xi}\epsilon_{\kappa\rho}\frac{\partial x_m^\kappa}{\partial \bar{x}_j^\beta}\frac{\partial x_m^\rho}{\partial \bar{x}_k^\gamma} = \epsilon_{\eta\xi}\epsilon_{\kappa\rho}\frac{\partial \bar{x}_i^\alpha}{\partial x_n^\eta}\frac{\partial x_m^\kappa}{\partial \bar{x}_j^\beta}\frac{\partial \bar{x}_k^\gamma}{\partial x_n^\xi}\frac{\partial x_m^\rho}{\partial \bar{x}_k^\gamma} = \epsilon_{\eta\xi}\epsilon_{\kappa\rho}\frac{\partial \bar{x}_i^\alpha}{\partial x_n^\eta}\frac{\partial x_m^\kappa}{\partial \bar{x}_j^\beta}\frac{\partial x_m^\rho}{\partial x_n^\xi} \\
=& \epsilon_{\eta\xi}\epsilon_{\kappa\rho}\frac{\partial \bar{x}_i^\alpha}{\partial x_n^\eta}\frac{\partial x_m^\kappa}{\partial \bar{x}_j^\beta}\delta_{mn}\delta_{\rho\xi} = \epsilon_{\eta\rho}\epsilon_{\kappa\rho}\frac{\partial \bar{x}_i^\alpha}{\partial x_n^\eta}\frac{\partial x_n^\kappa}{\partial \bar{x}_j^\beta} = \delta_{\eta\kappa}\frac{\partial \bar{x}_i^\alpha}{\partial x_n^\eta}\frac{\partial x_n^\kappa}{\partial \bar{x}_j^\beta} = \frac{\partial \bar{x}_i^\alpha}{\partial x_n^\eta}\frac{\partial x_n^\eta}{\partial \bar{x}_j^\beta} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}
\end{aligned}$$

11

$$\begin{aligned}
\overline{\{u,v\}} \equiv& \epsilon_{\alpha\beta}\frac{\partial u}{\partial \bar{x}_i^\alpha}\frac{\partial v}{\partial \bar{x}_i^\beta} \\
\{u,v\} =& \epsilon_{\alpha\beta}\frac{\partial u}{\partial x_i^\alpha}\frac{\partial u}{\partial x_i^\beta} \\
=& \epsilon_{\alpha\beta}\frac{\partial u}{\partial \bar{x}_k^\gamma}\frac{\partial \bar{x}_k^\gamma}{\partial x_i^\alpha}\frac{\partial v}{\partial \bar{x}_n^\eta}\frac{\partial \bar{x}_n^\eta}{\partial x_i^\beta} = \epsilon_{\alpha\beta}\frac{\partial \bar{x}_k^\gamma}{\partial x_i^\alpha}\frac{\partial \bar{x}_n^\eta}{\partial x_i^\beta}\frac{\partial u}{\partial \bar{x}_k^\gamma}\frac{\partial v}{\partial \bar{x}_n^\eta} \\
=& \{\bar{x}_k^\gamma, \bar{x}_n^\eta\}\frac{\partial u}{\partial \bar{x}_k^\gamma}\frac{\partial v}{\partial \bar{x}_n^\eta} = \epsilon_{\gamma\eta}\delta_{kn}\frac{\partial u}{\partial \bar{x}_k^\gamma}\frac{\partial v}{\partial \bar{x}_n^\eta} \\
=& \overline{\{u,v\}}
\end{aligned}$$

12

$$\begin{aligned}
S_{+-} \equiv& -W = \frac{1}{2}(V + \bar{q}\bar{p} - qp) \\
S_{--} \equiv& -W' = -W - \bar{q}\bar{p} = \frac{1}{2}(V - \bar{q}\bar{p} - qp) \\
S_{++} \equiv& -W'' = -W + qp = \frac{1}{2}(V + \bar{q}\bar{p} + qp) \\
S_{-+} \equiv& -W''' = -W'' - \bar{q}\bar{p} = \frac{1}{2}(V - \bar{q}\bar{p} + qp)
\end{aligned}$$

$$S_{\pm\pm} = \frac{1}{2}(V \pm \bar{q}\bar{p} \pm qp)$$

対応して

$$\begin{aligned}
\bar{p} =& \frac{\partial S_{++}}{\partial \bar{q}},\ q = \frac{\partial S_{++}}{\partial p} \\
\bar{p} =& \frac{\partial S_{+-}}{\partial \bar{q}},\ p = -\frac{\partial S_{+-}}{\partial q} \\
\bar{q} =& -\frac{\partial S_{-+}}{\partial \bar{p}},\ q = \frac{\partial S_{-+}}{\partial p} \\
\bar{q} =& -\frac{\partial S_{--}}{\partial \bar{p}},\ p = -\frac{\partial S_{--}}{\partial q}
\end{aligned}$$

重要な例として以下のものがある。

- 恒等変換 $S_{++} = p\bar{q}$

$$\bar{p} = p,\ q = \bar{q}$$

- 位相変換 $S_{++} = p\bar{q} + \Phi(\bar{q})$

$$\bar{p} = p + \frac{\partial \Phi}{\partial \bar{q}},\ q = \bar{q}$$

- 点変換 $S_{++} = pq(\bar{q})$

$$\bar{p} = p\frac{\partial q(\bar{q})}{\partial \bar{q}},\ q = q(\bar{q})$$

ここで無限小変換として恒等変換の近傍の微小変換を微少量の１次まででで考えよう。

$$S_{++} = p\bar{q} + \delta S(\bar{q}, p) \approx p\bar{q} + s(q, p)$$

対応して

$$\begin{aligned}
\bar{p} =& \frac{\partial S_{+-}}{\partial \bar{q}},\ p = -\frac{\partial S_{+-}}{\partial q} \\
\bar{q} =& -\frac{\partial S_{--}}{\partial \bar{p}},\ p = -\frac{\partial S_{--}}{\partial q} \\
\bar{p} =& \frac{\partial S_{++}}{\partial \bar{q}},\ q = \frac{\partial S_{++}}{\partial p} \\
\bar{q} =& -\frac{\partial S_{-+}}{\partial \bar{p}},\ q = \frac{\partial S_{-+}}{\partial p}
\end{aligned}$$

これから[13]

$$\begin{aligned}\delta p =& \bar{p} - p = +\frac{\partial s}{\partial q}\\ \delta q =& \bar{q} - q = \frac{\partial S}{\partial p} = -\frac{\partial s}{\partial p}\\ \delta x_i^\alpha =& -\epsilon_{\alpha\beta}\frac{\partial s}{\partial x_i^\beta}\\ ds =& -\epsilon_{\alpha\beta}\delta x_i^\alpha dx_i^\beta = \epsilon_{\alpha\beta} dx_i^\alpha \delta x_i^\beta\end{aligned}$$

ここで $\delta\bar{x}_i^\alpha = \bar{x}_i^\alpha - x_i^\alpha$ を考えて[14]

$$d\delta V \equiv dv = -\epsilon_{\alpha\beta}(\delta x_i^\alpha dx_i^\beta + x_i^\alpha d\delta x_i^\beta)$$

に注意すれば

$$s = \frac{1}{2}(v + \epsilon_{\alpha\beta} x_i^\alpha \delta x_i^\beta)$$

と書ける。

無限小変換の例としては次のものをあげておこう。

- 無限小位相変換

$$\begin{aligned}s =& \varphi(q)\\ \delta p =& \varphi'(q),\ \delta q = 0\end{aligned}$$

- 無限小点変換

$$\begin{aligned}s =& p\lambda(q)\\ \delta p =& p\lambda'(q),\ \delta q = -\lambda\end{aligned}$$

13

$$\begin{aligned}\bar{p} =& \frac{\partial S}{\partial \bar{q}} = p + \frac{\partial \delta S}{\partial \bar{q}} \approx p + \frac{\partial s}{\partial q}\\ q =& \frac{\partial S}{\partial p} = \bar{q} + \frac{\partial \delta S}{\partial p} \approx \bar{q} + \frac{\partial s}{\partial p}\end{aligned}$$

14

$$\begin{aligned}d\delta V \equiv& dv\\ =& \epsilon_{\alpha\beta}\left(x_i^\alpha dx_i^\beta - (\delta\bar{x}_i^\alpha + x_i^\alpha) d(\delta x_i^\beta + x_i^\beta)\right)\\ =& -\epsilon_{\alpha\beta}(\delta x_i^\alpha dx_i^\beta + x_i^\alpha d\delta x_i^\beta)\end{aligned}$$

3 ハミルトンヤコビの方程式

3.1 古典解と作用

古典軌道 $q = q_c(t)$ が初期条件 $q^i = q_c(t^I)$, 終条件 $q^f = q_c(t^f)$ をみたすときこの軌道に沿っての作用 $S(q^f, t^f; q^i, t^i)$ を考える。

$$S(q^f, t^f; q^i, t^i) = \int_{t^i}^{t^f} dt\, L(q_c, \dot{q}_c, t)$$

これから q^i, t^i, q^f, t^f を変化させたときの変分を考えて

$$\begin{aligned}
\delta S =& + L^f \delta t^f - L^i \delta t^i + \int_{t^i}^{t^f} dt \left(\frac{\partial}{\partial q_c} L(q_c, \dot{q}_c, t) \delta q_c + \frac{\partial}{\partial \dot{q}_c} L(q_c, \dot{q}_c, t) \delta \dot{q}_c \right) \\
=& + L^f \delta t^f - L^i \delta t^i + \int_{t^i}^{t^f} dt \left(\frac{\partial}{\partial q_c} L(q_c, \dot{q}_c, t) - \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_c} L(q_c, \dot{q}_c, t) \right) \delta q_c + \left. \frac{\partial}{\partial \dot{q}_c} L(q_c, \dot{q}_c, t) \delta q_c \right|_{t^i}^{t^f} \\
=& + L^f \delta t^f - L^i \delta t^i + p^f \delta q_c(t^f) - p^i \delta q_c(t^i) \\
=& + L^f \delta t^f - L^i \delta t^i + p^f \delta q_c^f - p^i \delta q_c^i
\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
L^f =& L(q_c(t^f), \dot{q}_c(t^f), t^f),\ L^i = L(q_c(t^i), \dot{q}_c(t^i), t^i) \\
p_c^f =& p_c(t^f),\ p_c^i = p_c(t^i) \\
p(t) =& \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right|_{q=q_c}
\end{aligned}$$

また端点での変分に関して次の関係を使うと

$$\begin{aligned}
\delta q_c^f =& \delta q_c(t^f) + \dot{q}_c \delta t^f \\
\delta q_c^i =& \delta q_c(t^i) + \dot{q}_c \delta t^i
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\delta S =& p_c^f \delta q_c^f - (\dot{q}_c p_c - L^f) \delta t^f - p_c^i \delta q_c^i + (\dot{q}_c p_c - L^i) \delta t^i \\
=& p_c^f \delta q_c^f - H^f \delta t^f - p_c^i \delta q_c^i + H^i \delta t^i
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
p_c^f =& \frac{\partial S}{\partial q_c^f}, \quad H^f = - \frac{\partial S}{\partial t^f} \\
p_c^i =& - \frac{\partial S}{\partial q_c^i}, \quad H^i = \frac{\partial S}{\partial t^i}
\end{aligned}$$

ここでハミルトニアンは

$$H^f = H(q^f, p^f),\ H^i = H(q^i, p^i)$$

これから次のハミルトンヤコビの方程式が導かれる。

ハミルトン・ヤコビの方程式

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial t^f} + H(q^f, \frac{\partial S}{\partial q^f}) =& 0\\ \frac{\partial S}{\partial t^i} - H(q^i, -\frac{\partial S}{\partial q^f}) =& 0\\ S =& S(q^f,^f; q^i, t^i)\\ H =& H(q,p) = p\dot{q} - L\end{aligned}$$

第 II 部
経路積分と量子論

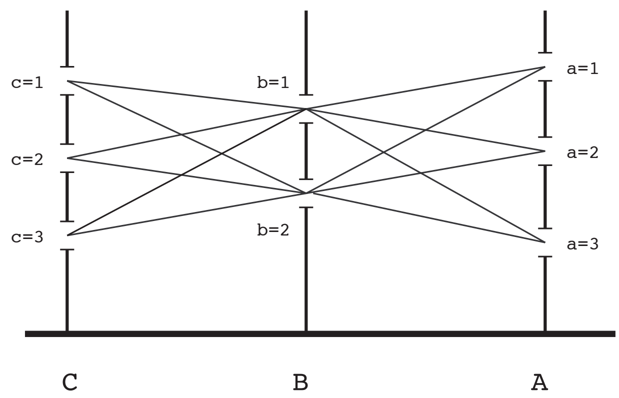
解析力学による古典力学のみを仮定し、量子論の基本的理論形式である経路積分を Feynman にならい予備知識を最小として導入しそのいくつかの基本的側面を議論する。

経路積分は現代の物理において理論、実験、数値的研究すべてにおいてその基礎となっており必須の概念であることに注意しよう。

4 確率振幅と重ね合わせの原理

4.1 量子論における確率と重ね合わせの原理

最初に次のように測定器 A, B, C を並べた系を考えよう。



この系でまず測定 A を行いその結果が a であり、その後に測定 B を行ってその結果が b となる確率を P_{ba} としよう。また同様にまず測定 B を行いその結果が b であり、その後に測定 C を行ってその結果が c となる確率を P_{cb} としよう。

このとき測定 A を行いその結果が a であり、その後に測定 B を行ってその結果が b となりさらにひきつづいて測定 C を行いその結果が c となる確率を P_{cba} としたとき、a と b の間の事象と b と c の間の事象とが独立であれば P_{ba}, P_{cb},P_{cba} のあいだには

$$P_{cba} = P_{cb}P_{ba}$$

の関係式が成立することはよく知られている。また測定 A を行いその結果が a であり、その後に測定 C を行ってその結果が c となる確率を P_{ca} とすれば、事象の排他性より B の結果について場合分けして

$$\begin{aligned} P_{ca} &= \sum_b P_{cba} \\ &= \sum_b P_{cb}P_{ba} \qquad \text{(*Cl)} \end{aligned}$$

が従う。振り返って考えてみるとこの事実 $(*Cl)$ は自明なことではなく、経験則であることに気づくであろう。

実は、量子力学に従う系においては、この関係式 $(*Cl)$ は「事象が確定する観測 B を実際に実行する」との条件下でのみ成り立つと考えられている。

$$P_{ca}^{q,\mathrm{ms}} = \sum_b P_{cb}P_{ba} \qquad \text{(*Q1)}$$

ここで量子力学に従う系の確率に対する基本的な仮定として以下の事実をみとめよう。一般に観測 X の値が x となり引き続いて行った観測 Y の値が y となる確率 P^q_{yx} に対してある複素数 φ_{yx} (確率振幅) が存在し

確率振幅

$$P^q_{yx} = |\varphi_{yx}|^2$$

となる。この仮定のもとで量子力学による確率振幅の重ね合わせの原理として次のものを要求する。

確率振幅の重ね合わせの原理

$$\varphi_{ca} = \sum_b \varphi_{cb}\varphi_{ba}$$

よって

$$\begin{aligned}
P^q_{ba} &= |\varphi_{ba}|^2, \quad P^q_{cb} = |\varphi_{cb}|^2 \\
P^q_{ca} &= |\varphi_{ca}|^2 = \left|\sum_b \varphi_{cb}\varphi_{ba}\right|^2 \\
&= \sum_b P^q_{cb}P^q_{ba} + 2\mathrm{Re}\sum_{b<b'} \varphi^*_{cb}\varphi^*_{ba}\varphi_{cb'}\varphi_{b'a} \quad \neq \sum_b P^q_{cb}P^q_{ba} \qquad (\text{*Q2})
\end{aligned}$$

となる。この最後の項は確率振幅が何か波動的な性質を持ちその干渉効果を与えると考えられる。この干渉が無視できる時のみ古典的な確率法則が再現するのである。

一方この一般的な表式は「観測 B を全く行わない」つまり観測装置は存在するが動作していない状況下での確率であることに注意しよう。すなわち「観測 B 」を行えばこの観測により系の量子的コヒーレンスは完全に破壊されてしまい、干渉のない場合の古典的確率法則 (Cl) に従う事象が観測されるわけである。

このように、実際に測定可能な実験結果を量子力学において解釈しようとするとき確率的な解釈は必須であり、理論（議論）の根底をなすものである。さらにその確率は実験状況により $(Q1)$, $(Q2)$ といった異なるものとなり一般には古典的な確率解釈と異なるものを与えることになる。(量子力学的コヒーレンスと波動関数の干渉)

これを少し拡張すれば観測装置 $A, B, C, D, \cdots, Z$ を設定し A が a を与えた後 Z が z となる確率は他の測定装置を全く動作させない場合

$$P^q_{za} = \left|\sum_{b,c,d,\cdots} \varphi_{zy}\varphi_{yx}\cdots\varphi_{dc}\varphi_{cb}\varphi_{ba}\right|^2$$

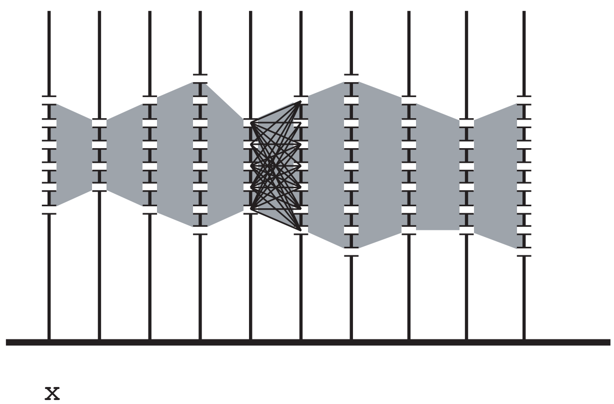
と与えられることになることも納得できるであろう。

4.2　確率振幅と経路積分

この記述をさらに一般に拡張することを考えよう。測定装置が 1 次元的にならんでおり時間 $t = t_i$ の粒子の空間座標を $x = x_i$ であるとして測定装置の列で指定される量子力学的粒子の通り得る領域を R で指定することとする。つまり、領域 R は

$$
\begin{aligned}
R &= \cdots [a_{i-1}, b_{i-1}] \otimes [a_i, b_i] \otimes [a_{i+1}, b_{i+1}] \otimes \cdots \\
\cdots &\quad x_{i-1} \in [a_{i-1}, b_{i-1}], x_i \in [a_i, b_i], x_{i+1} \in [a_{i+1}, b_{i+1}] \cdots
\end{aligned}
$$

であり、



領域 R を粒子が通過する量子力学的な確率を

$$P(R) = |\varphi(R)|^2$$

とすると前節の議論の単純な拡張として $\varphi(R)$ は次のような表式で与えられることとなる。

$$\varphi(R) \;=\; \lim_{\epsilon \to 0} \int_R \cdots dx_{i+1} dx_i dx_{i-1} \cdots \varphi(x_{i+1}, x_i) \varphi(x_i, x_{i-1}) \cdots, \quad (t_{i+1} - t_i = \epsilon)$$

さらに（経路積分による）量子力学における基本的な仮定として微少時間間隔における確率振幅の位相は量子力学における基本定数であるプランク定数 $\hbar$ を単位にした古典的な粒子による世界線により与えられる「作用」 $S = S_c$ で与えられるとする。すなわち

微少区間での確率振幅

$$
\begin{aligned}
\varphi(x_{i+1}x_i) &\propto e^{\frac{i}{\hbar}S(x_{i+1},x_i)} \\
S(x_{i+1},x_i) &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} dt\, L(x_c,\dot{x}_c,t) \\
\frac{\delta L(x_x,\dot{x}_c,t)}{\delta x} &= 0,\ x_{i+1}=x_c(t_{i+1}),\ x_i=x_c(t_i)
\end{aligned}
$$

ここで解析力学における作用 S とラグランジアン $L(x,\dot{x},t)$ の関係を用いた。[15]

これから確率振幅 $\varphi(R)$ を形式的に次のように書こう。

確率振幅の経路積分表示

$$
\varphi(R) = \int_R D[x(t)]\, e^{\frac{i}{\hbar}S} = \int_R D[x(t)]\, e^{\frac{i}{\hbar}\int dt L(x,\dot{x},t)}
$$

ここで積分はまだ決めていない規格化定数 A をふくめて

$$
\int_R D[x(t)] = \lim_{\epsilon\to 0}\int\cdots\int\cdots\frac{dx_{i+1}}{A}\frac{dx_i}{A}\cdots
$$

の意味である。この種の積分を「経路積分」と呼ぶ。

つまり

$$
\varphi(R) \;=\; \lim_{\epsilon\to 0}\int\cdots\frac{dx_i}{A}\frac{dx_{i-1}}{A}\cdots e^{\frac{i}{\hbar}S(x_i,x_{i-1})}\cdots
$$

を意味する。

---

[15]複素数の指数関数についてはテイラー展開

$$
e^z = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}z^n
$$

を拡張して定義する。これより

$$
\begin{aligned}
e^{i\theta} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(i\theta)^n = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{(2m)!}(i\theta)^{2m} + \sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{(2m+1)!}(i\theta)^{2m+1} \\
&= \sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{(2m)!}(-)^m\theta^{2m} + i\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{(2m+1)!}(-)^m\theta^{2m+1} \\
&= \cos\theta + i\sin\theta : \qquad \text{Euler の公式}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
e^{2\pi i} &= \cos 2\pi + i\sin 2\pi = 1 \\
e^{z+2\pi i n} &= e^z, \qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots \\
& \quad e^z\text{は周期 } 2\pi i
\end{aligned}
$$

具体的には微少時間間隔 ϵ の 1 次まで正しい作用として、

$$S(x_i, x_{i-1}) = \epsilon L(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}, \frac{x_i - x_{i-1}}{\epsilon})$$

をとればよい。ここで次の諸点に注意する.

- 後述のように $\delta x = x_{i+1} - x_i = \mathcal{O}(\epsilon^{1/2})$。が有効な寄与をすることに注意する。$\delta x = x_{i+1} - x_i >> \epsilon^{1/2}$ は経路積分には効かない。
- $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ の誤差は、時間間隔 T に対して $\mathcal{O}(\epsilon^2) \cdot \frac{T}{\epsilon} = \mathcal{O}(\epsilon) \to 0$ で無視できる。

4.3　古典極限とニュートンの運動方程式

ここで量子力学を特徴づけるプランク定数が零となる極限（$\hbar \to 0$）を考えてみよう。(作用 S として $S/\hbar \to \infty$ を意味する。すなわち十分高エネルギーの現象を考えることに対応する。) このとき量子力学以前の古典力学が再現することを期待するわけである。

この極限をとると

$$\frac{S}{\hbar} \to \infty$$

であるから指数関数の肩の絶対値が非常に大きな値となる。そこで $e^{i\ \text{大きな数}}$ はきわめて早く振動していることに注意すると粒子の経路の小さな変動により作用が少し変化したとき $e^{i\ \text{大きな数}}$ は激しく振動しうち消しあうと考えられる。よってこの古典極限 では確率を最大とする経路を求めると考えては指数関数の肩がなるべく小さくなる条件が満たされると考えられる。すなわち指数関数の肩の作用が停留となる条件が古典極限においては粒子の経路を定めると考えられる。すなわち

古典極限 $S/\hbar \to \infty$

$$\begin{aligned} \delta S &= 0 \quad (\text{最小作用の原理}) \\ \frac{\delta}{\delta x} L &= \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0, \quad (\text{Euler 方程式}) \end{aligned}$$

とニュートン力学が自然に導かれる。

これを少し復習してみよう。

ポテンシャル中の粒子の場合

まず 1 次元のばあいラグランジアンは

$$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)$$

よってオイラー方程式は

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = -\frac{dV}{dx} - \frac{d}{dt} m\dot{x} = -V' - m\ddot{x} = 0$$

これはニュートンの運動方程式

$$m\ddot{x} = -V'$$

を与える。

次に 3 次元の場合

ポテンシャル中の粒子のラグランジュ関数

$$L(\vec{r},\dot{\vec{r}}) = \frac{m}{2}\dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r})$$

オイラー方程式は $\alpha = x, y, z$ として

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial r_\alpha} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}_\alpha} &= -\frac{\partial V}{\partial r_\alpha} - \frac{d}{dt}m\dot{r}_\alpha = -\partial_\alpha V - m\ddot{r}_\alpha \\ m\ddot{r}_\alpha &= -\partial_\alpha V, \quad m\ddot{\vec{r}} = -\vec{\nabla}V \end{aligned}$$

よってこれもニュートン方程式となる。

次に電荷 e の荷電粒子がスカラーポテンシャル $\phi(\vec{r})$, ベクトルポテンシャル $\vec{A}(\vec{r})$ 中にあるときのラグランジアンは次のように与えられることに注意しよう。

荷電粒子のラグランジェ関数

$$L(\vec{r},\dot{\vec{r}}) = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2 - e\phi(\vec{r}) + e\dot{\vec{r}}\cdot\vec{A}(\vec{r})$$

これをまず、確認しよう。オイラー方程式は[16]

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial r_\alpha} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot r_\alpha} &= -e\frac{\partial \phi}{\partial r_\alpha} + e\dot r_\beta \frac{\partial A_\beta}{\partial r_\alpha} - \frac{d}{dt}\left(m\dot r_\alpha + eA_\alpha\right) \\
&= -e\frac{\partial \phi}{\partial r_\alpha} + e\dot r_\beta \frac{\partial A_\beta}{\partial r_\alpha} - m\ddot r_\alpha - e\dot A_\alpha - e\frac{\partial A_\alpha}{\partial r_\beta}\dot r_\beta \\
&= -m\ddot r_\alpha - e\dot A_\alpha - e\partial_\alpha \phi + e\dot r_\beta(\partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha) \\
&= -m\ddot r_\alpha + eE_\alpha + e(\dot{\vec r}\times\vec B)_\alpha = 0
\end{aligned}$$

ここで電場と磁場は

$$\begin{aligned}
\vec E &= -\vec\nabla\phi - \dot{\vec A} \\
\vec B &= \mathrm{rot}\,\vec A \\
(\dot{\vec r}\times\vec B)_\alpha &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\dot r_\beta \epsilon_{\gamma\mu\nu}\partial_\mu A_\nu = (\delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\nu} - \delta_{\alpha\nu}\delta_{\beta\mu})\dot r_\beta \partial_\mu A_\nu \\
&= \dot r_\beta \partial_\alpha A_\beta - \dot r_\beta \partial_\beta A_\alpha
\end{aligned}$$

よって

$$m\ddot{\vec r} = e(\vec E + \dot{\vec r}\times\vec B)$$

これはローレンツ力をうけて運動する粒子の運動方程式でありラグランジアンの正当性が示せた。

[17]

---

[16]

$$\begin{aligned}
\mathrm{rot}\,\vec E + \frac{\partial B}{\partial t} &= \mathrm{rot}\left(\vec\nabla\phi - \dot{\vec A}\right) + \mathrm{rot}\,\dot{\vec A} = 0 \\
\because\ (\mathrm{rot}\,\vec\nabla\phi)_i &= \epsilon_{ijk}\partial_j(\vec\nabla\phi)_k = \epsilon_{ijk}\partial_j\partial_k\phi \\
&= \frac{1}{2}(\epsilon_{ijk}\partial_j\partial_k\phi - \epsilon_{ikj}\partial_k\partial_j\phi) = \frac{1}{2}(\epsilon_{ijk} - \epsilon_{ikj})\partial_j\partial_k\phi = 0 \\
\mathrm{div}\,\vec B &= \mathrm{div}\,\mathrm{rot}\,\vec A = \partial_i(\mathrm{rot}\,\vec A)_i \\
&= \partial_i\epsilon_{ijk}\partial_j A_k = \epsilon_{ijk}\partial_i\partial_j A_k = 0
\end{aligned}$$

と Maxwell 方程式の内 2 個はすでに満たした。

[17]アインシュタインの記法

$$\sum_{i=x,y,z} A_iB_i = \sum_{i=1,2,3} A_iB_i = A_iB_i$$

ならびに

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{i\ell m} = \sum_i \epsilon_{ijk} i\ell m = \delta_{j\ell}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{k\ell}$$

任意の$\vec A,\vec B,\vec C,\vec D$に対して

$$\begin{aligned}
(\vec A\times\vec B)\cdot(\vec C\times\vec D) &= (\vec A\cdot\vec C)(\vec B\cdot\vec D) - (\vec A\cdot\vec D)(\vec B\cdot\vec C) \\
&\because \\
\epsilon_{ijk}A_jB_k\epsilon_{i\ell m}C_\ell D_m &= (\delta_{j\ell}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{k\ell})A_jB_kC_\ell D_m \\
&= A_jB_kC_jD_k - A_jB_kC_kD_j = (\vec A\cdot\vec C)(\vec B\cdot\vec D) - (\vec A\cdot\vec D)(\vec B\cdot\vec C)
\end{aligned}$$

ここで $\chi(\vec{r},t)$ を任意の時空間の関数としてつぎのゲージ変換

$$
\begin{aligned}
\vec{A} &\to \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\chi \\
\phi &\to \phi' = \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t}
\end{aligned}
$$

をおこなっても対応する物理量 $\vec{E}, \vec{B}$ は不変であることに注意する。

$$
\vec{E}' = \vec{E}, \quad \vec{B}' = \vec{B}
$$

つまり、ポテンシャルによる記述には自由度が残っていることに注意しよう。

に注意。ここでクロネッカーのデルタ δ_{ij} は次のように定義される。

$$
\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}
$$

また完全反対称なエディングトンのイプシロン ϵ_{ijjk} は

$$
\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1, \quad \epsilon_{213} = \epsilon_{132} = \epsilon_{321} = -1, \quad \text{その他}\epsilon_{iij} = 0 \cdots
$$

となる。なお完全反対称性とは

$$
\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik} = -\epsilon_{ikj} = -\epsilon_{kji}
$$

を指す。これらを用いて

$$
\begin{aligned}
(\vec{A} \times \vec{B})_i &= \epsilon_{ijk} A_j B_k \\
&= \sum_{j=1}^{3} \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} A_j B_k
\end{aligned}
$$

であり、

$$
\begin{aligned}
(\vec{\nabla} f(\vec{r}))_\alpha &= \partial_\alpha f = \frac{\partial f}{\partial r_\alpha} \\
\mathrm{rot}\, \vec{A} &= \vec{\nabla} \times \vec{A} \\
(\mathrm{rot}\, \vec{A})_i &= \epsilon_{ijk} \partial_j A_k \\
\mathrm{div}\, \vec{A} &= \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \\
&= \partial_i A_i = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial A_i}{\partial r_i}
\end{aligned}
$$

とベクトル解析の公式が書ける。

5 波動関数と物理量、不確定性原理

5.1 波動関数

前節で議論した確率振幅の表式を現時刻 $t = t_i$ に着目して次のように書こう。

$$\begin{aligned} \varphi(R) = \varphi(R', R'') &= \int dx\, \chi^*(x,t)\psi(x,t) \\ \psi(x = x_i, t = t_i) &= \int_{R'} \frac{dx_{i-1}}{A}\frac{dx_{i-2}}{A}\cdots e^{\frac{i}{\hbar}\left(S(x_i,x_{i-1})+S(x_{i-1},x_{i-2})+\cdots\right)} \\ \bar{\chi}(x = x_i, t = t_i) &= \int_{R''} \cdots \frac{dx_{i+2}}{A}\frac{dx_{i+1}}{A}\frac{1}{A}e^{\frac{i}{\hbar}\left(\cdots+S(x_{i+2},x_{i+1})+S(x_{i+1},x_i)\right)} \end{aligned}$$

ここで積分領域 $R = R' + R''$ を過去 R' と未来 R'' に分けたことに注意しよう。ψ は過去の全情報、χ^* は未来の全情報を持っていることとなる。つまり現在の状態が ψ であり、ある観測、実験等を行った後状態 χ となる確率 P が

$$P = \left| \int dx\, \bar{\chi}(x)\psi(x) \right|^2$$

となるわけである。この過去及び現在の全情報を持った複素量

$$\psi(x,t)$$

を時間、空間 (x,t) における <u>波動関数</u> と呼ぶ。

ここで同時に観測可能なすべての物理量の組を $A, B, C, \cdots$ として,[18] [19] それぞれ $a, b, c, \cdots$ の確定した値を示す未来を指定する状態を

$$\bar{\chi}_{a,b,c,\cdots}(x)$$

とすれば観測の結果それぞれの物理量が $a, b, c, \cdots$ の値をとる確率 $P_{a,b,c,\cdots}$ は次のようになる。

$$\begin{aligned} P_{a,b,c,\cdots} &= |\varphi_{a,b,c,\cdots}|^2 \\ \varphi_{a,b,c,\cdots} &= \int dx\, \bar{\chi}_{a,b,c,\cdots}(x)\psi(x) \end{aligned}$$

とくに現在の状態が物理量 $A, B, C, \cdots$ に対してそれぞれその値が $a', b', c', \cdots$ と確定した状態 $\chi_{a',b',c',\cdots}(x)$ (特性関数) であるとするとその確率は 1 か 0 であり、

$$\int dx\, \bar{\chi}_{a,b,c,\cdots}(x)\chi_{a',b',c',\cdots}(x) = \delta_{aa'}\,\delta_{bb'}\,\delta_{cc'}\cdots$$

[18] そのような組は 1 通りとは限らない
[19] これらの値 $a, b, c, \cdots$ で状態が完全に指定される場合を考える。(完全性)

となる。(規格直交性) また「任意」の波動関数に対して[20]

$$\psi(x) = \sum_{a,b,c,\cdots} \varphi_{a,b,c,\cdots} \chi_{a,b,c,\cdots}(x)$$

と波動関数は特性関数で展開できると仮定しよう。

このとき

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sum_{a,b,c,\cdots} \int dx' \, \bar{\chi}_{a,b,c,\cdots}(x')\psi(x')\chi_{a,b,c,\cdots}(x) \\ &= \int dx' \left(\sum_{a,b,c,\cdots} \chi_{a,b,c,\cdots}(x)\bar{\chi}_{a,b,c,\cdots}(x') \right) \psi(x')\end{aligned}$$

よりデルタ関数を用いて

$$\sum_{a,b,c,\cdots} \chi_{a,b,c,\cdots}(x)\bar{\chi}_{a,b,c,\cdots}(x') = \delta(x-x')$$

となる。この関係式を（特性関数の）完全性と呼ぶ。

5.2 物理量とその期待値

次に物理量のいわゆる期待値について議論しよう。

以下の議論では

$$\bar{\chi}_{a,b,c,\cdots} = \chi^*_{a,b,c,\cdots}$$

を仮定し、計算を進めてみよう。(この仮定についてはあとで振り返る。)

前節の議論から観測を行って A の値が a となる確率 P_a は

$$P_a = \sum_{b,c,\cdots} P_{a,b,c,\cdots} = \sum_{b,c,\cdots} |\varphi_{a,b,c,\cdots}|^2$$

(ただし a は実数としよう。複素量はその実部と虚部を別けて考える)) これを用いて物理量 A を多数回観測したときの確率的な期待値を $\langle A \rangle$ と書けば

$$\langle A \rangle = \sum_a a P_a$$

---

[20]

$$\psi'(x) = \sum_{a,b,c,\cdots} \varphi'_{a,b,c,\cdots}\chi_{a,b,c,\cdots}(x)$$

として $\psi'(x)$ をつくれば $\varphi'_{a,b,c,\cdots} = \int dx \bar{\chi}_{a,b,c,\cdots}(x)\psi'(x) = \varphi_{a,b,c}$ すなわち

$$\bar{P}_{a,b,c,\cdots} = P_{a,b,c,\cdots}$$

ここで $A, B, C, \cdots$ が同時に観測可能なすべての物理量であり、状態を完全に指定することを思い出せば、状態 ψ と ψ' とは物理的に区別できないことを意味する。これより展開の一意性と考え $\psi = \psi'$ と書こう.

となる。これを次のように変形しよう。

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \sum_{a,b,c,\cdots} a\varphi^*_{a,b,c,\cdots}\varphi_{a,b,c,\cdots} \\ &= \sum_{a,b,c,\cdots} a\int dx\int dx'\chi_{a,b,c,\cdots}(x)\psi^*(x)\chi^*_{a,b,c,\cdots}(x')\psi(x') \\ &= \int dx\,\psi^*(x)\mathcal{A}\psi(x) = \int dx\int dx'\psi^*(x)\mathcal{A}(x,x')\psi(x)\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}\mathcal{A}\psi(x) &= \int dx'\mathcal{A}(x,x')\psi(x') \\ \mathcal{A}(x,x') &= \sum_{a,b,c,\cdots} a\chi_{a,b,c,\cdots}(x)\chi^*_{a,b,c,\cdots}(x')\end{aligned}$$

この議論により、物理量 A は波動関数に対する<u>対応する線型演算子$\mathcal{A}$</u> を持ち、その波動関数 ψ での期待値は内積の表記を用いて

物理量の期待値

$$\langle A\rangle = \int dx\,\psi^*(x)\mathcal{A}\psi(x) = (\psi,\mathcal{A}\psi)$$

となる。特に内積空間の言葉を借りて任意の波動関数 ψ,ϕ に対して

$$(\mathcal{A}\psi,\phi) = (\psi,\mathcal{A}\phi)$$

の時、演算子 A をエルミートと呼ぶ。そのためには

$$\mathcal{A}(x,x') = \mathcal{A}^*(x',x)$$

が必要十分である。これは行列としてのエルミート性に他ならない。[21]

観測可能な物理量と演算子

観測可能な物理量には波動関数に対するエルミートな線型演算子が対応する

---

[21]

$$\begin{aligned}\int dx\,(\mathcal{A}\psi(x))^*\phi(x) &= \int dx\int dx' A^*(x,x')\psi(x')^*\phi(x) \\ \int dx\psi(x)^*\mathcal{A}\phi(x) &= \int dx\int dx' A(x,x')\psi(x)^*\phi(x') = \int dx\int dx' A(x',x)\psi(x')^*\phi(x)\end{aligned}$$

より

$$\mathcal{A}(x,x') = \mathcal{A}^*(x',x)$$

が必要十分である。

この特性関数 $\chi_{a,b,c,\cdots}(x)$ は次式を満たし、線型演算子 $\mathcal{A}$ の固有関数、a は固有値と呼ばれる。

$$\begin{aligned}\mathcal{A}\chi_{a,b,c,\cdots}(x) &= \int dx' \sum_{a',b',c'\cdots} a\chi_{a',b',c',\cdots}(x)\chi^*_{a',b',c',\cdots}(x')\chi_{a,b,c,\cdots}(x') \\ &= \sum_{a,b,c\cdots} a\chi_{a',b',c',\cdots}(x)\delta_{aa'}\delta_{bb'}\cdots = a\chi_{a,b,c,\cdots}(x)\end{aligned}$$

よって

$$\sum_{a,b,c,\cdots}\big(\mathcal{A}\chi_{a,b,c,\cdots}(x)\big)\chi^*_{a,b,c,\cdots}(x') \;=\; A(x,x')$$

この命題つまり「物理量にエルミート演算子を対応させる」ことを量子力学の基本命題の一つとすれば一般のエルミート演算子の固有関数 $\chi_n(\vec{r})$ は規格化された完全性を作ることを認めれば、固有関数は次の関係式を満たし

$$\begin{aligned}\int dx\chi^*_n(x)\chi_m(x) =&\delta_{nm} \\ \sum_n \chi_n(\vec{r})\chi^*_n(\vec{r}') =&\delta(\vec{r}-\vec{r}')\end{aligned}$$

$\bar{\chi}_{a,b,c,\cdots} = \chi^*_{a,b,c,\cdots}$ と取った仮定が正当化される。

さらにこの特性関数は同時に測定可能な物理量を表す演算子 $\mathcal{A},\mathcal{B},\mathcal{C},\cdots$ に対してつぎのように同時固有関数となっている。[22]

$$\begin{aligned}\mathcal{A}\chi_{a,b,c,\cdots} &= a\chi_{a,b,c,\cdots} \\ \mathcal{B}\chi_{a,b,c,\cdots} &= b\chi_{a,b,c,\cdots} \\ \mathcal{C}\chi_{a,b,c,\cdots} &= c\chi_{a,b,c,\cdots} \\ &\vdots\end{aligned}$$

また任意の（物理的な）波動関数は特性関数で展開できるのでこれらの線型演算子はお互いに可換となる。

$$\begin{aligned}\mathcal{AB}\psi(x) &= \mathcal{AB}\sum_{a,b,c,\cdots}\chi_{a,b,c}(x) = \mathcal{A}\sum_{a,b,c,\cdots}\mathcal{B}\chi_{a,b,c}(x) \\ &= \mathcal{A}\sum_{a,b,c,\cdots} b\chi_{a,b,c}(x) = \sum_{a,b,c,\cdots} b\mathcal{A}\chi_{a,b,c}(x) = \sum_{a,b,c,\cdots} ba\chi_{a,b,c}(x) \\ &= \mathcal{BA}\psi(x) \\ &\quad \text{つまり } \mathcal{AB}=\mathcal{BA}\end{aligned}$$

22

$$\begin{aligned}(\mathcal{A}\chi_{a,b,c,\cdots})(x) &= \int dx' \sum_{a',b',c',\cdots} a'\chi_{a',b',c',\cdots}(x)\chi^*_{a',b',c',\cdots}(x')\cdot\chi_{a,b,c,\cdots}(x') \\ &= \sum_{a',b',c',\cdots} a'\chi_{a',b',c',\cdots}(x)\delta_{aa'}\delta_{bb'}\delta_{cc'}\cdots = a\chi_{a,b,c,\cdots}(x)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{AB} = \mathcal{BA}, \qquad \mathcal{AC} &= \mathcal{CA}, \qquad \mathcal{BC} = \mathcal{CB}, \cdots \\
[\mathcal{A}, \mathcal{B}] &\equiv \mathcal{AB} - \mathcal{BA} = 0 \\
[\mathcal{A}, \mathcal{C}] &= [\mathcal{B}, \mathcal{C}] = 0 \cdots
\end{aligned}
$$

またその対偶として常に正しい表現

ハイゼンベルグの不確定性原理

「非可換な演算子により表現される物理量は同時に観測することはできない」

が得られる。このハイゼンベルグの不確定性原理は量子力学における基本的な事実である。

5.3 運動量と波数

波数 (k_x, k_y, k_z) が確定した状態の波動関数 (特性関数) である平面波

$$
\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}
$$

を特性関数とする物理量を運動量 $\hbar\vec{k}$ と呼ぼう。ここで系は $V = L^3$ は 1 辺 L の立方体であり、周期的境界条件

$$
\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y+L, z) = \psi(x, y, z+L) = \psi(x, y, z)
$$

を課すと波数は

$$
\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z), \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots
$$

となる。よって任意の波動関数 $\psi(\vec{r})$ に対して

$$
\vec{\mathcal{P}}\psi(\vec{r}) = \int d\vec{r}\,' \vec{\mathcal{P}}(\vec{r}, \vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')
$$

ここで

$$
\vec{\mathcal{P}}(\vec{r}, \vec{r}\,') = \sum_{\vec{k}} \hbar\vec{k}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\psi^*_{\vec{k}}(\vec{r}\,') = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} \hbar\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}
$$

よって[23]

$$
\begin{aligned}
\vec{\mathcal{P}}\psi(\vec{r}) &= \int d\vec{r}\,'\frac{1}{V}\sum_{\vec{k}}\hbar\vec{k}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\psi(\vec{r}\,') \\
&= \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}}\int d\vec{r}\,'\frac{1}{V}\sum_{\vec{k}}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\psi(\vec{r}\,') \\
&= \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}}\int d\vec{r}\,'\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,') = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}}\,\psi(\vec{r})
\end{aligned}
$$

つまり

運動量演算子

$$
\vec{\mathcal{P}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}}
$$

5.4 位置演算子

空間座標 $\vec{r}$ が $\vec{r}=\vec{a}$ に確定した状態の波動関数 (特性関数) $\chi_{\vec{a}}$ は Dirac のデルタ関数で

$$
\chi_{\vec{a}}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{a})
$$

で与えられる。よって任意の波動関数 $\psi(\vec{r})$ に関して

$$
\vec{\mathcal{R}}\psi(\vec{r}) = \int d\vec{r}\,'\vec{\mathcal{R}}(\vec{r},\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')
$$

ここで

$$
\vec{\mathcal{R}}(\vec{r},\vec{r}\,') = \int d\vec{a}\,\vec{a}\chi_{\vec{a}}(\vec{r})\chi^*_{\vec{a}}(\vec{r}\,') = \int d\vec{a}\,\vec{a}\delta(\vec{r}-\vec{a})\delta(\vec{r}\,'-\vec{a})
$$

[23]

$$
\frac{1}{V}\sum_{\vec{k}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{L^3}\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3(\Delta k)^3\sum_{\vec{k}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \delta(\vec{r})
$$

ここで Dirac のデルタ関数とは任意の関数 $f(x)$ に関して

$$
\int dx\,f(x)\delta(x-a) = f(a)
$$

となるものを指す。

一次元のとき

$$
\delta_K(x) = \int_{-K}^{K}\frac{dk}{2\pi}e^{ikx} = \frac{1}{2\pi}\frac{e^{iKx}-e^{-iKx}}{ix} = \pi K\frac{\sin Kx}{Kx}
$$

は $\lim_{x\to 0}\delta_K(x) = 2K \to \infty \quad (K\to\infty)$ ならびに $x\neq 0$ で $K\to\infty$ とともに非常に早く振動しさらに $\int_{-\infty}^{\infty}\delta_K(x) = 1$ に注意しよう。

よって

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{R}}\psi(\vec{r}) &= \int d\vec{r}\,' \int d\vec{a}\,\vec{a}\delta(\vec{r}-\vec{a})\delta(\vec{r}\,'-\vec{a})\psi(\vec{r}\,') \\ &= \int d\vec{a}\,\vec{a}\delta(\vec{r}-\vec{a})\psi(\vec{a}) = \vec{r}\,\psi(\vec{r})\end{aligned}$$

つまり

位置演算子

$$\vec{\mathcal{R}} = \vec{r}\,\cdot \qquad \text{(かけ算)}$$

となる。

一般に微分演算とかけ算は次のように可換でないので

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_x\mathcal{R}_x\psi(\vec{r}) &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Big(x\psi(\vec{r})\Big) \\ &= -i\hbar\psi - i\hbar\partial_x\psi \\ \mathcal{R}_x\mathcal{P}_x\psi(\vec{r}) &= \mathcal{R}_x\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r})\Big) \\ &= -ix\hbar\partial_x\psi \\ \text{つまり}\ \mathcal{R}_x\mathcal{P}_x &\neq \mathcal{P}_x\mathcal{R}_x\end{aligned}$$

これらから <u>粒子の運動量と位置は同時に観測することはできない</u> こととなる。

6 シュレディンガー方程式

典型的な作用関数に対してその確率振幅を与える波動関数が満たす偏微分方程式を導こう。この方程式はシュレディンガー方程式と呼ばれる。まず、$x_{i+1}=x$, $t_{i+1}=t+\epsilon$, $x_i=y$, $t_i=t$ として

$$\begin{aligned}\psi(x,t+\epsilon) &= \int \frac{dy}{A} e^{\frac{i}{\hbar}S(x,y)}\psi(y,t)\\ S(x,y) &= \epsilon L(\frac{x+y}{2},\frac{x-y}{\epsilon})\end{aligned}$$

この両辺を ϵ^1 まで展開して比較する。

6.1 ポテンシャル中の粒子

この場合ラグランジアンは

$$L(x,\dot{x})=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x)$$

であるから、

$$\begin{aligned}(l.h.s) &= \psi+\epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}\\ (r.h.s.) &= \int\frac{dy}{A}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon\left\{\frac{m}{2}(\frac{x-y}{\epsilon})^2-V(\frac{x+y}{2})\right\}\right]\psi(y,t) \qquad (x-y=\xi)\\ &= \int\frac{d\xi}{A}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{\xi}{\epsilon}\right)^2-V(x-\frac{\xi}{2})\right\}\right]\psi(x-\xi,t)\\ &= \frac{1}{A}\int d\xi\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m\xi^2}{2\epsilon}-\epsilon V(x-\frac{\xi}{2})\right\}\right]\psi(x-\xi,t)\\ &= \frac{1}{A}\int d\xi\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m\xi^2}{2\epsilon}-\epsilon V(x)\right\}\right]\times\left(\psi(x)-\xi\psi'(x)+\frac{1}{2}\xi^2\psi''(x)\right)\end{aligned}$$

ここで $\xi^2\sim\epsilon$ より大きな ξ は振動が激しくなるためその寄与がうち消しあうため

$$\xi=x_i-x_{i-1}=\mathcal{O}(\epsilon^{\frac{1}{2}})$$

のみが主要な寄与を与える。よって

$$\psi+\epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t} = e^{-\frac{i}{\hbar}V(x)\epsilon}\frac{1}{A}\int d\xi e^{\frac{im}{2\epsilon\hbar}\xi^2}\left(\psi+\frac{1}{2}\xi^2\psi''\right)$$

ここで

$$\begin{aligned}\int d\xi e^{\frac{im}{2\epsilon\hbar}\xi^2} &= \left(\frac{2\pi\hbar\epsilon i}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\\ \int d\xi e^{\frac{im}{2\epsilon\hbar}\xi^2}\xi^2 &= \frac{\hbar\epsilon i}{m}\left(\frac{2\pi\hbar\epsilon i}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

を使うと（適宜収束因子を導入後に計算し最後に零とする。）[24] [25]

$$\psi + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{A}\left(1 - \frac{i}{\hbar}V(x)\epsilon\right)\left(\frac{2\pi\hbar\epsilon i}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\psi + \frac{\hbar i}{2m}\epsilon\psi''\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

よって ψ の最低次を比べて

$$A = \left(\frac{2\pi\hbar\epsilon i}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$$

次に ϵ をみて

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}V\psi + \frac{i\hbar}{2m}\psi''$$

これより波動関数は次の微分方程式をみたす

電磁場のない場合のシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi$$

これば単純に 3 次元にも拡張できて

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}\right)\psi + V\psi \\ &= \left(\frac{\vec{\mathcal{P}}^2}{2m} + V\right)\psi, \end{aligned}$$

[24] 例えば $\epsilon \to \epsilon - i0$ とする。

$$\frac{im\xi^2}{2\hbar(\epsilon - i0)} = \left(-0 + \frac{im}{2\hbar\epsilon}\right)\xi^2$$

[25]

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ax^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-ay^2} \qquad \mathrm{Re}\, a > 0 \\ I^2 &= \int dx \int dy e^{-a(x^2+y^2)} = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} dr r e^{-ar^2} = 2\pi\frac{1}{2}\int_0^{\infty} d(r^2) e^{-a(r^2)} = \frac{\pi}{a} \\ I &= \left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

a で微分して

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2 e^{-ax^2} = \frac{1}{2a}\left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{1}{2}}$$

6.2 電磁場中の荷電粒子

電荷 e の荷電粒子がスカラーポテンシャル $\phi(\vec{r})$, ベクトルポテンシャル $\vec{A}(\vec{r})$ 中にあるときのラグランジアンは

$$L(\vec{r},\dot{\vec{r}}) = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2 - e\phi(\vec{r}) + e\dot{\vec{r}}\cdot\vec{A}(\vec{r})$$

であることから

次に電磁場がないときと同様に本節最初の式を展開する。

$$\begin{aligned}
(l.h.s) &= \psi(\vec{r}) + \epsilon\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial t} \\
(r.h.s.) &= \int\frac{d\vec{r}'}{A^3}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon\left\{\frac{m}{2}(\frac{\vec{r}-\vec{r}'}{\epsilon})^2 - e\phi(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2}) + e\frac{\vec{r}-\vec{r}'}{\epsilon}A(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2})\right\}\right]\psi(\vec{r}',t) \qquad (\vec{r}-\vec{r}'=\vec{\xi}) \\
&= \int\frac{d\vec{\xi}}{A^3}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon\left\{\frac{m}{2}(\frac{\vec{\xi}}{\epsilon})^2 - e\phi(\vec{r}-\frac{\vec{\xi}}{2}) + e\frac{\vec{\xi}}{\epsilon}\cdot A(\vec{r}-\frac{\vec{\xi}}{2})\right\}\right]\psi(\vec{r}-\vec{\xi}) \\
&\qquad (\text{ up to}\mathcal{O}(\epsilon^1),\ |\vec{\xi}| = \mathcal{O}(\epsilon^{1/2})) \\
&= \int\frac{d\vec{\xi}}{A^3}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m}{2}\frac{\vec{\xi}^2}{\epsilon} - \epsilon e\phi(\vec{r}) + e\vec{\xi}\cdot\left(\vec{A}-\frac{\vec{\xi}}{2}\cdot\vec{\nabla}\vec{A}\right)\right\}\right]\left(\psi - \vec{\xi}\cdot\vec{\nabla}\psi + \frac{1}{2}(\vec{\xi}\cdot\vec{\nabla})^2\psi\right)
\end{aligned}$$

ここで $|\vec{\xi}| = \mathcal{O}(\epsilon^{1/2})$ と考えて $\mathcal{O}(\epsilon^1)$ まで展開すると $\vec{\xi}$ の奇数次の積分が消えることにも注意して

$$\begin{aligned}
(r.h.s.) &= \int\frac{d\vec{\xi}}{A^3}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{\vec{\xi}^2}{\epsilon}}\left[1 + \frac{i}{\hbar}\left\{-\epsilon e\phi(\vec{r}) + e\vec{\xi}\cdot\left(\vec{A}-(\frac{\vec{\xi}}{2}\cdot\vec{\nabla})\vec{A}\right)\right\} + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 e^2\vec{\xi}^2\vec{A}^2\right] \\
&\qquad\times\left(\psi - \xi\cdot\vec{\nabla}\psi + \frac{1}{2}(\xi\cdot\vec{\nabla})^2\psi\right) \\
&= \int\frac{d\vec{\xi}}{A^3}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{\vec{\xi}^2}{\epsilon}}\left[\psi + \frac{1}{2}(\xi\cdot\vec{\nabla})^2\psi - \frac{i}{\hbar}\epsilon e\phi\psi\right. \\
&\qquad\left. + \frac{i}{\hbar}\left\{-e(\vec{\xi}\cdot\vec{A})\vec{\xi}\cdot\vec{\nabla}\psi - e\vec{\xi}\cdot(\frac{\vec{\xi}}{2}\cdot\vec{\nabla})\vec{A}\psi\right\} - \frac{1}{2}\frac{1}{\hbar^2}e^2\vec{\xi}^2\vec{A}^2\psi\right] \\
&= \psi + \frac{i\epsilon\hbar}{m}\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2\psi - \frac{i}{\hbar}\epsilon e\phi\psi + \frac{i}{\hbar}\frac{i\epsilon\hbar}{m}\left\{-e\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi - \frac{1}{2}e(\vec{\nabla}\cdot\vec{A})\psi\right\} - \frac{i\epsilon\hbar}{m}\frac{1}{2\hbar^2}e^2\vec{A}^2\psi \\
&= (l.h.s.) = \psi + \epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}
\end{aligned}$$

よって[26]

---

[26]

$$\begin{aligned}
f(\vec{r}+\vec{\xi}) &= f(\vec{r}+t\vec{\xi})\Big|_{t=1} \\
&= \sum_n\frac{1}{n!}t^n\left(\frac{d^n}{dt^n}f(\vec{r}+t\vec{\xi})\big|_{t=0}\right)\Big|_{t=1} \\
&= \sum_n\frac{1}{n!}(\vec{\xi}\cdot\vec{\nabla})^n f(\vec{r})
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
i\hbar\dot{\psi} &= \left[-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} + \frac{ie\hbar}{2m}\left(\vec{A}\cdot\vec{\nabla} + \vec{\nabla}\cdot\vec{A}\right) + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^{\,2} + e\phi\right]\psi \\
&= \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}\right)^2 + e\phi\right]\psi \\
&= \left[\frac{1}{2m}\left(\vec{\mathcal{P}} - e\vec{A}\right)^2 + e\phi\right]\psi
\end{aligned}
$$

電磁場中の荷電粒子のシュレディンガー方程式

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= H\phi \\
H &= \left[\frac{1}{2m}\left(\vec{\mathcal{P}} - e\vec{A}\right)^2 + e\phi\right]
\end{aligned}
$$

この H をハミルトニアンと呼ぶ。

また

$$
\vec{\nabla}\vec{A}\psi = \vec{\nabla}\cdot(\vec{A}\psi) = (\vec{\nabla}\cdot\vec{A})\psi + \vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi
$$

7 正準量子化

この節で通常のいわゆる正準量子化との対応について議論しておこう。

7.1 古典論の正準形式

前節最後に与えた H はハミルトニアンと呼ばれ、一般のラグランジアン $L = L(\vec{r}, \dot{\vec{r}})$ に対して独立変数をルジャンドル変換により

$$\vec{r}, \dot{\vec{r}}$$

から

$$\vec{r}, \vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} \quad (\text{各成分ごと})$$

に変えることにより次のようにして得られる。

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \vec{p} \cdot \dot{\vec{r}} - L(\vec{r}, \dot{\vec{r}})$$

このハミルトニアンに関してハミルトンの運動方程式

ハミルトンの運動方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \vec{r}} &= -\dot{\vec{p}} \\ \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} &= \dot{\vec{r}} \end{aligned}$$

はラグランジアン L に関するオイラー方程式、すなわち最小作用の原理（ニュートン力学）と同値であることが示せる.

すなわち古典的粒子の運動はこのハミルトンの運動方程式により定まることとなる。[27]

[27] 1次元の時、ここでこのハミルトニアンを用いてオイラー方程式を書き直すことを考えよう。まず、ハミルトニアンの微小変化に対して

$$\begin{aligned} dH &= \frac{\partial H}{\partial x}dx + \frac{\partial H}{\partial p}dp \qquad \text{一方 } x, \dot{x} \text{が } x, p \text{ の関数となっていることを考えて} \\ &= dp\dot{x} + p\left(\frac{\partial \dot{x}}{\partial x}dx + \frac{\partial \dot{x}}{\partial p}dp\right) - \frac{\partial L}{\partial x}dx - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\left(\frac{\partial \dot{x}}{\partial x}dx + \frac{\partial \dot{x}}{\partial p}dp\right) \\ &= \left(p\frac{\partial \dot{x}}{\partial x} - \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\frac{\partial \dot{x}}{\partial x}\right)dx + \left(\dot{x} + p\frac{\partial \dot{x}}{\partial p} - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\frac{\partial \dot{x}}{\partial p}\right)dp \qquad p \text{ の定義をつかって} \\ &= -\frac{\partial L}{\partial x}dx + \dot{x}dp \end{aligned}$$

　また H が明示的に時間に依存しない時、H は時間に依存しないことが、ハミルトンの運動方程式から次の通り示せる.

$$\begin{aligned}\frac{dH}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial H}{\partial p}\dot{p} \\ &= -\dot{p}\dot{x} + \dot{x}\dot{p} = 0\end{aligned}$$

すなわち H は (エネルギーと呼ばれる) 保存量となる．特にポテンシャル中の粒

ここでオイラー方程式 $\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0$ であれば

$$\begin{aligned}dH &= -\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}dx + \dot{x}dp \\ &= -\dot{p}dx + \dot{x}dp\end{aligned}$$

すなわちオイラー方程式と運動量の定義からつぎのハミルトンの運動方程式

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial x} &= -\dot{p} \\ \frac{\partial H}{\partial p} &= \dot{x}\end{aligned}$$

が導出される。一方逆にハミルトンの運動方程式を仮定しラグランジアン $L(x,\dot{x})$ を

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

と定義しよう。ただしここで p も $\dot{x}, x$ で逆に解かれていると考える。よって

$$\begin{aligned}dL &= \frac{\partial L}{\partial x}dx + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}d\dot{x} \\ &= \left(\frac{\partial p}{\partial x}dx + \frac{\partial p}{\partial \dot{x}}d\dot{x}\right)\dot{x} + pd\dot{x} - \left(\frac{\partial H}{\partial x}dx + \frac{\partial H}{\partial p}\left(\frac{\partial p}{\partial x}dx + \frac{\partial p}{\partial \dot{x}}d\dot{x}\right)\right) \\ &= \left(\dot{x}\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial H}{\partial x} - \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial x}\right)dx + \left(\dot{x}\frac{\partial p}{\partial \dot{x}} + p - \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial \dot{x}}\right)d\dot{x}\end{aligned}$$

　正準方程式をつかって

$$= \dot{p}dx + pd\dot{x}$$

これより

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial x} &= \dot{p} \\ \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} &= p\end{aligned}$$

よって

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0$$

とオイラー方程式が導ける。

子 $L=\frac{m}{2}(\dot{\vec{r}})^2-V(\vec{r})$ の場合[28]

ポテンシャル中の粒子系の運動量とハミルトニアン

$$\begin{aligned}\vec{p} &= m\dot{\vec{r}}\\ H &= \frac{m}{2}\dot{\vec{r}}^2+V(\vec{r})\end{aligned}$$

と H は、エネルギー汎関数を与える．また電磁場中の粒子 $L=\frac{m}{2}(\dot{\vec{r}})^2-e\phi(\vec{r})+e\dot{\vec{r}}\cdot\vec{A}(\vec{r})$ の場合[29]

荷電粒子の運動量とハミルトニアン

$$\begin{aligned}\vec{p} &= m\dot{\vec{r}}_i+e\vec{A}\\ H &= \frac{m}{2}\dot{\vec{r}}^2+e\phi(\vec{r})\\ &= \frac{1}{2m}(\vec{p}-e\vec{A})^2+e\phi(\vec{r})\end{aligned}$$

となる．

　このハミルトニアンを記述する変数 $\vec{r}$, $\vec{p}$ を正準変数と呼ぶ．さらにハミルトニアンが運動の定数

$$H=E\ \text{定数}$$

[28]

$$\begin{aligned}p_i &= \frac{\partial L}{\partial\dot{r}_i}=m\dot{r}_i\\ H &= p_i\dot{r}_i-L=\frac{m}{2}(\dot{\vec{r}})^2+V(\vec{r})\end{aligned}$$

[29]

$$\begin{aligned}p_i &= \frac{\partial L}{\partial\dot{r}_i}=m\dot{r}_i+eA_i\\ H &= p_i\dot{r}_i-L=(m\dot{r}_i+eA_i)\dot{r}_i-\frac{m}{2}(\dot{\vec{r}})^2+e\phi(\vec{r})-e\dot{\vec{r}}\cdot\vec{A}(\vec{r})\\ &= \frac{m}{2}(\dot{\vec{r}})^2+e\phi(\vec{r})\\ &= \frac{1}{2m}(\vec{p}-e\vec{A})^2+e\phi(\vec{r})\end{aligned}$$

であるとき、作用積分 S は次のような表示を持つ.

$$
\begin{aligned}
S &= \int_{t_1}^{t_2} dt\, L \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\vec{p}\cdot\dot{\vec{r}} - H\right) \\
&= \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} \vec{p}\cdot d\vec{r} - E(t'-t)
\end{aligned}
$$

7.2 古典論の運動方程式とポアソン括弧

さらに一般の物理量 $\mathcal{O}$ を考えたときこれは正準変数の関数 $\mathcal{O}(\{r_i\},\{p_i\},t)$ であることを思い出せば運動はつぎの方程式により定まる。[30]

$$
\frac{d\mathcal{O}}{dt} = \frac{\partial\mathcal{O}}{\partial t} + \{\mathcal{O}, H\}
$$

ここで A, B に対するポアソン括弧式を次のように定義する。

$$
\{A, B\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial r_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial r_i}\frac{\partial A}{\partial p_i}\right)
$$

よって物理量 $\mathcal{O}$ が時間 t にあらわに依存しないときハミルトニアンとのポアソン括弧式がゼロであれば

$$
\{\mathcal{O}, H\} = 0
$$

$\mathcal{O}$ は保存量となる。また正準変数のあいだのポアソン括弧はお互いに共役なものの間でのみ有限で次のようになる。

$$
\{r_i, p_j\} = \delta_{ij}
$$

30

$$
\begin{aligned}
\frac{d\mathcal{O}}{dt} &= \frac{\partial\mathcal{O}}{\partial t} + \frac{\partial\mathcal{O}}{\partial r_i}\frac{dr_i}{dt} + \frac{\partial\mathcal{O}}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt} \\
&= \frac{\partial\mathcal{O}}{\partial t} + \frac{\partial\mathcal{O}}{\partial r_i}\dot{r}_i + \frac{\partial\mathcal{O}}{\partial p_i}\dot{p}_i \\
&= \frac{\partial\mathcal{O}}{\partial t} + \frac{\partial\mathcal{O}}{\partial r_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial\mathcal{O}}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} \\
&= \frac{\partial\mathcal{O}}{\partial t} + \{\mathcal{O}, H\}
\end{aligned}
$$

7.3 正準量子化とハイゼンベルグの運動方程式

正準量子化

前節まで議論した経路積分による量子力学によれば系の現在を規定する波動関数 $\psi(t,\vec{r})$ はシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t,\vec{r})}{\partial t} = H\psi(t,\vec{r})$$

に従う。ここで H はハミルトニアン演算子であり古典的ハミルトニアン $H_{cl}(\vec{r},\vec{p})$ において正準変数 $(r_i,p_i), i=x,y,z$ に対して $r_i\to\hat{r}_i=r_i\cdot$(掛算演算), $p_i\to\hat{p}_i=i\hbar\frac{\partial}{\partial r_i}$ と置き換えることにより得られた演算子である。特に演算子の間の交換子 $[,\ ]$ を

$$[\hat{A},\hat{B}]\cdot = \hat{A}(\hat{B}\cdot)-\hat{B}(\hat{A}\cdot)$$

と定義すれば古典論の正準変数を交換子がゼロとならないつまりと非可換な演算子 $\hat{r}_i$, $\hat{p}_j$ におきかえたこととなる。

$$H = H_{cl}(\hat{r},\hat{p})$$

また正準変数の間の交換子を古典的ポアソン括弧式 $\{r_i,p_j\}=\delta_{ij}$ と対応させれば

$$[\hat{r}_i,\hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

であることに注意して

$$\{A,B\}\to\frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{B}]$$

と置き換えたことに対応する。以上の手続きを正準量子化と呼ぶ。

ユニタリ変換と表示

さらに前節までの議論から物理量はあるエルミート演算子 $\mathcal{O}$ に対応しその時刻 t での期待値は次のように定まることを知った。

$$\langle\mathcal{O}\rangle=\int d^3r\psi^*(t,\vec{r})\mathcal{O}\psi(t,\vec{r}),\qquad \int d^3r|\psi(t,\vec{r})|^2=1$$

これをシンボリックに

$$\begin{aligned}\langle\mathcal{O}\rangle &= \langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle=\langle t|\mathcal{O}_S|t\rangle\\ |t\rangle &\equiv |\psi\rangle\\ \mathcal{O}_S &\equiv \mathcal{O}\end{aligned}$$

と書こう。最後の記法は線形演算子とそれが作用する状態ベクトルを明示した記法である。これらの物理的な状態が作る内積空間をヒルベルト空間と呼ぶ。以上の議論はをシュレディンガー表示による議論と呼ばれる。

ここでヒルベルト空間における基底ベクトルのユニタリ変換 U を考えよう。

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I$$

ここで線形演算子に対しても対応するユニタリ変換を行えばその内積は不変であることに注意しよう。すなわち

$$\begin{aligned}\langle\psi|A|\phi\rangle =& \langle\psi U^\dagger U|A|U^\dagger U\phi\rangle = \langle\psi'|A'|\phi'\rangle \\ & |\psi'\rangle = U|\psi\rangle, \quad |\phi'\rangle = U|\phi\rangle \\ & A' = UAU^\dagger\end{aligned}$$

とくに

$$U = e^{iHt/\hbar}$$

ととるとシュレディンガー方程式 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$ の型式解が

$$\begin{aligned}\psi(t) =& e^{-iHt/\hbar}\psi(t=0) \\ |t\rangle =& e^{-iHt/\hbar}|0\rangle\end{aligned}$$

であることに対応して状態 $\psi(t)$ に対応する状態ベクトルを変換した状態ベクトルは常に $|0\rangle$ に等しく時間に依存しない。この状態ベクトルをハイゼンベルグ表示の状態ベクトル $|\rangle_H$ と呼ぶ。

$$|\rangle_H = |0\rangle = |t=0\rangle_S$$

物理量に対応するエルミート演算子もこの変換に対応してハイゼンベルグ表示の演算子を

$$\mathcal{O}_H = \mathcal{O}_H(t) = U\mathcal{O}_S U^\dagger = e^{iHt/\hbar}\mathcal{O}_S e^{-iHt/\hbar}$$

と定義すれば期待値は当然表示によらず

$$\langle\mathcal{O}\rangle = \langle\mathcal{O}\rangle_H = \langle\mathcal{O}\rangle_S$$

となる。ここで

$$\begin{aligned}\langle\mathcal{O}\rangle_H =& {}_H\langle|\mathcal{O}_H(t)|\rangle_H \\ \langle\mathcal{O}\rangle_S =& {}_S\langle t|\mathcal{O}_S|t\rangle_S\end{aligned}$$

とシュレディンガー表示では時間にあらわに依存しない演算子に対するハイゼンベルグ表示の演算子ば時間に依存しハイゼンベルグ表示では状態が時間に依存しない。

ここで物理量の時間変化を考えるのにはハイゼンベルグ表示がもっとも簡単で

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\mathcal{O}\rangle =& {}_H\langle|\frac{d}{dt}\mathcal{O}_H(t)|\rangle_H \\
=& {}_H\langle\left(\frac{\partial\mathcal{O}}{\partial t}\right)_H\rangle_H + \frac{1}{i\hbar}\langle[O_H, H]\rangle \\
\frac{\partial\mathcal{O}}{\partial t} =& e^{iHt/\hbar}\frac{\partial\mathcal{O}_S}{\partial t}e^{-iHt/\hbar}
\end{aligned}
$$

よって任意の表示で

$$
\frac{d}{dt}\langle\mathcal{O}\rangle = \left\langle\left(\frac{\partial\mathcal{O}}{\partial t}\right)\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[O, H]\rangle
$$

ただし演算子の時間微分はシュレディンガー表示で計算したのちに任意の表示に変換するものとする。この表式を古典的な物理量の運動方程式と比較すればここでも対応原理

$$
\{\cdot,\cdot\} \to \frac{1}{i\hbar}[\cdot,\cdot]
$$

が成立していることに注意しよう。この量子力学的な物理量の期待値の運動方程式をハイゼンベルグの運動方程式と呼ぶ。

8 時間発展演算子

8.1 時間発展演算子のラグランジェ形式での表式

前節の波動関数の経路積分表示

$$
\psi(x_i, t_i) \;=\; \int_{R'} \frac{dx_{i-1}}{A}\frac{dx_{i-2}}{A}\cdots e^{\frac{i}{\hbar}\left(S(x_i,x_{i-1})+S(x_{i-1},x_{i-2})+\cdots\right)}
$$

を用いると $t_i > t_j$ として

時間発展演算子の経路積分表示 (ラグランジェ形式)

$$
\begin{aligned}
\psi(x_i,t_i) &= \int dx_j \mathcal{K}(x_i,x_j)\psi(x_j,t_j) \\
\mathcal{K}(x_i,x_j) &= \lim_{n\to\infty}\int \frac{dx_{i-1}}{A}\frac{dx_{i-2}}{A}\cdots\frac{dx_{j+1}}{A}\frac{1}{A}e^{\frac{i}{\hbar}\left(S(x_i,x_{i-1})+S(x_{i-1},x_{i-2})+\cdots+S(x_{j+1},x_j)\right)} \\
& \quad A=\left(\frac{2\pi\hbar\epsilon i}{m}\right)^{\frac{1}{2}},\quad n\,\text{等分},\text{積分は}\,n-1\,\text{個}, A\,\text{は}\,n\,\text{個},\quad \epsilon=\frac{t_j-t_i}{n} \\
&= \int_{\substack{x(t_i)=x_i \\ x(t_j)=x_j}} Dx(t)\ e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_j}^{t_i}dt\,L(x,\dot{x},t)} = \int_{\substack{x(t_i)=x_i \\ x(t_j)=x_j}} Dx(t)\ e^{\frac{i}{\hbar}S}
\end{aligned}
$$

3 次元なら

$$
\begin{aligned}
\psi(\vec{r}_i,t_i) &= \int d^3r_j \mathcal{K}(\vec{r}_i,\vec{r}_j)\psi(\vec{r}_j,t_j) \\
\mathcal{K}(\vec{r}_i,\vec{r}_j) &= \lim_{n\to\infty}\frac{1}{A^3}\prod_{k=1}^{n-1}\left(\int\frac{d^3r_k}{A^3}\right)e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{n}\epsilon L(\frac{\vec{r}_k+\vec{r}_{k-1}}{2},\frac{\vec{r}_k-\vec{r}_{k-1}}{\epsilon})} \\
&= \int_{\substack{\vec{r}(t_i)=\vec{r}_i \\ \vec{r}(t_j)=\vec{r}_j}} D\vec{r}(t)\ e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_j}^{t_i}dt\,L(\vec{r},\dot{\vec{r}},t)} = \int_{\substack{\vec{r}(t_i)=\vec{r}_i \\ \vec{r}(t_j)=\vec{r}_j}} D\vec{r}(t)\ e^{\frac{i}{\hbar}S}
\end{aligned}
$$

と時間発展演算子 $\mathcal{K}(x,y)$ の経路積分表示が得られる。なお

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}(x,y) &= \delta(x-y) \quad t_x=t_y \\
\mathcal{K}(x,y) &= \big(\mathcal{K}(y,x)\big)^{-1} \quad t_x<t_y
\end{aligned}
$$

と定義しておく。

以下この時間発展演算子 $\mathcal{K}$ をいくつかの場合に具体的に求めるが，その前にこの時間発展演算子のハミルトン形式による経路積分の表式について議論しておこう。

8.2　時間発展演算子のハミルトニアン形式での表現

ラグランジアンに含まれる経路の時間微分に由来する項 $\frac{\vec{r}_k-\vec{r}_{k-1}}{\epsilon}$ を消去するために各時間間隔 $t_{k-1}\to t_k$ 毎にあらたな変数として運動量 p_k を定義する。具体的に

は平方完成とガウス積分をもちい[31] より、ポテンシャルの項をつけくわえて

$$\begin{aligned}\mathcal{K}(\vec{r}_i,\vec{r}_j) &= \lim_{n\to\infty}\prod_{k=1}^{n-1}\left(\int\frac{d^3r_kd^3p_k}{(2\pi\hbar)^3}\right)\, e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{n}\vec{p}_k\cdot\Delta\vec{r}-\epsilon H(\frac{\vec{r}_k+\vec{r}_{k-1}}{2},p_k)}\\ &= \int_{\substack{\vec{r}(t_i)=\vec{r}_i\\ \vec{r}(t_j)=\vec{r}_j}} D\vec{r}(t)D\vec{p}(t)\; e^{\frac{i}{\hbar}\int\vec{p}\cdot d\vec{r}-\int_{t_j}^{t_i}dt\,H(\vec{r},\vec{p})}\\ &= \int_{\substack{\vec{r}(t_i)=\vec{r}_i\\ \vec{r}(t_j)=\vec{r}_j}} D\vec{r}(t)D\vec{p}(t)\; e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_j}^{t_i}dt\,\left(\vec{p}\cdot\dot{\vec{r}}-H(\vec{r},\vec{p})\right)}\end{aligned}$$

時間発展演算子：ハミルトン形式

$$\mathcal{K}(\vec{r}_i,\vec{r}_j) = \int_{\substack{\vec{r}(t_i)=\vec{r}_i\\ \vec{r}(t_j)=\vec{r}_j}} D\vec{r}(t)D\vec{p}(t)\; e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_j}^{t_i}dt\,\left(\vec{p}\cdot\dot{\vec{r}}-H(\vec{r},\vec{p})\right)}$$

[31] まず、

$$\begin{aligned}\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\Delta\vec{r}-\epsilon\frac{1}{2m}(\vec{p}-e\vec{A})^2\right) &= -\frac{i}{\hbar}\frac{\epsilon}{2m}\left((\vec{p}-e\vec{A})^2-\frac{2m}{\epsilon}\Delta\vec{r}\cdot\vec{p}\right) = -\frac{\epsilon i}{2m\hbar}\left(\vec{p}^2-2(e\vec{A}+\frac{m}{\epsilon}\Delta\vec{r})\cdot\vec{p}+e^2\vec{A}^2\right)\\ &= -\frac{\epsilon i}{2m\hbar}\left(\vec{p}-(e\vec{A}+\frac{m}{\epsilon}\Delta\vec{r})\right)^2-\frac{\epsilon i}{2m\hbar}\left(e^2\vec{A}^2-(e\vec{A}+\frac{m}{\epsilon}\Delta\vec{r})^2\right)\\ &= -\frac{\epsilon i}{2m\hbar}\left(\vec{p}-(e\vec{A}+\frac{m}{\epsilon}\Delta\vec{r})\right)^2+\frac{i}{\hbar}\epsilon\left(e\frac{\Delta r}{\epsilon}\vec{A}+\frac{m\Delta\vec{r}^2}{2\epsilon^2}\right)\end{aligned}$$

これを指数関数の肩に乗せ積分して

$$\int_{-\infty}^{\infty}dp e^{-\frac{\epsilon i}{2m\hbar}(p-C)^2} = \left(\frac{2\pi\hbar m}{\epsilon i}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon i}\right)^{\frac{1}{2}}(2\pi\hbar) = \frac{2\pi\hbar}{A}$$

より

$$\begin{aligned}\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\; e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\Delta\vec{r}-\epsilon\frac{1}{2m}(\vec{p}-e\vec{A})^2\right)} &= \frac{1}{A^3}e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\left(e\frac{\Delta r}{\epsilon}\vec{A}+\frac{m\Delta\vec{r}^2}{2\epsilon^2}\right)} = \frac{1}{A^3}e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\left(e\dot{\vec{r}}\cdot\vec{A}+\frac{m\dot{\vec{r}}^2}{2}\right)}\\ \int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\; e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\Delta\vec{r}-\epsilon H)} &= \int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\; e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\Delta\vec{r}-\epsilon\{\frac{1}{2m}(\vec{p}-e\vec{A})^2+e\phi\}\right)}\\ &= \frac{1}{A^3}e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\left(e\dot{\vec{r}}\cdot\vec{A}+\frac{m\dot{\vec{r}}^2}{2}-e\phi\right)} = e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon L}\end{aligned}$$

8.3 質量 m の自由粒子の場合（直接計算:1 次元）

まず、ラグランジアンは

$$L(x,\dot{x}) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2$$

と与えられる。そこで、 $x_i = x_{final} = x_n$, $x_j = x_{initial} = x_0$, $\epsilon = (t_{final} - t_{initila})/n$ として

$$\mathcal{K}(x_{final}, x_{initial}) = \lim_{n\to\infty} \int \frac{1}{A}\prod_{k=1}^{n-1}\frac{dx_k}{A} e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{n} S(x_k,x_{k-1})}$$

ここで

$$\begin{aligned} S(x_k, x_{k-1}) &= \epsilon L\left(\frac{x_k + x_{k-1}}{2}, \frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon}\right) \\ &= \frac{m}{2\epsilon}(x_k - x_{k-1})^2 \end{aligned}$$

ここで $A = (\frac{2\pi\hbar\epsilon i}{m})^{\frac{1}{2}}$ に注意して

$$\begin{aligned} \frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty} & dx_{n-1} e^{\frac{i}{\hbar}\left(S(x_n,x_{n-1})+S(x_{n-1},x_{n-2})\right)} = \frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} e^{\frac{im}{\epsilon\hbar}\left(x_{n-1}^2-(x_n+x_{n-2})x_{n-1}+\frac{1}{2}(x_n^2+x_{n-2}^2)\right)} \\ &= \frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} e^{\frac{im}{\epsilon\hbar}\left(\left(x_{n-1}-\frac{1}{2}(x_n+x_{n-2})\right)^2+\frac{1}{2}(x_n^2+x_{n-2}^2)-\frac{1}{4}(x_n+x_{n-2})^2\right)} \\ &= \frac{1}{A}\left(\frac{\pi\hbar\epsilon i}{m}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{m}{4\epsilon\hbar}(x_n-x_{n-2})^2} = \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{im}{4\epsilon\hbar}(x_n-x_{n-2})^2} \end{aligned}$$

続けて

$$\begin{aligned} \frac{1}{A^2}\int_{-\infty}^{\infty} & dx_{n-1}dx_{n-2} e^{\frac{i}{\hbar}\left(S(x_n,x_{n-1})+S(x_{n-1},x_{n-2})+S(x_{n-2},x_{n-3})\right)} \\ &= \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-2} e^{\frac{im}{4\epsilon\hbar}\left((x_n-x_{n-2})^2+2(x_{n-2}-x_{n-3})^2\right)} \\ &= \left(\frac{m}{4\pi\hbar\epsilon i}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{3im}{4\epsilon\hbar}\left(x_{n-2}^2-\frac{2}{3}(x_n+2x_{n-3})x_{n-2}+\frac{1}{3}(x_n^2+2x_{n-3}^2)\right)} \\ &= \left(\frac{1}{3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{3m}{4\epsilon\hbar}\frac{1}{9}(3x_n^2+6x_{n-3}^2-(x_n+2x_{n-3})^2)} \\ &= \left(\frac{1}{3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{m}{6\epsilon\hbar}(x_n-x_{n-3})^2} \end{aligned}$$

一般に帰納法で

$$\frac{1}{A^{j-1}}\int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1}\cdots dx_{n-j+1} e^{\frac{i}{\hbar}\left(S(x_n,x_{n-1})+\cdots+S(x_{n-j+1},x_{n-j})\right)} = \left(\frac{1}{j}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{m}{2j\epsilon\hbar}(x_n-x_{n-j})^2}$$

とすれば

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{A^j}\int_{-\infty}^{\infty} & dx_{n-1}\cdots dx_{n-j} e^{\frac{i}{\hbar}\left(S(x_n,x_{n-1})+\cdots+S(x_{n-j},x_{n-j-1})\right)} \\
&= (\frac{m}{2j\pi\hbar\epsilon i})^{\frac{1}{2}}\int dx_{n-j} e^{i\frac{m}{2j\epsilon\hbar}\left((x_n-x_{n-j})^2+j(x_{n-j}-x_{n-j-1})^2\right)} \\
&= (\frac{m}{2j\pi\hbar\epsilon i})^{\frac{1}{2}}\int dx_{n-j} e^{i\frac{m((j+1)}{2j\epsilon\hbar}\left((x_{n-j}^2-\frac{1}{j+1}(x_n+jx_{n-j-1}))^2+\frac{1}{j+1}(x_n^2+jx_{n-j-1}^2)-\frac{1}{(j+1)^2}((x_n+jx_{n-j-1}))^2)\right)} \\
&= (\frac{1}{j+1})^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{m}{2j(j+1)\epsilon\hbar}\left((j+1)(x_n^2+jx_{n-j-1}^2)-(x_n+jx_{n-j-1})^2\right)} \\
&= (\frac{1}{j+1})^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{m}{2j(j+1)\epsilon\hbar}(jx_n^2+jx_{n-j-1}^2-2jx_nx_{n-j-1})} \\
&= (\frac{1}{j+1})^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{m}{2(j+1)\epsilon\hbar}(x_n-x_{n-j-1})^2}
\end{aligned}
$$

と一般の j でも成立。ここで $j=n-1$ として

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}(x_{final},x_{initial}) &= \frac{1}{A}(\frac{1}{n})^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{m}{2n\epsilon\hbar}(x_n-x_0)^2} \\
&= \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar T}} e^{i\frac{m}{2n\epsilon\hbar}(x_{final}-x_{initial})^2}
\end{aligned}
$$

自由粒子系の時間発展演算子

$$
\mathcal{K}(x_i,x_j)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}\ e^{i\frac{m}{2\hbar T}(x_i-x_j)^2}
$$

8.4　自由粒子の場合：続き（フーリエ展開とヤコビアン）

　ここでは次のように考えてみよう。まずオイラー方程式を満たす古典的な経路 $x=x_c(t)$ は $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}=m\ddot{x}=0$ を満たす。

$$
\begin{aligned}
\ddot{x}_c &= 0 \\
x_c(t_j) &= x_j, \quad x_c(t_i)=x_i \\
x_c(t) &= x_i\frac{t-t_j}{T}+x_j\frac{t-t_i}{-T}, \quad x_c'(t)=\frac{x_i-x_j}{T}
\end{aligned}
$$

一般的な経路をこの古典解のまわりで展開して

$$
\begin{aligned}
x(t) &= x_c(t)+\delta x(t) \\
\delta x(t_j) &= \delta x(t_i)=0
\end{aligned}
$$

$$\int_j^i dt\, L = \frac{m}{2}\int_j^i dt\,(\dot{x}_c+\dot{\delta x})^2 = \frac{m}{2}\int_j^i dt\,(\dot{x}_c^2+2\dot{x}_c\dot{\delta x}+\dot{\delta x}^2)$$

ここで部分積分より

$$\begin{aligned}\int_j^i dt\,\ddot{x}_c &= x_c\dot{x}_c\Big|_j^i - \int_j^i dt\, x_c\ddot{x}_c = x_c\dot{x}_c\Big|_j^i = \frac{(x_i-x_j)^2}{T} \\ \int_j^i dt\, 2\dot{x}_c\dot{\delta x} &= 2\dot{x}_c\delta x\Big|_j^i - \int_j^i dt\, 2\ddot{x}_c\delta x = 0\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}\mathcal{K}(x_i,x_j) &= e^{\frac{im(x_i-x_j)^2}{2\hbar T}}\mathcal{K}(0,0) \\ \mathcal{K}(0,0) &= \int_{\delta x(0)=\delta x(T)=0} D\delta x\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^T dt\,\frac{m}{2}(\dot{\delta x})^2} \\ &= \frac{1}{A^n}\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\int_{-\infty}^{\infty}dx_2\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dx_{n-1}\, e^{\frac{im}{2\hbar}\sum_{k=1}^{n}\frac{(\delta x_k-\delta x_{k-1})^2}{\epsilon}} \\ &\quad\ \delta x_0=\delta x_n=0\end{aligned}$$

これにより初期条件 x_i, x_j に依存する部分は確定したことになる。また直接の計算と比べることにより、<u>有限の n においても</u>

$$\mathcal{K}(0,0) = \left(\frac{m}{i2\pi\hbar T}\right)^{1/2}$$

となる。

　ここで $\mathcal{K}(0,0)$ を少し異なる方法で計算することを考えよう。すなわち、積分変数を

$$\delta x_1, \delta x_2, \cdots, \delta x_{n-1}$$

から

$$a_1, a_2, \cdots, a_{n-1}$$

につぎの線形変換で

$$\begin{pmatrix}\delta x_1\\ \vdots\\ \delta x_{n-1}\end{pmatrix} = D_{n-1}\begin{pmatrix}a_1\\ \vdots\\ a_{n-1}\end{pmatrix}, \qquad D_{n-1} = \begin{pmatrix}\sin\frac{\pi\cdot 1}{T}t_1 & \sin\frac{\pi\cdot 2}{T}t_1 & \cdots & \sin\frac{\pi\cdot(n-1)}{T}t_1\\ \sin\frac{\pi\cdot 1}{T}t_2 & \sin\frac{\pi\cdot 2}{T}t_2 & \cdots & \sin\frac{\pi\cdot(n-1)}{T}t_2\\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ \sin\frac{\pi\cdot 1}{T}t_{n-1} & \sin\frac{\pi\cdot 2}{T}t_{n-1} & \cdots & \sin\frac{\pi\cdot(n-1)}{T}t_{n-1}\end{pmatrix}$$

と変換することを考える。これは $\delta x_k=\delta x(t_k)$ であることに注意すれば境界条件 $\delta x(0)=\delta x(T)=0$ を満たすフーリエ級数

$$\delta(t) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \sin\frac{\pi k t}{T}$$

の有限近似として

$$\delta x(t_j) \;=\; \sum_{k=1}^{n-1} a_k \sin \pi k \frac{t_j}{T} = \sum_{k=1}^{n-1} a_k \sin \frac{\pi k j}{n}, \qquad T = n\epsilon$$

と展開することに対応する。これより

$$\mathcal{K}(0,0) \;=\; \frac{1}{A^n} \int_{-\infty}^{\infty} da_1 \int_{-\infty}^{\infty} da_2 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} da_{n-1} \, |\det D_{n-1}| e^{\frac{im}{2\hbar}\sum_{j=1}^{n} \frac{(\delta x_j - \delta x_{j-1})^2}{\epsilon}}$$

ここでこの表式を差分形式のままで計算すれば次の関係式に注意して[32]

[33]

---

[32]

$$\begin{aligned}
\int dt \, (\dot{\delta x})^2 &= \sum_{j=1}^{n} \frac{(\delta x_j - \delta x_{j-1})^2}{\epsilon} = \frac{n}{T} \sum_{j=1}^{n} \Big(\sum_k a_k (\sin \frac{\pi}{n} kj - \sin \frac{\pi}{n} k(j-1)) \Big)^2 \\
&= \frac{n}{T} \sum_{j=1}^{n} \sum_{kk'} a_k a_{k'} \Big\{ \sin \frac{\pi}{n} kj \sin \frac{\pi}{n} k' j \\
&\quad + \sin \frac{\pi}{n} k(j-1)) \sin \frac{\pi}{n} k'(j-1)) \\
&\quad - 2 \sin \frac{\pi}{n} kj \sin \frac{\pi}{n} k'(j-1)) \Big\}
\end{aligned}$$

ここで

$$\sum_{j=0}^{n-1} \sin \frac{\pi}{n} kj \sin \frac{\pi}{n} k' j \;=\; \frac{1}{2} \sum_j \cos \frac{\pi}{n}(k-k')j - \cos \frac{\pi}{n}(k+k')j = n\, \delta_{kk'}$$

$$\sum_{j=0}^{n-1} \sin \frac{\pi}{n} kj \sin \frac{\pi}{n} k' j \;=\; \frac{1}{2} \sum_j \cos \frac{\pi}{n}(k-k')j - \cos \frac{\pi}{n}(k+k')j = \delta_{kk'} \frac{n}{2}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0}^{n-1} \quad & \sin \frac{\pi}{n} kj \sin \frac{\pi}{n} k'(j-1) = \\
& \frac{1}{2} \sum_j \cos \frac{\pi}{n}((k-k')j + k') - \cos \frac{\pi}{n}((k+k')j - k') = \delta_{kk'} \frac{n}{2} \cos \frac{\pi k}{n}
\end{aligned}$$

よって

$$\int dt \, (\dot{\delta x})^2 \;=\; \frac{n^2}{T} \sum_{k=1}^{n-1} a_k^2 (1 - \cos \frac{\pi k}{n}) = \frac{2n^2}{T} \sum_{k=1}^{n-1} a_k^2 \sin^2 \frac{\pi k}{2n}$$

[33]

$$\int_0^T dt \sin \frac{\pi k}{T} t \sin \frac{\pi k'}{T} t \;=\; \frac{1}{2} \int_0^T dt \big(\cos \frac{\pi(k-k')}{T} t - \cos \frac{\pi(k+k')}{T} t \big) = \delta_{kk'} \frac{T}{2}$$

$$
\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{n} \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\epsilon} &= \frac{n}{T} \sum_{j=1}^{n} \Big(\sum_k a_k (\sin \frac{\pi}{n} kj - \sin \frac{\pi}{n} k(j-1)) \Big)^2 \\
&= \frac{2n^2}{T} \sum_{k=1}^{n-1} a_k^2 \sin^2 \frac{\pi k}{2n}
\end{aligned}
$$

これから

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}(0,0) &= |D_{n-1}| \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{n}{2}} \prod_{k=1}^{n-1} \left(\frac{i\pi T\hbar}{mn^2 \sin^2 \frac{\pi k}{2n}} \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= |D_{n-1}| \left(\frac{mn}{2\pi i \hbar T} \right)^{\frac{n}{2}} \prod_{k=1}^{n-1} \left\{ \left(\frac{2\pi i T \hbar}{mn} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{2n \sin^2 \frac{\pi k}{2n}} \right)^{\frac{1}{2}} \right\}
\end{aligned}
$$

これが $(\frac{m}{2\pi i \hbar T})^{1/2}$ に等しいので

$$
\begin{aligned}
|D_{n-1}| &= \det \sin \frac{\pi i j}{n} \\
&= n^{(n-2)/2} 2^{(n-1)/2} \prod_{k=1}^{n-1} \sin \frac{\pi k}{2n}
\end{aligned}
$$

8.5 調和振動子の場合

質量 m 角振動数 ω の調和振動子のラグランジアンはよく知られているように

$$
L(x, \dot{x}, t) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x), \qquad V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2
$$

で与えられる。ここで古典的オイラー方程式は

$$
\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = -V'(x) - m\ddot{x} = -m\omega^2 x - m\ddot{x} = 0 \qquad \ddot{x} = -\frac{V'(x)}{m} = -\omega^2 x
$$

この古典解を $x_c(t)$ としてこの周りで展開して

$$
x(t) = x_c(t) + \delta x(t), \qquad \begin{array}{c} x_c(t_j) = x_j, \quad x_c(t_i) = x_i \\ \delta x(t_j) = \delta x(t_i) = 0 \end{array}
$$

とすれば

$$\begin{aligned}
S &= \int_{t_j}^{t_i} dt\, L(x,\dot{x},t) \\
&= \int_{t_j}^{t_i} dt \left(\frac{1}{2}m\dot{x}_c^2 + m\dot{x}_c\dot{\delta x} + \dot{\delta x}^2 - \{V(x_c) + V'(x_c)\delta x + \frac{1}{2}V''(x_c)\delta x^2\}\right) \\
&= \int_{t_j}^{t_i} dt \left(\big(\frac{1}{2}m\dot{x}_c^2 - V(x_c)\big) + \big(\frac{1}{2}m\dot{\delta x}^2 - \frac{1}{2}V''(x_c)\delta x^2\big) + \big(m\dot{x}_c\dot{\delta x} - V'(x_c)\delta x\big)\right) \\
&= S(x_c) + S_0(\delta x) + \int_{t_j}^{t_i} dt\, \big(m\dot{x}_c\dot{\delta x} - V'(x_c)\delta x\big)
\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
S_0(\delta x) &= \int_{t_j}^{t_i} dt\, \big(\frac{1}{2}m\dot{\delta x}^2 - \frac{1}{2}V''(x_c)\delta x^2\big) = \frac{1}{2}m\delta x\dot{\delta x}\Big|_{t_j}^{t_i} + \int_{t_j}^{t_i} dt\, \big(-\frac{1}{2}m\delta x\ddot{\delta x} - \frac{1}{2}V''(x_c)\delta x^2\big) \\
&= \frac{1}{2}m\int_{t_j}^{t_i} dt \left((\dot{\delta x})^2 - \omega^2\delta x^2\right)
\end{aligned}$$

残りの項は部分積分して

$$\int_{t_j}^{t_i} dt\, \big(m\dot{x}_c\dot{\delta x} - V'(x_c)\delta x\big) = m\dot{x}_c\delta x\Big|_{t_j}^{t_i} - \int_{t_j}^{t_i} dt\, \big(m\ddot{x}_c + V'(x_c)\big)\delta x = 0$$

これより

$$\mathcal{K}(x_i,x_j) = e^{\frac{i}{\hbar}S(x_c)}F(T)$$

$$F(T=t_i-t_j) = \int_{\delta x(t_i)=\delta x(t_j)=0} D\delta x(t)\ e^{\frac{i}{\hbar}S_0(\delta x)} = \int_{\delta x(t_i)=\delta x(t_j)=0} D\delta x(t)\ e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_j}^{t_i} dt\, L(\delta x,\dot{\delta x},t)}$$

ここで $F(T)$ は、x_i,x_j に依存しない複素量である。さらに $S(x_c)$ を具体的に求めると[34]

$$S(x_c) = \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left((x_i^2+x_j^2)\cos\omega T - 2x_ix_j\right)$$

[34] まず、

$$\begin{aligned}
x_c(t) &= ae^{i\omega t} + be^{-i\omega t} \\
\dot{x}_c(t) &= i\omega(ae^{i\omega t} - be^{-i\omega t}) \\
\begin{pmatrix} x_i \\ x_j \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{i\omega t_i} & e^{-i\omega t_i} \\ e^{i\omega t_j} & e^{-i\omega t_j} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} &= \frac{1}{e^{i\omega(t_i-t_j)} - e^{-i\omega(t_i-t_j)}}\begin{pmatrix} e^{-i\omega t_j} & -e^{-i\omega t_i} \\ -e^{i\omega t_j} & e^{i\omega t_i} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_i \\ x_j \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

残りの $F(T)$ は少し計算が長いので後に回すこととして

$$F(T)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}}$$

を認めれば結局

調和振動子の時間発展演算子

$$\mathcal{K}(x_i,x_j)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}}\ \exp\left[i\frac{m\omega}{2\hbar\sin\omega T}\Big((x_i^2+x_j^2)\cos\omega T-2x_ix_j\Big)\right]$$

となる。ここで $\omega\to 0$ とすれば自由粒子系の時間発展演算子を再現することも確認できる。

最後にここで

$$F(T=t_i-t_j)\ \ =\ \ \int_{\delta x(0)=\delta x(T)=0} D\delta x(t)\ e^{-\frac{im}{2\hbar}\int_0^T dt\,\delta x\left(\frac{d^2}{dt^2}+\omega^2\right)\delta x}$$

の計算をやってみよう。まず任意の $\delta x(0)=\delta(T)=0$ を満たす関数は自由粒子のときと同じに

$$\delta x(t)=\sum_{k=1}^{\infty}a_k\sin\frac{\pi k}{T}t$$

と書けることに注意しよう。

$$\begin{aligned}
S(x_c) &= \int_{t_j}^{t_i}dt\left(\frac{1}{2}m\dot{x_c}^2-V(x_c)\right)\\
&= \frac{1}{2}mx_c\dot{x_c}\Big|_{t_j}^{t_i}-\int_{t_j}^{t_i}dt\left(\frac{1}{2}mx_c\ddot{x_c}+\frac{1}{2}m\omega^2x_c^2\right)\\
&= \frac{1}{2}mx_c\dot{x_c}\Big|_{t_j}^{t_i}-\int_{t_j}^{t_i}dt\,\frac{1}{2}mx_c\Big(\ddot{x_c}+\omega^2x_c\Big)\\
&= \frac{1}{2}mx_c\dot{x_c}\Big|_{t_j}^{t_i}\\
&= \frac{1}{2}mi\omega\frac{1}{e^{i\omega(t_i-t_j)}-e^{-i\omega(t_i-t_j)}}\Bigg(x_i\big((e^{-i\omega t_j}x_i-e^{-i\omega t_i}x_j)e^{i\omega t_i}-(-e^{i\omega t_j}x_i+e^{i\omega t_i}x_j)e^{-i\omega t_i}\big)\\
&\quad -x_j\big((e^{-i\omega t_j}x_i-e^{-i\omega t_i}x_j)e^{i\omega t_j}-(-e^{i\omega t_j}x_i+e^{i\omega t_i}x_j)e^{-i\omega t_j}\big)\Bigg)\\
&= \frac{1}{2}mi\omega\frac{1}{e^{i\omega T}-e^{-i\omega T}}\Bigg(x_i\big((e^{i(\omega T)}x_i-x_j)-(-e^{-i\omega T}x_i+x_j)\big)-x_j\big((x_i-e^{-i\omega T}x_j)-(-x_i+e^{i\omega T}x_j)\big)\Bigg)\\
&= \frac{1}{2}mi\omega\frac{1}{e^{i\omega T}-e^{-i\omega T}}\Bigg(x_i^2(e^{i(\omega T)}+e^{-i(\omega T)})+x_j^2(e^{i(\omega T)}+e^{-i(\omega T)})-4x_ix_j\Bigg)\\
&= \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\Bigg((x_i^2+x_j^2)\cos\omega T-2x_ix_j\Bigg)
\end{aligned}$$

前節の計算から

$$\int dt\,\dot{x}^2 = \frac{n^2}{T}\sum_{k=1}^{n-1} a_k^2(1-\cos\frac{\pi k}{n}) = \frac{2n^2}{T}\sum_{k=1}^{n-1} a_k^2 \sin^2\frac{\pi k}{2n}$$

一方、ほぼ同様に

$$\begin{aligned}\int dt\,x^2 &= \epsilon\frac{1}{4}\sum_{j=1}^{n-1}(x_j+x_{j-1})^2 \\ &= \frac{T}{4}\sum_{k=1}^{n-1} a_k^2(1+\cos\frac{\pi k}{n}) = \frac{T}{2}\sum_{k=1}^{n-1} a_k^2\cos^2\frac{\pi k}{2n}\end{aligned}$$

これより

$$\begin{aligned}\frac{i}{\hbar}\int dt\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2-\frac{m\omega^2}{2}x^2\right) &= \frac{im}{4T\hbar}\sum_k a_k^2\left(4n^2\sin^2\frac{k\pi}{2n}-\omega^2T^2\cos^2\frac{\pi k}{2n}\right) \\ &= \frac{im}{4T\hbar}\sum_k 4n^2\sin^2\frac{k\pi}{2n}\left(1-\left(\frac{\omega T}{2n\tan\frac{k\pi}{2n}}\right)^2\right)a_k^2\end{aligned}$$

ここで前節の計算結果である $|D_{n-1}|$ をつかって[35]

$$\begin{aligned}F(T) &= \frac{1}{A^n}\int da_1\cdots da_{n-1}\,|D_{n-1}|\,\exp\{\frac{im}{\hbar}\sum\frac{n^2}{T}\sin^2\frac{k\pi}{2n}\left(1-(\frac{\omega T}{2n\tan\frac{k\pi}{2n}})^2\right)a_k^2\} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2}\prod_{k=1}^{n-1}\left\{1-\left(\frac{\omega T}{2n\tan\frac{k\pi}{2n}}\right)^2\right\}^{-1/2} \\ &\to \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2}\left(\frac{1}{\omega T}\sin\omega T\right)^{-1/2} = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}\right)^{1/2}\end{aligned}$$

35

$$\sin x = x\prod_{n=1}^{\infty}\left(1-\left(\frac{x}{n\pi}\right)^2\right)$$

と零点とそこでの微分（逆数の留数) を比べる。

9　虚時間形式と量子統計力学

最後にここで議論してきた実時間の量子力学と量子統計力学の対応について説明しよう。まず時間発展演算子 $\mathcal{K}(t,\vec{r};s,\vec{r}')$ は次の微分方程式 (シュレディンガー方程式) を満たすことを確認しよう。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{K}(t,\vec{r};s,\vec{r}') \;=\; H_{\vec{r}}\mathcal{K}(t,s)$$

初期条件は

$$\mathcal{K}(t,\vec{r};s,\vec{r}')=\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

である。まず、ハミルトニアンの完全系をつくる規格直交化された固有状態 $\psi_n(\vec{r})$ (固有値 E_n), $n=0,1,2,\cdots$ を準備しよう。

$$\begin{aligned} H\psi_n(\vec{r}) &= E_n\psi_n(\vec{r}) \\ \sum_n \psi_n(\vec{r})\psi_n^*(\vec{r}') &= \delta(\vec{r}-\vec{r}') \\ \int d\vec{r}\,\psi_n^*(\vec{r})\psi_m(\vec{r}) &= \delta_{nm} \end{aligned}$$

これより時間発展演算子は次のように書けることはすぐわかる。[36]

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(t,\vec{r};s,\vec{r}') &= \mathcal{K}(\vec{r};\vec{r}';t-s)=\sum_n e^{E_n(t-s)/i\hbar}\psi_n(\vec{r})\psi_n^*(\vec{r}') \\ \mathcal{K}(t;s) &= \mathcal{K}(t-s)=e^{H(t-s)/i\hbar} \end{aligned}$$

一方温度 T のカノニカル集団における量子統計力学においては次の密度行列と呼ばれる物理量が本質的な役割をはたす。

$$\rho(\vec{r},\vec{r}') \;=\; \sum_n e^{-\beta E_n}\psi_n(\vec{r})\psi_n^*(\vec{r}')$$

ここで

$$\beta=\frac{1}{k_BT}$$

k_B はボルツマン定数である。例えば分配関数 Z は

$$Z \;=\; \sum_n e^{-\beta E_n}$$

36

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{K}(t,\vec{r};s,\vec{r}') \;=\; \sum_n E_n e^{E_n(t-s)/i\hbar}\psi_n(\vec{r})\psi_n^*(\vec{r}')=e^{E_n(t-s)/i\hbar}\sum_n H_{\vec{r}}\psi_n(\vec{r})\psi_n^*(\vec{r}')=H_{\vec{r}}\mathcal{K}(t,\vec{r};s,\vec{r}')$$

と与えられるが、これは密度行列より

$$Z \;=\; \mathrm{Tr}\,\rho(\vec{r},\vec{r}') = \int d\vec{r}\,\rho(\vec{r},\vec{r})$$

として得られる。

この密度行列 $\rho(\vec{r},\vec{r}')$ と時間発展演算子 $\mathcal{K}(\vec{r},\vec{r}')$ を比べると

$$\rho(\vec{r},\vec{r}') \;=\; \mathcal{K}(\vec{r};\vec{r}';t-s=-i\hbar\beta)$$

すなわち時間 $t-s$ に虚数の時間

$$t-s=-i\hbar\beta$$

を代入することで密度行列が得られる。

虚時間と密度行列

$$\rho(\vec{r},\vec{r}') \;=\; \mathcal{K}(\vec{r};\vec{r}';t-s=-i\hbar\beta)$$

例えば調和振動子の場合

$$\rho(\vec{r},\vec{r}') \;=\; \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh\beta\hbar\omega}}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar\sinh\beta\hbar\omega}((x_i^2+x_j^2)\cosh\beta\hbar\omega-2x_ix_j)\right]$$

となる。ここで $\beta\to\infty$ とすれば

$$\rho(\vec{r},\vec{r}') \;\sim\; e^{-\frac{\hbar\omega}{2}\beta}$$

これは $\beta\to\infty$ で

$$\begin{aligned}\rho(\vec{r},\vec{r}') &= e^{-\beta E_0}\left(\psi_0(\vec{r})\psi_0^*(\vec{r}')+\sum_{n\neq 0}\psi_n(\vec{r})\psi_n^*(\vec{r}')e^{-\beta(E_n-E_0)}\right)\\ &\propto e^{-\beta E_0}\end{aligned}$$

と比べると調和振動子系の基底状態のエネルギーが

$$E_0=\frac{\hbar\omega}{2}$$

であることを示す。

第 III 部
物性論における幾何学的位相

古典論には決して存在し得ない量子論に従う世界特有の効果である「幾何学的位相」を導入し、そのいくつかの基本的側面を議論し、紹介する。

10 境界項としてのトポロジカル項と経路積分

まず、時空間 $(\vec{r}_i, t_i)$, $(\vec{r}_f, t_f)$, における波動関数 $\psi(\vec{r}_i, t_i)$, $\psi(\vec{r}_f, t_f)$ の関係を与える時間発展演算子 $K(\vec{r}_f, t_f; \vec{r}_i, t_i)$ の経路積分による表示は次のようになることをまず復習しよう.

$$
\begin{aligned}
\psi(\vec{r}_f, t_f) &= \int d\vec{r}_i \, K(\vec{r}_f, t_f; \vec{r}_i, t_i) \psi(\vec{r}_i, t_i) \\
K(\vec{r}_f, t_f; \vec{r}_i, t_i) &= \int_{\vec{r}(t_i)=\vec{r}_i, \vec{r}(t_f)=\vec{r}_f} D\{\vec{r}(t)\} \, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt \, L(\vec{r}(t), \dot{\vec{r}}(t))}
\end{aligned}
$$

ここで L は古典論を $\hbar \to 0$ でオイラー方程式として再現するためには古典論のラグランジアンととるのであった. このオイラーラグランジェ方程式を　(各成分ごとの) としよう.

$$
\frac{\partial L}{\partial \vec{r}} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = 0
$$

実は解析力学で知られているよう特定のオイラー方程式を与えるラグランジアンは一つではなく不定性をもち、

$$
\begin{aligned}
L' &= L + \delta L \\
\delta L &= \frac{dW(\vec{r}, t)}{dt} = \frac{\partial W}{\partial \vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} + \frac{\partial W}{\partial t} = \frac{\partial W}{\partial r_j}\dot{r}_j + \frac{\partial W}{\partial t}
\end{aligned}
$$

と任意関数 $W(\vec{r})$ の時間微分だけ変化させても等しいオイラー方程式を与える. これは次のように簡単に確認できる.

$$
\begin{aligned}
\frac{\delta \delta L}{\delta r_i} &= \frac{\partial \delta L}{\partial r_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial \delta L}{\partial \dot{r}_i} \\
&= \frac{\partial^2 W}{\partial r_i \partial r_j}\dot{r}_j + \frac{\partial^2 W}{\partial t \partial r_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial W}{\partial r_i} \\
&= \frac{\partial^2 W}{\partial r_i \partial r_j}\dot{r}_j + \frac{\partial^2 W}{\partial t \partial r_i} - \frac{\partial^2 W}{\partial r_i \partial t} - \frac{\partial^2 W}{\partial r_j \partial r_i}\dot{r}_j = 0
\end{aligned}
$$

ここでラグランジアンとして電磁場中のもの

$$
L = \frac{m}{2}\dot{\vec{r}}^2 - e\phi + e\dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}
$$

をとり運動量の定義

$$
\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}}
$$

を思い出すと、この $L' = L + \delta L$ をラグランジアンとすることは運動量として $\vec{p}'$

$$
\vec{p}' = \vec{p} + \frac{\partial W}{\partial \vec{r}} = \vec{p} + \vec{\nabla} W
$$

をとることとなる．さらにハミルトニアンは

$$
\begin{aligned}
H' &= \vec{p}'\cdot\dot{\vec{r}} - L' \\
&= \vec{p}'\cdot\dot{\vec{r}} - L - \frac{dW}{dt} \\
&= \left(\vec{p} + \frac{\partial W}{\partial \vec{r}}\right)\cdot\dot{\vec{r}} - L - \frac{\partial W}{\partial \vec{r}}\cdot\dot{\vec{r}} - \frac{\partial W}{\partial t} \\
&= H - \frac{\partial W}{\partial t}
\end{aligned}
$$

となる．ここで運動量とハミルトニアンの具体的な形

$$
\begin{aligned}
\vec{p} &= m\dot{\vec{r}} + e\vec{A} \\
H[\vec{p},\vec{A},\phi] &= \frac{1}{2m}(\vec{p}-e\vec{A})^2 + e\phi
\end{aligned}
$$

を思い出すと

$$
\begin{aligned}
\vec{p}' &= m\dot{\vec{r}} + e\vec{A}' \\
H'[\vec{p}',\vec{A}',\phi'] &= \frac{1}{2m}(\vec{p}'-e\vec{A}')^2 + e\phi'
\end{aligned}
$$

と書ける．ここで

$$
\begin{aligned}
\vec{A}' &= \vec{A} + \frac{1}{e}\vec{\nabla}W \\
\phi' &= \phi - \frac{1}{e}\frac{\partial W}{\partial t}
\end{aligned}
$$

である．これは最初の節で議論したゲージ変換と解釈でき $(\chi = \frac{1}{e}W)$ 対応する磁場、ならびに電場は不変である．つまり、古典的には全く同等の力学法則を与える.（オイラー方程式の不変性とコンシステントである.）

一方量子力学的には異なるラグランジアンからなる経路積分は異なる時間発展ならびに波動関数が与えられることとなり、一般には異なるものとなる．この量子力学的には異なる運動を経路積分によりもう少し議論してみよう.

ここで導入した異なるラグランジアン L' のもとでの経路積分による時間発展演算子 K' ならびに波動関数 ψ に関しては

$$
\begin{aligned}
\psi'(\vec{r}_f,t_f) &= \int d\vec{r}_i K'(\vec{r}_f,t_f;\vec{r}_i,t_i)\psi'(\vec{r}_i,t_i) \\
K'(\vec{r},t;\vec{r}',t') &= \int_{\vec{r}(t_f)=\vec{r}_f,\vec{r}(t_i)=\vec{r}_i} D\{\vec{r}(t)\}\, \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\, L'(\vec{r}(t),\dot{\vec{r}}(t))\right]
\end{aligned}
$$

となる。ここで W は t_i, t_j が十分に近いとき局所的には一価関数として与えられることに注意すれば局所的には次の関係式が成立する。

$$\begin{aligned}\int_{t_i}^{t_f} dt\, L' &= \int_{t_i}^{t_f} dt\, L + \int_{t_i}^{t_f} dt\, \frac{dW}{dt} \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt\, L + W(\vec{r}_f, t_f) - W(\vec{r}_i, t_i)\end{aligned}$$

よって波動関数に関する次のような関係が得られる.

$$\psi'(\vec{r}_f, t_f) = e^{\frac{i}{\hbar}(W(\vec{r}_f,t_f)-W(\vec{r}_i,t_i))} \int d\vec{r}_i K(\vec{r}_f, t_f; \vec{r}_i, t_i)\psi'(\vec{r}_i, t_i)$$

ラグランジアン L での時間発展とくらべて

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}W(\vec{r},t)}\psi'(\vec{r}, t)$$

と L' 系と L 系とは位相因子だけ異なる波動関数となる．これはシュレディンガー方程式に直接代入することによっても確認できる．

$$i\hbar\partial_t\psi = \partial_t W e^{-\frac{i}{\hbar}W}\psi' + i\hbar\partial_t e^{-\frac{i}{\hbar}W}\psi'$$

また

$$\begin{aligned}(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A})\psi &= \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}W}\psi' \\ &= -\vec{\nabla}W e^{-\frac{i}{\hbar}W}\psi' + e^{-\frac{i}{\hbar}W}\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\nabla} - e\vec{A}\right)\psi' \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}W}\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\nabla} - e\vec{A}')\psi' \qquad \text{よって} \right. \\ \frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A})^2\psi &= e^{-\frac{i}{\hbar}W}\frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}')^2\psi'\end{aligned}$$

これらを次式に代入すると

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[\frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A})^2 + e\phi\right]\psi$$

次の式が得られる.

$$i\hbar\partial_t\psi' = \left[\frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}')^2 + e\phi'\right]\psi'$$

つまり L' 系のシュレディンガー方程式ともコンシステントである.

11　経路積分とアハロノフ・ボーム効果

ここまでの議論は局所的なものであったが、この位相因子 W は $\frac{dW}{dt}$ は一価であっても W 自身は大局的には必ずしも一価関数とは限らない。この事実が量子力学的に重要な結果を導くことを観察しよう。つまり世界線

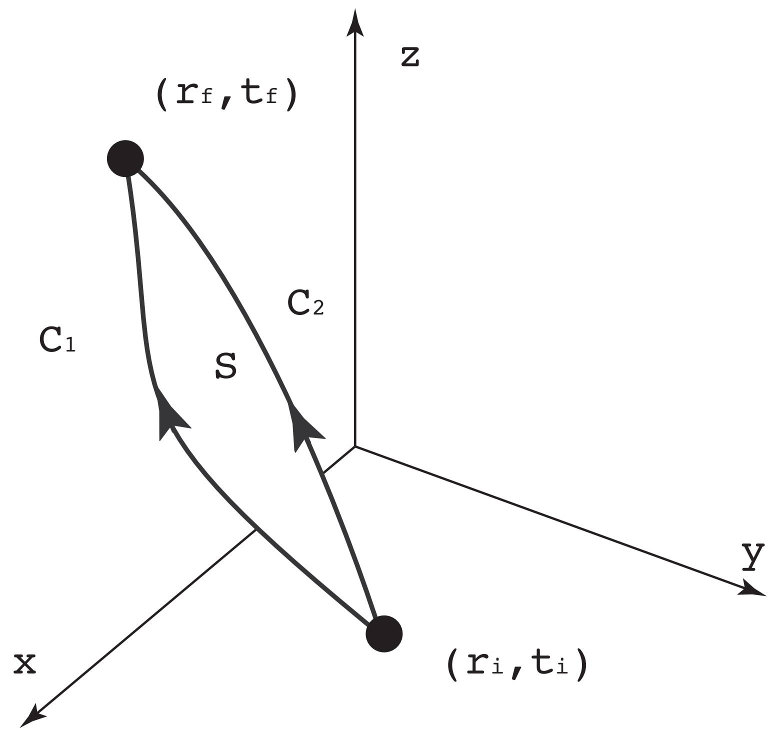
$$\vec{r}(t) : t \in [t_i, t_f]$$

において始点 $\vec{r}_i$ と終点 $\vec{r}_f$ を固定して経路を連続に変形したとき特異点をよぎらない限りその寄与が

$$\int_{t_i}^{t_f} dt \, \frac{dW(\vec{r}(t), t)}{dt} \;=\; \int_i^f dW = W_f - W_i$$

となることは一般の積分定理が保証する。しかし経路が特異点をよぎる場合特異点をからの寄与がありそれが多価性を生むこととなる。議論を具体的にするためにここでは空間 3 次元の系で特に z 軸が特異点の集合である場合を考えてみよう。

この場合図のように粒子の経路を W の特異点をよぎらずに変形する限り

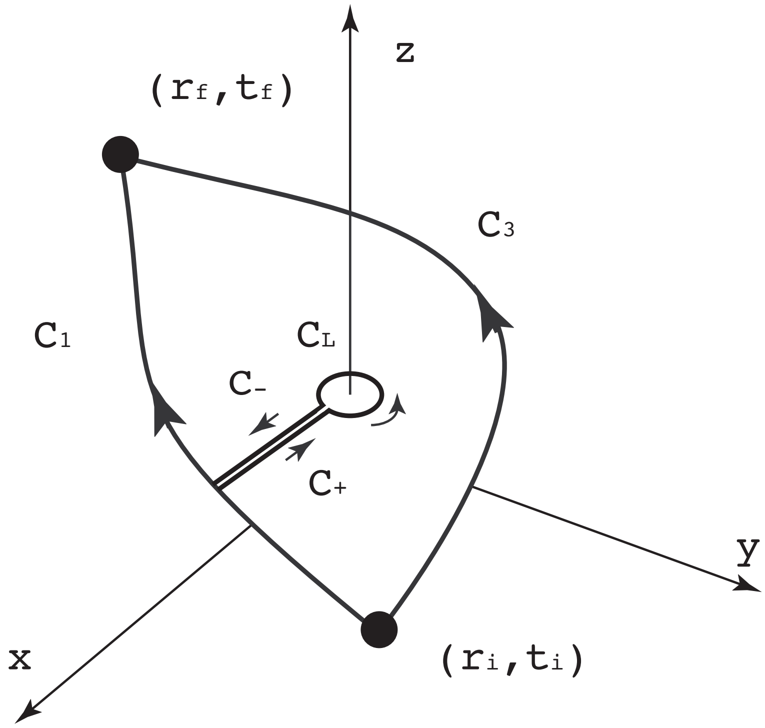


$$\int_{C_2} dW - \int_{C_1} dW \;=\; \int_{C_2 - C_1} d\vec{\ell} \cdot \vec{\nabla} W = \int_{\partial S} d\vec{\ell} \cdot \vec{\nabla} W = \int_S d\vec{S} \cdot \mathrm{rot}\, \vec{\nabla} W = 0$$

となり、よって

$$\int_{C_1} dW \;=\; \int_{C_2} dW = W(\vec{r}_f, t_f) - W(\vec{r}_i, t_i)$$

は経路によらない。一方経路が特異点をよぎる場合、



$$\int_{C_3} dW = \int_{C_1+C_++C_L+C_-+C_1} dW = \int_{C_1+C_L} dW = \int_{C_1} dW + \int_{C_L} dW$$

となる。　すなわち経路 C_3 を通る場合経路 C_1 を通る時より

$$\begin{aligned}\int_{C_L} dW &= \int_{C_L} d\vec{r}\cdot\vec{\nabla}W = e\int_{C_L} d\vec{r}\cdot\delta\vec{A} = e\int_S d\vec{S}\cdot\mathrm{rot}\,\delta\vec{A} \equiv e\Phi \\ \delta\vec{A} &= \vec{A}'-\vec{A} = \frac{1}{e}\vec{\nabla}W\end{aligned}$$

だけ余分な寄与があることとなる。同様に特異点 t 軸を２回、３回と回る経路はその２倍３倍の寄与を受け、同様に逆向きの経路も存在することにも注意しよう。

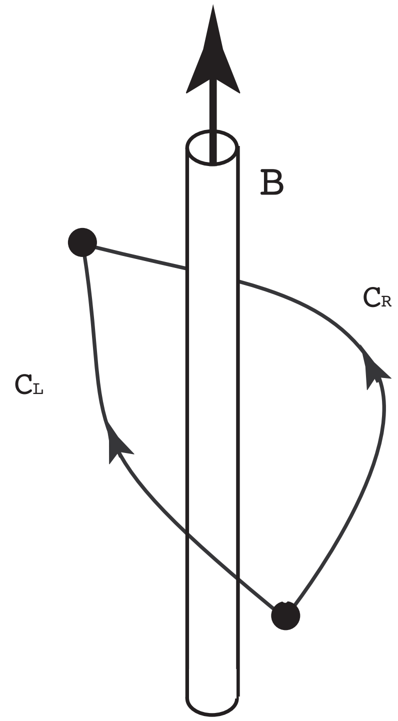
つまり、このような特異点が存在する場合、粒子系の時間発展はその始点と終点のみでは定まらず、特異点周りの回転数 n を指定してはじめて定まり、(例えば経路 C_1 を回転数 0, C_3 を回転数 1 として) 波動関数の時間発展は回転数 n の経路を $C(n)$ と書いて次のように与えられることとなる。

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r},t,n) &= \int d\vec{r}'K'(\vec{r},t;\vec{r}',t';n)\psi(\vec{r}',t') \qquad n=\cdots,-2,-1,0,1,2,\cdots \\ K'(\vec{r},t;\vec{r}',t';n) &= \int_{C(n);\vec{r}(t_f)=\vec{r}_f,\vec{r}(t_i)=\vec{r}_i} D\{\vec{r}(t)\}\,\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\,L'(\vec{r}(t),\dot{\vec{r}}(t))\right] \\ &= C_0\chi^n\int_{\vec{r}(t_f)=\vec{r}_f,\vec{r}(t_i)=\vec{r}_i} D\{\vec{r}(t)\}\,\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\,L(\vec{r}(t),\dot{\vec{r}}(t))\right] \\ \chi &= e^{\frac{i}{\hbar}\int_{C_L}dW} = \exp[i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}], \qquad \Phi_0=\frac{h}{e} \\ & C_0 = e^{\frac{i}{\hbar}n\int_{C(0)=C_1}dW}\end{aligned}$$

となる。ここで
$$\Phi_0 = \frac{h}{e}$$
は磁束単位と呼ばれる。すなわち特異点がある場合、n 回特異点周りを回る波動関数は
$$\frac{n\Phi}{\Phi_0}$$
だけの余分な位相を受けることとなる。この
$$\Phi$$
は特異点の効果を磁束として読み直したものであり、逆に物理系の定義されていない領域に存在する磁束を特異点の効果として記述するものとも言える。古典的には物理系が存在しない領域での磁束 Φ は力学法則には当然現れなかったものが量子力学的効果により観測量として表面化した効果であり量子力学特有な効果であり発見者にちなんでアハロノフ・ボーム効果（AB 効果）と呼ばれている。

円柱座標 (r, φ, z) では
$$\begin{aligned} W &= e\frac{\Phi}{2\pi}\varphi \\ \vec{\nabla} W &= e\frac{1}{r}\frac{\partial W}{\partial \varphi}\hat{E}_\varphi = e\frac{\Phi}{2\pi r}\hat{E}_\varphi \\ &= e\Phi\frac{\hat{z}\times\vec{r}}{2\pi r^2} \\ &= e\delta\vec{A} \end{aligned}$$
よって
$$\int_S d\vec{S}\cdot\delta\vec{B} = \int_S d\vec{S}\cdot \mathrm{rot}\,\delta\vec{A} = \int_{C_L} d\vec{r}\cdot\delta\vec{A} \;=\; \frac{1}{e}\int d\vec{r}\cdot\vec{\nabla}W = \Phi$$
ならびに $r \neq 0$ の時
$$\mathrm{rot}\,\vec{A} \;=\; \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\Phi}{2\pi}\right) = 0$$
より、
$$\delta\vec{B} \;=\; \mathrm{rot}\,\delta\vec{A} = \hat{z}\Phi\delta(\vec{r})$$
とつまり z 軸に無限に細い磁束の管が存在する考えることと同値である。

具体的には図のような完全に磁束のもれないソレノイドをおいたときのそ右側の経路 C_R を通る電子と左側の経路 C_L を通る電子とは異なる位相を受けたとえばそれらを干渉させた場合、ソレノイド内の磁束強度に関して Φ/Φ_0 について 2π 周期が観測されることとなる。



この事実は量子力学に従う粒子にとっては本質的なものは磁場ではなくベクトルポテンシャルであることを示すものである。

12　ベリー位相

前節での AB 効果の議論にあらわれた量子力学特有の位相の効果は「幾何学的位相」と呼ばれるものの例として理解される。この幾何学的位相は M. V. Berry によるいわゆる断熱過程における Berry 位相の発見により広く注目されるにいたった。(M.V. Berry, Proc. R. Soc. Lond. A 392, 45 (1984)) ここではこの Berry 位相の立場から AB 効果を議論することを試みたい。

そこでまず、断熱過程における Berry 位相についての議論から始めよう。

まず、時間にあらわに依存しないハミルトニアンを考えよう。

$$\frac{\partial}{\partial t}H = 0$$

このとき一般にシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = H\Psi(\vec{r},t)$$

はその時間依存性を変数分離できて次の固有値問題となる。

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r},t) &= e^{\frac{i}{\hbar}Et}\psi(\vec{r}) \\ H\psi_n(\vec{r}) &= E\psi_n(\vec{r}), \quad n = 0,1,2,\cdots\end{aligned}$$

ここで $\psi_n(\vec{r})$ は規格直交化された完全系をつくる固有状態を示す。

$$\begin{aligned}\int d\vec{r}\,\psi_n^*(\vec{r})\psi_m(\vec{r}) &= \delta_{nm} \\ \sum_n \psi_n(\vec{r})\psi_n^*(\vec{r}') &= \delta(\vec{r}-\vec{r}')\end{aligned}$$

更にこのハミルトニアンがあるパラメター $\vec{R}$ に依存するとし

$$H = H(\vec{R})$$

このパラメター $\vec{R}$ が時間とともに変化するとする。なお対応して固有値問題も

$$H(\vec{R})\psi_n(\vec{R}) = E_n(\vec{R})\psi_n(\vec{R})$$

となる。このとき断熱定理 (証明省略) によると「$|E_n(\vec{R}) - E_m(\vec{R})| > 0$ ($\forall m \neq n$) の時、十分 $\vec{R}(t)$ の変化がゆっくりである場合、ある時刻に特定の固有状態 n にあったとすると波動関数は位相のみが変化することが許される。」すなわち

$$\Psi(t=0) = \psi_n(R(0))$$

とすると

$$\begin{aligned}\Psi(t) &= e^{i\theta(t)}\psi_n(R(t)) \\ \Psi &= e^{i\theta}\psi_n\end{aligned}$$

となることを断熱定理は主張する。

この表式をシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H(R)\Psi$$

に代入すれば

$$i\hbar(i\dot\theta e^{i\theta}\psi_n + e^{i\theta}\dot\psi_n) \;=\; e^{i\theta}H\psi_n = e^{i\theta}E_n\psi_n$$

これに ψ_n^* をかけて空間積分を行なえば内積の記法

$$(m,n) = \int d\vec r\psi_m^*(\vec r)\psi_n(\vec r)$$

を使って、規格直交性に注意すれば

$$i\hbar(i\dot\theta + (n,\dot n)) \;=\; E_n$$

これは一階の微分方程式ですぐ積分できて $(\theta(0)=0)$

$$\begin{aligned}
\theta &= \int_0^t dt'\,\frac{-E_n}{\hbar} + \int_0^t dt'\,i(n,\dot n)\\
&= \int_0^t dt'\,\frac{-E_n(\vec R(t))}{\hbar} + i\int_0^t dt'\,\frac{d\vec R}{dt}\cdot(n,\vec\nabla_R n)\\
&= -\frac{1}{\hbar}\int_0^t dt'\,\frac{-E_n(\vec R(t))}{\hbar} + i\int_{\vec R(0)}^{\vec R(t)} d\vec R\,\cdot(n,\vec\nabla_R n)
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
\Psi &= e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt\,E_n}\;e^{i\gamma}\,\psi_n\\
\gamma &= i\int d\vec R\cdot(n,\vec\nabla n)
\end{aligned}$$

この γ を Berry Phase とよび、これは幾何学的位相の典型例である。なお ψ_n の規格化より γ は実である。[37]

[37]

$$\begin{aligned}
(n,\vec\nabla n) &= \int d\vec r\,\psi_n^*\vec\nabla\psi_n\\
(\vec\nabla n,n) &= \int d\vec r\,\vec\nabla\psi_n^*\psi_n = \big((n,\vec\nabla n)\big)^*
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{また}\quad 1 &= (n,n)\\
0 &= (\vec\nabla n,n)+(n,\vec\nabla n)\\
(\vec\nabla n,n) &= -(n,\vec\nabla n)
\end{aligned}$$

よって　$(n,\vec\nabla n) = i\mathrm{Im}\,(n,\vec\nabla n)$: 純虚数

とくにパラメター空間 $\vec{R}$ において経路が閉曲線 C を作る場合

$$\gamma_C = i\oint_C d\vec{R}\cdot(n,\vec{\nabla}n)$$

は閉曲線 C から定まる幾何学的な量となる。

ここでパラメター空間が 3 次元の場合とすると通常のベクトル解析より

$$\begin{aligned}\vec{A} &\equiv i(n(\vec{R}),\vec{\nabla}_R n(\vec{R}))\\ \gamma_C &= \int_C d\vec{R}\cdot\vec{A}\\ &= \int_S d\vec{S}\cdot\mathrm{rot}\,\vec{A}\end{aligned}$$

すなわち Berry 位相 γ は境界を C とする閉曲面を透過する或る種の磁束に対応すると理解できる。

Berry 位相としての AB 効果

この Berry 位相の議論を磁場中の電子の運動に適用してみよう。空間 $\vec{R}$ における電子系をベクトルポテンシャル $\vec{A}$ 中で断熱的に移動させることを考えよう。(電荷 $-e$) まず $\vec{R}$ 周りの物理系のハミルトニアンとして

$$H(\vec{p}+e\vec{A},\vec{r}-\vec{R}(t))$$

を考える。そこでまずベクトルポテンシャルのない場合の固有値問題が解けているとして

$$H(\vec{p},\vec{r}-\vec{R})\psi_n^0(\vec{R}) = E_n\psi_n^0(\vec{R})$$

とするとベクトルポテンシャルのある場合のハミルトニアン $H(p+e\vec{A})$ に対するスナップショットの固有値問題

$$H(p+e\vec{A})\psi_n(\vec{R}) = E_n\psi_n(\vec{R})$$

の解は

$$\psi_n(\vec{R}) = e^{-i\frac{e}{\hbar}\int_{\vec{R}}^{\vec{r}} d\vec{r}\,\cdot\,\vec{A}(\vec{r})}\psi_n^0(\vec{R})$$

となる。[38] よって[39]

$$
\begin{aligned}
i\gamma &= -\int d\vec{R}\cdot(n,\vec{\nabla}_R n) \\
&= -i\frac{e}{\hbar c}\int d\vec{R}\cdot\vec{A}(\vec{R}) + (n_0|\vec{\nabla}_R n_0)
\end{aligned}
$$

ベクトルポテンシャルの存在により

$$
e^{-i\frac{2\pi}{\Phi_0}\int d\vec{R}\cdot\vec{A}(\vec{R})}
$$

だけ余分な位相変化を受けることとなる。特に $\vec{R}$ が閉曲線 $C=\partial S$ を作る場合その位相変化は

$$
\begin{aligned}
\gamma &= -2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0} \\
\Phi &= \int_S d\vec{S}\cdot\vec{B}, \quad \vec{B}=\mathrm{rot}\,\vec{A}
\end{aligned}
$$

となる。すなわち磁束単位 Φ_0 を単位として曲面 S をよぎる磁束の分だけ量子力学的な波動関数は位相として受けることとなる。

38

$$
\begin{aligned}
(\vec{p}+e\vec{A})\psi_n(\vec{R}) &= (\hbar\frac{\vec{\nabla}}{i}+e\vec{A})\psi_n(\vec{R}) \\
&= -e\vec{A}(\vec{r})\psi_n(\vec{R}) + e^{-i\frac{e}{\hbar c}\int_{\vec{R}}^{\vec{r}} d\vec{r}\cdot\vec{A}(\vec{r})}\vec{p}\psi_n^0(\vec{R}) + e\vec{A}\psi_n(\vec{R}) \\
&= e^{-i\frac{e}{\hbar}\int_{\vec{R}}^{\vec{r}} d\vec{r}\cdot\vec{A}(\vec{r})}\vec{p}\psi_n^0(\vec{R})
\end{aligned}
$$

$$
H(\vec{p}+e\vec{A})\psi_n(\vec{R}) = e^{-i\frac{e}{\hbar c}\int_{\vec{R}}^{\vec{r}} d\vec{r}\cdot\vec{A}(\vec{r})}H(\vec{p})\psi_n^0(\vec{R})
$$

39

$$
\begin{aligned}
i\gamma &= -\int d\vec{R}\cdot(n,\vec{\nabla}_R n) \\
&= -i\frac{e}{\hbar}\int d\vec{R}\cdot\vec{A}(\vec{R}) + (n_0|\vec{\nabla}_R n_0) \\
&= -i\frac{2\pi}{\Phi_0}\int d\vec{R}\cdot\vec{A}(\vec{R}) + i\gamma_0
\end{aligned}
$$

13 触れられなかった話題

時間の関係で議論できなかった話題として

- 分数統計粒子系
- 量子ホール効果における幾何学的効果
- 超伝導における幾何学的効果
- スピン系における幾何学的効果

等々がある。