経路積分

量子力学での運動に対するシュレーディンガー方程式の仮定とは別の方法である経路積分を見ていきます。
最初に量子論的な粒子の性質から経路積分の仮定を与え、次にシュレーディンガー方程式と正準交換関係から同じ経路積分を導出します。後半に生成汎関数の話をしています。

量子力学で知りたいのは、ある時間 t_i で位置 q_i の状態 $|q_i;t_i\rangle$ から、ある時間 $t_f > t_i$ で位置 q_f の状態 $|q_f;t_f\rangle$ になる遷移振幅 $\langle q_f;t_f|q_i;t_i\rangle$ です。これを 2 重スリットの実験に対する考察から仮定します。簡単に言えば、どちらの穴を通ったか分からないなら、それぞれの穴を通った時の遷移振幅を足せば、全体の遷移振幅になるというものです。

まず、粒子の経路 (軌道) を決定できているとします。つまり、t_i から t_f の間の時間 $t_i < t_1 < t_2 < \ldots < t_N < t_f$ での位置が $q_1, q_2, \ldots, q_N$ と分かっているとします。$|q_i;t_i\rangle$ から $|q_1;t_1\rangle$、$|q_1;t_1\rangle$ から $|q_2;t_2\rangle$、とした遷移振幅は

$$\langle q_1;t_1|q_i;t_i\rangle\ ,\ \langle q_2;t_2|q_1;t_1\rangle\ ,\ \ldots,\ \langle q_f;t_f|q_N;t_N\rangle$$

と続いています。これがある 1 つの経路 γ_k として繋がっているので、確率と同じように、この経路での遷移振幅 $\langle q_f;t_f|q_i;t_i\rangle_\gamma$ は積によって

$$\langle q_f;t_f|q_i;t_i\rangle_{\gamma_k} = \langle q_f;t_f|q_N;t_N\rangle\cdots\langle q_{n+1};t_{n+1}|q_n;t_n\rangle\cdots\langle q_2;t_2|q_1;t_1\rangle\langle q_1;t_1|q_i;t_i\rangle$$

このとき、ディラックはラグランジアン L によって

$$\langle q_{n+1};t_{n+1}|q_n;t_n\rangle \simeq \exp[\frac{i}{\hbar}\tau L(q_n, q_{n+1}, \tau)]$$

となると指摘しました。τ は時間間隔 $\tau = t_{n+1} - t_n$ $(t_n = t_i + n\tau)$ です。そうすると、q_i, t_i では $n = 0$、q_f, t_f では $n = N + 1$ として

$$\langle q_f;t_f|q_i;t_i\rangle_{\gamma_k} \simeq \exp[\frac{i}{\hbar}\tau\sum_{n=0}^{N} L(q_n, q_{n+1}, \tau)]$$

$\tau \to 0$ の極限で和は積分になり

$$S[q] = \int_{t_i}^{t_f} dt\ L(q, \frac{dq}{dt})$$

として作用 S が出てきて

$$\langle q_f;t_f|q_i;t_i\rangle_{\gamma_k} \simeq \exp[\frac{i}{\hbar}S]$$

これをファインマン (Feynman) がさらに、粒子の経路が分かっていないなら、全ての可能な経路を足し合わせたものが遷移振幅になるとして

$$\langle q_f;t_f|q_i;t_i\rangle = \sum_k \langle q_f;t_f|q_i;t_i\rangle_{\gamma_k} = \mathcal{N}\sum_k \exp[\frac{i}{\hbar}S(\gamma_k)]$$

と与えました。$\mathcal{N}$ は定数です。k は可能な経路 γ_k に対して和を取ることで、$S(\gamma_k)$ は可能な経路 γ_k での作用という意味です (例えば、$k = 3$ での $S(\gamma_3)$ が極値なら、γ_3 が古典的な粒子の現実の経路)。これを経路積分 (path integral) と言い、$\langle q_f;t_f|q_i;t_i\rangle$ をファインマン核 (Feynman kernel) と呼びます。積分とついているのは、経路は連続的に扱えると考えて、和を積分に置き換え

$$\langle q_f;t_f|q_i;t_i\rangle \simeq \mathcal{N}\int dq_1 d_2\cdots dq_N \exp[\frac{i}{\hbar}S[q]] \tag{1}$$

とするからです。経路積分の特徴は、演算子が全く入っていなく、古典的な量によって量子力学の遷移振幅が計算できる点です。

次に見ていくように、経路積分は、時間発展はハミルトニアン演算子に従い、正準交換関係を満たすと仮定することで導出できます。つまり、「量子力学での仮定」での (iv) と正準交換関係を仮定することは、経路積分を仮定することと同じです。このため、経路積分は別の量子化の方法として区別されます。経路積分に対して、(iv) と正準交換関係を仮定する場合を演算子形式と呼びます。演算子形式と経路積分はどちらも、量子力学の実験結果と解析力学との対応に対する考察の結果として出てきています。もう 1 つ別方向の仮定として、シュウィンガーの作用原理と呼ばれるものもあります。

時間発展演算子 (シュレーディンガー方程式) と正準交換関係から経路積分を導出します。先に必要なものを準備しておきます。

位置演算子 $\hat{q}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ の正準交換関係は

$$[\hat{q},\hat{p}] = i\hbar$$

となっています。

波動関数 $\psi(q,t)$ をシュレーディンガー描像で

$$\psi(q,t) = \langle q|\psi(t)\rangle_S$$

これはハイゼンベルグ描像と

$$|\psi(t)\rangle_S = e^{-iHt/\hbar}|\psi\rangle_H$$

と対応しています。添え字の S はシュレーディンガー描像、H はハイゼンベルグ描像を表しています。位置演算子 $\hat{q}$ に対しては

$$\hat{q}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{q}_S e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

$\hat{q}_S$ の固有値を q、固有状態を $|q\rangle$ とすれば

$$\begin{aligned}
\hat{q}_S|q\rangle &= q|q\rangle \\
e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{q}_S|q\rangle &= e^{i\hat{H}t/\hbar}q|q\rangle \\
e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{q}_S e^{-i\hat{H}t/\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}|q\rangle &= qe^{i\hat{H}t/\hbar}|q\rangle \\
\hat{q}_H(t)e^{i\hat{H}t/\hbar}|q\rangle &= qe^{i\hat{H}t/\hbar}|q\rangle
\end{aligned}$$

となるので、$e^{i\hat{H}t/\hbar}|q\rangle$ はハイゼンベルグ描像での固有状態です。これを $|q,t\rangle$ と書きますが、$|q,t\rangle$ はシュレーディンガー描像でなく、ハイゼンベルグ描像であることに注意してください。$\hat{q}_H$ の固有状態 $|q,t\rangle$ というだけです。こういったことから、$|q,t\rangle$ のことを動く基底 (moving basis) と呼んだりします。また、$|q,t\rangle$ は

$$|q,t\rangle = e^{i\hat{H}t/\hbar}|q\rangle$$

と与えているので時間発展と見れそうですが、シュレーディンガー描像での時間発展の式と違っています (時間発展演算子では $-i\hat{H}t/\hbar$)。これを使うとハイゼンベルグ描像を使ったときの波動関数は

$$\psi(q,t) = \langle q|\psi(t)\rangle_S = \langle q|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle_H == \langle q,t|\psi\rangle_H$$

と書けることが分かります。

位置と運動量に対する完全性は

$$\int dq|q\rangle\langle q| = 1\ ,\ \int dp|p\rangle\langle p| = 1$$

積分範囲は $-\infty \sim \infty$ としますが、省いて書いていきます。直交性は

$$\langle q'|q\rangle = \delta(q'-q)\ ,\ \langle p'|p\rangle = \delta(p'-p)$$

時間が含まれていても

$$\int dq|q,t\rangle\langle q,t| = \int dq e^{i\hat{H}t/\hbar}|q\rangle\langle q|e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{i\hat{H}t/\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar} = 1$$

直交性は時間が等しいとすれば

$$\langle q',t|q,t\rangle = \langle q'|e^{-i\hat{H}t/\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}|q\rangle = \langle q'|q\rangle = \delta(q'-q)$$

そして、$\langle q|p\rangle$ は

$$\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipq/\hbar}$$

となっています。

今知りたいのは、状態が異なっている $\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle$ についてです。これは位置 q_i, 時間 t_i から位置 q_f, 時間 t_f への遷移振幅で、ファインマン核です。ファインマン核 $\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle$ を $K(q_f,t_f;q_i,t_i)$ と書きます。これは

$$\begin{aligned}\psi(q_f,t_f) = \langle q_f,t_f|\psi\rangle_H &= \int dq\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle\langle q_i,t_i|\psi\rangle_H \\ &= \int dq K(q_f,t_f;q_i,t_i)\psi(q_i,t_i)\end{aligned}$$

として、最初の状態の波動関数 $\psi(q_i,t_i)$ と最後の状態 $\psi(q_f,t_f)$ への変換部分として出てきます。

ファインマン核についてもう少し触れておきます。完全性を挟めば

$$\begin{aligned}K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle &= \int dq'\langle q_f,t_f|q',t'\rangle\langle q',t'|q_i,t_i\rangle \\ &= \int dq' K(q_f,t_f;q',t')K(q',t';q_i,t_i)\end{aligned}$$

これは、時間 t_i での状態 $|q_i\rangle$ が時間 t' での状態 $|q'_i\rangle$ を経由して最後の時間 t_f での状態 $|q_f\rangle$ になることを表しています (両辺に $\psi(q_i,t_i)$ を掛けてみればわかりやすいです)。このことをもっと式に当てはめて言えば、時間 t_i

での始状態 $|q_i\rangle$ から中間状態 $|q'\rangle$ にいく遷移振幅 $K(q',t';q_i,t_i)$ に、その中間状態から終状態 $|q_f\rangle$ への遷移振幅 $K(q_f,t_f;q',t')$ を掛けるという作業を、あらゆる可能な中間状態に対して行い、その全てを足したものが始状態から終状態への遷移振幅 $K(q_f,t_f;q_i,t_i)$ になるということです。

ファインマン核の話は終わりにして、$\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle$ の話に戻ります。$\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle$ に対して完全性を挟み続けることで

$$\begin{aligned}\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle &= \int dq_1\cdots dq_{n-1}dq_n\langle q_f,t_f|q_n,t_n\rangle\langle q_n,t_n|q_{n-1},t_{n-1}\rangle\cdots\langle q_1,t_1|q_i,t_i\rangle\\ &= \int dq_1\cdots dq_{n-1}dq_nK(q_f,t_f;q_n,t_n)K(q_n,t_n;q_{n-1},t_{n-1})\cdots K(q_1,t_1;q_i,t_i)labeleq:1 \qquad (2)\end{aligned}$$

このとき t_{j+1} と t_j の間隔を τ として $t_f-t_i=(n+1)\tau$ とし、q_j もその区分された時間での状態だとします。これは微小な領域で区切ることで中間状態を作り続け、しかも各中間状態で可能な状態（可能な位置）の和をとらせるように構成されています。つまり、$|q_i,t_i\rangle$ から $\langle q_f,t_f|$ へをより細かく見ています。

時間間隔 τ が微小として適当な部分をみてみると

$$\langle q_{j+1},t_{j+1}|q_j,t_j\rangle=\langle q_{j+1}|e^{-i\hat{H}t_{j+1}/\hbar}e^{i\hat{H}t_j/\hbar}|q_j\rangle=\langle q_{j+1}|e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}|q_j\rangle \qquad (3)$$

これは展開すれば

$$\begin{aligned}\langle q_{j+1}|e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}|q_j\rangle &= \langle q_{j+1}|\Big(1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau+\cdots\Big)|q_j\rangle\\ &= \langle q_{j+1}|q_j\rangle-\frac{i}{\hbar}\tau\langle q_{j+1}|\hat{H}|q_j\rangle+\cdots\end{aligned}$$

なので、ハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ を $\hat{H}(\hat{p},\hat{q})$ として

$$\langle q_{j+1}|\hat{H}(\hat{p},\hat{q})|q_j\rangle=\int dp_j\langle q_{j+1}|p_j\rangle\langle p_j|\hat{H}(\hat{p},\hat{q})|q_j\rangle$$

において

$$\langle p_j|\hat{H}(\hat{p},\hat{q})|q_j\rangle=\langle p_j|q_j\rangle H(p,q_j)$$

として、$e^{-iH(p,q_j)\tau/\hbar}$ とすればよさそうですが、問題があります。古典論なら $pq^2=(pq^2+q^2p)/2$ は成立しますが、演算子では成立しないために、ハミルトニアン演算子に含まれる $\hat{p},\hat{q}$ の順序を設定する必要があります。

一般的に見るのは面倒なので、簡単な例で示すだけにします。$\hat{q},\hat{p}$ を含む演算子として $e^{\alpha\hat{q}+\beta\hat{p}}$ を使い、$\hat{q}$ と $\hat{p}$ の交換関係は定数なので、ハウスドルフの公式から

$$\begin{aligned}\langle q'|e^{\alpha\hat{q}+\beta\hat{p}}|q\rangle &= \langle q'|e^{\alpha\hat{q}/2}e^{\beta\hat{p}}e^{\alpha\hat{q}/2}|q\rangle\\ &= \int dp\langle q'|e^{\alpha\hat{q}/2}e^{\beta\hat{p}}|p\rangle\langle p|e^{\alpha\hat{q}/2}|q\rangle\\ &= \int dp\ e^{\alpha q'/2}e^{\beta p}e^{\alpha q/2}\langle q'|p\rangle\langle p|q\rangle\\ &= \int dp\ \exp[\frac{\alpha(q'+q)}{2}+\beta p]\langle q'|p\rangle\langle p|q\rangle\end{aligned}$$

これから、もとの演算子で $\hat{q}$ が挟んだ q', q の中点に置き換わるのが分かります。このことから、$\hat{H}(\hat{p},\hat{q})$ は

$$\langle p_j|\hat{H}(\hat{p},\hat{q})|q_j\rangle = \langle p_j|q_j\rangle H(p,\overline{q}) \quad (\overline{q} = \frac{q_{j+1}+q_j}{2})$$

このように、2 つの点の平均値を取ることを中点処方 (midpoint prescription) と言います一般的に示すには、ワイル変換とワイル順序の話が必要ですが省きます。

(3) にこの置き換えを使うことで

$$\begin{aligned}
\langle q_{j+1}, t_{j+1}|q_j, t_j\rangle &= \langle q_{j+1}|e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}|q_j\rangle \\
&= \int dp_j \langle q_{j+1}|p_j\rangle\langle p_j|e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}|q_j\rangle \\
&= \int dp_j \langle q_{j+1}|p_j\rangle\langle p_j|q_j\rangle e^{-iH(p,\overline{q})\tau/\hbar} \\
&= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar}\exp[\frac{i}{\hbar}p_j(q_{j+1}-q_j)]e^{-iH(p,\overline{q})\tau/\hbar}
\end{aligned}$$

同様に、$\langle q_1, t_1|q_i, t_i\rangle$ と $\langle q_f, t_f|q_n, t_n\rangle$ は、$q_0 = q_i,\ q_{n+1} = q_f$ とすれば

$$\begin{aligned}
\langle q_1, t_1|q_i, t_i\rangle &= \int \frac{dp_0}{2\pi\hbar}\exp\Big[\frac{i}{\hbar}(p_0(q_1-q_0) - H(p_0,\overline{q}_0)\tau)\Big] \\
\langle q_f, t_f|q_n, t_n\rangle &= \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar}\exp\Big[\frac{i}{\hbar}(p_n(q_{n+1}-q_n) - H(p_n,\overline{q}_n)\tau)\Big]
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
\langle q_f, t_f|q_i, t_i\rangle =& \int dq_1\cdots dq_n \langle q_f, t_f|q_n, t_n\rangle\langle q_n, t_n|q_{n-1}, t_{n-1}\rangle\cdots\langle q_1, t_1|q_i, t_i\rangle \\
=& \int dq_1\cdots dq_n \int \frac{dp_0 dp_1\cdots dp_n}{(2\pi\hbar)^{n+1}}\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{n}(p_j(q_{j+1}-q_j) - H(p,\overline{q})\tau)\Big] \\
=& \int \prod_{j=1}^{n} dq_j \int \prod_{j=0}^{n}\frac{dp_j}{2\pi\hbar}\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{n}(p_j(q_{j+1}-q_j) - H(p_j,\overline{q}_j)\tau)\Big]
\end{aligned}$$

この段階で、経路積分 (位相空間での経路積分) と呼ばれます。位置の両端 q_i, q_f は固定されていますが、運動量の両端 p_0, p_{n+1} は固定されていないことに注意してください。ここで表記として

$$\int \prod_{j=1}^{n} dq_j = \int \mathcal{D}q\ ,\ \int \prod_{j=0}^{n}\frac{dp_j}{2\pi\hbar} = \int \mathcal{D}p$$

というのを定義します。$\mathcal{D}p, \mathcal{D}q$ は経路積分の測度 (measure) と呼ばれます。

exp 内を変形させて

$$\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{n}\big((q_{j+1}-q_j)p_j - H(p_j,\overline{q}_j)\tau\big) = \frac{i}{\hbar}\tau\sum_{j=0}^{n}\big(p_j\frac{q_{j+1}-q_j}{\tau} - H(p_j,\overline{q}_j)\big)$$

$q_{j+1}-q_j$ は時間間隔 τ での差で、和は間隔 τ の時間 t_j を変数に持つ関数に対するものなので、$\tau\to 0$ の極限で

$$\frac{q_{j+1}-q_j}{\tau}\ \Rightarrow\ \dot{q}_j\ ,\ \tau\sum_{j=0}^{n}f(t_j)\ \Rightarrow\ \int_t^{t'}d\tau\ f(\tau)$$

と置き換えられます。「$\cdot$」は時間微分です。よって、時間の連続極限 $(n\to\infty)$ で

$$\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle=\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt(p\dot{q}-H(p,q))\Big]$$

これの exp 内はラグランジアン L の定義になっているので

$$\begin{aligned}\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle=&\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt(p\dot{q}-H(p,q))\Big]\\=&\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt\ L(p,q))\Big]\\=&\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\exp[\frac{i}{\hbar}S]\end{aligned}$$

積分が q,p に対してなので L の変数も (p,q) のまま書いています。S は作用で、この形まで変形したものを経路積分と呼ぶことが多いです。

(1) と一致させるには運動量積分を実行する必要があります。しかし、右辺の積分が計算できるかどうかが経路積分の最大の問題点となっています (計算できるかどうかという以前に数学的に右辺を定義できるのかという根本的な問題が現在でも横たわっています)。相互作用のない自由粒子や調和振動子のような場合は計算できますが、そうでない場合はほとんどが積分できません。そのために、摂動展開して計算する摂動論が中心的な役割を持っています。また、近似を使わずに直接右辺の積分を数値的に計算しようというものが格子理論です。

ポテンシャルが位置にのみ依存しているハミルトニアンなら運動量積分が簡単に計算できます。$\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle$ からその一部を取り出して、

$$\begin{aligned}\langle q_{j+1},t_{j+1}|q_j,t_j\rangle=&\int\frac{dp_j}{2\pi\hbar}\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\big(p_j(q_{j+1}-q_j)-\big(\frac{p_j^2}{2m}+V(\bar{q}_j)\big)\tau\big)\Big]\\=&\int\frac{dp_j}{2\pi\hbar}\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\tau\big(p_j\frac{q_{j+1}-q_j}{\tau}-\frac{p_j^2}{2m}+V(\bar{q}_j)\big)\Big]\\=&\int\frac{dp_j}{2\pi\hbar}\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\tau\big(p_j\dot{q}_j-\frac{p_j^2}{2m}+V(\bar{q}_j)\big)\Big]\end{aligned}$$

$(q_{j+1}-q_j)/\tau$ を $\dot{q}_j$ と書いています。この積分を実行するには、平方完成して

$$\begin{aligned}&\exp[\frac{i}{\hbar}\tau V(\bar{q}_j)]\int\frac{dp_j}{2\pi\hbar}\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\tau\frac{1}{2m}(2mp_j\dot{q}_j-p_j^2)\Big]\\&=\ \exp[V(\bar{q}_j)]\int\frac{dp_j}{2\pi\hbar}\exp\Big[-\frac{i}{2m\hbar}\tau\big((p_j-m\dot{q}_j)^2-m^2\dot{q}_j^2\big)\Big]\\&=\ \exp\big[\frac{i}{\hbar}\tau(\frac{m}{2}\dot{q}_j^2-V(\bar{q}_j)\big]\int\frac{dp_j}{2\pi\hbar}\exp\big[-\frac{i}{2m\hbar}\tau\big((p_j-m\dot{q}_j)^2\big)\big]\\&=\ \exp\big[\frac{i}{\hbar}\tau(\frac{m}{2}\dot{q}_j^2-V(\bar{q}_j)\big]\int\frac{dp'_j}{2\pi\hbar}\exp\big[-\frac{i\tau}{2m\hbar}p_j'^2\big]\end{aligned}$$

これはガウス積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

から

$$\langle q_{j+1}, t_{j+1} | q_j, t_j \rangle = \Big(\frac{2\pi i\hbar\tau}{m}\Big)^{-1/2} \exp\big[\frac{i}{\hbar}\tau(\frac{m}{2}\dot{q}_j^2 - V(\overline{q}_j)\big]$$

後はこれを繰り返せば $\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle$ になるので、時間の連続極限 $(n \to \infty)$ を取って

$$\begin{aligned}
\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle &= \lim_{n\to\infty} \Big(\frac{2\pi i\hbar\tau}{m}\Big)^{-(n+1)/2} \int \prod_{j=1}^{n} dq_j \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\tau \sum_{j=0}^{n} (\frac{m}{2}\dot{q}_j^2 - V(\overline{q}_j))\Big] \\
&= N \int \mathcal{D}q \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt (\frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q))\Big] \\
&= N \int \mathcal{D}q \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\ L(q, \dot{q})\Big] \\
&= N \int \mathcal{D}q \exp\Big[\frac{i}{\hbar}S\Big] \qquad (4)
\end{aligned}$$

q_j も連続になるので $\overline{q}_j$ は q になります。積分の外にいる定数は N としています。定数 N は $n \to \infty$ の極限を取るときの規格化定数の役割を持っています。

これで (1) と一致しました。しかし、このようにラグランジアンに対応させられるのも、ハミルトニアンが今のようなガウス積分が実行できる形 (2 次形式) になっているからです。

最初に経路積分を仮定したときの話を、もう 1 度しておきます。(4) の和の形になっているものを見ると分かりやすいです。作用 S は q がどんな関数なのかによって値が決まり、その関数形は具体的に与えられていない点に注意します。解析力学でのオイラー・ラグランジュ方程式は作用の変分が 0 になるような経路 $q^c(t)$ が運動方程式の解になることを示しています。しかし、今は $q(t)$ が運動方程式の解とは言っていないです。なぜなら、時間を分割して、そのある時間 t_j での位置 $q_j (= q(t_j))$ はどんな値でも取れるとしているからです (積分範囲が $-\infty \sim \infty$)。始点 (q_i, t_i) と終点 (q_f, t_f) の間の区分けされた全ての点がこのようになっています。その中から運動方程式の解となるように q_j の位置を選ぶなら、exp にいる作用 S は運動方程式の解となる経路 $q^c(t)$ の関数形を持ちます。これは $\mathcal{D}q$ の中から運動方程式の解となる点を 1 つずつ取り出して経路を 1 つ作っただけです。つまり、$\mathcal{D}q$ の全体を考えれば、(q_i, t_i) から (q_f, t_f) へ至るあらゆる経路にそれぞれの経路での作用による重み $\exp[iS/\hbar]$ が掛かったものの和となっていると言えます。これが経路積分の仮定です。

(1) と対応させるために (4) の形にしましたが、$V(q) = 0$ でさえこの積分を実行するのはわりと面倒です。しかし、時間発展の形を使えば、$V = 0$ でのファインマン核は簡単に求めることができます。実際に、

$$
\begin{aligned}
\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle &= \langle q_f|\exp[-i\hat{H}(t_f-t_i)/\hbar]|q_i\rangle \\
&= \int dp \langle q_f|\exp[-i\hat{H}(t_f-t_i)/\hbar]|p\rangle\langle p|q_i\rangle \\
&= \int dp \exp[-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_f-t_i)]\langle q_f|p\rangle\langle p|q_i\rangle \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \exp[-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_f-t_i)]\exp[\frac{i}{\hbar}(q_f-q_i)p] \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \exp[-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}(t_f-t_i)p^2+\frac{i}{\hbar}(q_f-q_i)p] \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2\pi m\hbar}{i(t_f-t_i)}}\exp\Big[\frac{im(q_f-q_i)^2}{2\hbar(t_f-t_i)}\Big] \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_i)}}\exp\Big[\frac{im(q_f-q_i)^2}{2\hbar(t_f-t_i)}\Big]
\end{aligned}
$$

として、簡単に求まります。途中で、ガウス積分

$$
\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iax^2+ibx} = \sqrt{\frac{\pi}{ia}}\exp\big[\frac{ib^2}{4a}\big]
$$

を使っています。

最後に散乱問題や場の量子論あたりでかなり使われる話に触れておきます。今まで見てきたファインマン核に源 (source) として $J(t)$ による項を加えます。源 J を加えることは、仮想的なポテンシャル $J(t)q$ を加えるのと同じなので、J は外場とも呼ばれます。このように経路積分に源を加えるという発想はシュウィンガー (Schwinger) によって与えられたようです。

源を加えることで、位置演算子を真空で挟んだ時の期待値 (真空期待値) が求まることを見ます。源 J を経路積分に

$$
\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle_J = \int \mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt(p\dot{q}-H(p,q)+J(t)q)\Big] \tag{5}
$$

このように加えます。$J(t)$ に対して制限として、$J(t)$ はある時間の t_1 から t_2 の範囲でしか作用しないとし、$\lim_{t\to\pm\infty} J(t)=0$ を与えます。完全性を挟んで展開し

$$
\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle_J = \int dq_1\int dq_2\langle q_f,t_f|q_2,t_2\rangle\langle q_2,t_2|q_1,t_2\rangle_J\langle q_1,t_1|q_i,t_i\rangle
$$

ハミルトニアンの離散的な固有状態 $|n\rangle$ を挟んで個別に計算していくと

$$
\begin{aligned}
\langle q_f, t_f | q_2, t_2\rangle &= \langle q_f|\exp[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_f]\exp[\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_2)]|q_2\rangle \\
&= \sum_n \langle q_f|\exp[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_f]|n\rangle\langle n|\exp[\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_2)]|q_2\rangle \\
&= \sum_n \langle q_f|\exp[-\frac{i}{\hbar}E_n t_f]|n\rangle\langle n|\exp[\frac{i}{\hbar}E_n t_2)]|q_2\rangle \\
&= \sum_n \langle q_f|n\rangle\langle n|q_2\rangle\exp[-\frac{i}{\hbar}E_n(t_f - t_2)] \\
&= \sum_n \psi_n(q_f)\psi_n^*(q_2)\exp[-\frac{i}{\hbar}E_n(t_f - t_2)]
\end{aligned}
$$

E_n はハミルトニアンの固有値で、エネルギーです。同様に

$$
\langle q_1, t_1 | q_i, t_i\rangle = \sum_n \psi_n(q_1)\psi_n^*(q_i)\exp[-\frac{i}{\hbar}E_n(t_1 - t_i)]
$$

これらの結果を入れて

$$
\begin{aligned}
\langle q_f, t_f | q_i, t_i\rangle_J = &\int dq_1 \int dq_2 \sum_{n,n'} \psi_n(q_f)\psi_n^*(q_2)\exp[-\frac{i}{\hbar}E_n(t_f - t_2)] \\
&\qquad \times \langle q_2, t_2|q_1, t_2\rangle_J \psi_{n'}(q_1)\psi_{n'}^*(q_i)\exp[-\frac{i}{\hbar}E_{n'}(t_1 - t_i)]
\end{aligned}
$$

$\psi_{n'}(q_1)$ と $\psi_n^*(q_2)$ の中に $\exp[-\frac{i}{\hbar}E_{n'}t_1]\exp[\frac{i}{\hbar}E_n t_2)]$ の部分を含ませてしまい

$$
\begin{aligned}
\langle q_f, t_f | q_i, t_i\rangle_J = &\sum_{n,n'} \psi_n(q_f)\psi_{n'}^*(q_i)\exp\big[-\frac{i}{\hbar}(E_n t_f - E_{n'}t_i)\big] \\
&\times \int dq_1 \int dq_2 \psi_n^*(q_2, t_2)\langle q_2, t_2|q_1, t_2\rangle_J \psi_{n'}(q_1, t_1)
\end{aligned}
$$

ここで、時間の取り扱いに問題がおきます。極限として $t_f \to \infty, t_i \to -\infty$ をとったとき、exp 部分を定義できません。だったらしなければいいとはいかなく、目的があってこの極限を取りたいのでどうにかしなければなりません。問題が起こるのは、$e^{ix} = \cos x + i\sin x$ からわかると思います。

この問題の処理の仕方は収束してくれるように、時間の極限を $t_f \to e^{-i\delta}\infty, t_i \to -e^{-i\delta}\infty$ といったものに置き換えることで解決します。これは $e^{-i\delta}$ によって減衰の効果を加えることで収束させるというものです (時間 t を $\tau = it(\delta = \pi/2)$ のようにおもいっきり虚数時間にすることもでき、この変換の正当性を無視すれば経路積分は数学的に定式化できます)。$e^{-i\delta}$ は複素平面上で実軸 t から δ だけ回転させる動きを与えます。

この減衰の項によって収束していったときに、どの項がきいてくるのかは、$\exp[-\frac{i}{\hbar}(E_n t_f - E_{n'}t_i)]$ の形から、最も値が低い基底のエネルギー E_0 の項と考えられます。これは E_n の値が大きいほうが早く収束するため、最も値の小さいものの影響が強くでるためです。このことから

$$
\begin{aligned}
\lim_{t_i \to -e^{-i\delta}\infty, t_f \to e^{-i\delta}\infty} \langle q_f, t_f | q_i, t_i\rangle_J = &\ \psi_0(q_f)\psi_0^*(q_i)\exp[-\frac{i}{\hbar}E_0(t_f - t_i)] \\
&\times \int dq_1 \int dq_2 \psi_0^*(q_2, t_2)\langle q_2, t_2|q_1, t_2\rangle_J \psi_0(q_1, t_1)
\end{aligned}
$$

書き換えれば

$$\int dq_1 \int dq_2 \psi_0^*(q_2,t_2)\langle q_2,t_2|q_1,t_2\rangle_J \psi_0(q_1,t_1) = \lim_{t_f\to e^{-i\delta}\infty}\lim_{t_i\to -e^{-i\delta}\infty} \frac{\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle_J}{\psi_0(q_f)\psi_0^*(q_i)\exp[-\frac{i}{\hbar}E_0(t_f-t_i)]}$$

$\psi_0(q_1,t_1)$ は $\langle q_1,t_1|0\rangle$ で、右辺は

$$\begin{aligned}
\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle &= \sum_n \langle q_f,t_f|n\rangle\langle n|q_i,t_i\rangle \\
&= \sum_n \langle q_f|\exp[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_f]|n\rangle\langle n|\exp[\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_2)|q_i\rangle \\
&= \sum_n \langle q_f|\exp[-\frac{i}{\hbar}E_n t_f]|n\rangle\langle n|\exp[\frac{i}{\hbar}E_n t_i)|q_i\rangle \\
&= \sum_n \exp[-\frac{i}{\hbar}E_n(t_f-t_i)]\langle q_f|n\rangle\langle n|q_i\rangle
\end{aligned}$$

これの $t_{f,i}\to\pm\infty$ をとれば

$$\lim_{t_f\to\infty}\lim_{t_i\to-\infty}\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle = \psi_0(q_f)\psi_0^*(q_i)\exp[-\frac{i}{\hbar}E_0(t_f-t_i)]$$

となることから

$$\int dq_1 \int dq_2 \langle 0|q_2,t_2\rangle\langle q_2,t_2|q_1,t_2\rangle_J\langle q_1,t_1|0\rangle = \lim_{t_f\to e^{-i\delta}\infty}\lim_{t_i\to -e^{-i\delta}\infty}\frac{\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle_J}{\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle}$$

これから新しく $Z[J]$ を

$$Z[J] = \lim_{t_f\to e^{-i\delta}\infty}\lim_{t_i\to -e^{-i\delta}\infty}\frac{\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle_J}{\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle} = \int dq_1 \int dq_2 \langle 0|q_2,t_2\rangle\langle q_2,t_2|q_1,t_2\rangle_J\langle q_1,t_1|0\rangle$$

このように定義します。分母は q_f,q_i の境界条件による何かしらの定数になるので N とし、分子の $\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle_J$ に (5) を入れて

$$Z[J] = \lim_{t_f\to e^{-i\delta}\infty}\lim_{t_i\to -e^{-i\delta}\infty} N\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt(p\dot{q}-H(p,q)+J(t)q)\Big]$$

しかし、これだと極限の動きが分かりづらいので他の収束させる方法がよく使われます。

今したような時間軸に対して回転を与えるという方法ではなく、ハミルトニアンに減衰項 $(-i\epsilon q^2)$ を入れてしまうという方法です。そうすると

$$Z[J] = N\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt(p\dot{q}-H(p,q)+J(t)q+i\epsilon q^2\Big]$$

こうすれば $\int dt\epsilon q^2/\hbar$ の項が効いて減衰していきますし、時間も問題なく無限大に設定できます。また、ハミルトニアンの形が自由粒子によるものなら、p 積分による定数部分を今の定数 N の中に入れてしまって

$$Z[J] = N' \int \mathcal{D}q \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt(L(q,\dot{q}) + J(t)q + i\epsilon q^2)\Big]$$

N' は与えられた条件による規格化によって決めることができます (規格化定数)。ここでは規格化についてちゃんと触れませんが、条件は $J=0$ で $\langle q_f, t_f | q_i, t_i\rangle$ と一致しなければいけないことから

$$Z[0] = 1$$

となっています。

次に見ていきたいのは、位置演算子を挟んだ $\langle q_f, t_f|\hat{q}(t_j)|q_i, t_i\rangle$ についてです。時間は $t_f > t_j > t_i$ です。完全性を挟んでいけば

$$\begin{aligned}
\langle q_f, &t_f|\hat{q}(t_k)|q_i, t_i\rangle \\
&= \int dq_1 \cdots dq_n \langle q_f, t_f|q_n, t_n\rangle\langle q_n, t_n|q_{n-1}, t_{n-1}\rangle \cdots \langle q_{k+1}, t_{k+1}|\hat{q}(t_k)|q_k, t_k\rangle \cdots \langle q_1, t_1|q_i, t_i\rangle \\
&= \int dq_1 \cdots dq_n \ q(t_k)\langle q_f, t_f|q_n, t_n\rangle\langle q_n, t_n|q_{n-1}, t_{n-1}\rangle \cdots \langle q_{k+1}, t_{k+1}|q_k, t_k\rangle \cdots \langle q_1, t_1|q_i, t_i\rangle
\end{aligned}$$

となって、固有値 $q(t_k)$ が外に出てくるだけなので、残りの部分は経路積分の形なって

$$\langle q_f, t_f|\hat{q}(t_k)|q_i, t_i\rangle = \int \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p \ q(t_k) \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt(p\dot{q} - H(p,q))\Big]$$

$\mathcal{D}q$ は $q(t_k) = q_k$ も含んでいます。これはそのまま一般化させることができて

$$\langle q_f, t_f|\mathrm{T}(\hat{q}(t_1)\cdots\hat{q}(t_n))|q_i, t_i\rangle = \int \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p \ q(t_1)\cdots q(t_n) \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt(p\dot{q} - H(p,q))\Big]$$

左辺の $\mathrm{T}(\hat{q}(t_1)\cdots\hat{q}(t_n))$ は時間の大きいほうから小さいほうに行くように並べるという記号で時間順序積と呼ばれます。例えば

$$\mathrm{T}(A(t_1)B(t_2)) = \begin{cases} A(t_1)B(t_2) & t_1 > t_2 \\ B(t_2)A(t_1) & t_2 > t_1 \end{cases}$$

となります。なので、$t' > t_k > t_j > t$ なら

$$\langle q_f, t_f|q_n, t_n\rangle\langle q_n, t_n|q_{n-1}, t_{n-1}\rangle \cdots \langle q_{k+1}, t_{k+1}|\hat{q}(t_k)|q_k, t_k\rangle \cdots \langle q_{j+1}, t_{j+1}|\hat{q}(t_j)|q_j, t_j\rangle \cdots \langle q_1, t_1|q_i, t_i\rangle$$

と作用させればいいです。

右辺の経路積分では時間の順序に指定がなくなっていることに注意してください。左辺で時間順序をちゃんと考慮して経路積分を作ると、時間の順序と無関係になります。こうなる理由は、左辺は演算子によって記述されているために演算子の交換が自由にできないのに対して、経路積分では演算子ではなく c 数になっているために自由に入れ替えられるからです。

$\hat{q}$ を挟んだものは $Z[J]$ と似ていることがわかると思います。二つ並べれば

$$Z[J] = N \int \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt(p\dot{q} - H(p,q) + J(t)q)\Big]$$

$$\langle q_f, t_f|\mathrm{T}(\hat{q}(t_1)\cdots\hat{q}(t_n))|q_i, t_i\rangle = \int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\ q(t_1)\cdots q(t_n)\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt(p\dot{q}-H(p,q))\Big]$$

つまり、$Z[J]$ を J について微分し $J=0$ にすれば、q が前に出てきて同じ式になります (減衰項はハミルトニアンの中に入れてます)。ここで言っている微分は汎関数微分 (functional derivative) で、関数を関数で微分するというものです。定義として

$$\frac{\delta q(t)}{\delta q(t')} = \delta(t-t')$$

と与えられています (「経路積分～準古典近似～」参照)。汎関数微分を実行すると

$$\begin{aligned}\frac{\delta Z[J]}{\delta J(t_1)} &= \frac{i}{\hbar}N\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\int dt\delta(t-t_1)q(t_1)\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt(p\dot{q}-H(p,q)+J(t)q)\Big]\\ &= \frac{i}{\hbar}N\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\ q(t_1)\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt(p\dot{q}-H(p,q)+J(t)q)\Big]\end{aligned}$$

として q が出てきます。そのまま何回も汎関数微分を実行すれば

$$\frac{\delta^n Z[J]}{\delta J(t_1)\cdots\delta J(t_n)} = (\frac{i}{\hbar})^n N\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}pq(t_1)\cdots q(t_n)\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt(p\dot{q}-H(p,q)+J(t)q)\Big]$$

後は $(i/\hbar)^n$ を消して $J=0$ にすれば形は一致させられます。このように、源 J によって q が生成され、その J も最後に消してしまうことで、J の存在する系から J のない元の系での関係になります。このことから $Z[J]$ は生成汎関数と呼ばれます (正確にはグリーン関数の生成汎関数)。

$\langle q_f, t_f|T(\hat{q}(t_1)\cdots\hat{q}(t_n))|q_i, t_i\rangle$ は、積分の時間の範囲を合わせるために $t_f, t_i \to \pm\infty$ としたとき、状態が真空 $|0\rangle(\hat{H}|0\rangle = E_0|0\rangle = 0)$ になるとすれば

$$\langle 0|\mathrm{T}(\hat{q}(t_1)\cdots\hat{q}(t_n))|0\rangle = (\frac{\hbar}{i})^n\frac{\delta Z[J]}{\delta J(t_1)\cdots\delta J(t_n)}\Big|_{J=0}$$

時間を無限大にとりたかった理由は無限大の時間でこのように真空状態になるという設定を作りたかったからです。さらに、左辺が $\hat{q}(t)$ の時間順序積になっていることから、生成汎関数 $Z[J]$ を

$$Z[J] = \langle 0|\mathrm{T}\exp[\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt\ J(t)\hat{q}(t)]|0\rangle$$

と書けることも分かります。これを J で汎関数微分すれば、右辺は $\langle 0|, |0\rangle$ に挟まれた $\hat{q}(t)$ の時間順序積になります。

また、$\langle q_f, t_f|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|q_i, t_i\rangle$ は

$$
\begin{aligned}
\langle q_f, t_f|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|q_i, t_i\rangle &= \sum_{n,n'}\langle q_f, t_f|n\rangle\langle n|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|n'\rangle\langle n'|q_i, t_i\rangle \\
&= \sum_{n,n'}\langle q_f|\exp[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_f]|n\rangle\langle n|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|n'\rangle\langle n'|\exp[\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_i)|q_i\rangle \\
&= \sum_{n,n'}\exp[-\frac{i}{\hbar}(E_n t_f - E_{n'}t_i)]\langle q_f|n\rangle\langle n|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|n'\rangle\langle n'|q_i\rangle \\
&= \sum_{n,n'}\exp[-\frac{i}{\hbar}(E_n t_f - E_{n'}t_i)]\psi_n(q_f)\psi^*_{n'}(q_i)\langle n|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|n'\rangle
\end{aligned}
$$

これの $t_{f,i} \to \pm\infty$ をとったとき、$|n\rangle, |n'\rangle$ の基底を真空 $|0\rangle$ とすることで

$$
\lim_{t_f\to\infty}\lim_{t_i\to-\infty}\langle q_f, t_f|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|q_i, t_i\rangle = \exp[-\frac{i}{\hbar}E_0(t_f - t_i)]\psi_0(q_f)\psi^*_0(q_i)\langle 0|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|0\rangle
$$

となるのが分かるので

$$
\begin{aligned}
\lim_{t_f\to\infty}\lim_{t_i\to-\infty}\frac{\langle q_f, t_f|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|q_i, t_i\rangle}{\langle q_f, t_f|q_i, t_i\rangle} &= \frac{\exp[-\frac{i}{\hbar}E_0(t_f - t_i)]\psi_0(q_f)\psi^*_0(q_i)\langle 0|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|0\rangle}{\psi_0(q_f)\psi^*_0(q_i)\exp[-\frac{i}{\hbar}E_0(t_f - t_i)]} \\
&= \langle 0|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|0\rangle
\end{aligned}
$$

このことから、規格化を入れた形として

$$
\langle 0|T(\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2))|0\rangle = \lim_{t_f\to\infty}\lim_{t_i\to-\infty}\frac{\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\; q(t_1)q(t_2)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt(p\dot{q} - H(p, q))\right]}{\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt(p\dot{q} - H(p, q))\right]}
$$

という関係式がでてきます。これは演算子 $\hat{q}$ は何個でも成り立っています。