経路積分〜自由粒子〜

自由粒子での経路積分の積分を計算します。

自由粒子での遷移振幅 (ファインマン核) は、「経路積分」で求めたように

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

τ は $\tau = (t_f - t_i)/(n+1)$ です。これの q_j 積分を実行します。積分 q_j において、$j = 1$ の場合 $(n = 1)$

$$\begin{aligned}
\int dq_1 \exp\Big[\frac{im}{2\hbar\tau} \sum_{j=0}^{1} (q_{j+1} - q_j)^2 \Big] &= \int dq_1 \exp[\frac{im}{2\hbar\tau}(q_1 - q_0)^2] \exp[\frac{im}{2\hbar\tau}(q_2 - q_1] \\
&= \int dq_1 \exp\Big[\frac{im}{2\hbar\tau} (2q_1^2 + q_0^2 + q_2^2 - 2q_1 q_0 - 2q_2 q_1) \Big] \\
&= \int dq_1 \exp\Big[\frac{im}{2\hbar\tau} (2(q_1 - \frac{q_0}{2} - \frac{q_2}{2})^2 + \frac{q_0^2}{2} + \frac{q_2^2}{2} - q_0 q_2) \Big] \\
&= \int dq_1 \exp\Big[\frac{im}{2\hbar\tau} (2(q_1 - \frac{q_0}{2} - \frac{q_2}{2})^2 + \frac{1}{2}(q_0 - q_2)^2) \Big] \\
&= \int dq_1 \exp\Big[\frac{im}{\hbar\tau} (q_1 - \frac{q_0}{2} - \frac{q_2}{2})^2 + \frac{im}{4\hbar\tau}(q_0 - q_2)^2 \Big]
\end{aligned}$$

exp 内の第一項が積分に引っかかり、それはガウス積分なので

$$\begin{aligned}
&\int dq_1 \exp[\frac{im}{\hbar\tau}(q_1 - \frac{q_0}{2} - \frac{q_2}{2})^2 + \frac{im}{4\hbar\tau}(q_0 - q_2)^2] \\
&= \int dq_1 \exp[-\frac{m}{i\hbar\tau}(q_1 - \frac{q_0}{2} - \frac{q_2}{2})^2 + \frac{im}{4\hbar\tau}(q_0 - q_2)^2] \\
&= \sqrt{\frac{i\pi\hbar\tau}{m}} \exp[\frac{im}{4\hbar\tau}(q_0 - q_2)^2]
\end{aligned}$$

というわけで、$j = 1$ では

$$\frac{m}{2\pi i\hbar\tau} \sqrt{\frac{i\pi\hbar\tau}{m}} \exp[\frac{im}{4\hbar\tau}(q_0 - q_2)^2] = \sqrt{\frac{m}{4i\pi\hbar\tau}} \exp[\frac{im}{4\hbar\tau}(q_0 - q_2)^2]$$

この積分は係数を一般化すれば

$$\int dq_n \exp[-a(q_{n+1}-q_n)^2]\exp[-b(q_n-q_{n-1})^2] = \sqrt{\frac{\pi}{a+b}}\exp[-\frac{ab}{a+b}(q_{n+1}-q_{n-1})^2]$$

となっています (導出は同じように平方完成してやればいいです)。

$j=2$ では

$$\begin{aligned}
&\Big(\frac{2\pi i\hbar\tau}{m}\Big)^{-\frac{3}{2}}\int dq_1\int dq_2 \exp[\frac{im}{2\hbar\tau}\sum_{j=0}^{2}(q_{j+1}-q_j)^2]\\
&=\Big(\frac{2\pi i\hbar\tau}{m}\Big)^{-\frac{3}{2}}\int dq_1\int dq_2 \exp[\frac{im}{2\hbar\tau}((q_1-q_0)^2+(q_2-q_1)^2+(q_3-q_2)^2)]
\end{aligned}$$

となるので、q_1 積分の結果を使うことで

$$\begin{aligned}
&\Big(\frac{2\pi i\hbar\tau}{m}\Big)^{-\frac{3}{2}}\int dq_1\int dq_2 \exp[\frac{im}{2\hbar\tau}((q_1-q_0)^2+(q_2-q_1)^2+(q_3-q_2)^2)]\\
&=\sqrt{\frac{m}{4i\pi\hbar\tau}}\Big(\frac{2\pi i\hbar\tau}{m}\Big)^{-\frac{1}{2}}\int dq_2\exp[\frac{im}{4\hbar\tau}(q_0-q_2)^2]\exp[\frac{im}{2\hbar\tau}(q_3-q_2)^2]\\
&=\sqrt{\frac{m}{4i\pi\hbar\tau}}\Big(\frac{2\pi i\hbar\tau}{m}\Big)^{-\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{\pi}{\frac{m}{4i\hbar\tau}+\frac{m}{2i\hbar\tau}}}\exp\Big[-\frac{\frac{m}{4i\hbar\tau}\frac{m}{2i\hbar\tau}}{\frac{m}{4i\hbar\tau}+\frac{m}{2i\hbar\tau}}(q_3-q_0)^2\Big]\\
&=\sqrt{\frac{-m^2}{8\pi^2\hbar^2\tau^2}}\sqrt{\frac{4i\pi\hbar\tau}{3m}}\exp[\frac{im}{6\hbar\tau}(q_3-q_0)^2]\\
&=\sqrt{\frac{m}{6i\pi\hbar\tau}}\exp[\frac{im}{6\hbar\tau}(q_3-q_0)^2]
\end{aligned}$$

そして、これがどこまでも繰り返されます。$j=1$ と $j=2$ の構造を見てみると、$L=1,2$ とすれば

$$\sqrt{\frac{m}{2(L+1)i\pi\hbar\tau}}\exp[\frac{im}{2(L+1)\hbar\tau}(q_{L+1}-q_0)^2]$$

とわかります。よって、自由粒子での遷移振幅は積分を実行することで

$$\begin{aligned}
\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle &= \lim_{n\to\infty}\sqrt{\frac{m}{2(n+1)i\pi\hbar\tau}}\exp[\frac{im}{2(n+1)\hbar\tau}(q_{n+1}-q_0)^2]\\
&=\sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t_f-t_i)}}\exp[\frac{im}{2\hbar}\frac{(q_f-q_i)^2}{t_f-t_i}]\quad(\tau=\frac{t_f-t_i}{n+1})
\end{aligned}\tag{1}$$

と求まります。

この結果を古典的な場合と比較してみます。今やってきたことは

$$\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle=\int\mathcal{D}q\exp[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt\frac{m}{2}\dot{q}^2]=\int\mathcal{D}q\exp[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt\ L]=\int\mathcal{D}q\exp[\frac{i}{\hbar}S]$$

での積分を実行するというものでした。そして、古典論での自由粒子に対する作用は

$$S=\int_{t_i}^{t_f}dt\frac{1}{2}m\dot{q}^2=\int_{t_i}^{t_f}dt\ L$$

これを計算すると (解析力学の「オイラー・ラグランジュ方程式」参照)

$$S=\frac{m}{2}\frac{(q_f-q_i)^2}{t_f-t_i}$$

これを (1) の exp 内と比較すると $i/\hbar$ がつけられているだけと分かります。この性質は、ラグランジアンが 2 次以下で構成されている限り成立します (2 次までなら積分を実行できる)。例えば、調和振動子の場合でも同様に exp 内は古典論での作用に $i/\hbar$ をつけるだけでいいようになっています。つまり、この場合では一般的に

$$\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle=F(t_i,t_f)\exp[\frac{i}{\hbar}S]$$

と書けます。2 次以下といったように 3 次以上の項が出てくるとこの性質はなくなります。

さらに (1) を見てみると、遷移振幅は振動していることが分かり (オイラーの公式)、時間を固定してしまえば位置の関数となります。そして、振動が正弦波のようになり波長 λ を持つ領域があったとします。そうすると、位置 x から λ だけ動かすのは位相が 2π 動くことに対応する (振幅は 2π 動かせば元に戻る) ので、q_i,t_i を原点にとって、位相に相当する exp 内を取り出すと

$$|\frac{m}{2\hbar}\frac{(x+\lambda)^2}{t}-\frac{m}{2\hbar}\frac{x^2}{t}|=2\pi$$

ここら辺は振動の話から分かると思います。これは変形すれば

$$\frac{\lambda^2+2x\lambda}{t}=\frac{4\pi\hbar}{m}$$
$$\lambda\simeq\frac{2\pi\hbar t}{mx}$$

λ は x より小さいとして λ^2 を無視しています。古典論での運動量は、距離 x 進むのにかかる時間が t なら

$$p=mv=m\frac{x}{t}\ \Rightarrow\ x=\frac{pt}{m}$$

なので、古典的な運動量で十分な場合として、これを入れてみると

$$\lambda=\frac{2\pi\hbar}{p}=\frac{h}{p}$$

となり、ド・ブロイ波長となります。波数 $k=2\pi/\lambda$ を使えば運動量は

$$p=\hbar k$$

となります。

次に位置を固定して時間の場合で同様のことを行ってみます。時間の場合では周期 T によって位相が 2π 変わるので

$$
\begin{aligned}
2\pi &= |\frac{m}{2\hbar}\frac{x^2}{(t+T)} - \frac{m}{2\hbar}\frac{x^2}{t}| \\
&= \frac{m}{2\hbar}\frac{x^2 T}{t(t+T)} \\
&= \frac{m}{2\hbar t^2}\frac{x^2 T}{1+T/t}
\end{aligned}
$$

t は T に比べて大きいとして

$$
T \simeq 2\pi\frac{2\hbar t^2}{mx^2}
$$

そして、周期は角振動数 ω によって $T = 2\pi/\omega$ であり、さらに古典的なエネルギー E_c というのは

$$
E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(\frac{x}{t})^2
$$

なので

$$
\begin{aligned}
\frac{2\pi}{\omega} &= 4\hbar\pi\frac{1}{m}\frac{m}{2E_c} \\
E_c &= \hbar\omega
\end{aligned}
$$

となり、振幅が正弦波のようになっている状況では運動量、エネルギーともにド・ブロイの公式を再現します。