6章 経路積分

・経路積分の導出・形式について理解する
・始状態・終状態が基底状態の場合を考える

位置q', 時刻t'から, q'', t''に発展する確率振幅は,

$\langle q''|e^{-iHt''}e^{iHt'}|q'\rangle = \langle q''|e^{-iH(t''-t')}|q'\rangle$

$H(P,Q)=\frac{1}{2m}P^2+V(Q)$ はハミルトニアン,

位置演算子Qに対し, その固有状態 $|q\rangle$は

$Q|q\rangle = q|q\rangle$ を満たす,

$e^{iHt}Qe^{-iHt}=Q(t)$ と書くと,

$e^{iHt}|q\rangle = |q,t\rangle$について, $Q(t)|q,t\rangle = q|q,t\rangle$

以下, $\langle q''|e^{-iH(t''-t')}|q'\rangle = \langle q'',t''|q',t'\rangle$ を考える

$\delta t \equiv \frac{t''-t'}{N}$ とし, $e^{-iH(t''-t')}=(e^{-iH\delta t})^N$,

$\langle q'',t''|q',t'\rangle = \langle q''|e^{-iH\delta t}\int dq_N|q_N\rangle\langle q_N|\cdots\int dq_1|q_1\rangle\langle q_1|e^{-iH\delta t}|q'\rangle$

$=\int\prod_{j=1}^{N}dq_j\langle q''|e^{-iH\delta t}|q_N\rangle\cdots\langle q_1|e^{-iH\delta t}|q'\rangle$

完全性 $\mathbb{1}=\int dq|q\rangle\langle q|$ を用いている,

$\exp(-iH\delta t)=\exp\left(-i\left(\frac{1}{2m}P^2+V(Q)\right)\delta t\right)$

$=\exp\left(-i\frac{\delta t}{2m}P^2\right)\exp(-i\delta tV(Q))\exp(O(\delta t^2))$

δtの1次の項を含まない $\exp(O(\delta t^2))\simeq 1$ とすると,

$\langle q_2|e^{-iH\delta t}|q_1\rangle$

$=\int dp_1\langle q_2|e^{-i\frac{\delta t}{2m}P^2}|p_1\rangle\langle p_1|e^{-i\delta tV(Q)}|q_1\rangle$

$=\int dp_1 e^{-i\frac{\delta t}{2m}p_1^2}e^{-i\delta tV(q_1)}\langle q_2|p_1\rangle\langle p_1|q_1\rangle$

$=\int\frac{dp_1}{2\pi}e^{-i\frac{\delta t}{2m}p_1^2}e^{-i\delta tV(q_1)}e^{ip_1q_2}e^{-ip_1q_1}$

$=\int\frac{dp_1}{2\pi}e^{-i\delta tH(p_1,q_1)}e^{ip_1(q_2-q_1)}$

$\langle q|p\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ipq}$ を用いている,

$H(P,Q)$がPとQが掛け合わさる項を含むような場合,
次のような一般化を考える,

$H(P,Q)=\int\frac{dx}{2\pi}\frac{dk}{2\pi}e^{ixP+ikQ}\int dp\,dq\,e^{-ixp-ikq}H(p,q)$

$H(p,q)$が古典的なハミルトニアン

このとき, $\bar{q}_1=\frac{1}{2}(q_1+q_2)$として,

$\langle q_2|e^{-iH\delta t}|q_1\rangle$

$=\int\frac{dp_1}{2\pi}e^{-i\delta tH(p_1,\bar{q}_1)}e^{ip_1(q_2-q_1)}$ と修正される

以上から、

$$\langle q'', t'' | q', t' \rangle = \int \prod_{k=1}^{N} dq_k \prod_{j=0}^{N} \frac{dp_j}{2\pi} e^{-i\delta t H(p_j, q_j)} e^{ip_j(q_{j+1}-q_j)}$$

ただし、$q_{N+1} = q''$, $q_0 = q'$ である、

$\frac{q_{j+1}-q_j}{\delta t} = \dot{q}_j$ とし、$\delta t \to 0$ の極限を取ると、

$$\langle q'', t'' | q', t' \rangle = \int Dq Dp \, e^{i\int_{t'}^{t''} dt (p(t)\dot{q}(t) - H(p(t), q(t)))}$$

$Dq = \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} dq_j$ であり、

$q(t') = q'$, $q(t'') = q''$ を満たす全ての経路 $q(t)$ で積分することを意味する、

Dp も同様だが、$p(t')$, $p(t'')$ は任意に取れる

ここで $H(p, q)$ において、

p の最高次の項が2次かつ q を含まなければ、

運動量についての積分はガウス積分として処理でき、

$\frac{\partial}{\partial p}(p\dot{q} - H(p,q)) = \dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p} = 0$ となる

$p = p(\dot{q}, q)$ を用いて、

$L(\dot{q}, q) = p(\dot{q}, q) - H(p(\dot{q}, q), q)$ として、

$$\langle q'', t'' | q', t' \rangle = \int Dq \, e^{i\int_{t'}^{t''} dt L(\dot{q}, q)}$$

ここで、ガウス積分により出る定数は Dq に入れ込む、

これはハミルトン形式からラグランジュ形式へ移る手続きとなっている

次に、$\langle q'', t'' | Q(t_1) | q', t' \rangle$ ($t' < t_1 < t''$) を考える、

$\langle q'', t'' | Q(t_1) | q', t' \rangle$

$= \int \prod_{j=1}^{N} dq_j \langle q'' | e^{-iH\delta t} | q_N \rangle \cdots \langle q_k | Q | q_{k-1} \rangle \cdots \langle q_1 | e^{-iH\delta t} | q' \rangle$

$\langle q_k | Q | q_{k-1} \rangle = q_k \delta(q_k - q_{k-1})$ より、

$\langle q'', t'' | Q(t_1) | q', t' \rangle = \int Dq Dp \, q(t_1) e^{iS}$,

$S = \int_{t'}^{t''} dt (p\dot{q} - H(p, q))$,

同様に2つの時刻 t_1, t_2 を考えたとき、

$\int Dq Dp \, q(t_1) q(t_2) e^{iS} = \langle q'', t'' | T Q(t_1) Q(t_2) | q', t' \rangle$

(Tは時間順序積) を要請するのが分かる

次に、ハミルトニアンの次のような拡張を考える、

$H(p, q) \to H(p, q) - f(t) q(t) - h(t) p(t)$

また、関数微分 $\frac{\delta}{\delta f(t_1)} f(t_2) = \delta(t_1 - t_2)$ を導入する、

$$\langle q'',t''|q',t'\rangle_{f,h} = \int DqDp\, e^{i\int_{t'}^{t''} dt\,(p\dot{q} - H(p,q) + fq + hp)}$$ として,

$$\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta f(t_1)}\langle q'',t''|q',t'\rangle_{f,h} = \int DqDp \int_{t'}^{t''} q(t)\delta(t-t_1)\, e^{iS_{f,h}}$$
$$= \int DqDp\, q(t_1)\, e^{iS_{f,h}}$$

$S_{f,h} = \int_{t'}^{t''} dt\,(p\dot{q} - H(p,q) + fq + hp)$ である,

同様に一般の $q(t_1), \cdots, p(t_n), \cdots$ について

$$\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta f(t_1)}\cdots\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta h(t_n)}\cdots\langle q'',t''|q',t'\rangle_{f,h} = \int DqDp\, q(t_1)\cdots p(t_n)\cdots e^{iS_{f,h}}$$

このことから, $Q(t_1), \cdots, P(t_n), \cdots$ について

$$\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta f(t_1)}\cdots\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta h(t_n)}\cdots\langle q'',t''|q',t'\rangle_{f,h}\Big|_{f=h=0}$$
$$= \langle q'',t''|T\,Q(t_1)\cdots P(t_n)\cdots|q',t'\rangle$$ が分かる

基底状態($|0\rangle$)から基底状態まで移ろう場合を考える,

$$\langle 0,t''|0,t'\rangle_{f,h} = \langle 0|e^{-iHt''}e^{iHt'}|0\rangle_{f,h}$$
$$= \int dq''\langle 0|q''\rangle\langle q''|e^{-iHt''}\int dq' e^{iHt'}|q'\rangle\langle q'|0\rangle$$
$$= \int dq''dq'\,\psi_0^*(q'')\langle q'',t''|q',t'\rangle_{f,h}\psi_0(q')$$

よって, $t' \to -\infty$, $t'' \to +\infty$ を取れば,

$$\langle 0|0\rangle_{f,h} = \lim_{\substack{t'\to-\infty\\ t''\to+\infty}}\int dq''dq'\,\psi_0^*(q'')\langle q'',t''|q',t'\rangle_{f,h}\psi_0(q')$$

別の視点で $\langle 0|0\rangle_{f,h}$ を考える,

$$|q';t'\rangle = e^{iHt'}|q'\rangle,$$

Hの固有状態$|n\rangle$: $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ について,

$\mathbb{1} = \sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n|$ を用いると,

$$|q';t'\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{iHt'}|n\rangle\langle n|q'\rangle$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty}\psi_n^*(q')\, e^{iE_n t'}|n\rangle$$

ここで, Hを微小な正数ϵで$(1-i\epsilon)H$と置き換えると,

$$\lim_{t'\to-\infty}|q';t'\rangle = \lim_{t'\to-\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\psi_n^*(q')\, e^{iE_n t'}e^{\epsilon E_n t'}|n\rangle$$
$$= \psi_0^*(q')|0\rangle \quad (\because E_0 = 0)$$

同様に, $\lim_{t''\to\infty}\langle q'';t''| = \psi_0(q'')\langle 0|$,

このことは, $(1-i\epsilon)H$ を用いれば境界条件 $q(t')$, $q(t'')$ に依らず $t \to \pm\infty$で基底状態へと移ることを意味しており,

$$\langle 0|0\rangle_{f,h} = \int DqDp\, e^{i\int_{-\infty}^{\infty} dt\,(p\dot{q} - (1-i\epsilon)H + fq + hp)}$$

$i\epsilon H$ を摂動として扱うことを考えてみる,

$H \to H_0(p,q)$, $-i\epsilon H \to H_1(p,q)$ として,

$$\langle 0|0\rangle_{f,h} = \int \mathcal{D}q\,\mathcal{D}p\; e^{i\int_{-\infty}^{\infty} dt\,(p\dot{q} - H_0 - H_1 + fq + hp)}$$

$$= e^{-i\int_{-\infty}^{\infty} dt'\, H_1\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta h(t')},\, \frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta f(t')}\right)}$$

$$\times \int \mathcal{D}q\,\mathcal{D}p\; e^{i\int_{-\infty}^{\infty} dt\,(p\dot{q} - H_0(p,q) + fq + hp)}$$

H_1がpに依存せず，H_0が先述のpの2次の条件のとき，

$L_1(q) = -H_1(q)$ を用いて，

$$\langle 0|0\rangle_{f} = e^{i\int_{-\infty}^{\infty} dt'\, L_1\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta f(t')}\right)}$$

$$\times \int \mathcal{D}q\; e^{i\int_{-\infty}^{\infty} dt\,(L_0(\dot{q}, q) + fq)}$$

$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$ を満たす $p(\dot{q}, q)$ により変形する //