経路積分の一計算
A Computation of Feynman Path Integral

廣　島　　　勉

1　はじめに

n 次元ユークリッド空間$\mathbb{R}^n$ の関数 V をポテンシャルとするシュレディンガー作用素を $\mathcal{H}=\ \Delta+V$ とし、ν を定数として偏微分方程式

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\frac{\nu}{2}\mathcal{H}\varphi \tag{1.1}$$

を考える。この方程式は $\nu=1$ の場合はポテンシャル付の熱方程式であり、ν が純虚数の場合シュレディンガー方程式となる（[1]）。

$t>0$，$x,x_0\in\mathbb{R}^n$ とする。$V\equiv 0$ の場合，（1.1）の基本解は

$$\left(\frac{\nu}{2\pi t}\right)^{\frac{n}{2}}\exp\left(-\frac{\nu\left|x-x_0\right|^2}{2t}\right) \tag{1.2}$$

である。また、$w>0$ を定数としてポテンシャルが $V(x)=\frac{1}{2}w^2\left|x\right|^2$ である場合、$0<t<\frac{\pi}{w}$ における基本解は

$$\left(\frac{\nu w}{2\pi\sin wt}\right)^{\frac{n}{2}}\exp\left(-\frac{\nu w\left(\left(\left|x\right|^2+\left|x_0\right|^2\right)\cos wt-2\left\langle x,x_0\right\rangle\right)}{2\sin wt}\right) \tag{1.3}$$

である。

V をポテンシャルとするラグランジェアン L は、

$$L(x,v)=\frac{1}{2}\left|v\right|^2-V(x)$$

で与えられる。$\gamma=\gamma\ (s):[0,t]\to\mathbb{R}^n$ を$\mathbb{R}^n$ における経路とする。γ の作用積分$\mathcal{A}$ は次で与えられる。

$$\mathcal{A}(\gamma)=\int_0^t L\left(\gamma(s),\frac{d\gamma}{ds}(s)\right)ds. \tag{1.4}$$

始点 $x_0=\gamma\ (0)$ と終点 $x=\gamma\ (t)$ を固定した経路 γ に関して

$$\exp\left(-\nu\mathcal{A}(\gamma)\right)$$

の和

$$\int \exp\left(-\nu \mathcal{A}(\gamma)\right) \mathcal{D}\gamma \tag{1.5}$$

をとると、関数 V をポテンシャルとする偏微分方程式(1.1)の基本解が得られると言うのがファインマン経路積分のアイディアである。ただし、経路積分(1.5)の計算に自然な測度を期待するのは不可能であり、何らかの解釈が必要となる。

本論文では $\mathbb{R}^n$ における経路 γ を古典軌道からの変分で表し、作用素 $-\frac{d^2}{ds^2}$ の固有関数に分解し、その振幅を積分パラメータとして経路積分を表現することを試みた。

自由運動粒子と調和振動子の場合には、その経路積分が方程式（1.1）の基本解の主要部分を与えることを示す。

2　古典軌道と固有関数分解

経路の始点と終点は $x_0 = \gamma(0)$ と $x = \gamma(t)$ に固定する。これを境界条件として、経路 γ に関する汎関数 $\mathcal{A}$ の極小点を経路 c とする。c は古典軌道であり、

$$c = c(s) \colon [0, t] \to \mathbb{R}^n,$$
$$\frac{d^2 c}{ds^2}(s) + \operatorname{grad} V(c(s)) = 0,$$
$$c(0) = x_0,\ c(t) = x$$

を満たす。経路 γ の古典軌道からのずれを ψ で表す。すなわち、

$$\psi = \psi(s) \colon [0, t] \to \mathbb{R}^n,$$
$$\gamma(s) = c(s) + \psi(s),$$
$$\psi(0) = \psi(t) = 0$$

である。さらに ψ を作用素 $-\frac{d^2}{ds^2}$ の固有値

$$\left(\frac{\pi}{t}\right)^2, \left(\frac{2\pi}{t}\right)^2, \left(\frac{3\pi}{t}\right)^2, \dots$$

に対応する固有関数

$$\left\{ \sqrt{\frac{2}{t}} \sin\left(\frac{\pi k s}{t}\right) \,\middle|\, k = 1, 2, 3, \dots \right\}$$

で次の様に分解する。

$$\psi(s) = \sqrt{2\pi} \sum_{k \geq 1} \frac{\lambda_k t}{\pi k} \sqrt{\frac{2}{t}} \sin\left(\frac{\pi k s}{t}\right) = 2\sqrt{\frac{t}{\pi}} \sum_{k \geq 1} \frac{\lambda_k}{k} \sin\left(\frac{\pi k s}{t}\right) \tag{2.1}$$

ここで $\{\lambda_k \mid k = 1, 2, 3, \dots\}$ は $\mathbb{R}^n$ の点列であり、(2.1)の係数は

$$\int_0^t \left| \frac{d\psi}{ds}(s) \right|^2 ds = 2\pi \sum_{k \geq 1} |\lambda_k|^2$$

となるようにとってある。

部分積分

$$\int_0^t \left\langle \frac{dc}{ds}(s), \frac{d\psi}{ds}(s) \right\rangle ds = -\int_0^t \left\langle \frac{d^2c}{ds^2}(s), \psi(s) \right\rangle ds$$

を使って、作用積分(1.4)を計算すると

$$\mathcal{A}(\gamma) = \mathcal{A}(c) + \pi \sum_{k \geq 1} |\lambda_k|^2 - \int_0^t \{V(\gamma(s)) - V(c(s)) - \langle \operatorname{grad} V(c(s)), \psi(s) \rangle\} \, ds \tag{2.2}$$

を得る。この分解の下で、$\nu^{\frac{n}{2}}$を正規化因子として、経路積分(1.5)を

$$\int \exp\left(-\nu \mathcal{A}(\gamma)\right) \mathcal{D}\gamma = \int \exp\left(-\nu \mathcal{A}(\gamma)\right) \mathcal{D}\psi = \lim_{l \to \infty} \nu^{\frac{ln}{2}} \int \exp\left(-\nu \mathcal{A}(\gamma)\right) \prod_{1 \leq k \leq l} d\lambda_k \tag{2.3}$$

として計算する。

3 自由運動粒子

ポテンシャルが恒等的に 0、すなわち $V \equiv 0$ の場合、古典軌道は

$$c(s) = x_0 + \frac{s}{t}(x - x_0)$$

で、その作用積分は

$$\mathcal{A}(c) = \frac{|x - x_0|^2}{2t}$$

となる。

また経路積分の被積分関数は

$$\exp\left(-\nu \mathcal{A}(\gamma)\right) = \exp\left(-\nu \mathcal{A}(c)\right) \prod_{k \geq 1} \exp\left(-\pi\nu |\lambda_k|^2\right) \tag{3.1}$$

であり、$c \neq 0, \Re c \geq 0$ のとき、ガウス積分

$$\int \exp\left(-\pi c |\lambda|^2\right) d\lambda = c^{-\frac{n}{2}}$$

により、経路積分(2.3)は、

$$\int \exp\left(-\nu \mathcal{A}(\gamma)\right) \mathcal{D}\gamma = \exp\left(-\frac{\nu |x - x_0|^2}{2t}\right) \tag{3.2}$$

となる。これを$\left(\frac{\nu}{2\pi t}\right)^{\frac{n}{2}}$で正規化して，次の結果を得る。

命題 3.1. 自由運動粒子の場合、経路積分

$$\left(\frac{\nu}{2\pi t}\right)^{\frac{n}{2}} \int \exp\left(-\nu \mathcal{A}(\gamma)\right) \mathcal{D}\gamma$$

は方程式(1.1)の基本解である。

証明 .(1.2)と(3.2)を比較すれば良い。

4　調和振動子

$w>0$ を定数として，ポテンシャルが $V(x)=\frac{1}{2}w^2|x|^2$ の場合，古典軌道の方程式

$$\frac{d^2c}{ds^2}(s)+w^2c(s)=0,$$
$$c(0)=x_0,\ c(t)=x$$

の解は $t\neq 0,\ \pm\frac{\pi}{w},\pm\frac{2\pi}{w},\pm\frac{3\pi}{w}\ ,\ldots$ において、

$$c(s)=\frac{x\sin ws-x_0\sin w(t-s)}{\sin wt}$$

であり、その作用積分は

$$\mathcal{A}(c)=\frac{w\left(\left(|x|^2+|x_0|^2\right)\cos wt-2\langle x,x_0\rangle\right)}{2\sin wt} \tag{4.1}$$

である。

作用積分の分解(2.2)は、

$$V(x+\xi)-V(x)-\langle \operatorname{grad} V(x),\xi\rangle=\frac{1}{2}|\xi|^2$$

と、

$$\int_0^t|\psi(s)|^2\,ds=\frac{2t^2}{\pi}\sum_{k\geq 1}\frac{|\lambda_k|^2}{k^2}$$

に注意して、

$$\begin{aligned}\mathcal{A}(\gamma)&=\mathcal{A}(c)+\pi\sum_{k\geq 1}|\lambda_k|^2-\frac{w^2}{2}\int_0^t|\psi(s)|^2\,ds\\&=\mathcal{A}(c)+\pi\sum_{k\geq 1}\left(1-\frac{w^2t^2}{\pi^2k^2}\right)|\lambda_k|^2\end{aligned}$$

となる。したがって経路積分の被積分関数は

$$\exp\left(-\nu\mathcal{A}(\gamma)\right)=\exp\left(-\nu\mathcal{A}(c)\right)\prod_{k\geq 1}\exp\left(-\pi\nu\left(1-\frac{w^2t^2}{\pi^2k^2}\right)|\lambda_k^2|\right)$$

となるので、ガウス積分と無限積の公式

$$\prod_{k\geq 1}\left(1-\frac{z^2}{\pi^2k^2}\right)=\frac{\sin z}{z}$$

を適用して

$$\int \exp\left(-\nu\mathcal{A}(\gamma)\right)\mathcal{D}\gamma = \left\{\prod_{k\geq 1}\left(1-\frac{w^2t^2}{\pi^2k^2}\right)\right\}^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\nu\mathcal{A}(c)\right) \\ = \left(\frac{wt}{\sin wt}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left(-\nu\mathcal{A}(c)\right) \tag{4.2}$$

を得る。

自由運動粒子の場合と同じ正規化因子 $\left(\frac{\nu}{2\pi t}\right)^{\frac{n}{2}}$ を使うと

$$\left(\frac{\nu}{2\pi t}\right)^{\frac{n}{2}} \int \exp\left(-\nu\mathcal{A}(\gamma)\right)\mathcal{D}\gamma = \left(\frac{\nu w}{2\pi \sin wt}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left(-\nu\mathcal{A}(c)\right) \tag{4.3}$$

であるので、次を得る。

命題 4.1. 調和振動子の場合、経路積分

$$\left(\frac{\nu}{2\pi t}\right)^{\frac{n}{2}} \int \exp\left(-\nu\mathcal{A}(\gamma)\right)\mathcal{D}\gamma$$

は $t \neq 0, \pm\frac{\pi}{w}, \pm\frac{2\pi}{w}, \pm\frac{3\pi}{w}, \ldots$ において方程式(1.1)の基本解である。

証明 . (1.3) と(4.1)、(4.3)から従う。

5　ヤコビ作用素の固有関数による分解

§ 2 での古典軌道からのずれ ψ の分解を、古典軌道 c の第 2 変分に関連したヤコビ作用素 $\mathcal{J}$ の固有関数に置き換えてみる。ヤコビ作用素 $\mathcal{J}$ は

$$\psi = \psi(s) \colon [0,t] \to \mathbb{R}^n, \\ \psi(0) = \psi(t) = 0.$$

である ψ に対し

$$\mathcal{J}\psi(s) = -\frac{d^2\psi}{ds^2}(s) - \mathrm{Hess}\, V(c(s))\psi(s)$$

で定義される作用素である。必要とあればポテンシャル V に仮定を置き、t が十分小さいときヤコビ作用素 $\mathcal{J}$ の固有値は正であるとする。

ヤコビ作用素 $\mathcal{J}$ の固有値の列を

$$m_1^2 \leq m_2^2 \leq m_3^2 \leq \ldots$$

とし、対応するヤコビ作用素 $\mathcal{J}$ の固有関数の正規直交系を

$$\{\psi_k \mid k = 1, 2, 3, \ldots\}$$

として、次の様に ψ を分解する :

$$\psi(s) = \sqrt{2\pi}\sum_{k\geq 1}\frac{\mu_k}{m_k}\psi_k(s). \tag{5.1}$$

ここで係数は

$$\int_0^t \left|\frac{d\psi}{ds}(s)\right|^2 ds = -\int_0^t \left\langle \frac{d^2\psi}{ds^2}(s), \psi \right\rangle^2 ds$$
$$= 2\pi \sum_{k\geq 1} |\mu_k|^2 + \int_0^t \langle \mathrm{Hess}\, V(c(s))\psi(s), \psi(s)\rangle\, ds$$

となるようにとってある。

以上の状況で、

$$W(s) = V(\gamma(s)) - V(c(s)) - \langle \mathrm{grad}\, V(c(s)), \psi(s)\rangle - \frac{1}{2}\langle \mathrm{Hess}\, V(c(s))\psi(s), \psi(s)\rangle$$

と置くと、作用積分(1.4)は、

$$\mathcal{A}(\gamma) = \mathcal{A}(c) + \pi \sum_{k\geq 1} |\mu_k|^2 - \int_0^t W(s)ds \tag{5.2}$$

と計算される。調和振動子の場合 $W \equiv 0$ となることに注意しよう。

6　形式的体積形式

§ 2 での ψ の分解(2.1)

$$\{\lambda_k \mid k = 1, 2, 3, \ldots\} \mapsto \sum_{k\geq 1} \frac{\lambda_k t}{\pi k}\sqrt{\frac{2}{t}} \sin\left(\frac{\pi k s}{t}\right)$$

を経路のヒルベルト空間への線形写像とみなすと、

$$\left\{ \sqrt{\frac{2}{t}} \sin\left(\frac{\pi k s}{t}\right) \,\middle|\, k = 1, 2, 3, \ldots \right\}$$

が正規直交系であるので、その体積形式は形式的無限積で

$$\prod_{k\geq 1} \left(\frac{t}{\pi k}\right)^n d\lambda_k = \left(\det\left(-\frac{d^2}{ds^2}\right)\right)^{-\frac{1}{2}} \prod_{k\geq 1} d\lambda_k \tag{6.1}$$

となると考えられる。同じく(5.1)の

$$\{\mu_k \mid k = 1, 2, 3, \ldots\} \mapsto \sum_{k\geq 1} \frac{\mu_k}{m_k}\psi_k(s)$$

においては、同様に形式的に体積形式は

$$\prod_{k\geq 1} \frac{d\mu_k}{m_k} = (\det \mathcal{J})^{-\frac{1}{2}} \prod_{k\geq 1} d\mu_k \tag{6.2}$$

となる。(6.1)と(6.2)から、経路積分の積分パラメータの変数変換によって

$$\prod_{k\geq 1} d\lambda_k = \frac{\prod_{k\geq 1}\left(\frac{\pi k}{t}\right)^n}{\prod_{k\geq 1} m_k}\prod_{k\geq 1} d\mu_k = \sqrt{\frac{\det\left(-\frac{d^2}{ds^2}\right)}{\det \mathcal{J}}}\prod_{k\geq 1} d\mu_k \tag{6.3}$$

となることが期待される。ただし、$\prod_{k\geq 1}\left(\frac{\pi k}{t}\right)^n$ と $\prod_{k\geq 1} m_k$ は共に発散し、$\det\left(-\frac{d^2}{ds^2}\right)$ と $\det\mathcal{J}$ も形式的な表現である。

7　無限次元変数変換

(6.3)の

$$\sqrt{\frac{\det\left(-\frac{d^2}{ds^2}\right)}{\det \mathcal{J}}} = \frac{\prod_{k\geq 1}\left(\frac{\pi k}{t}\right)^n}{\prod_{k\geq 1} m_k}$$

を関数として実現しよう。

$n\times n$ 行列値関数$\Psi(s;z)$を $z\in\mathbb{C}$ をパラメータとする微分方程式

$$-\mathcal{J}\Psi(s;z)+z\Psi(s;z)=0,$$
$$\Psi(0;z)=0,$$
$$\frac{d\Psi}{ds}(0;z)=1$$

の初期値問題の解とする。$\Psi(s;z)$は z について解析的であり，z の方程式

$$\det\Psi(t;z)=0$$

の解が重複度も含め$\mathcal{J}$の固有値に一致するので、

$$\frac{\det\Psi(t;z)}{\det\Psi(t;0)} = \prod_{k\geq 1}\left(1-\frac{z}{m_k^2}\right)$$

となる。またこの初期値問題の漸近的な解$\{\Psi_k \mid k=1,2,3,\ldots\}$は

$$\frac{d^2\Psi_{k+1}}{ds^2}(s;z)+z\Psi_k(s;z)+\mathrm{Hess}\,V(c(s))\Psi_k(s;z)=0$$
$$\Psi_0(s;z)=s$$

から帰納的に

$$\Psi_k(s;z)=\frac{(-z)^{k+1}s^{2k+1}}{(2k+1)!}+(z\text{ の }k\text{ 次以下の項})$$

となる。

また、作用素$-\frac{d^2}{ds^2}$の固有値は z の関数

$$\left(\frac{F(t;z)}{F(t;0)}\right)^n = \prod_{k\geq 1}\left(1-\frac{t^2 z}{\pi^2 k^2}\right)^n$$

の零点と重複度を含め一致する。ここで、F は z をパラメータとする微分方程式

$$\frac{d^2F}{ds^2}(s;z) + zF(s;z) = 0,$$
$$F(0;z) = 0,$$
$$\frac{dF}{ds}(0;z) = 1$$

の初期値問題の解である。その漸近的解 $\{F_k \mid k = 1, 2, 3, \ldots\}$ は、同様に

$$F_k(s;z) = \frac{(-z)^{k+1}s^{2k+1}}{(2k+1)!} + (z \text{ の } k \text{ 次以下の項})$$

となる。

従って、$-z \to \infty$ のとき、

$$\frac{\Psi(t;z)}{F(t;z)} \to 1$$

となるので、$F(s;0) = s$ に注意して $\Psi(s) = \Psi(s;0)$ と置くと

$$\frac{\prod_{k\geq 1}\left(\frac{\pi k}{t}\right)^n}{\prod_{k\geq 1} m_k} = \lim_{-z\to\infty} \frac{\prod_{k\geq 1}\left(1 - \frac{t^2 z}{\pi^2 k^2}\right)^n}{\prod_{k\geq 1}\left(1 - \frac{z}{m_k^2}\right)} = \lim_{-z\to\infty} \frac{t^n \det \Psi(t;z)}{F(t;z)^n \det \Psi(t)} = \frac{t^n}{\det \Psi(t)}$$

と計算するのが妥当であると考えられる。

これを調和振動子の場合に確かめる。$V(x) = \frac{w^2}{2}|x|^2$ のとき、Hess $V(x) = w^2$ であるから、$\Psi(s)$ は微分方程式

$$\frac{d^2\Psi}{ds^2}(s) + w^2\Psi(s) = 0,$$
$$\Psi(0) = 0,$$
$$\frac{d\Psi}{ds}(0) = 1$$

の初期値問題の解で、

$$\Psi(s) = \frac{\sin ws}{w}$$

であり、体積形式の変換(6.3)は

$$\prod_{k\geq 1} d\lambda_k = \left(\frac{wt}{\sin wt}\right)^{\frac{n}{2}} \prod_{k\geq 1} d\mu_k$$

となる．これを(5.2)の経路積分に適用すれば(4.2)が再現される。

参考文献

[1]　藤原　大輔、ファインマン経路積分の数学的方法、シュプリンガー・フェアラーク東京、(1999)