9　経路積分とシュレディンガー方程式

9.1　古典力学と量子力学

作用が極値をとる経路がニュートンの古典力学に対応していることを学んだ。量子力学はその経路からのずれに注目する。第 5 章のフェルマーの原理でも述べたように、所要時間が最小の経路 C に対して、それから ± 1 波長以内ずれた経路も許される。もし経路全体が波長程度ならば、実際の経路は最小作用の古典的な経路の周りに大きく拡がった経路も許されるであろう。

量子力学は原子核の周りの電子の振る舞いを正しく理解することから始まった。電子（他の粒子、物体でもよい）は、大きなスケールで眺めれば、粒子のように見える。しかし原子の中の電子の振る舞いを調べるには、電子を原子のサイズのスケールで見なければならない。そのレベルでは電子は波（ド・ブロイによると物質波）と見做さなければならない。粒子-波動の読み替えでは、粒子のエネルギーが E、運動量が p のとき、物質波の振動数は $\nu = E/h$、波長は $\lambda = h/p$ である。$h = 6.63 \times 10^{-34}$J であるので、もし電子の速度を $v = 10^{-2}c$ とすれば、$\lambda = 6.63 \times 10^{-34}/(9.11 \times 10^{-31} \times 3 \times 10^{6}) \sim 2 \times 10^{-10}$m となり、大体原子の大きさと同程度である。1kg の物体の波長は電子の場合の 10^{-30} 倍である。全ての物質は粒子性と波動性の両方を兼ね備えている。

9.2　電子の波動性

電子が波動的な振る舞いをすることは、電子による干渉実験で示せる。光を用いた干渉実験と同じように、電子を放出する源を 2 個のスリットの前面に置き、電子を放出する。スリットの後ろに電子を感知できる装置を並べる（光の場合のスクリーンの役割を果たす)。電子が粒子なら、どちらかのスリットを通ってきて、観測装置で検出される。スリットで散乱されて、軌道が曲げられることはあっても、どちらのスリットを通って来たかは確認できる。もし電子が波動なら、電子波はスリットのどちらを通ってきたか分からない。両方のスリットを通ってきたかもしれない。そのような場合は、干渉が起こる。

電子の干渉を確かめる実験は外村により行われた。源から電子を発射し続ける。最初の内は観測装置に検出されるパターンには干渉縞は顕著でない。しかし長時間の観測を行うと、干渉パターンがはっきりしてくる。そのパターンは光のパターンと同じである。

9.3　経路積分

波動としての電子は波動関数で表される。時刻 t での点 $\boldsymbol{x}$ での波動関数は $\psi(\boldsymbol{x}, t)$ と表される。$\psi(\boldsymbol{x}, t)$ は一般に複素数である。まるで電磁波の電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}, t)$ のように考えてよい。電場の場合は $|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}, t)|^2$ は $\boldsymbol{x}, t$ での電場のエネルギー密度を表すが、電子の波動関数の場合は、$|\psi(\boldsymbol{x}, t)|^2$ は電子が $\boldsymbol{x}, t$ にいる存在確率を表すという違いはある。

波動関数が時空間でどのような振舞うかを考えよう。ファイマンはラグランジュの原理で説明できないかと考えた。電子が一つの時空間（A で表す）から別の時空間（B で表す）へ伝播

するとしよう。出発点での波動関数 ψ_A が与えられているとき、それは B にどのように伝わるか。いろいろな経路を通って伝播し、それの重ねあわせとして B での波動関数 ψ_B が決まる。一つの経路 Γ にたいして作用 $S(\Gamma)$

$$S(\Gamma) = \int_A^B \mathcal{L} dt$$

が定義出来る。するとこの経路 Γ を通って、

$$\psi_B = \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(\Gamma)\right] \psi_A \tag{9.1}$$

のように A の波動関数が B に伝えられる。ここで $\hbar$ はプランク定数 h を 2π で割ったものであり、$\hbar = 1.054 \times 10^{-34}$Js である。（作用の次元とプランク定数の次元は同じである。）

いろいろな経路が許されるから、全ての経路が寄与するはずである：

$$\psi_B = K[B; A]\psi_A. \tag{9.2}$$

ここで

$$K[B; A] = \sum_\Gamma \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\Gamma)\right) \tag{9.3}$$

である。重要なポイントは各々のパスにより位相が異なることである。経路について足し算するとプラスとマイナスが相殺しあって寄与がなくなると思えるが、作用が最小の経路の周りの経路では位相がそれほど異ならなくて、足し算をすると残るというのは、古典力学でのラグランジュの原理と同じである。

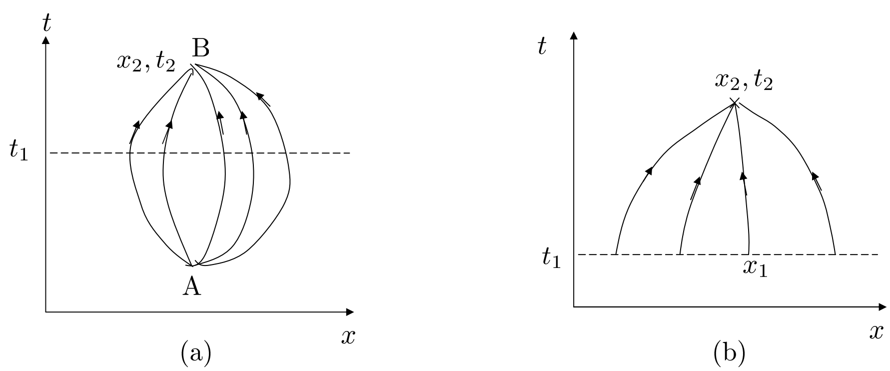

図 9.1: 波動関数 $\psi(x_2, t_2)$ は時刻 t_1 での波動関数 $\psi(x_1, t_1)$ の重ね合わせで決まる。

9.4　シュレディンガー方程式

ファイマンは (9.2)、(9.3) から量子力学で有名なシュレディンガー方程式を導いた。図 9.1(a) のように、いろいろな経路をとり、A から B へ波動関数は伝播する。それを図 9.1(b) のように $t = t_1$ で切ってみる。いろいろな経路を経てくるということは、t_1 でのいろいろな x_1 座標からの寄与があるということである。いろいろな経路 x_1 に渡って和をとればよい。したがって時刻 t_2 での点 x_2 での波動関数はある過去 t_1 のあらゆる点での波動関数の重ね合わせで表される：

$$\psi(x_2, t_2) = \sum_{\{x_1\}} K(x_2, t_2; x_1, t_1)\psi(x_1, t_1). \tag{9.4}$$

ここで $K(x_2, t_2; x_1, t_1)$ は (x_1, t_1) から (x_2, t_2) への全ての経路を経た遷移確率であり、(9.3) で与えられる：

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right] = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)\right)dt\right]. \tag{9.5}$$

任意の t_1 ではなく、t_2 は t_1 から微小時間 ε だけしか隔たっていないとしよう。そこで $t_1 = t$, $t_2 = t + \varepsilon$ とし、便宜上 $x_2 = x$, $x_1 = y$ としよう。すると t_1 から t_2 への経路の作用は

$$S = \int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)\right)dt = \frac{m(x-y)^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V\left(\frac{x+y}{2}\right) \tag{9.6}$$

と近似できる。ここで t_1, t_2 間の平均速度を $(x-y)/\varepsilon$ とし、V は中間点の値で評価している。すると (9.4) は

$$\psi(x, t+\varepsilon) = \sum_{\{y\}} \exp\left[\frac{i}{2\hbar}\frac{m(x-y)^2}{\varepsilon} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon V\left(\frac{x+y}{2}\right)\right]\psi(y, t). \tag{9.7}$$

$\sum_{\{y\}}$ を y の積分で置き換える。規格化因子を A として、$\sum_{\{y\}} \to A\int dy$ とすると、

$$\psi(x, t+\varepsilon) = A\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{i}{2\hbar}\frac{m(x-y)^2}{\varepsilon} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon V\left(\frac{x+y}{2}\right)\right]\psi(y, t)dy.$$

$y = x + \varepsilon^{1/2}z$ とおき、積分変数を y から、z に変更する：

$$\psi(x, t+\varepsilon) = \varepsilon^{1/2}A\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{imz^2}{2\hbar} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}V\left(x + \frac{\varepsilon^{1/2}z}{2}, t\right)\right]\psi(x + \varepsilon^{1/2}z, t)\,dz. \tag{9.8}$$

(9.8) の各項を $\varepsilon^{1/2}$ のベキで展開して、ε の 1 次のオーダーまで考慮する：

$$\begin{aligned}
&\exp\left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V\left(x + \frac{\varepsilon^{1/2}z}{2}\right)\right] = 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}V(x)\\
&\psi(x, t+\varepsilon) = \psi(x, t) + \varepsilon\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t),\\
&\psi(x + \varepsilon^{1/2}z, t) = \psi(x, t) + \varepsilon^{1/2}z\frac{\partial}{\partial x}\psi(x, t) + \frac{1}{2}\varepsilon z^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t).
\end{aligned}$$

これらを (9.8) に代入して、ε の１次まで残せば、

$$\begin{aligned}\psi(x,t)+\varepsilon\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) &= \varepsilon^{1/2}A\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(\frac{imz^2}{2\hbar}\right)\left[\psi(x,t)+\varepsilon^{1/2}z\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right.\\ &+ \left.\frac{1}{2}\varepsilon z^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V(x)\psi(x,t)\right]dz\end{aligned}$$

右辺と左辺の第１項どうしが等しいとする。この要請から規格化定数 A が決まる：

$$\frac{1}{A}=\varepsilon^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(\frac{imz^2}{2\hbar}\right)dz=\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2}.$$

次に

$$\int_{-\infty}^{\infty}z^2\exp\left(\frac{imz^2}{2\hbar}\right)dz\equiv\lim_{R\to\infty}\int_{-R}^{R}z^2\exp\left(\frac{imz^2}{2\hbar}\right)dz$$

において部分積分することにより、

$$\frac{\varepsilon^{3/2}}{2}A\int_{-\infty}^{\infty}z^2\exp\left(\frac{imz^2}{2\hbar}\right)=\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}$$

を得る。整理すれば、シュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x,t) \tag{9.9}$$

が導かれる。