区分的陪特性経路による相空間経路積分ー計算例を中心に

熊ノ郷　直人（工学院大学）

$T>0$, $x\in\mathbf{R}^d$ とする．プランクパラメータ $0<\hbar<1$ をもつ Schrödinger 方程式の基本解の作用素を $U(T,0)$ とする．

$$\left(i\hbar\partial_T - H(T,x,\frac{\hbar}{i}\partial_x)\right)U(T,0)=0\,,\quad U(0,0)=I\,. \tag{1}$$

$x_0\in\mathbf{R}^d$ に関する Fourier 変換と $\xi_0\in\mathbf{R}^d$ に関する逆 Fourier 変換で，恒等作用素 I は

$$Iv(x)=v(x)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^d\int_{\mathbf{R}^{2d}} e^{\frac{i}{\hbar}(x-x_0)\cdot\xi_0}v(x_0)dx_0d\xi_0\,, \tag{2}$$

と書け，Hamilton 作用素 $H(T,x,\frac{\hbar}{i}\partial_x)$ は関数 $H(T,x,\xi_0)$ を用いて

$$H(T,x,\frac{\hbar}{i}\partial_x)v(x)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^d\int_{\mathbf{R}^{2d}} e^{\frac{i}{\hbar}(x-x_0)\cdot\xi_0}H(T,x,\xi_0)v(x_0)dx_0d\xi_0\,, \tag{3}$$

と書ける．T が小さいとき，

$$U(T,0)v(x)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^d\int_{\mathbf{R}^{2d}} e^{\frac{i}{\hbar}(x-x_0)\cdot\xi_0}U(T,0,x,\xi_0)v(x_0)dx_0d\xi_0\,, \tag{4}$$

となる関数 $U(T,0,x,\xi_0)$ を求めたい．Feynman の相空間経路積分を用いると形式的には

$$e^{\frac{i}{\hbar}(x-x_0)\cdot\xi_0}U(T,0,x,\xi_0)=\int e^{\frac{i}{\hbar}\phi[q,p]}\mathcal{D}[q,p]\,, \tag{5}$$

と書ける．ここで $q:[0,T]\to\mathbf{R}^d$ は $q(0)=x_0$, $q(T)=x$ となる位置の経路，$p:[0,T)\to\mathbf{R}^d$ は $p(0)=\xi_0$ となる運動量の経路，$\phi[q,p]$ は相空間経路 (q,p) に対する作用

$$\phi[q,p]=\int_{[0,T)}p(t)\cdot dq(t)-\int_{[0,T)}H(t,q(t),p(t))dt\,, \tag{6}$$

であり，相空間経路積分 $\int\sim\mathcal{D}[q,p]$ は“ すべての経路 (q,p) に関する和 ”である．

しかし，数学的には測度 $\mathcal{D}[q,p]$ は存在しない．物理的にも位置 $q(t)$ と運動量 $p(t)$ を同時刻 t に測定できない不確定性原理があり，相空間経路にはいろいろな解釈がある．

この講演では計算上の理由から，区分的陪特性経路を定義し，一般的な汎関数 $F[q,p]$ を振幅とする相空間経路積分

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}\phi[q,p]}F[q,p]\mathcal{D}[q,p] \tag{7}$$

が存在する汎関数 $F[q,p]$ のクラス $\mathcal{F}$ を与える．

特に区分的陪特性経路による基本解 $U(T,0,x,\xi_0)$ の計算例を中心に解説する．

仮定 1 (Hamilton 関数) 実数値関数 $H(t,x,\xi):\mathbf{R}\times\mathbf{R}^d\times\mathbf{R}^d\to\mathbf{R}$ は任意の多重指数 α, β に対し，$\partial_x^\alpha\partial_\xi^\beta H(t,x,\xi)$ は連続で，正の定数 $C_{\alpha,\beta}$ が存在し
$|\partial_x^\alpha\partial_\xi^\beta H(t,x,\xi)|\le C_{\alpha,\beta}(1+|x|+|\xi|)^{\max(2-|\alpha+\beta|,0)}$.

例 1 (仮定 1 を満たす Hamilton 作用素)

$$\begin{aligned} H(t,x,\frac{\hbar}{i}\partial_x) &= \sum_{j,k=1}^d (a_{j,k}(t)\frac{\hbar}{i}\partial_{x_j}\frac{\hbar}{i}\partial_{x_k}+b_{j,k}(t)x_j\frac{\hbar}{i}\partial_{x_k}+c_{j,k}(t)x_jx_k) \\ &+ \sum_{j=1}^d (a_j(t)\frac{\hbar}{i}\partial_{x_j}+b_j(t)x_j)+c(t,x)\,. \end{aligned}$$

ただし $a_{j,k}(t)$, $b_{j,k}(t)$, $c_{j,k}(t)$, $a_j(t)$, $b_j(t)$ と $\partial_x^\alpha c(t,x)$ は有界で連続な実数値関数とする．

例 2 (汎関数 $F[q,p]\in\mathcal{F}$ の例) $0\le t\le T$, $0\le T'\le T''\le T$ とする．

(1) $|\partial_x^\alpha B(t,x)|\le C_\alpha(1+|x|)^m$（運動量 p によらない）のとき，$F[q]=B(t,q(t))\in\mathcal{F}$.
特に $F[q,p]\equiv 1\in\mathcal{F}$.

(2) $|\partial_x^\alpha\partial_\xi^\beta B(t,x,\xi)|\le C_{\alpha,\beta}(1+|x|+|\xi|)^m$ のとき，$F[q,p]=\displaystyle\int_{[T',T'')}B(t,q(t),p(t))dt\in\mathcal{F}$.

(3) $|\partial_x^\alpha\partial_\xi^\beta B(t,x,\xi)|\le C_{\alpha,\beta}$ のとき，$F[q,p]=e^{\int_{[T',T'')}B(t,q(t),p(t))dt}\in\mathcal{F}$.

定理 1 ($\mathcal{F}$ の性質) $F[q,p]$, $G[q,p]\in\mathcal{F}$ ならば，$F[q,p]+G[q,p]$, $F[q,p]G[q,p]\in\mathcal{F}$.

汎関数 $F[q,p]$ のクラス $\mathcal{F}$ の定義はあとで述べる．ここで定義を述べなくても，定理 1 を例 2 に適用すれば，相空間経路積分可能な汎関数 $F[q,p]\in\mathcal{F}$ の例を創ることができる．

さて，区分的陪特性経路を用いた時間分割近似法による経路積分の定義を述べよう：

$\Delta_{T,0}=(T_{J+1},T_J,\ldots,T_1,T_0)$ を区間 $[0,T]$ の任意の分割

$$\Delta_{T,0}:T=T_{J+1}>T_J>\cdots>T_1>T_0=0\,, \tag{8}$$

とする．$t_j=T_j-T_{j-1}$ とおき，分割の幅 $|\Delta_{T,0}|=\max_{1\le j\le J+1}t_j$ が小さいとする．
$x_{J+1}=x$ とおき，$x_j\in\mathbf{R}^d$，$\xi_j\in\mathbf{R}^d$，$j=1,2,\ldots,J$ とする．

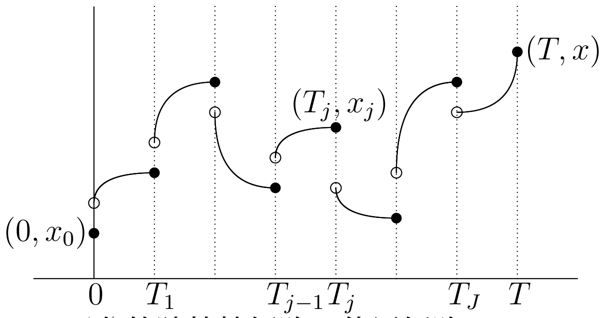
陪特性経路 $\bar q_{T_j,T_{j-1}}=\bar q_{T_j,T_{j-1}}(t,x_j,\xi_{j-1})$ と $\bar p_{T_j,T_{j-1}}=\bar p_{T_j,T_{j-1}}(t,x_j,\xi_{j-1})$ を正準方程式

$$\begin{aligned} &\partial_t\bar q_{T_j,T_{j-1}}(t)=(\partial_\xi H)(t,\bar q_{T_j,T_{j-1}},\bar p_{T_j,T_{j-1}})\,, \\ &\partial_t\bar p_{T_j,T_{j-1}}(t)=-(\partial_x H)(t,\bar q_{T_j,T_{j-1}},\bar p_{T_j,T_{j-1}})\,,\quad T_{j-1}\le t\le T_j\,, \end{aligned} \tag{9}$$

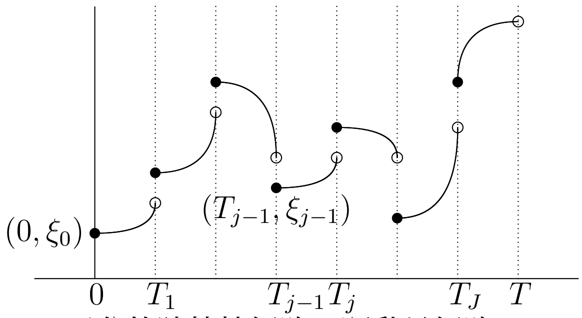
と 境界条件 $\bar q_{T_j,T_{j-1}}(T_j)=x_j$，$\bar p_{T_j,T_{j-1}}(T_{j-1})=\xi_{j-1}$ で定義する（図参照）．

区分的陪特性経路 $q_{\Delta_{T,0}}=q_{\Delta_{T,0}}(t,x_{J+1},\xi_J,x_J,\ldots,\xi_1,x_1,\xi_0,x_0)$ と
$p_{\Delta_{T,0}}=p_{\Delta_{T,0}}(t,x_{J+1},\xi_J,x_J,\ldots,\xi_1,x_1,\xi_0)$ を

$$\begin{aligned} q_{\Delta_{T,0}}(t) &= \bar q_{T_j,T_{j-1}}(t,x_j,\xi_{j-1}),\quad T_{j-1}<t\le T_j,\quad q_{\Delta_{T,0}}(0)=x_0, \\ p_{\Delta_{T,0}}(t) &= \bar p_{T_j,T_{j-1}}(t,x_j,\xi_{j-1}),\quad T_{j-1}\le t<T_j,\quad j=1,2,\ldots,J,J+1 \end{aligned} \tag{10}$$



区分的陪特性経路の位置経路 $q_{\Delta_{T,0}}$



区分的陪特性経路の運動量経路 $p_{\Delta_{T,0}}$

で定義する（図参照）．このとき汎関数 $\phi[q_{\Delta_{T,0}}, p_{\Delta_{T,0}}]$, $F[q_{\Delta_{T,0}}, p_{\Delta_{T,0}}]$ は関数となる．

$$\phi[q_{\Delta_{T,0}}, p_{\Delta_{T,0}}] = \phi_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, \xi_J, x_J, \ldots, \xi_1, x_1, \xi_0, x_0)\,, \tag{11}$$

$$F[q_{\Delta_{T,0}}, p_{\Delta_{T,0}}] = F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, \xi_J, x_J, \ldots, \xi_1, x_1, \xi_0, x_0)\,. \tag{12}$$

定理 2 (相空間経路積分の存在) T が小さいとき，任意の汎関数 $F[q,p] \in \mathcal{F}$ に対して，

$$\begin{aligned}&\int e^{\frac{i}{\hbar}\phi[q,p]} F[q,p]\mathcal{D}[q,p] \\ &\equiv \lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0} \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{dJ} \int_{\mathbf{R}^{2dJ}} e^{\frac{i}{\hbar}\phi[q_{\Delta_{T,0}}, p_{\Delta_{T,0}}]} F[q_{\Delta_{T,0}}, p_{\Delta_{T,0}}] \prod_{j=1}^{J} dx_j d\xi_j\end{aligned} \tag{13}$$

は (x, ξ_0, x_0) に関して $\mathbf{R}^{3d}$ 上広義一様収束する．つまり相空間経路積分は存在する．

例 3 (基本解 $U(T,0,x,\xi_0)$ の計算例) $d=1$, $F[q,p] \equiv 1$ とする．

(1) $H(t,x,\xi) = \xi^2/2$ のとき，(13) より

$$e^{\frac{i}{\hbar}(x-x_0)\cdot\xi_0} U(T,0,x,\xi_0) = \int e^{\frac{i}{\hbar}\phi[q,p]}\mathcal{D}[q,p] = \exp\frac{i}{\hbar}\Big((x-x_0)\cdot\xi_0 - \frac{T}{2}\xi_0^2\Big)\,.$$

と計算できて，(4) の作用素 $U(T,0)$ は以下の Schrödinger 方程式を満たす．

$$(i\hbar\partial_T + \hbar^2\triangle/2)U(T,0) = 0\,,\quad U(0,0) = I\,.$$

(2) $H(t,x,\xi) = x^2/2 + \xi^2/2$ のとき，(13) より

$$e^{\frac{i}{\hbar}(x-x_0)\cdot\xi_0} U(T,0,x,\xi_0) = \frac{1}{(\cos T)^{1/2}} \exp\frac{i}{\hbar}\Big(-x_0\cdot\xi_0 + \frac{2x\cdot\xi_0 - (x^2+\xi_0^2)\sin T}{2\cos T}\Big)\,.$$

と計算できて，(4) の作用素 $U(T,0)$ は以下の Schrödinger 方程式を満たす．

$$(i\hbar\partial_T + \hbar^2\triangle/2 - x^2/2)U(T,0) = 0\,,\quad U(0,0) = I\,.$$

(3) $H(t,x,\xi)=x^2/2+x\cdot\xi+\xi^2/2$ のとき，(13) より

$$e^{\frac{i}{\hbar}(x-x_0)\cdot\xi_0}U(T,0,x,\xi_0)=\Big(\frac{e^T}{1+T}\Big)^{1/2}\exp\frac{i}{\hbar}\Big(-x_0\cdot\xi_0+\frac{2x\cdot\xi_0-T(x^2+\xi_0^2)}{2(1+T)}\Big).$$

と計算できて，(4) の作用素 $U(T,0)$ は以下の Schrödinger 方程式を満たす.

$$(i\hbar\partial_T+\hbar^2\triangle/2-x\frac{\hbar}{i}\partial_x-x^2/2)U(T,0)=0\,,\quad U(0,0)=I\,.$$

(4) $H(t,x,\xi)=x^2/2-\xi^2/2$ のとき，(13) より

$$e^{\frac{i}{\hbar}(x-x_0)\cdot\xi_0}U(T,0,x,\xi_0)=\frac{1}{(\cosh T)^{1/2}}\exp\frac{i}{\hbar}\Big(-x_0\cdot\xi_0+\frac{2x\cdot\xi_0-(x^2-\xi_0^2)\sinh T}{2\cosh T}\Big).$$

と計算できて，(4) の作用素 $U(T,0)$ は以下の方程式を満たす.

$$(i\hbar\partial_T-\hbar^2\triangle/2-x^2/2)U(T,0)=0\,,\quad U(0,0)=I\,.$$

(5) 例外として複素数値関数 $H(t,x,\xi)=-ix^2/2-i\xi^2/2$ としても, (13) より

$$e^{\frac{i}{\hbar}(x-x_0)\cdot\xi_0}U(T,0,x,\xi_0)=\frac{1}{(\cosh T)^{1/2}}\exp\frac{i}{\hbar}\Big(-x_0\cdot\xi_0+\frac{2x\cdot\xi_0+i(x^2+\xi_0^2)\sinh T}{2\cosh T}\Big).$$

と計算できて，(4) の作用素 $U(T,0)$ は以下の熱方程式を満たす

$$(\hbar\partial_T-\hbar^2\triangle/2+x^2/2)U(T,0)=0\,,\quad U(0,0)=I\,.$$

定義 1 (汎関数のクラス $\mathcal{F}$) $F[q_{\Delta_{T,0}},p_{\Delta_{T,0}}]$ が仮定 2 を満たすとき $F[q,p]\in\mathcal{F}$ とする.

仮定 2 m は非負整数，u_j, $j=1,2,\ldots,J,J+1$ は分割 $\Delta_{T,0}$ に依存する非負のパラメータで $\sum_{j=1}^{J+1}u_j=U<\infty$ を満たすとする．任意の非負整数 M に対し，正の定数 A_M, X_M が存在し，任意の分割 $\Delta_{T,0}$ と， $|\alpha_j|$, $|\beta_{j-1}|\le M$ となる任意の多重指数 α_j, β_{j-1}, $j=1,2,\ldots,J,J+1$ と，$1\le k\le J$ となる任意の整数 k に対し，

$$\begin{aligned}&|(\prod_{j=1}^{J+1}\partial_{x_j}^{\alpha_j}\partial_{\xi_{j-1}}^{\beta_{j-1}})F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1},\xi_J,\ldots,x_1,\xi_0,x_0)|\\&\le A_M(X_M)^{J+1}(\prod_{j=1}^{J+1}(t_j)^{\min(|\beta_{j-1}|,1)})(1+\sum_{j=1}^{J+1}(|x_j|+|\xi_{j-1}|)+|x_0|)^m\,,\end{aligned}\tag{14}$$

$$\begin{aligned}&|(\prod_{j=1}^{J+1}\partial_{x_j}^{\alpha_j}\partial_{\xi_{j-1}}^{\beta_{j-1}})\partial_{x_k}F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1},\xi_J,\ldots,x_1,\xi_0,x_0)|\\&\le A_M(X_M)^{J+1}u_k(\prod_{j\neq k}(t_j)^{\min(|\beta_{j-1}|,1)})(1+\sum_{j=1}^{J+1}(|x_j|+|\xi_{j-1}|)+|x_0|)^m\,.\end{aligned}\tag{15}$$

時間が許せば，積分との順序交換，摂動展開，Hamilton 型準古典近似について述べる.

[1] N. Kumano-go, D. Fujiwara, Phase space Feynman path integrals via piecewise bicharacteristic paths and their semiclassical approximations, Bull. Sci. math. **132** (2008), 313–357.