量子力学2

TKG

2025年3月5日

目 次

1 INTRODUCTION **1**

2 摂動論 **1**

2.1 方法1 1

2.2 ディラック表示 2

3 ボルン近似 **3**

4 WKB近似 **5**

5 トンネル効果 **7**

6 熱核 **9**

7 熱核を用いた摂動論の計算 **10**

1 INTRODUCTION

量子力学noteのおまけみたいなものです。 相互作用表示（Dirac表示）とかボルン近似とか。WKB近似とトンネル効果についても説明を追加しました。

2 摂動論

ここではハミルトニアンが $H = E + V$ と書けて、ハミルトニアンが E だけの場合には厳密に計算出来る場合について。V は摂動項と呼ばれる。それは V を E からの小さな摂動と考えて、ハミルトニアンが E の場合からのずれを計算するからである。摂動の方法には2通りやり方がある。1つは E の固有値がとびとびの値を取る場合である。2つめは連続的な値を取る場合である。

2.1 方法 1

まずはとびとびの値を取る場合について説明する。E の i 番目の固有値を E_i、その固有状態を $|E_i\rangle$ とする。V が十分小さいので $H = E + V$ の E_i に近い固有値 H_i、その固有状態を $|H_i\rangle$ とすると

$$\begin{aligned} H_i &= E_i + a_i + b_i + \cdots \\ |H_i\rangle &= |E_i\rangle + |\alpha_i\rangle + |\beta_i\rangle + \cdots \end{aligned} \tag{1}$$

の形で書ける。ここで級数は第 j 項目は j 次の微小量である。シュレディンガー方程式より

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|H_i\rangle &= H_i|H_i\rangle \\ &= (E_i + a_i + b_i + \cdots)(|E_i\rangle + |\alpha_i\rangle + \cdots) \\ &= E_i|E_i\rangle + (a_i|E_i\rangle + E_i|\alpha_i\rangle) + \cdots \end{aligned} \tag{2}$$

さらに $H|H_i\rangle = H_i|H_i\rangle$ より

$$\begin{aligned} 0 &= (H_i - E - V)|H_i\rangle \\ &= (E_i + a_i + b_i + \cdots - E - V)(|E_i\rangle + |\alpha_i\rangle + \cdots) \end{aligned} \tag{3}$$

よって

$$E_i|E_i\rangle = E|E_i\rangle \tag{4}$$

$$(E_i - E)|\alpha_i\rangle + (a_i - V)|E_i\rangle = 0 \tag{5}$$

$$(E_i - E)|\beta_i\rangle + (a_i - V)|\alpha_i\rangle + b_i|E_i\rangle = 0 \tag{6}$$

$$\vdots$$

となり、これにより順々に求めていける。(4) は摂動のない場合のシュレディンガー方程式である。(5) より、左から $\langle E_i|$ をかければ

$$a_i = \langle E_i|V|E_i\rangle \tag{7}$$

が得られる。さらに (5) に左から $\langle E_j|$ $(i \neq j)$ をかけてまとめると

$$\langle E_j|\alpha_i\rangle = \frac{\langle E_j|V|E_i\rangle}{E_i - E_j} \tag{8}$$

従って $\langle E_i|\alpha_i\rangle = 0$ と仮定すれば

$$|\alpha_i\rangle = \sum_{j:j\neq i}\frac{\langle E_j|V|E_i\rangle}{E_i - E_j}|E_j\rangle \tag{9}$$

などともとまる。

2.2 ディラック表示

2 つめの方法を説明する。時間発展演算子 $T_{t\leftarrow t_0}$（ここでは初期時刻 t_0 から終時刻 t までの発展演算子であることを明示するためにこう書いた）の満たすシュレディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}T_{t\leftarrow t_0} = HT_{t\leftarrow t_0} \tag{10}$$

ここに $H = E + V$ とした時

$$T^*_{t\leftarrow t_0} := e^{-\frac{E}{i\hbar}(t-t_0)} T_{t\leftarrow t_0} \tag{11}$$

と置けば $T^*_{t\leftarrow t_0}$ は

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} T^*_{t\leftarrow t_0} = V^* T^*_{t\leftarrow t_0} \qquad \left(V^* := e^{-\frac{E}{i\hbar}(t-t_0)} V e^{\frac{E}{i\hbar}(t-t_0)} \right) \tag{12}$$

なる微分方程式を満たす。この方程式の形式解は

$$\begin{aligned} T^*_{t\leftarrow t_0} &= 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} V^* \mathrm{d}\acute{t} + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} V^*(\acute{t})\mathrm{d}\acute{t}\int_{t_0}^{\acute{t}} V^*(t'')\mathrm{d}t'' + \cdots \\ &=: T\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} V^*(\acute{t})\mathrm{d}\acute{t}\right) \end{aligned} \tag{13}$$

ここで最後の等式の T は時間順序積を表している。時間順序積とは時間に依存する演算子 $f(t), g(t)$ に対して、時刻 t_1, t_2 でのそれぞれの演算子値 $f(t_1), g(t_2)$ の積に対して

$$Tf(t_1)g(t_2) := \theta(t_1 - t_2)f(t_1)g(t_2) + \theta(t_2 - t_1)g(t_2)f(t_1) \tag{14}$$

($\theta(t)$ はヘビサイド関数であり、

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & : t > 0 \\ 0 & : t < 0 \end{cases} \tag{15}$$

で定義される）のように時刻が早い方ほど後ろの方へ並ぶように順序を与える作用素である。

2 つの E の固有値、固有状態を

$$E\,|E_1\rangle = E_1\,|E_1\rangle \tag{16}$$

$$E\,|E_2\rangle = E_2\,|E_2\rangle \tag{17}$$

とすれば

$$\langle E_2|T^*_{t\leftarrow t_0}|E_1\rangle = e^{-\frac{E_2}{i\hbar}(t-t_0)}\,\langle E_2|T_{t\leftarrow t_0}|E_1\rangle \tag{18}$$

従って遷移確率は

$$\begin{aligned} P(E_1 \to E_2) &= |\,\langle E_2|T_{t\leftarrow t_0}|E_1\rangle\,|^2 \\ &= |\,\langle E_2|T^*_{t\leftarrow t_0}|E_1\rangle\,|^2 \end{aligned} \tag{19}$$

即ち T^* が得られれば遷移確率が計算出来る。T^* の表示を使って $E_1 \neq E_2$ の時

$$\begin{aligned} P(E_1 \to E_2) &= |\int \mathrm{d}t_1 \frac{1}{i\hbar}\,\langle E_2|V^*(t_1)|E_1\rangle\,|^2 + \cdots \\ &= \frac{1}{\hbar^2}|\int \langle E_2|V^*|E_1\rangle\,|^2 + \cdots \end{aligned} \tag{20}$$

として計算出来る。ここで行った表示をディラック表示という。ここで注意しておくが、ディラック表示では演算子は摂動項を含まないハミルトニアン E により生成されるフローにより時間発展する。

3　ボルン近似

ハミルトニアン $H = E + V$ の摂動論の続き。今度もエネルギー固有値が連続的な場合である。E の固有値を E_0、その固有状態を $|E_0\rangle$ と置く。次に H の固有値を H_0、その固有状態を $|H_0\rangle$ とする。E の固有値も H の固有値も連続的な値を取るので $E_0 = H_0$ と取れる。とびとびの固有値の場合の時のように固有状態を

$$|H_0\rangle = |E_0\rangle + |\alpha\rangle + \cdots \tag{21}$$

と展開し、シュレディンガー方程式に代入し、1 次の微小量を比べれば

$$(E_0 - E)\,|\alpha\rangle = V\,|E_0\rangle \tag{22}$$

となる。次に E として、自由粒子の場合を考える。自由粒子の場合にはハミルトニアン E は

$$E = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad (\Delta = \left(\frac{d}{dx}\right)^2 + \left(\frac{d}{dy}\right)^2 + \left(\frac{d}{dz}\right)^2) \tag{23}$$

で与えられる。従って摂動のない場合には $E\,|E_0\rangle = E_0\,|E_0\rangle$ は

$$(\Delta + \frac{2mE_0}{\hbar^2})\,|E_0\rangle = 0 \tag{24}$$

となる（これは Helmholtz 方程式という）。(22) 式は左から

$$|\mathbf{k}_1\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{x}}}{\sqrt{(2\pi)^3}} \tag{25}$$

をかけて整理すれば

$$\begin{aligned}(-\mathbf{k}_1^2 + w^2)\,\langle\mathbf{k}_1|\alpha\rangle &= \frac{2m}{\hbar^2}\,\langle\mathbf{k}_1|V|E_0\rangle \\ &= \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3\mathbf{k}_2\,\langle\mathbf{k}_1|V|\mathbf{k}_2\rangle\,\langle\mathbf{k}_2|E_0\rangle\end{aligned} \tag{26}$$

ここで相互作用のないエネルギー E は運動量 $\mathbf{p}$ と交換するので、$|E_0\rangle$ として $|E_0\rangle = |\mathbf{k}_0\rangle$ とする。$w^2 = \frac{2mE_0}{\hbar^2}$ である。従って $E_0 = w\hbar$ であり、$\mathbf{k}_0^2 = w^2$ となり、

$$\langle\mathbf{k}_1|\alpha\rangle = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{\langle\mathbf{k}_1|V|\mathbf{k}_0\rangle}{(w^2 - \mathbf{k}_1^2)} \tag{27}$$

となる。ここで摂動項 V が $\mathbf{x}$ だけの関数 $V(\mathbf{x})$ であるとすると、間に $1 = \int d^3\mathbf{x}\,|\mathbf{x}\rangle\,\langle\mathbf{x}|$ を挟み、

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{k}_1|\alpha\rangle &= \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}\frac{\langle\mathbf{k}_1|\mathbf{x}\rangle\,V(\mathbf{x})\,\langle\mathbf{x}|\mathbf{k}_0\rangle}{(w^2 - \mathbf{k}_1^2)} \\ &= \frac{2m}{\hbar^2(2\pi)^3}\int d^3\mathbf{x}\frac{e^{i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_1)\mathbf{x}}}{w^2 - \mathbf{k}_1^2}V(\mathbf{x})\end{aligned} \tag{28}$$

となる。これを $\mathbf{k}_1$ に対して重ね合わせを行えば

$$\begin{aligned}|\alpha\rangle &= \int d^3\mathbf{k}_1\,|\mathbf{k}_1\rangle\,\langle\mathbf{k}_1|\alpha\rangle \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int d^3\mathbf{x}_1 V(\mathbf{x}_1)e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{x}_1}\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1)}}{\mathbf{k}^2 - w^2}\end{aligned} \tag{29}$$

となる。$\mathbf{k}$ 積分の部分を計算するには以下のようにすればよい

$$\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1)}}{\mathbf{k}^2 - w^2} = \lim_{\varepsilon\to 0}\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1)}}{\mathbf{k}^2 - w^2 \pm i\varepsilon} \tag{30}$$

ここで $\pm$ はここではまだどちらの記号だともいえない。右辺の積分を計算する。まず

$$\begin{aligned} d^3\mathbf{k} &= k^2 dk d\Omega_3 \\ &= k^2 \sin\theta dk d\theta d\varphi \qquad (0 \le \theta \le \pi,\ 0 \le \varphi \le 2\pi) \\ &= k^2 dk d\cos\theta d\varphi \end{aligned} \tag{31}$$

と積分変数を極座標へ代え、$\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1) = k|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|\cos\theta$ より

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1)}}{\mathbf{k}^2 - w^2 \pm i\varepsilon} &= \int \frac{dk d\cos\theta d\varphi}{(2\pi)^3} \frac{k^2 e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|\cos\theta}}{k^2 - w^2 \pm i\varepsilon} \\ &= \frac{1}{i(2\pi)^2|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} \int_0^\infty dk \frac{k}{k^2 - w^2 \pm i\varepsilon} \left[e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} - e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} \right] \\ &= \frac{1}{i(2\pi)^2|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} \int_{-\infty}^\infty dk \frac{k e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|}}{k^2 - w^2 \pm i\varepsilon} \end{aligned} \tag{32}$$

ここで

$$\int dk \frac{k e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|}}{k^2 - w^2 \pm i\varepsilon} = \int dk \frac{k e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|}}{(k + \sqrt{w^2 \mp i\varepsilon})(k - \sqrt{w^2 \mp i\varepsilon})} \tag{33}$$

ここでさらに、k の積分路を実軸と複素平面上の 0 を中心とする円とで囲まれる領域の上半分の半円を反時計回りで取ると、半円の円弧の部分の積分は円の半径を無限に持っていくと $\to 0$ となる。よってその極限においては、もとの積分路に一致する。従って pole が $\sqrt{w^2 + i\varepsilon}$ か $-\sqrt{w^2 - i\varepsilon}$ なので、そのどちらであるかに対して

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \int dk \frac{k e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|}}{(k + \sqrt{w^2 \mp i\varepsilon})(k - \sqrt{w^2 \mp i\varepsilon})} = \begin{cases} i\pi e^{iw|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} & : \text{for } -i\varepsilon \\ i\pi e^{-iw|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} & : \text{for } +i\varepsilon \end{cases} \tag{34}$$

となる。従って結果として

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1)}}{\mathbf{k}^2 - w^2 \pm i\varepsilon} = \begin{cases} \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} e^{iw|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} & : \text{for } -i\varepsilon \\ \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} e^{-iw|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} & : \text{for } +i\varepsilon \end{cases} \tag{35}$$

よって

$$|\alpha\rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3\mathbf{x}_1 V(\mathbf{x}_1) e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{x}_1} \frac{e^{iw|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} \qquad : \text{for } -i\varepsilon \tag{36}$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3\mathbf{x}_1 V(\mathbf{x}_1) e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{x}_1} \frac{e^{-iw|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_1|} \qquad : \text{for } +i\varepsilon \tag{37}$$

となる。この第 1 次までの近似をボルン近似という。

次にディラック表示による計算を説明する。この場合には始状態 $|\mathbf{k}_0\rangle$ から終状態 $\langle\mathbf{k}_1|$ への遷移振幅を求めればよい。遷移振幅は (18) の左辺で与えられるので、直ちに

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{k}_1|T^*_{t\leftarrow t_0}|\mathbf{k}_0\rangle &= \langle\mathbf{k}_1|\mathbf{k}_0\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^t d\acute{t}\, \langle\mathbf{k}_1|V^*(\acute{t})|\mathbf{k}_0\rangle + \cdots \\ &= \langle\mathbf{k}_1|\mathbf{k}_0\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^t d\acute{t} e^{\frac{(E_0-E_1)}{i\hbar}\acute{t}}\, \langle\mathbf{k}_1|V|\mathbf{k}_0\rangle + \cdots \\ &= \langle\mathbf{k}_1|\mathbf{k}_0\rangle + \frac{1}{i\hbar}\, \langle\mathbf{k}_1|V|\mathbf{k}_0\rangle\, (2\pi)\delta(E_1 - E_0) + \cdots \end{aligned} \tag{38}$$

としてもとまる。これもまたボルン近似と呼ばれる。ここで与えたディラック表示によるボルン近似は場の理論において非相対論的極限で与えられる遷移振幅と比べられるべきものである。

4 WKB 近似

この節では半古典的近似（WKB 近似）について説明する。一般的な Schredinger 方程式を厳密に解くことは困難な場合が多い。従って、多くの場合においてここまで見てきたような摂動論的な計算を行い解析することになる。ここでは摂動論の別の視点からのアプローチを見てみる。この方法によって古典論との関係がいくらか明らかになると思う。完全なる対応は経路積分法によって初めて明らかになるであろう。またこの方法は後に説明するトンネル効果の理解にも通じる。時刻 t_1 から t_2 までの一般的な時間発展演算子は $T_{t_1\leftarrow t_2} = T\exp(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_2}^{t_1} Hdt)$ である[1]。Schredinger 方程式は

$$i\hbar\frac{d}{dt}T_{t\leftarrow t_0} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)T_{t\leftarrow t_0} \tag{39}$$

などと書けるのであった。ここで位置座標 q の固有状態を $|q\rangle$、$|\acute{q}\rangle$ とし、

$$\langle q|T_{t\leftarrow t_0}|\acute{q}\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(q,\acute{q},t,t_0)\right) \tag{40}$$

と置くと、上の Schredinger 方程式に左から $\langle q|$ を、右から $|\acute{q}\rangle$ をかけると

$$\left(\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2 - i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial q^2} + V\right)\langle q|T_{t\leftarrow t_0}|\acute{q}\rangle = 0 \tag{41}$$

を得る。同様に $\acute{q}$、t_0 に関しても同様の方程式が得られるのが分かる。ここで微分方程式が q と t のみ、または $\acute{q}$ と t_0 のみに分けられること、また q,t の組み合わせと $\acute{q},t_0$ の組み合わせに対しての対称性より $S(q,\acute{q},t,t_0) = S(q,t) - S(\acute{q},t_0)$ と変数分離出来る。ここで上記方程式は $\hbar \sim 0$ と近似できる場合にはちょうどハミルトン・ヤコビ方程式と一致するのが分かる[2]。従って $\hbar$ の 0 次の order の方程式の解 $S_0(q,a,t)$（a は任意定数）はハミルトン・ヤコビ方程式の完全解である（"解析力学"note 参照)。S は (41) を用いて $\hbar$ の冪順に求めていけば

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \cdots \tag{42}$$

といった形に一般的に書けることが分かる。ここで

$$S_H(q,\acute{q},t,t_0) := S_0(q,a,t) - S_0(\acute{q},a,t_0) \tag{43}$$

と置けば、"解析力学"note を参照すれば分かるが、S_H はハミルトンの主関数となっている。実際ハミルトン・ヤコビ方程式の完全解は $S(q,a,t)$ といった任意定数を含んだ形で求まり、振幅は定数 a に依存しないはずなので

$$0 = \frac{\partial}{\partial a}\langle q,t|\acute{q},t_0\rangle = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S_H}{\partial a}\langle q,t|\acute{q},t_0\rangle \tag{44}$$

よりハミルトン・ヤコビ理論の方法と一致しているのが分かる。従って S_H はハミルトンの主関数である。ハミルトンの主関数は時刻 t_0 で $\acute{q}$、時刻 t で q に位置するような古典解に沿った作用積分に等しい。即ち

$$S_H(q,\acute{q},t,t_0) = \int_{t_0}^{t} L_{cl}dt \tag{45}$$

である。この結果は経路積分法からも得ることが出来る。q と $\acute{q}$ との（そして t と t_0 との）対称性より、$\hbar$ に関して最初の order で

$$\langle q|T_{t\leftarrow t_0}|\acute{q}\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S_H(q,\acute{q},t,t_0)\right) \tag{46}$$

となることが分かる。この結果のもう少し突っ込んだ議論は次節で行う。

[1] ハミルトニアンが時間によらない、即ち保存系の場合には $T_{t_1\leftarrow t_2} = e^{\frac{H}{i\hbar}(t_1-t_2)}$ である。

[2] ハミルトニアンが時間によらない場合には $|\alpha\rangle$ としてエネルギーの固有状態 $|E\rangle$ を用いて、Schredinger 方程式は簡単に書けるし、ハミルトン・ヤコビ方程式も時間微分のない形に書けるが、一般的な場合を意識してここではあえてこのように書いた。

5　トンネル効果

ここでは簡単のために保存系の場合を考える。今度は (39) の左から $|q\rangle$ を、右からエネルギーの固有状態 $|E\rangle$ をかける。そして上と同様に

$$\langle q|e^{\frac{H}{i\hbar}t}|E\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(q,E,t)\right), \qquad S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 + \cdots \tag{47}$$

と置く。ハミルトン・ヤコビ方程式は時間によらない形

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S_0}{\partial q}\right)^2 = E - V \tag{48}$$

で与えられる。(41) の $\hbar$ の 0 次の order からなる式（ハミルトン・ヤコビ方程式）の形式解は

$$S_0(q,E,t) = \pm\int^q \sqrt{2m(E-V)}dq - Et \tag{49}$$

となる。従って

$$\langle q|T_{t\leftarrow t_0}|E\rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\pm\int_{q_0}^q \sqrt{2m(E-V)}dq - E(t-t_0) + C + \mathcal{O}(\hbar)\right)\right] \tag{50}$$

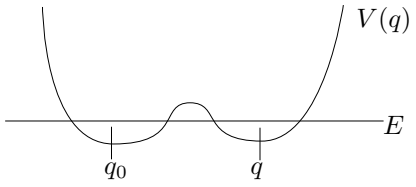
となる。ただし $\langle q_0|E\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}C}$ と置いた。q_0 は今はとりあえず何でもよい。ここで古典的な系において系のエネルギーが E で時刻 t_0 で q_0、時刻 t で q にいる古典解が存在する場合には、$q(t)$ を

$$\frac{m}{2}\left(\frac{dq}{dt}\right)^2 + V = E \tag{51}$$

を満たすように取れば[3]

$$\begin{aligned}\pm\int_{q_0}^q \sqrt{2m(E-V)}dq - E(t-t_0) &= \int_{t_0}^t \left(m\left(\frac{dq}{dt}\right)^2 - E\right)dt \\ &= \int_{t_0}^t \left(\frac{m}{2}\left(\frac{dq}{dt}\right)^2 - V\right)dt \\ &= \int_{t_0}^t L_{cl}dt\end{aligned} \tag{53}$$

となることが分かる。(50) において $q_0 < q$ の場合には $+$ 符号は正の向きへの進行波を表し、$-$ 符号は負の向きへの進行波を表している。この時、古典的なレベルにおいては、経路上で常に $E - V(q) > 0$ でないといけない。ところが今は E は古典的な意味でのエネルギーではなく、系がとり得る可能なエネルギー固有値であればよかったので、そして q_0 に対し q も任意でいいので、$E - V(q) < 0$ である場合も出てくる。これは古典的には許されない経路を通っているということを意味している。言い換えれば、古典的な解が存在しない場合である。即ち量子論的には古典的に許されない経路を通っていくことが出来る。例えば下図のような場合である。



[3] このように取れば、$q(t)$ は運動方程式に従う。実際 t で微分すると

$$m\frac{d^2q}{dt^2}\frac{dq}{dt} = -\frac{dV}{dq}\frac{dq}{dt} \tag{52}$$

となり、運動方程式が得られる。

エネルギー E が V の真ん中の山より低い場合、従って古典的には q_0 から q への移動は許されないが、量子論的には可能となるのである。このような現象をトンネル効果という。

さて、このようなエネルギー E がポテンシャル V よりも小さい場合、(49) の右辺第一項目は純虚数となることが分かる。従って $t = -i\tau$ と置けば

$$S_0 = i\left(\pm\int_{q_2}^{q_1}\sqrt{2m(V(q)-E)}dq + E(\tau_1-\tau_2)\right) \tag{54}$$

と書ける。ここで τ は実数に取ることにする。この置き換えは $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = i\frac{\partial L}{\partial(\frac{dq}{d\tau})}$ に注意すれば、古典的な作用積分を

$$\begin{aligned} S &= \int L(q,\dot{q},t)dt \\ &\Rightarrow \quad -i\int L(q, i\frac{dq}{d\tau},\tau)d\tau \end{aligned} \tag{55}$$

と置き換えることに等しいことが分かる。具体的にラグランジアンを書けば

$$L = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - V \Rightarrow -\left(\frac{m}{2}\left(\frac{dq}{d\tau}\right)^2 + V\right) \tag{56}$$

という置き換えに等しい。即ちトンネル効果は虚数時間での力学を考えることで解析出来る。エネルギー E を持った正の向きへ進行した粒子がポテンシャルの山を透過し、位置 q へ到達する確率は $|\langle q|T_{t\leftarrow t_0}|E\rangle|^2$ で与えられる。こうして計算すれば Gamow の透過因子が得られる。またこのように虚数時間で量子論を計算すると、遷移振幅は

$$\langle q_1|e^{-\frac{1}{\hbar}H(\tau_1-\tau_2)}|q_2\rangle = \sum_E e^{-\frac{1}{\hbar}E(\tau_1-\tau_2)}\langle q_1|E\rangle\langle E|q_2\rangle \tag{57}$$

となるので $\tau_1 - \tau_2 \gg 1$ の時、主要項を調べれば基底エネルギーが求まるのである。

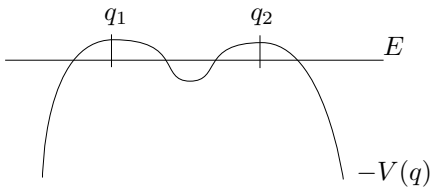
さて虚数時間での力学を簡単に解析してみよう。この場合の考えるべき形式的なラグランジアンは

$$L_E = \frac{m}{2}\left(\frac{dq}{d\tau}\right)^2 + V \tag{58}$$

である。従って形式的なハミルトニアンは

$$H_E = \frac{m}{2}\left(\frac{dq}{d\tau}\right)^2 - V \tag{59}$$

となる。従って V が上記の例に出した図のような二重底型ポテンシャル（double well potential）の場合には、下図のようなポテンシャル中での力学を考えることに等しいことが分かる。



古典的な系のエネルギーは、ラグランジアン L_E を逆符号で定義したので $E = -H_E$ である。実際にこうやって計算した結果が上の結果に一致するのを見るのは容易である。

では前節のような $\langle q|T_{t\leftarrow t_0}|q_0\rangle$ の計算を考えてみよう。もう一度方程式 (41) を見てみる。$\hbar \sim 0$ の order では

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S_0}{\partial q}\right)^2 = -\frac{\partial S_0}{\partial t} - V \tag{60}$$

のハミルトン・ヤコビ方程式が得られた。ここでのケースは右辺が負である場合に相当する。この場合には S が複素数でもよかったので $S_0 = iS_E$ と置けばよいのであるが、そうすると右辺に虚数が現れてしまう。従って $t = -i\tau$ としてやればよい。S_E、τ を用いてハミルトン・ヤコビ方程式を書けば

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S_E}{\partial q}\right)^2 &= -\frac{\partial S_E}{\partial \tau} + V \\ &= -H + V \end{aligned} \tag{61}$$

となるが、これはちょうど $-V$ のポテンシャル中での運動を考えるのに等しいことが分かる。従ってこのハミルトン・ヤコビ方程式の解 $S_E(q, q_0, \tau, \tau_0)$ は

$$m\frac{dq}{d\tau} = \frac{\partial S_E}{\partial q} = \pm\sqrt{2m(V-H)} \tag{62}$$

と置けば、ポテンシャル $-V$ の系のハミルトンの主関数

$$\begin{aligned} S_E &= \int_{\tau_0}^{\tau}\left(\pm\sqrt{2m(V-H)}\frac{dq}{d\tau} - H\right)d\tau \\ &= \int_{\tau_0}^{\tau}\left(m\left(\frac{dq}{d\tau}\right)^2 - H\right)d\tau \\ &= \int_{\tau_0}^{\tau}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{dq}{d\tau}\right)^2 + V\right)d\tau \\ &= \int_{\tau_0}^{\tau} L_E(q, \frac{dq}{d\tau}, \tau)d\tau \end{aligned} \tag{63}$$

に等しい。ここに

$$L_E(q, \frac{dq}{d\tau}, \tau) = -L(q, i\frac{dq}{d\tau}, -i\tau) \tag{64}$$

である。

以上のようにトンネル効果は一般的に虚数時間での力学で解析することが出来る。場の量子論においてトンネル効果を解析する場合にも、虚数時間で解析する方法が有効となる。そのようにして得られる解はインスタントンと呼ばれる。

6 熱核

時間発展演算子 $T_{t\leftarrow t_0}$ の満たすシュレディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}T_{t\leftarrow t_0} = HT_{t\leftarrow t_0} \tag{65}$$

であり、その一般解は

$$\begin{aligned} T_{t\leftarrow t_0} &= 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1 H(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1 H(t_1)\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2 H(t_2) + \cdots \\ &= 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1 T\left(H(t_1)\right) + \frac{1}{2!}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2 T(H(t_1)H(t_2)) + \cdots \\ &= T\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1 H(t_1)\right]. \end{aligned}$$

のようにして得られるのであった。ここで、初期時刻 t_0 と時刻 t との間の関係は $t > t_0$ でないといけない。ここで演算子 $K_{t\leftarrow t_0}$ を

$$K_{t\leftarrow t_0} = \theta(t-t_0)T_{t\leftarrow t_0} \tag{66}$$

で定義すると、これは $t < t_0$ の領域まで定義できる。ここで $\theta(t-t_0)$ はヘビサイド関数であり、

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & : t \geq 0 \\ 0 & : t < 0 \end{cases}$$

で定義される。この $K_{t\leftarrow t_0}$ はシュレディンガー方程式の代わりに、

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right) K_{t\leftarrow t_0} = \delta(t-t_0) \tag{67}$$

を満たす。この方程式 (67) は演算子の方程式であるので、両側から $\langle q|$ と $|q_0\rangle$ で挟むと、

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right) \langle q| K_{t\leftarrow t_0} |q_0\rangle = \delta(t-t_0)\delta(q-q_0) \tag{68}$$

となる。$G(q,q_0,t,t_0) = \langle q| K_{t\leftarrow t_0} |q_0\rangle$ と置いて、これを**熱核**という。または演算子 $K_{t\leftarrow t_0}$ も区別せずに熱核と呼ぶことにする。この式は、q と t からなる空間の関数上で見たときに、熱核が作用素 $i\hbar\partial_t - H$ の逆作用素 $(i\hbar\partial_t - H)^{-1}$ に対応することを意味している。熱核と時間発展演算子との違いはヘビサイド関数のみであるが、それらの満たす方程式の違いがあるため、時間発展演算子を扱うより熱核を扱う方が便利であったりする。

7　熱核を用いた摂動論の計算

ハミルトニアン $H = E + V$ に対して、時間発展演算子 $T_{t\leftarrow t_0}$ の満たすシュレディンガー方程式は、

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}T_{t\leftarrow t_0} = HT_{t\leftarrow t_0} \tag{69}$$

である。また、摂動のない時間発展演算子 $U_{t\leftarrow t_0}$ のシュレディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U_{t\leftarrow t_0} = EU_{t\leftarrow t_0} \tag{70}$$

である。ディラック表示に置ける時間発展方程式は

$$T^*_{t\leftarrow t_0} = U_{t_0\leftarrow t}T_{t\leftarrow t_0} \quad \left(U_{t_0\leftarrow t} = U^{-1}_{t\leftarrow t_0}\right) \tag{71}$$

に対して、

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}T^*_{t\leftarrow t_0} = V^*T^*_{t\leftarrow t_0} \qquad V^* = U_{t_0\leftarrow t}VU_{t\leftarrow t_0} \tag{72}$$

であった。この時、ディラック表示での時間発展演算子は

$$\begin{aligned} T^*_{t\leftarrow t_0} &= 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} V^*\mathrm{d}\acute{t} + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} V^*(\acute{t})\mathrm{d}\acute{t}\int_{t_0}^{\acute{t}} V^*(t'')\mathrm{d}t'' + \cdots \\ &= T\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} V^*(\acute{t})\mathrm{d}\acute{t}\right) \end{aligned} \tag{73}$$

と書けた。従って、これを用いると時間発展演算子 $T_{t\leftarrow t_0}$ は

$$\begin{aligned} T_{t\leftarrow t_0} &= U_{t\leftarrow t_0}\left(1+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}V^*\mathrm{d}\acute{t}+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t}V^*(\acute{t})\mathrm{d}\acute{t}\int_{t_0}^{\acute{t}}V^*(t'')\mathrm{d}t''+\cdots\right) \\ &= U_{t\leftarrow t_0}+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}U_{t\leftarrow \acute{t}}VU_{\acute{t}\leftarrow t_0}d\acute{t}+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t}d\acute{t}\int_{t_0}^{\acute{t}}dt''U_{t\leftarrow t'}VU_{t'\leftarrow t''}VU_{t''\leftarrow t_0}+\ldots \end{aligned} \tag{74}$$

と書ける。ここで $T_{t\leftarrow t_0}$ に対する熱核を $K_{t\leftarrow t_0}=\theta(t-t_0)T_{t\leftarrow t_0}$ とし、$U_{t\leftarrow t_0}$ に対する熱核を $G_{t\leftarrow t_0}=\theta(t-t_0)U_{t\leftarrow t_0}$ とする。上式に $\theta(t-t_0)$ をかけると

$$K_{t\leftarrow t_0}=G_{t\leftarrow t_0}+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}G_{t\leftarrow \acute{t}}VG_{\acute{t}\leftarrow t_0}d\acute{t}+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t}d\acute{t}\int_{t_0}^{\acute{t}}dt''G_{t\leftarrow t'}VG_{t'\leftarrow t''}VG_{t''\leftarrow t_0}+\ldots \tag{75}$$

が得られる。積分の中の摂動のない時間発展演算子は時間が逆転しないので熱核に置き換えることができることに注意されたい。この関係式を**リップマン-シュウィンガー方程式**と呼ぶ。

ここで初期時刻 t_0 で状態が $|\varphi\rangle$ で与えられた時、時刻 t での状態は

$$|\varphi_t\rangle = T_{t\leftarrow t_0}|\varphi\rangle \tag{76}$$

となるが、リップマン-シュウィンガー方程式を使うと

$$\theta(t-t_0)|\varphi_t\rangle = G_{t\leftarrow t_0}|\varphi\rangle+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'G_{t\leftarrow t'}VG_{\acute{t}\leftarrow t_0}|\varphi\rangle+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t}d\acute{t}\int_{t_0}^{\acute{t}}dt''G_{t\leftarrow t'}VG_{t'\leftarrow t''}VG_{t''\leftarrow t_0}|\varphi\rangle+\ldots \tag{77}$$

が得られる。