

Separation of Angular Variables in Path Integral

埼玉大・理工 伊藤大介

Introduction :

Feynman の Path Integral は Heisenberg, Schrödinger とは異なる第 3 の量子化法として, また Hamilton 型式によらぬ全自空的な量子化法として, 原理的な重要性をもつものであるが, 実際問題に適用しようとするとき非常に困難な技術的問題に遭遇し, 残念なことに現在適用例としては自由粒子とか 1 次元振動子のような, 単純な場合に限られ, 量子力学の試金石であった水素原子の問題すら取扱い難い状況である。Schrödinger 理論でも, 角変数の分離を行わなければ水素原子の問題もむつかしいことになる。同様な事情は Path Integral の場合にも存在するものと考えられる。若し, Path Integral から角変数が分離出来て, これを動径関数に関する単純な 1 変数の Path Integral に変換し得るなら, 少なくとも W. K. B. 近似などによっても Balmer Energy Level くらいは求まるであろう。ここではこれらの問題について考えてみたい。角変数の分離に限らず, 力学系の対称性の考慮によって, Path Integral を単純化する問題は実用上のみならず, 原理的にも重要な問題であろう。角変数の分離がこのような問題への緒となることを望んでいる。

1. Path Integral

$$\text{Path Integral } \langle \vec{r}, t | K | \vec{r}', 0 \rangle =$$

$$= \int \frac{d\vec{r}_1}{A^3} \int \frac{d\vec{r}_2}{A^3} \cdots \int \frac{d\vec{r}_n}{A^3} \exp \frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{m(\vec{r} - \vec{r}_1)^2}{2\tau^2} - V(\vec{r}) + \frac{m(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{2\tau^2} - V(\vec{r}_1) + \cdots \right. \\ \left. + \frac{m(\vec{r}_n - \vec{r}')^2}{2\tau^2} - V(\vec{r}_n) \right] \frac{1}{A^3}, \quad \tau \equiv t / (n+1) \quad (1)$$

は, 本質的には

$$\psi(\vec{r}, t + \tau) = \int \frac{d\vec{r}'}{A^3} e^{\frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{m(\vec{r} - \vec{r}')^2}{2\tau^2} - V(\vec{r}) \right]} \psi(\vec{r}', t) \quad (2)$$

を Iterate したものであり, (2) で $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{\xi}$ とおき

$$\psi(\vec{r}, t + \tau) = e^{-\frac{i\tau}{\hbar} V(\vec{r})} \int \frac{d\vec{\xi}}{A^3} e^{\frac{im}{2\hbar\tau} \xi^2} \psi(\vec{r} + \vec{\xi}, t)$$

$$\approx e^{-\frac{i\tau}{\hbar}V(\mathbf{r})} [1 + \langle (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) \rangle + \frac{1}{2} \langle \xi_i \xi_j \rangle \nabla_i \nabla_j + \dots] \psi(\vec{r}, t), \quad (3)$$

但し

$$A^3 \equiv \int d\vec{\xi} \exp \frac{im}{2\hbar\tau} \xi^2 = \left(\frac{2\pi i \hbar \tau}{m} \right)^{3/2} \quad (4)$$

に

$$\langle \xi_i \rangle = 0, \quad \langle \xi_i \xi_j \rangle \equiv \frac{\int d\vec{\xi} \xi_i \xi_j \exp im\xi^2/2\hbar\tau}{\int d\vec{\xi} \exp im\xi^2/2\hbar\tau} = \delta_{ij} \frac{i\hbar\tau}{m} \quad (5)$$

を用いれば

$$\psi(\vec{r}, t+\tau) \approx \left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} V(\mathbf{r}) + \dots \right) \left(1 + \frac{i\hbar}{2m} \Delta + \dots \right) \psi(\vec{r}, t) \quad (6)$$

となり、これから Schrödinger 方程式

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} i\hbar \frac{\psi(\vec{r}, t+\tau) - \psi(\vec{r}, t)}{\tau} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\vec{r}, t) \quad (7)$$

が得られるので、(1)が通常の量子化と同等である、というのが Path Int. の理論のスケッチである。

2. Separation of Angular Variables

球対称 Potential の場合、角変数を含むのは古典 Lagrangian の Kinetic Part のみであるから、ここで $\vec{r} \equiv r\vec{e}$, $\vec{r}' \equiv r'\vec{e}'$ とおけば

$$e^{i\frac{m(\vec{r}-\vec{r}')^2}{2\hbar\tau}} = e^{i\frac{m(r-r')^2}{2\hbar\tau} + \frac{mr r'}{\hbar\tau} (1 - \vec{e} \cdot \vec{e}')} \quad (8)$$

となる。右辺 exp. の第1項は Radial Kinetic Energy であるから、第2項が遠心力項を与えるものと考えられる。そこで

$$Z \equiv \frac{m r r'}{\hbar \tau} \quad (9)$$

とにおいて、この部分を球関数で展開すれば

$$\begin{aligned}
e^{iz(1-\vec{e} \cdot \vec{e}')} &= e^{iz} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (-i)^l \sqrt{\frac{\pi}{2Z}} J_{l+1/2}(Z) P_l(\vec{e} \cdot \vec{e}') \\
&= 4\pi \sum_{lm} (-i)^l \sqrt{\frac{\pi}{2Z}} e^{iz} J_{l+1/2}(Z) Y_{lm}(\vec{e}) Y_{lm}^*(\vec{e}') \quad (10)
\end{aligned}$$

となる。 $\tau \rightarrow 0$ の極限では r, r' の有限領域で(9)の Z は非常に大きいから $J_{l+1/2}(Z)$ にその漸近展開:

$$\begin{aligned}
J_{l+1/2}(Z) &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi Z}} \left[i^{-(l+1)} e^{iz} \left(1 - \frac{l(l+1)}{2iz} + \dots \right) \right. \\
&\quad \left. + (-i)^{-(l+1)} e^{-iz} \left(1 + \frac{l(l+1)}{2iz} + \dots \right) \right] \quad (11)
\end{aligned}$$

を用いれば, (10)は

$$\begin{aligned}
e^{iz(1-\vec{e} \cdot \vec{e}')} &\approx \frac{2\pi i}{Z} \sum_{lm} Y_{lm}(\vec{e}) Y_{lm}^*(\vec{e}') \left[\left(1 + \frac{l(l+1)}{2iz} + \dots \right) \right. \\
&\quad \left. - (-1)^l e^{2iz} \left(1 - \frac{l(l+1)}{2iz} + \dots \right) \right] \quad (12)
\end{aligned}$$

となる。 $e^{2iz} = e^{\frac{2imrr'}{\tau}}$ は $\tau \rightarrow 0$ で無限に速い振動をするので, (12)を積分核として用いた場合, 第2項からの寄与は第1項のそれに比べて無視できるであろう。そこでこれを落せば

$$e^{\frac{imrr'}{\tau}(1-\vec{e} \cdot \vec{e}')} \approx \frac{2\pi i \hbar \tau}{mrr'} \sum_{lm} Y_{lm}(\vec{e}) Y_{lm}^*(\vec{e}') e^{\frac{\hbar \tau l(l+1)}{2imrr'}} \quad (13)$$

となる。依って

$$\begin{aligned}
\frac{1}{A^3} e^{\frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{m(\vec{r}-\vec{r}')^2}{2\tau^2} - V(r) \right]} &\approx \frac{1}{A r r'} \sum_{lm} Y_{lm}(\vec{e}) Y_{lm}^*(\vec{e}') \\
&\times \exp \frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{m(r-r')^2}{2\tau^2} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mrr'} - V(r) \right] \quad (14)
\end{aligned}$$

が得られる。これを(1)に代入し, 方向積分を行えば

$$\langle \vec{r}, t | K | \vec{r}', 0 \rangle \equiv \frac{1}{A r r'} \sum_{lm} Y_{lm}(\vec{e}) Y_{lm}^*(\vec{e}') \langle \vec{r}, t | K_l | \vec{r}', 0 \rangle \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
\langle r, t | K_1 | r', 0 \rangle \approx & \int_0^\infty \frac{dr_1}{A} \int_0^\infty \frac{dr_2}{A} \cdots \int_0^\infty \frac{dr_n}{A} \exp \frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{m(r-r_1)^2}{2\tau^2} \right. \\
& - \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_1} + V(r) \right) + \frac{m(r_1-r_2)^2}{2\tau^2} - \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_1 r_2} + V(r_1) \right) + \cdots \\
& \left. + \frac{m(r_n-r')^2}{2\tau^2} - \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_n r'} + V(r_n) \right) \right]
\end{aligned} \quad (16)$$

となり、角変数が分離された Path Integral (16) が得られる。

3. Schrödinger Equation

(14)を(2)に代入すれば

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r}, t+\tau) \approx & \sum_{lm} Y_{lm}(\vec{e}) \int_0^\infty \frac{r'}{r} \frac{dr'}{A} e^{i \frac{m(r-r')}{2\hbar\tau}} - \frac{i\tau}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr r'} + V(r) \right) \\
& \times \int d\mathcal{Q} Y_{lm}^*(\vec{e}') \psi(\vec{r}', t)
\end{aligned} \quad (17)$$

となる。ここで

$$\psi(\vec{r}, t) \equiv \sum_{lm} \psi_{lm}(r, t) Y_{lm}(\vec{e}), \quad r' \equiv r + \xi \quad (18)$$

とおけば

$$\begin{aligned}
\psi_{lm}(r, t+\tau) \approx & e^{-\frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right]} \\
& \times \int_{-r}^\infty \frac{d\xi}{A} \left(1 + \frac{\xi}{r} \right) e^{i \frac{m}{2\hbar\tau} \xi^2} \left(1 + \xi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \cdots \right) \psi_{lm}(r, t),
\end{aligned} \quad (19)$$

$\tau \rightarrow 0$ では $\xi \sim 0$ 附近が主に寄与するので、下限 $-r$ は $-\infty$ とおいてよい。依って、

$$\begin{aligned}
\psi_{lm}(r, t+\tau) \approx & \left[1 - \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) + \cdots \right] \\
& \times \left[1 + \langle \xi^2 \rangle \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) + \cdots \right] \psi_{lm}(r, t),
\end{aligned} \quad (20)$$

が得られる。但し

$$\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \exp \frac{i m}{2 \hbar \tau} \xi^2 = 1, \quad \langle \xi \rangle = 0 \quad (21)$$

を用いた。 $\langle \xi^2 \rangle = \frac{i \hbar \tau}{m}$ であるから (20) は

$$i \hbar \frac{\psi_{1m}(r, t + \tau) - \psi_{1m}(r, t)}{\tau} \approx \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) + \dots \right] \psi_{1m}(r, t), \quad (22)$$

となり、これから動径関数に関する Schrödinger 方程式

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{1m}(r, t) = \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] \psi_{1m}(r, t) \quad (23)$$

が得られる。

4. W. K. B. Approximation and Balmer Energy Level :

(16) で $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ とおき、その中に現われる

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \quad (24)$$

で $r \equiv r_1 + \xi$ とおき、 ξ のべきに展開すれば

$$(24) \approx \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_1^2} - \frac{Ze^2}{r_1} \right) - \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr_1^2} \right) \frac{\xi}{r_1} + \left(\frac{3}{2} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr_1^2} - \frac{Ze^2}{r_1} \right) \frac{\xi^2}{r_1^2} + \dots$$

となる。 ξ の 1 次の項の係数が 0 になるように r_1 を決めれば

$$r_1 \equiv \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mZe^2} \approx \frac{\hbar^2}{mZe^2} l^2 \quad (25)$$

となり

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \approx -\frac{Ze^2}{2r_1} + \frac{Ze^2}{2r_1^3} \xi^2 + \dots = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 l(l+1)} + \frac{m\omega_1^2}{2} \xi^2 + \dots, \quad (26)$$

但し,

$$\omega_1^2 \equiv \frac{Z e^2}{m r_1^3} \quad (27)$$

となる。これを(16)に用いれば

$$\begin{aligned} \langle r, t | K_1 | r', 0 \rangle &\approx \int_{-r_1}^{\infty} \frac{d\xi_n}{A} \cdots \int_{-r_1}^{\infty} \frac{d\xi_1}{A} \exp \frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{m(\xi - \xi_1)^2}{2\tau^2} - \frac{m\omega_1^2}{2} \xi^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{m(\xi_1 - \xi_2)^2}{2\tau^2} - \frac{m\omega_1^2}{2} \xi_1^2 + \cdots + \frac{m(\xi_n - \xi')^2}{2\tau^2} - \frac{m\omega_1^2}{2} \xi_n^2 \right] \\ &\quad \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} (n+1) \tau \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 l(l+1)} \right] \\ &\equiv \langle r, t | K_1^{\text{R.V.}} | r', 0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} t \left(\frac{-mZ^2 e^4}{2\hbar^2 l(l+1)} \right)} \quad (28) \end{aligned}$$

が得られる。 $\langle r, t | K_1^{\text{R.V.}} | r', 0 \rangle$ は Radial Vibration に対する Path Integral であり、これに附加して, Balmer Energy

$$W_1 \approx -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 l^2} \quad (29)$$

の振動が現われる。こうして, W. K. B. 近似の範囲ではあるが, 角変数を分離すれば, Path Integral によっても Bound State や Resonance に Approach する途が開かれるであろうことを知ることができる。

(Feb. 4, 1976)