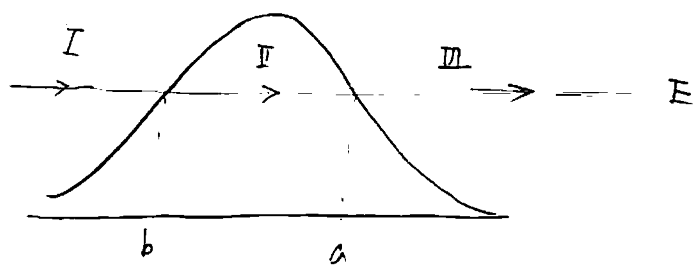
6.4. トンネリング



Region III :
$$\psi(x) = \frac{+i\cdot C}{\sqrt{k(x)}}\, e^{i\int_a^x k(x')dx' - \frac{i}{4}\pi}$$

$$= \frac{+iC}{\sqrt{k(x)}}\left\{\cos\left(\int_a^x k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right) + i\sin\left(\int_a^x k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right)\right\}$$

$\longrightarrow$ Region II
$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{\gamma(x)}}\, e^{\int_x^a \gamma(x')dx'} + \cancel{\frac{iC}{2}\frac{1}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{-\int_x^a \gamma(x')dx'}}^{\,0}$$

$$= \frac{C}{\sqrt{\gamma(x)}}\, e^{\int_b^a \gamma(x')dx' - \int_b^x \gamma(x')dx'}$$

$\longrightarrow$ Region I :
$$\frac{2C}{\sqrt{k(x)}}\, e^{\int_b^a \gamma(x')dx'} \cos\left(\int_x^a k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right)$$

$$= \frac{C}{\sqrt{k(x)}}\, e^{\int_b^a \gamma(x')dx'}\left\{ e^{i\int_x^a k(x')dx' - \frac{i\pi}{4}} + e^{-i\int_x^a k(x')dx' + \frac{i\pi}{4}}\right\}$$

∘ phase shift

トンネル確率：入射フラックスと透過フラックスの比

↓

$$\boxed{P = e^{-2\int_b^a \gamma(x)\,dx}} = e^{-2\int_b^a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)}\,dx}$$

• m が大きいと P は小

(note) a と b が近いと接続公式が破綻

→ 一様近似

$$P = \frac{1}{1+e^{2\int_b^a \gamma(x)\,dx}}$$

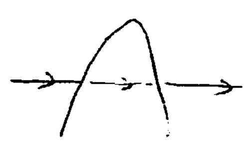
(note) $E > V_b$ でも一様近似は成立

→ a, b は複素数

$$E = V_0 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$x = \pm\sqrt{\frac{2}{m\omega^2}(V_0 - E)}$$

(note) $V(x) = V_0 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ のとき



$$P = \frac{1}{1+e^{-\frac{2\pi}{\hbar\omega}(E-V_b)}}$$

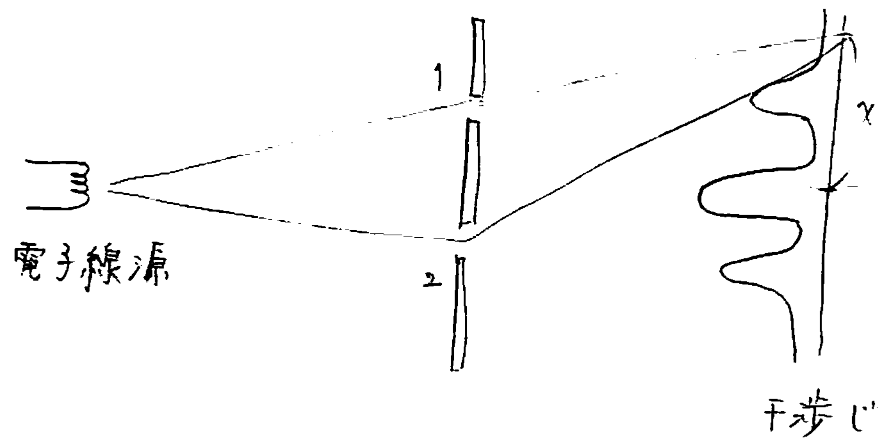
↔ P_{WKB} と一致

9. 経路積分による量子力学の定式化

参考文献： R.P. ファインマン, A.R. ヒッブス
「ファインマン経路積分と量子力学」

9.1 経路積分の考え方

二重スリットの問題



スリット1を通過し x に到達

振幅：

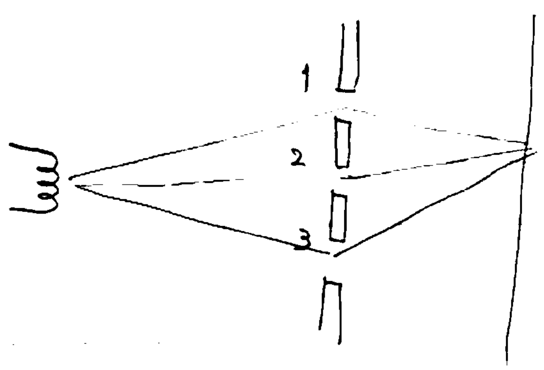
$$\phi(x) = \phi_1(x) + \phi_2(x)$$

スリット2を通過

確率：

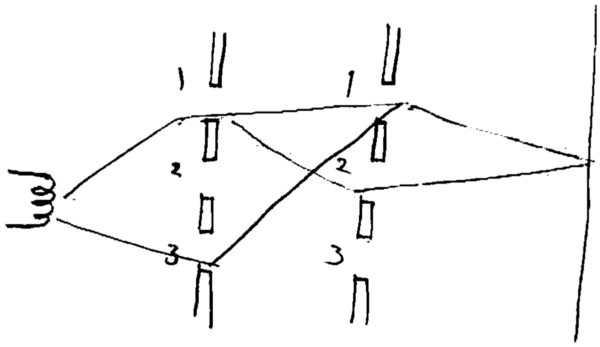
$$P(x) = |\phi(x)|^2 = |\phi_1(x)|^2 + |\phi_2(x)|^2 + \underbrace{(\phi_1\phi_2^* + \phi_1^*\phi_2)}_{\text{干渉項}}$$

・スリットが3つある場合



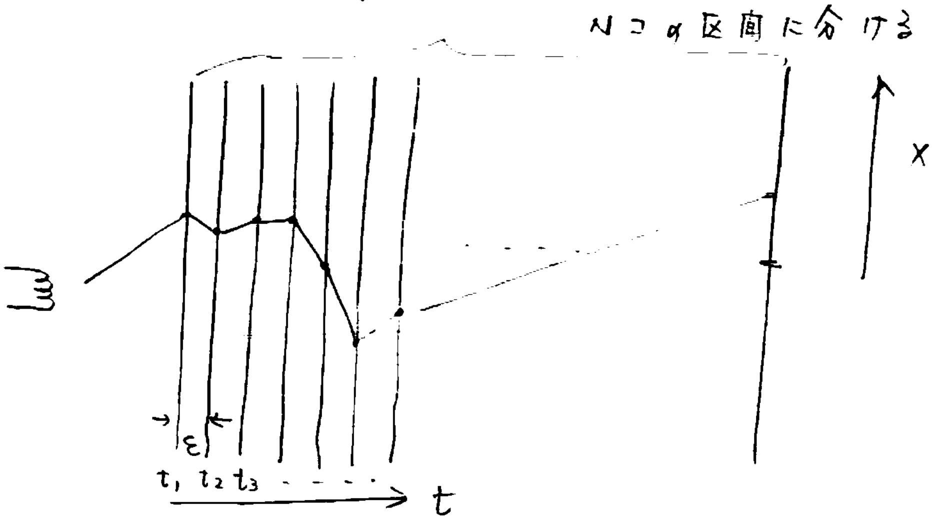
$$\phi(x) = \phi_1(x) + \phi_2(x) + \phi_3(x)$$

◦ スクリーンを2つ置いた場合



$$
\begin{aligned}
\Phi(x) = {} & \Phi_{11}(x) + \Phi_{12}(x) + \Phi_{13}(x) \\
& + \Phi_{21}(x) + \Phi_{22}(x) + \Phi_{23}(x) \\
& + \Phi_{31}(x) + \Phi_{32}(x) + \Phi_{33}(x) = \sum_{i:\text{経路}} \Phi_i(x)
\end{aligned}
$$

↓ 極限



$$
\Phi(x) = K(x_i, x_f) = \lim_{\varepsilon \to 0} \int dx_1 \int dx_2 \cdots \int dx_{N-1} \times \underbrace{\Phi(x_1, x_2, \cdots, x_{N-1})}_{e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} L(x,\dot{x},t)\,dt} = e^{\frac{i}{\hbar}}}
$$

9.2. 経路積分

初期座標 $|x_i\rangle \xrightarrow{\text{時間 } T}$ 終座標 $|x_f\rangle$

遷移振幅: $\boxed{K(x_f, x_i, T) = \langle x_f | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | x_i \rangle}$

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

(note) 時間推進演算子:

初期状態 $|\phi_i\rangle$ $|\phi(t)\rangle =$

→ 時間 t 後の状態 $\hat{U}(t,0)|\phi_i\rangle$

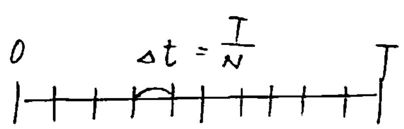
時間に依存するシュレーディンガー方程式 $i\hbar\dot{\phi} = H\phi$

↓

$i\hbar\dot{u} = Hu \quad \rightarrow \quad u = e^{-iHt/\hbar}$

■時間インターバル $(0, T)$ を N 等分する: $0, \cdots, t_n = n\Delta t, \cdots, t_N = T$

$\left(\Delta t = \frac{T}{N}\right)$



↓

$$e^{-i\hat{H}T/\hbar} = \underbrace{e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \cdot e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \cdots\cdots \cdot e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar}}_{N\text{コ}}$$

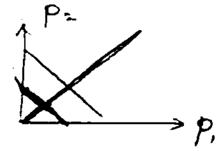
$$= \lim_{N\to\infty} (1 - i\hat{H}\Delta t/\hbar)(1 - i\hat{H}\Delta t/\hbar)\cdots(1 - i\hat{H}\Delta t/\hbar)$$

$$= \lim_{N\to\infty} \int dx_0 \cdots dx_N \; |x_N\rangle \prod_{i=1}^{N} \langle x_i | 1 - i\hat{H}\Delta t/\hbar | x_{i-1}\rangle$$

$$\times \langle x_0 |$$

$u' = p_1 - p_2$

$p' = \dfrac{p_1 + p_2}{2}$



$$p_1 x_1 - p_2 x_2 = \left(p' + \frac{u}{2}\right)\left(x' + \frac{v}{2}\right) - \left(p' - \frac{u}{2}\right)\left(x' - \frac{v}{2}\right)$$
$$= p' v + u x'$$

(note) $$\hat{H} = \int \frac{dp'\,dv\,dx'}{2\pi\hbar}\, e^{ip'v/\hbar}\, \left|x' + \tfrac{1}{2}v\right\rangle\left\langle x' - \tfrac{1}{2}v\right| \cdot H_w(p', x')$$

$$H_w(p', x') \equiv \int du\, \left\langle p' + \frac{u}{2}\right| \hat{H} \left| p' - \frac{u}{2}\right\rangle e^{ix'u/\hbar}$$
$$= \frac{p'^2}{2m} + V(x')$$

(証明)
$$\hat{H} = \int dp_1 dp_2 dx_1 dx_2\, |x_1\rangle\langle x_1|p_1\rangle\langle p_1|\hat{H}|p_2\rangle\langle p_2|x_2\rangle\langle x_2|$$
$$= \int \frac{dp_1 dp_2 dx_1 dx_2}{2\pi\hbar}\, |x_1\rangle\langle p_1|\hat{H}|p_2\rangle\langle x_2| \cdot e^{i(p_1x_1 - p_2x_2)/\hbar}$$

$$(p_1, p_2, x_1, x_2) \xrightarrow{\text{変数変換}} (p', u, x', v)$$

$$p_1 = p' + \frac{u}{2} \qquad x_1 = x' + \frac{v}{2}$$
$$p_2 = p' - \frac{u}{2} \qquad x_2 = x' - \frac{v}{2}$$

$$= \int \frac{dp'\,dv\,dx'}{2\pi\hbar}\, \left|x' + \frac{v}{2}\right\rangle\left\langle x' - \frac{v}{2}\right| \cdot e^{ip'v/\hbar}$$
$$\times \underbrace{\left[\int du\, \left\langle p' + \frac{u}{2}\right|\hat{H}\left|p' - \frac{u}{2}\right\rangle \cdot e^{iux'/\hbar}\right]}_{= H_w(p', x')}$$

$$H_w(p, x) = \int du\, \left\langle p + \frac{u}{2}\right| \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \left| p - \frac{u}{2}\right\rangle e^{ixu/\hbar}$$
$$= \int du\, e^{ixu/\hbar} \left\{ \frac{(p + \frac{u}{2})^2}{2m}\delta(u) + \int dx'\, V(x')\, \underbrace{\left\langle p + \frac{u}{2}\middle|x'\right\rangle\left\langle x'\middle|p - \frac{u}{2}\right\rangle}_{\frac{1}{2\pi\hbar} e^{ix'(\cancel{p} - \frac{u}{2} - \cancel{p} - \frac{u}{2})}} \right\}$$

$$= \frac{p^2}{2m} + \int du\, dx'\, \underbrace{\frac{e^{iu(x-x')/\hbar}}{2\pi\hbar}}_{\delta(x - x')} V(x') = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$\int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{ip_i(x_i - x_{i-1})} = \delta(x_i - x_{i-1})$$

$$\langle x_i | \hat{H} | x_{i-1} \rangle = \int \frac{dp' dv dx'}{2\pi\hbar} \langle x_i | x' + \frac{v}{2} \rangle \langle x' - \frac{v}{2} | x_{i-1} \rangle$$

$$\times H_W(p', x') \cdot e^{ip'v/\hbar}$$

$$x' + \frac{v}{2} = x_i \qquad x' - \frac{v}{2} = x_{i-1} \longrightarrow x' = \frac{x_i + x_{i-1}}{2}, \quad v = x_i - x_{i-1}$$

$$= \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} H_W\left(p', \frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right) e^{ip'(x_i - x_{i-1})}$$

$$e^{-i\hat{H}T/\hbar} = \lim_{N\to\infty} \int dx_0 \cdots dx_N \, |x_N\rangle$$

$$\times \prod_{i=1}^{N} \left\{ \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{ip_i(x_i - x_{i-1})/\hbar} \underbrace{\left[1 - \frac{i}{\hbar}\Delta t \, H_W\left(p_i, \frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)\right]}_{\substack{\wr \\ e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \, H_W}}} \right\}$$

$$\times \langle x_0 |$$

運動量積分を実行：

$$\int dp \quad e^{ip\Delta x/\hbar} \; e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}\frac{p^2}{2m}}$$

$$= \int dp \quad \exp\left\{-\frac{i\Delta t}{2m\hbar}\left(p^2 - \frac{2m\Delta x}{\Delta t}\,p\right)\right\}$$

$$= \int dp \quad \exp\left\{\frac{i\Delta t}{2m\hbar}\left(p - \frac{m\Delta x}{\Delta t}\right)^2 + \frac{im}{2\Delta t\hbar}(\Delta x)^2\right\}$$

$$= \sqrt{\frac{2m\hbar\pi}{i\Delta t}} \quad e^{+\frac{im}{2\Delta t\hbar}(\Delta x)^2}$$

$\downarrow$

$$K(x_f, x_i, T) = \langle x_f | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | x_i \rangle$$

$$= \lim_{N\to\infty} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \prod_{i=1}^{N} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\cdot i\Delta t}} \quad e^{+\frac{im}{2\Delta t\hbar}(x_i - x_{i-1})^2 - \frac{i\Delta t}{\hbar}V\left(\frac{x_i+x_{i-1}}{2}\right)}\Bigg|_{\substack{x_0 = x_i \\ x_N = x_f}}$$

$$= \lim_{N\to\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\cdot i\Delta t}} \prod_{i=1}^{N-1} \int \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\, i\Delta t}}\; dx_i\right)$$

$$\times \; e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t\left(\frac{m}{2}\left(\frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta t}\right)^2 - V\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)\right)}\Bigg|_{\substack{x_0 = x_i \\ x_N = x_f}}$$

$$= \int_{\substack{x(0) = x_i \\ x(T) = x_f}} \mathcal{D}[x(t)] \quad e^{\frac{i}{\hbar}S(x, T)}$$

$$S(x, T) = \int_0^T dt \; L(x, \dot{x}) = \int_0^T dt \; \left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)\right)$$

9.3. 様々な表示

。 $|\phi_i\rangle \longrightarrow |\phi_f\rangle$ への遷移:

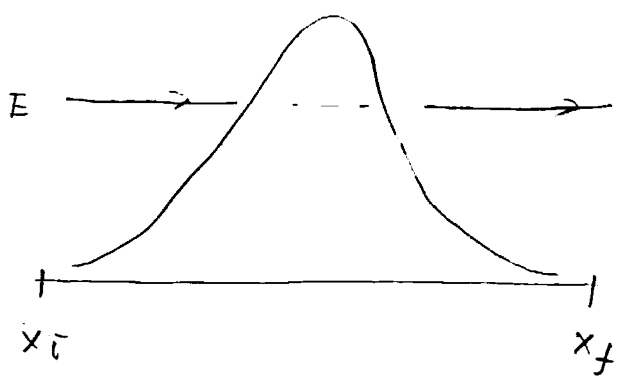
$$K_{fi}(T) = \langle \phi_f | e^{-i\hat{H}T/\hbar} |\phi_i\rangle$$
$$= \int dx_i\, dx_f \;\; \phi_f^*(x)\,\phi_i(x)\;\; K(x_f, x_i, T)$$

。エネルギー表示

エネルギーが固定されている場合 $\longrightarrow$ フーリエ変換

$$G(x_f, x_i, E) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^\infty dT\;\; K(x_f, x_i, T)\, e^{iET/\hbar}$$

cf. トンネリング



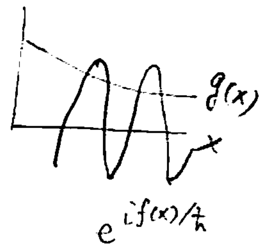
$$P(E) = |\,G(x_f, x_i, E)\,|^2$$

7.4 半古典近似

(note) 停留位相近似

$$I = \int_a^b g(x)\, e^{if(x)/\hbar}\, dx$$

$\hbar \to 0$ では $e^{if(x)/\hbar}$ は激しく振動する関数
(但し停留点以外 $f'(x_\alpha)=0$).

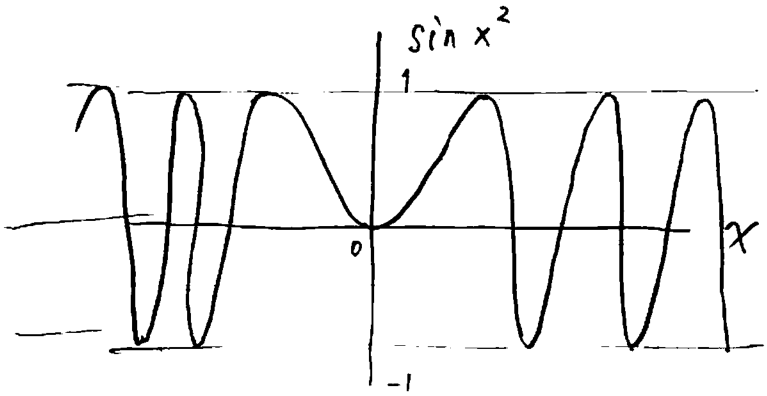


停留点近傍以外では正負が打ち消し合う

$$I \sim g(x_\alpha) \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\left(f(x_\alpha) + \frac{1}{2}(x-x_\alpha)^2 f''(x_\alpha)\right)} dx$$

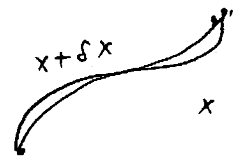
$$= g(x_\alpha)\, e^{\frac{i}{\hbar} f(x_\alpha)} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{i f''(x_\alpha)}}$$

cf. $e^{ix^2} = \cos x^2 + i \sin x^2$



$$K(x_i, x_f, T) = \int_{\substack{x(0)=x_i \\ x(T)=x_f}} \mathcal{D}[x(t)]\, e^{iS(x,T)/\hbar}$$

停留(点,)：
経路



$$\delta S = S[x+\delta x] - S[x] = 0$$

$$= \int_0^T dt\, L(\dot{x}+\delta\dot{x}, x+\delta x, t) - S[x]$$

$$= \int_0^T dt \left[\cancel{L(\dot{x}, x, t)} + \delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right] \cancel{- S[x]}$$

$$= \cancelto{0}{\delta x \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_0^T} - \int_0^T dt\, \delta x \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} \right] = 0$$

$\therefore$ $\quad \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \dfrac{\partial L}{\partial x} = 0$ $\longleftrightarrow$ 古典的ラグランジュ方程式

$\therefore$

$$\delta S = 0 \quad \text{for} \quad x(t) = x_{cl}(t)$$

半古典近似：

$$x(t) = x_{cl}(x) + \delta x(t)$$

$\downarrow$

$$V(x) \sim V(x_{cl}) + \frac{(\delta x)^2}{2} V''(x_{cl}) + \cdots$$

$\downarrow$

$$\boxed{K(x_i, x_f, T) \sim e^{-\frac{1}{2} i\pi\nu} \left| \frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x_i \partial x_f} \right|^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}}}$$

$\therefore$ 半古典的近似は2次関数に対しては exact.