# 経路積分 (2)：量子力学の Green 関数

## Brown 運動の数学，確率過程・確率解析 (6)


緒方秀教

電気通信大学


November 19, 2021

# はじめに

今回は物理よりの話になります．

- 前回：拡散型方程式・Schrödinger 方程式（量子力学）の Green 関数に対する経路積分表示．
- 今回：量子力学の Green 関数の経路積分について考える．
- 量子力学，Schrödinger 方程式の Green 関数（伝搬関数）．

$$\sum_{\text{path}} C \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(\text{path})]\right), \quad S[x(\cdot)]\ ：\text{ひとつの経路に沿っての作用}.$$

なぜ，exp の肩に「作用」が来るのか？

- Green 関数の具体的計算．
- Green 関数の物理的意味（「伝搬関数」以外に）．
  量子的固有状態についての情報を抱え持っている（固有エネルギー，固有関数）．

# 今回の内容

1. はじめに
2. 経路積分の解釈
3. 経路積分の計算
4. Green 関数の物理的意味
5. まとめ
6. 補遺：作用関数の微分

# 目次


1. はじめに
2. 経路積分の解釈
3. 経路積分の計算
4. Green 関数の物理的意味
5. まとめ
6. 補遺：作用関数の微分

# 経路積分の解釈

量子力学：ミクロな世界（原子，分子，…）をつかさどる物理学．

- すべてのモノは物質，波動の二側面をもつ．
- 波動関数 $\psi(t,x)$：波動の側面を記述．
- $|\psi(t,x)|^2$ は確率密度．
  $|\psi(t,x)|^2\mathrm{d}x$：時刻 $t$ に位置 $x \sim x+\mathrm{d}x$ に存在する確率．

# 経路積分の解釈

量子力学：ミクロな世界（原子，分子，…）をつかさどる物理学．

- すべてのモノは物質，波動の二側面をもつ．
- 波動関数 $\psi(t,x)$：波動の側面を記述．
- $|\psi(t,x)|^2$ は確率密度．
  $|\psi(t,x)|^2\mathrm{d}x$：時刻 $t$ に位置 $x\sim x+\mathrm{d}x$ に存在する確率．

Schrödinger 方程式：波動関数が従う基礎方程式．

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(t,x)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(t,x)}{\partial x^2}+V(t,x)\psi(t,x),$$

$$m\ \text{質量},\quad V(t,x)\ \text{ポテンシャル},\quad \hbar=\frac{h}{2\pi},\ h=6.62607015\times10^{-34}\mathrm{m^2kg/s}\quad \text{（Planck 定数）}.$$

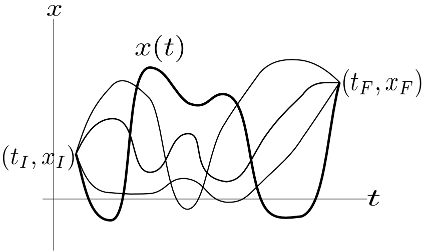
Green 関数（伝搬関数）$\mathscr{G}(t_F,x_F|t_I,x_I)$：波動の伝播の様子を与える．

$$\psi(t_F,x_F)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_I\mathscr{G}(t_F,x_F|t_I,x_I)\psi(t_I,x_I).$$

# 経路積分の解釈

## Green 関数の経路積分表示

$$\mathscr{G}(t_F,x_F|t_I,x_I)=\int_{x(t_I)=x_I}^{x(t_F)=x_F}\mathscr{D}x(\cdot)\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_I}^{t_F}\mathrm{d}t\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t}\right)^2-V(t,x)\right]\right).$$

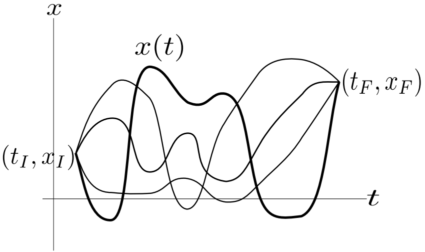



2 点 $(t_I,x_I),(t_F,x_F)$ を結ぶすべての経路 $x(t)$ についての和．

# 経路積分の解釈

## Green 関数の経路積分表示

$$\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) = \int_{x(t_I)=x_I}^{x(t_F)=x_F} \mathscr{D}x(\cdot) \exp\left( \underbrace{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} \right)^2 - V(t,x) \right]}_{\text{作用}} \right).$$




2 点 $(t_I, x_I), (t_F, x_F)$ を結ぶすべての経路 $x(t)$ についての和．

# 経路積分の解釈

$$\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) = \int_{x(t_I)=x_I}^{x(t_F)=x_F} \mathscr{D}x(\cdot) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(\cdot)]\right),$$

$S[x(\cdot)]$ は $(t_I, x_I) \sim (t_F, x_F)$ を結ぶひとつの経路 $x(t)$ に沿っての作用

$$S[x(\cdot)] := \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t L(t, x(t), \dot{x}(t)), \quad L(t, x(t), \dot{x}(t)) := \frac{m}{2}\dot{x}(t)^2 - V(t, x(t)) \quad \text{Lagrangian.}$$

- 経路 $x(t)$ は波動関数 $\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(\cdot)]\right)$ を与える．→それを集めたのが Green 関数（伝搬関数）．
- では，$\exp$ の肩に作用 $S$ が来るのはなぜか？

# 経路積分の解釈

$$\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) = \int_{x(t_I)=x_I}^{x(t_F)=x_F} \mathscr{D}x(\cdot) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(\cdot)]\right),$$

$S[x(\cdot)]$ は $(t_I, x_I) \sim (t_F, x_F)$ を結ぶひとつの経路 $x(t)$ に沿っての作用

$$S[x(\cdot)] := \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t L(t, x(t), \dot{x}(t)), \quad L(t, x(t), \dot{x}(t)) := \frac{m}{2}\dot{x}(t)^2 - V(t, x(t)) \quad \text{Lagrangian.}$$

- 経路 $x(t)$ は波動関数 $\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(\cdot)]\right)$ を与える．→それを集めたのが Green 関数（伝搬関数）．
- では，$\exp$ の肩に作用 $S$ が来るのはなぜか？

  （結論）$\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(\cdot)]\right)$ は経路 $x(t)$ に沿って微小な「平面波」をつなぎ合わせたものである．

  これをこれから，解析力学から始めて説明していく．

# 経路積分の解釈

まず，解析力学から

## Hamilton の原理（最小作用の原理）：古典力学の第一原理

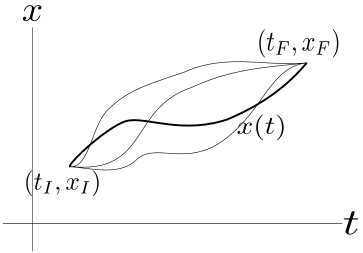
時間 $t = t_I \sim t_F$ における質点の軌道は，始点 $x(t_I) = x_I$, 終点 $x(t_F) = x_F$ を固定した上で

$$\text{作用} \quad S[x(\cdot)] = \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t L(t, x(t), \dot{x}(t)), \quad L(t, x(t), \dot{x}(t)) = \frac{m}{2}\dot{x}(t)^2 - V(t, x) \quad \text{Lagrangian}$$

を停留にするようなものをとる．

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

$\rightarrow$ 質点の軌道 $x(t)$.



# 経路積分の解釈

$\boxed{\text{まず，解析力学から}}$ Hamilton の原理の確認．

- $x(t)$：質点の実際の軌道
- $x(t)+\delta x(t)$：軌道 $x(t)$ から微小にずれた軌道 ( $\delta x(t_I)=\delta x(t_F)=0$ )

$$
\begin{aligned}
\delta S &= S[x+\delta x]-S[x] \\
&= \int_{t_I}^{t_F}\mathrm{d}t\left\{L(t,x+\delta x,\dot{x}+\dot{\delta x})-L(t,x,\dot{x})\right\} \\
&= \int_{t_I}^{t_F}\mathrm{d}t\left\{\delta x\frac{\partial L}{\partial x}+\dot{\delta x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right\} \qquad \text{（第 2 項に部分積分を施して）} \\
&= \underbrace{\left[\delta x\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right]}_{0\ (\because\ \delta x(t_I)=\delta x(t_F)=0\ )}+\int_{t_I}^{t_F}\mathrm{d}t\delta x\left\{\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\right\}=0.
\end{aligned}
$$

# 経路積分の解釈

$\boxed{\text{まず，解析力学から}}$ Hamilton の原理の確認．

- $x(t)$：質点の実際の軌道
- $x(t)+\delta x(t)$：軌道 $x(t)$ から微小にずれた軌道 ( $\delta x(t_I)=\delta x(t_F)=0$ )

$$\int_{t_I}^{t_F}\mathrm{d}t\,\delta x\left\{\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\right\}=0 \quad \text{for } \forall\delta x(t).$$

$$\therefore \quad \frac{\partial L}{\partial x}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)=0 \quad \text{Lagrange 運動方程式.}$$

Lagrange 運動方程式に $L=\frac{m}{2}\dot{x}^2-V(t,x)$ を代入すれば，Newton 運動方程式

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}=-\frac{\partial V(t,x)}{\partial x}$$

が得られる．

# 経路積分の解釈

作用 $S$ の意味　**作用 $S$ を終点 $(t,x)=(t_F,x_F)$ の関数とみなす**（始点 $(t_I,x_I)$ は固定）：

$$S(t,x) := S[x_\bullet(\cdot)] = \int_{t_I}^{t} \mathrm{d}\tau L(\tau, x_\bullet(\tau), \dot{x}_\bullet(\tau)),$$

$x_\bullet(\tau)$ ： $(t_I,x_I)\sim(t,x)$ を結ぶ質点の実際の軌道（運動方程式の解）.

このとき，次がわかる

$$\text{運動量}\quad p=\frac{\partial S}{\partial x},\qquad \text{エネルギー}\quad E=-\frac{\partial S}{\partial t}.$$

（ざっくりとした証明）

$$S=\int_{t_I}^{t_F}\mathrm{d}tL=\int_{t_I}^{t_F}\mathrm{d}t(p\dot{x}-E)\quad\therefore\quad \mathrm{d}S=p\mathrm{d}x_F-E\mathrm{d}t_F.$$

ちゃんとした証明はスライド「補遺」に記します（概要欄の URL に PC スライドを置いておきます）.

# 経路積分の解釈

$\boxed{\text{作用 } S \text{ の意味}}$ 作用 $S$ を終点 $(t, x) = (t_F, x_F)$ の関数とみなす（始点 $(t_I, x_I)$ は固定）：

$$S(t, x) := S[x_\bullet(\cdot)] = \int_{t_I}^{t} \mathrm{d}\tau L(\tau, x_\bullet(\tau), \dot{x}_\bullet(\tau)),$$

$x_\bullet(\tau)$ ： $(t_I, x_I) \sim (t, x)$ を結ぶ質点の実際の軌道（運動方程式の解）.

このとき，次がわかる

$$\text{運動量} \quad p = \frac{\partial S}{\partial x}, \quad \text{エネルギー} \quad E = -\frac{\partial S}{\partial t}.$$

**時空間内を微小変位 $(t, x) \to (t + \Delta t, x + \Delta x)$ したときの作用の微小変化**

$$\Delta S = p\Delta x - E\Delta t.$$

# 経路積分の解釈

$\boxed{\text{量子力学へ}}$　前期量子論（19 世紀後半〜20 世紀はじめ）

- 古典物理学では説明できない物理現象（黒体輻射，光電効果，etc.）．
- すべてのものは粒子と波動の二面性を持つ．

$$\text{エネルギー}\quad E = h\nu = \hbar\omega \quad (\nu\text{：振動数，}\omega = 2\pi\nu\text{：角振動数}),$$

$$\text{運動量}\quad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad (\lambda\text{：波長，}k = 2\pi/\lambda\text{：波数}).$$

# 経路積分の解釈

$\boxed{\text{量子力学へ}}$ 前期量子論（19 世紀後半〜20 世紀はじめ）

- 古典物理学では説明できない物理現象（黒体輻射，光電効果，etc.）．
- すべてのものは粒子と波動の二面性を持つ．

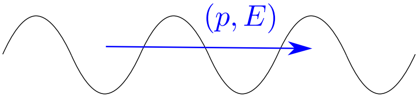
$$\text{エネルギー}\quad E = h\nu = \hbar\omega \quad (\nu\text{：振動数，}\omega = 2\pi\nu\text{：角振動数}),$$

$$\text{運動量}\quad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad (\lambda\text{：波長，}k = 2\pi/\lambda\text{：波数}).$$

**自由粒子（エネルギー，運動量一定）＝平面波．**

波動関数は平面波．

$$\begin{aligned}\psi(t,x) &= C\exp[\mathrm{i}(kx-\omega t)]\\ &= C\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(px-Et)\right].\end{aligned}$$



# 経路積分の解釈

量子力学へ　一般の粒子の波動関数は？

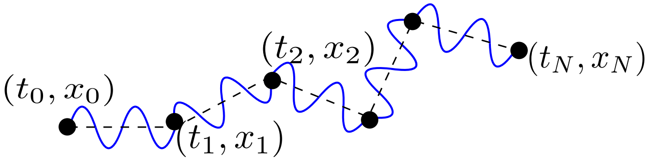
- まず，粒子は時空間内のひとつの経路 $x(t)$ 上を動くとする．
- 経路 $x(t)$ を細分する：

$$(t_0, x_0) \sim (t_1, x_1) \sim (t_2, x_2) \sim \cdots \sim (t_N, x_N).$$

- 各微小区間 $(t_k, x_k) \sim (t_{k+1}, x_{k+1})$ で波動関数を平面波で近似．

$$\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_k x - E_k t)\right].$$

- これらの微小平面波をつなぎ合わせたものが，経路 $x(t)$ に沿う波動関数である．

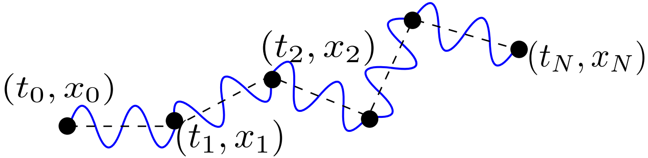


# 経路積分の解釈

量子力学へ　**一般の粒子の波動関数は？**

**経路 $x(t)$ に沿う波動関数．終点 $(t_F, x_F) = (t_N, x_N)$ における値は，**

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_0\Delta x_0 - E_0\Delta t_0)\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_1\Delta x_1 - E_1\Delta t_1)\right)\cdots\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_{N-1}\Delta x_{N-1} - E_{N-1}\Delta t_{N-1})\right).$$

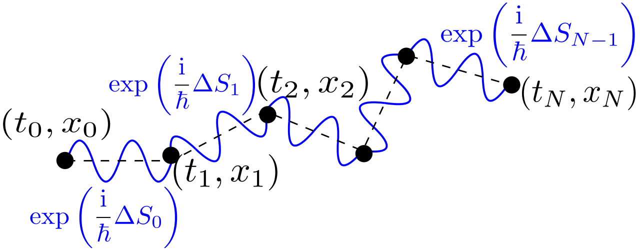


# 経路積分の解釈

$\boxed{\text{量子力学へ}}$ 一般の粒子の波動関数は？

経路 $x(t)$ に沿う波動関数．終点 $(t_F, x_F) = (t_N, x_N)$ における値は，$\Delta S = p\Delta x - E\Delta t$ を思い出すと

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta S_0\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta S_1\right)\cdots\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta S_{N-1}\right).$$

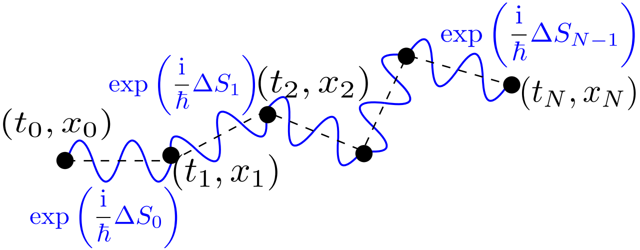


# 経路積分の解釈

量子力学へ　一般の粒子の波動関数は？

経路 $x(t)$ に沿う波動関数．終点 $(t_F, x_F) = (t_N, x_N)$ における値は，$\Delta S = p\Delta x - E\Delta t$ を思い出すと

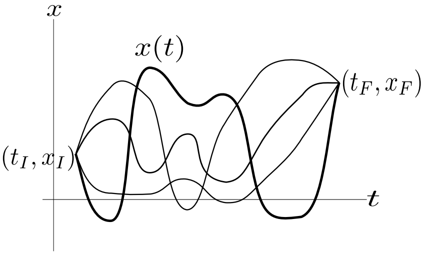
$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\Delta S_0 + \Delta S_1 + \cdots + \Delta S_{N-1})\right) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(\cdot)]\right).$$



# 経路積分の解釈

$\boxed{\text{量子力学へ}}$　**一本の経路** $x(t)$ **がつくる波動関数** $\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(\cdot)]\right)$ **を，**$(t_I, x_I) \sim (t_F, x_F)$ **をつなぐすべての経路** $x(t)$ **について和を取ったものが Green 関数** $\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I)$ **を与える．**

$$
\begin{aligned}
\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_F) &= \sum_{\text{paths}} C \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(\cdot)]\right) \\
&= \int_{x(t_I)=x_I}^{x(t_F)=x_F} \mathscr{D}x(\cdot) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(\cdot)]\right).
\end{aligned}
$$



# 経路積分の解釈

量子力学へ　古典力学的極限 ( $\hbar \to 0$ )

$x_1(t)$ : $\delta S[x_1] \neq 0$ なる経路.

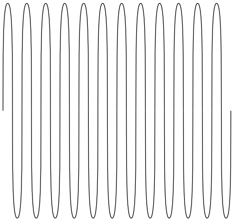
$x_1(t)$ 近傍の経路の経路積分への寄与を考える.

$$\int_{\text{neighborhood of } x_1} \mathscr{D}x(\cdot) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x]\right) \simeq \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x_1]\right) \underbrace{\int \mathscr{D}(\delta x) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \underbrace{\delta S}_{\neq 0}\right)}_{(1)} = 0.$$

(1) の exp の位相は, $\hbar \approx 0$ より非常に大きい.

(1) は激しく振動する波動の重ね合わせなので消える.

（参考）Riemann-Lebesgue の定理（Fourier 解析）.



# 経路積分の解釈

**量子力学へ** 古典力学的極限 ( $\hbar \to 0$ )

$x_{cl}(t)$ : $\delta S[x_{cl}] = 0$ なる経路，i.e.，古典的軌道（古典力学の運動方程式の解）．

（注意） 古典的運動方程式 $\Leftrightarrow$ $\delta S = 0.$

$x_{cl}(t)$ 近傍の経路の経路積分への寄与．$S[x] = S[x_{cl}] +$（高次の微小量）より

$$\int_{\text{neighborhood of } x_{cl}} \mathscr{D}x(\cdot) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x]\right) \simeq \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x_{cl}]\right) \neq 0.$$

**古典力学的極限 $\hbar \to 0$**

古典的軌道 $x_{cl}(t)$ 近傍の軌道のみが Green 関数の経路積分に寄与する．

$x(t) \simeq x_{cl}(t)$ に沿った波動関数 $\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(\cdot)]\right)$ のみ Green 関数 $\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I)$ に残る．

# 経路積分の解釈

**まとめ** Green 関数の経路積分表示．

$$\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_F) = \int_{x(t_I)=x_I}^{x(t_F)=x_F} \mathscr{D}x(\cdot) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(\cdot)]\right) = \sum_{\text{path}} C \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[\text{path}]\right).$$

- $(t_I, x_I) \sim (t_F, x_F)$ を結ぶすべての経路 $x(t)$ に沿う波動関数の和．
- 一つの経路 $x(t)$ に沿う波動関数は，経路を細分して各微小区間を平面波で近似して，それらをつなぎ合わせる．その結果が

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(\cdot)]\right)$$

である．

# 目次


1. はじめに
2. 経路積分の解釈
3. **経路積分の計算**
4. Green 関数の物理的意味
5. まとめ
6. 補遺：作用関数の微分

# 経路積分の計算

**これから，自由粒子，調和振動子に対して Green 関数を具体的に計算する．**

Green 関数の経路積分表示（定義）

$$
\begin{aligned}
\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) &= \int_{x(t_I)=x_I}^{x(t_F)=x_F} \mathscr{D}x(\cdot) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(t,x)\right]\right) \\
&:= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{N/2} \prod_{k=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_k \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{k=0}^{N-1}\Delta t\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t}\right)^2 - V(t_k, x_k)\right]\right),
\end{aligned}
$$

**時間，空間のきざみ**

$$
t_I = t_0 < t_1 < \cdots < t_N = t_F, \quad t_k = t_I + k\Delta t \quad \left(k = 0, 1, \ldots, N-1;\ \Delta t = \frac{t_F - t_I}{N}\right),
$$

$$
x_k = x(t_k) \quad (\, k = 0, 1, \ldots, N\,),
$$

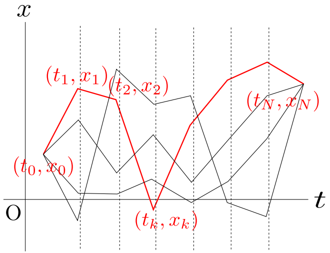
$$
\Delta x_k = x_{k+1} - x_k \quad (\, k = 0, 1, \ldots, N\,).
$$

# 経路積分の計算

**これから，自由粒子，調和振動子に対して Green 関数を具体的に計算する．**

Green 関数の経路積分表示（定義）

$$\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) = \lim_{N \to \infty} \left( \frac{m}{2\pi \mathrm{i} \hbar \Delta t} \right)^{N/2} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_k \exp \left( \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{k=1}^{N-1} \Delta t \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{\Delta x_k}{\Delta t} \right)^2 - V(t_k, x_k) \right] \right),$$




経路積分は

- 多重積分で
- 次元 $\to \infty$ としたもの．

# 経路積分の計算：自由粒子

$$\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{N/2} \left(\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_k\right) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\Delta t}\right)^2\right).$$

**次の公式を用いて $x_1, x_2, \ldots, x_{N-1}$ の順に積分を実行する．**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{a}\right) \exp\left(-\frac{(y-z)^2}{b}\right) = \sqrt{\frac{\pi ab}{a+b}} \exp\left(-\frac{(x-z)^2}{a+b}\right) \quad (\,\mathrm{Re}\, a, \mathrm{Re}\, b \geq 0\,).$$

# 経路積分の計算：自由粒子

$$\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{N/2} \left(\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_k\right) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\Delta t}\right)^2\right).$$

**次の公式を用いて $x_1, x_2, \ldots, x_{N-1}$ の順に積分を実行する．**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{a}\right) \exp\left(-\frac{(y-z)^2}{b}\right) = \sqrt{\frac{\pi ab}{a+b}} \exp\left(-\frac{(x-z)^2}{a+b}\right) \quad (\,\mathrm{Re}\, a, \mathrm{Re}\, b \geq 0\,).$$

**自由粒子に対する Green 関数**

$$\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(t_F - t_I)}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{m(x_F - x_I)^2}{2(t_F - t_I)}\right).$$

# 経路積分の計算：自由粒子

Green 関数を用いて波動関数の時間発展を計算する．

（例）

$$\psi(t=0,x) = \frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) \quad (\ a > 0 \ : \ \text{const.}\ ).$$

$$\psi(t,x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y \mathscr{G}(t,x|0,y)\psi(t=0,y), \quad \mathscr{G}(t,x|0,y) = \sqrt{\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\pi t}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}m(x-y)^2}{2\hbar t}\right).$$

前頁の公式を用いて，

$$\psi(t,x) = \sqrt{\frac{ma/\sqrt{\pi}}{ma^2 + \mathrm{i}\hbar t}} \exp\left(-\frac{mx^2}{2(ma^2 + \mathrm{i}\hbar t)}\right).$$

# 経路積分の計算：自由粒子

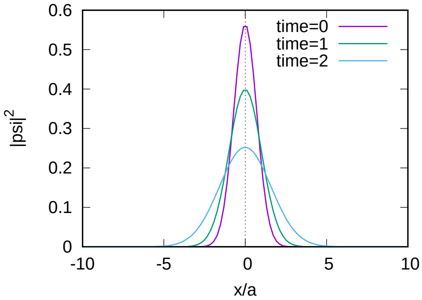
確率密度．

$$|\psi(t,x)|^2 = \sqrt{\frac{(ma)^2/\pi}{(ma^2)^2 + (\hbar t)^2}} \exp\left(-\frac{(max)^2}{(ma^2)^2 + (\hbar t)^2}\right).$$

時間経過とともに裾野が広がっていく．

確率密度 $|\psi(t,x)|^2$ のグラフ．

- 縦軸：$|\psi(t,x)|^2$.
- 横軸：$x/a$．
- time $= \hbar t/(ma^2)$.



# 経路積分の計算：調和振動子

$$
\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) = \lim_{N\to\infty} \left( \frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar \Delta t} \right)^{N/2} \int_{\mathbb{R}^{N-1}} \mathrm{d}^{N-1}\boldsymbol{x} \exp\left( \frac{\mathrm{i}}{\hbar} S_N(\boldsymbol{x}) \right),
$$

$$
S_N(\boldsymbol{x}) = S_N(x_1, \ldots, x_{N-1}) = \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{\Delta x_k}{\Delta t} \right)^2 - \frac{m\omega^2}{2} x_k^2 \right].
$$

$\nabla S_N(\boldsymbol{x}_{cl}) = 0$ **なる** $\boldsymbol{x}_{cl} = (x_1^{cl}, \ldots, x_{N-1}^{cl})$ **をとると，**

$$
S_N(\boldsymbol{x}) = \underbrace{S_N(\boldsymbol{x}_{cl})}_{(1)} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{N-1} \left. \frac{\partial^2 S_N}{\partial x_k \partial x_l} \right|_{\boldsymbol{x}_{cl}} (x_k - x_k^{cl})(x_l - x_l^{cl})}_{(2)}.
$$

$S(\boldsymbol{x})$ **は二次関数なので，右辺の展開は厳密に成り立つ．**

**右辺第 1 項，第 2 項の寄与をそれぞれ計算する．**

# 経路積分の計算：調和振動子

$\boxed{\text{第 1 項の寄与}}$ $\boldsymbol{x}_{cl} = (x_1^{cl}, \ldots, x_{N-1}^{cl})$ は次を満たす.

$$\nabla S_N(\boldsymbol{x}_{cl}) = 0, \quad \text{i.e.,} \quad \frac{x_{k+1}^{cl} - 2x_k^{cl} + x_{k-1}^{cl}}{\Delta t^2} + \omega^2 x_k^{cl} = 0.$$

$\Delta t \to 0$ ( $N \to \infty$ ) $\Rightarrow$ $x_{cl}(t) := \lim_{N\to\infty} x_k$：古典力学的調和振動子.

$$\frac{\mathrm{d}^2 x_{cl}}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2 x_{cl} = 0, \quad x_{cl}(t_I) = x_I, \quad x_{cl}(t_F) = x_F,$$

Hamilton の原理（最小作用の原理，$\nabla S_N(\boldsymbol{x}_{cl}) = 0$ に対応）

$$\delta S[x_{cl}] = 0, \quad \text{where} \quad S[x] := \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2\right] \quad \text{作用.}$$

# 経路積分の計算：調和振動子

**第 1 項の寄与**　**古典力学的調和振動子 $x_{cl}(t)$ の具体形．**

$$x_{cl}(t) = \frac{1}{\sin\omega(t_F - t_I)} \left[ x_I \sin[\omega(t_F - t)] + x_F \sin[\omega(t - t_I)] \right],$$

**古典力学的作用**

$$S_{cl} := S[x_{cl}(\cdot)] = \frac{\omega}{\sin\omega T} \left[ (x_I^2 + x_F^2)\cos\omega T - 2x_I x_F \right] \quad (\, T = t_F - t_I \,).$$

# 経路積分の計算：調和振動子

**第 1 項の寄与**　古典力学的調和振動子 $x_{cl}(t)$ の具体形．

$$x_{cl}(t) = \frac{1}{\sin\omega(t_F - t_I)}\left[x_I \sin[\omega(t_F - t)] + x_F \sin[\omega(t - t_I)]\right],$$

**古典力学的作用**

$$S_{cl} := S[x_{cl}(\cdot)] = \frac{\omega}{\sin\omega T}\left[(x_I^2 + x_F^2)\cos\omega T - 2x_I x_F\right] \quad (\,T = t_F - t_I\,).$$

$*$ $S_{cl} = S[x_{cl}]$ は次のように計算するとラク．

$$\begin{aligned} S_{cl} &= \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x_{cl}}{\mathrm{d}t}\right)^2 - \frac{m\omega^2}{2}(x_{cl})^2\right] \qquad \text{（部分積分を用いて）} \\ &= \frac{m}{2}\left[x_{cl}\frac{\mathrm{d}x_{cl}}{\mathrm{d}t}\right]_{t=t_I}^{t_F} - \frac{m}{2}\int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t x_{cl} \underbrace{\left[\frac{\mathrm{d}^2 x_{cl}}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2 x_{cl}\right]}_{0}] = \cdots . \end{aligned}$$

# 経路積分の計算：調和振動子

**第 2 項の寄与**　二次の項：$S_N(\boldsymbol{x})$ の二階微分を計算すると，次のように表される．

$$\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{N-1}\left.\frac{\partial^2 S_N}{\partial x_k \partial x_l}\right|_{\boldsymbol{x}_{cl}}(x_k - x_k^{cl})(x_l - x_l^{cl}). = \frac{m}{2\Delta t}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{cl})^T \mathsf{M}_N(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{cl}),$$

where

$$\mathsf{M}_N = \begin{bmatrix} 2-\omega^2\Delta t & -1 & & \\ -1 & 2-\omega^2\Delta t & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 2-\omega^2\Delta t \end{bmatrix}.$$

# 経路積分の計算：調和振動子

$$
\begin{aligned}
&\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) \\
&= S_{cl} \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{N/2} \exp\left(\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\Delta t}\int_{\mathbb{R}^{N-1}} \mathrm{d}^{N-1}\boldsymbol{x} (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{cl})^T \mathsf{M}_N (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{cl})\right) \\
&= S_{cl} \lim_{N\to\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar\Delta t}\cdot\frac{1}{\det \mathsf{M}_N}}.
\end{aligned}
$$

## 公式（線形代数の練習問題）

$$
\int_{\mathbb{R}^N} \mathrm{d}^N\boldsymbol{x} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{x}^T \mathsf{M}\boldsymbol{x}\right) = \sqrt{\frac{(2\pi \mathrm{i})^N}{\det \mathsf{M}}}.
$$

$\det \mathsf{M}_N$ を計算しなければならない．

# 経路積分の計算：調和振動子

$$
\begin{aligned}
M_n &:= \det \mathsf{M}_N \\
&= \begin{vmatrix}
2-\omega^2\Delta t & -1 & & & \\
-1 & 2-\omega^2\Delta t & -1 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & -1 & 2-\omega^2\Delta t
\end{vmatrix} \quad (\, n = N-1 \,).
\end{aligned}
$$

第一行について余因子展開することにより，

$$M_n = (2-\omega^2\Delta t)M_{n-1} - M_{n-2},$$

この差分方程式の一般解は

$$M_n = C_1\alpha_+^n + C_2\alpha_-^n \quad (\, C_1, C_2 \ : \ \text{const.}\,).$$

ここで，$\alpha_\pm$ は二次方程式 $x^2 = (2-\omega^2\Delta t)x - 1$ の根：

$$\alpha_\pm = 1 - \frac{1}{2}\omega^2\Delta t^2 \pm \mathrm{i}\omega\Delta t\sqrt{1-\omega^2\Delta t^2} = 1 \pm \mathrm{i}\omega\Delta t + \mathrm{O}(\Delta t^2).$$

# 経路積分の計算：調和振動子

$M_0 = 1,\ M_1 = 2 - \omega^2 \Delta t$ より係数 $C_1, C_2$ を定めて，

$$
\begin{aligned}
M_n = \det \mathsf{M}_N &= \frac{\alpha_+^N - \alpha_-^N}{\alpha_+ - \alpha_-} = \frac{(1 + \mathrm{i}\omega\Delta t + \mathrm{O}(\Delta t^2))^N - (1 - \mathrm{i}\omega\Delta t + \mathrm{O}(\Delta t^2))^N}{2\mathrm{i}\omega\Delta t(1 + \mathrm{O}(\Delta t^2))}, \\
\lim_{N\to\infty} \Delta t \det \mathsf{M}_N &= \lim_{N\to\infty} \frac{(1 + \mathrm{i}\omega T/N + \mathrm{O}(N^{-2}))^N - (1 - \mathrm{i}\omega T/N + \mathrm{O}(N^{-2}))^N}{2\mathrm{i}\omega(1 + \mathrm{O}(N^{-2}))} \\
&= \frac{\sin\omega T}{\omega} \quad (\,T = t_F - t_I\,).
\end{aligned}
$$

# 経路積分の計算：調和振動子

$M_0 = 1,\ M_1 = 2 - \omega^2 \Delta t$ より係数 $C_1, C_2$ を定めて，

$$M_n = \det \mathsf{M}_N = \frac{\alpha_+^N - \alpha_-^N}{\alpha_+ - \alpha_-} = \frac{(1 + \mathrm{i}\omega\Delta t + \mathrm{O}(\Delta t^2))^N - (1 - \mathrm{i}\omega\Delta t + \mathrm{O}(\Delta t^2))^N}{2\mathrm{i}\omega\Delta t(1 + \mathrm{O}(\Delta t^2))},$$

$$\lim_{N\to\infty} \Delta t \det \mathsf{M}_N = \lim_{N\to\infty} \frac{(1 + \mathrm{i}\omega T/N + \mathrm{O}(N^{-2}))^N - (1 - \mathrm{i}\omega T/N + \mathrm{O}(N^{-2}))^N}{2\mathrm{i}\omega(1 + \mathrm{O}(N^{-2}))}$$

$$= \frac{\sin \omega T}{\omega} \quad (\,T = t_F - t_I\,).$$

**調和振動子に対する Green 関数**

$$\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar \sin\omega(t_F - t_I)}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S_{cl}(t_F, x_F | t_I, x_I)\right),$$

$$S_{cl}(t_F, x_F | t_I, x_I) := \frac{m\omega}{2\sin\omega(t_F - t_I)}\left[(x_I^2 + x_F^2)\cos\omega(t_F - t_I) - 2x_I x_F\right] \quad \text{(古典力学的作用)}.$$

# 目次

1. はじめに
2. 経路積分の解釈
3. 経路積分の計算
4. Green 関数の物理的意味
5. まとめ
6. 補遺：作用関数の微分

# Green 関数の物理的意味

Schrödinger 方程式の Green 関数 $\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I)$.

- 解の伝播の様子を与える．

$$\psi(t_F, x_F) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_I \mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) \psi(t_I, x_I).$$

# Green 関数の物理的意味

Schrödinger 方程式の Green 関数 $\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I)$.

- 解の伝播の様子を与える．

$$\psi(t_F, x_F) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_I \mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) \psi(t_I, x_I).$$

- Hamiltonian$\widehat{H}$ の固有状態の情報を持っている．

$$\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) = \sum_n \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(t_F - t_I) E_n\right) \varphi_n(x_F) \varphi_n^*(x_I),$$

$E_n, \varphi_n(x)$ : $\widehat{H}$ の固有エネルギー,（規格化）固有関数

$$\left( \widehat{H}\varphi_n = E_n \varphi_n, \quad \widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(t, x) \right)$$

# Green 関数の物理的意味

Schrödinger 方程式の Green 関数 $\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I)$.

- 解の伝播の様子を与える.
- Hamiltonian $\widehat{H}$ の固有状態の情報を持っている.

両者はなぜつながるか？

Green 演算子（解の時間発展）：形式的に

$$\widehat{\mathscr{G}}(t_F | t_I) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(t_F - t_I)\widehat{H}\right).$$

$\widehat{H}$ の固有状態 $\{\ |n\rangle\ \}$ の完全性 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ より

$$\widehat{\mathscr{G}}(t_F | t_I) = \sum_n \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(t_F - t_I)\right)|n\rangle\langle n| \quad (\,|n\rangle\langle n| \ \text{：状態}\ n\ \text{への射影}\,),$$

$$\mathscr{G}(t_F, x_F | t_I, x_I) = \langle x_F | \widehat{\mathscr{G}}(t_F | t_I) | x_I\rangle = \sum_n \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(t_F - t_I)\right)\varphi_n(x_F)\varphi_n^*(x_I).$$

# Green 関数の物理的意味

調和振動子について，Green 関数より固有エネルギー・固有関数を求める．

Green 関数．

$$
\begin{aligned}
\mathscr{G}(t,x,y) &:= \mathscr{G}(t,x|0,y) \\
&= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega t}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}m\omega}{2\hbar\sin\omega t}[(x^2+y^2)\cos\omega t-2xy]\right).
\end{aligned}
$$

$$
\mathscr{G}(t,x,y)=\sum_n \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)tE_n}\varphi_n(x)\varphi_n^*(y),\quad \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x|\varphi_n(x)|^2=1 \quad \text{（規格化）}
$$

を用いて，

$$
\sum_n \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)tE_n}=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\mathscr{G}(t,x,x).
$$

右辺に調和振動子に対する Green 関数を代入して計算してみる．

# Green 関数の物理的意味

$$\sum_n \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)tE_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \mathscr{G}(t,x,x) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega t}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \exp\left[\frac{\mathrm{i}m\omega}{\hbar\sin\omega t}(\cos\omega t - 1)x^2\right],$$

右辺の積分を実行して，

$$\sum_n \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)tE_n} = \frac{1}{2\mathrm{i}\sin(\omega t/2)} = \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}}{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\mathrm{i}\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t\right].$$

$$\therefore \quad E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (\, n = 0,1,2,\ldots).$$

調和振動子の固有エネルギーが得られた．

$*$ 級数を収束させるために，$t \to t - \mathrm{i}\epsilon$ $(\, 0 < \epsilon \ll 1 \,)$ とする．

# Green 関数の物理的意味

$$
\begin{aligned}
\mathscr{G}(t,x,y) &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \mathrm{i}\hbar \sin\omega t}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}m\omega}{2\hbar\sin\omega t}[(x^2+y^2)\cos\omega t - 2xy]\right) \\
&= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{m\omega^2}{2\hbar}(x^2+y^2)\right] \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2} \\
&\quad \times \left\{1 + \frac{2m\omega}{\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \left[\frac{1}{2} - \frac{m\omega}{\hbar}(x^2+y^2) + 2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2y^2\right]\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t} + \cdots\right\}.
\end{aligned}
$$

**これと**

$$
\mathscr{G}(t,x,y) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n+1/2)\omega t}\varphi_n(x)\varphi_n^*(y)
$$

**とを比較して，**

$$
\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega^2}{2\hbar}x^2\right), \quad \varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\varphi_0(x), \quad \varphi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(2\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right)\varphi_0(x), \quad \ldots
$$

**調和振動子の固有関数が得られた．**

# Green 関数の物理的意味

**閑話休題．**

$$\sum_n \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)tE_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \mathscr{G}(t, x, x).$$

$$t = -\mathrm{i}\hbar\beta,$$

$$\left( \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad T \text{ : 絶対温度}, \quad k_B \text{ : Boltzmann 定数} = 1.380\,649 \times 10^{-23} \mathrm{JK}^{-1} \right)$$

**を代入すると，**

$$Z := \sum_n \mathrm{e}^{-\beta E_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \mathscr{G}(-\mathrm{i}\hbar\beta, x, x) \quad \text{統計力学における分配関数.}$$

$\mathscr{G}(-\mathrm{i}\hbar\tau, x, y)$**：拡散型方程式に対する Green 関数（前回動画）．**

# Green 関数の物理的意味

**閑話休題．**

$$\sum_n \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)tE_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \mathscr{G}(t,x,x).$$

$$t = -\mathrm{i}\hbar\beta,$$

$$\left(\beta = \frac{1}{k_B T}, \quad T : \textbf{絶対温度}, \quad k_B : \text{Boltzmann } \textbf{定数} = 1.380\,649 \times 10^{-23}\mathrm{JK}^{-1}\right)$$

**を代入すると，**

$$Z := \sum_n \mathrm{e}^{-\beta E_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \mathscr{G}(-\mathrm{i}\hbar\beta, x, x) \quad \textbf{統計力学における分配関数}.$$

$*$ 2019 **年の国際単位系** (SI) **の改定により，上記の** Boltzmann **定数の値は確定値となった．**
**（質量（キログラム）の定義はキログラム原器を用いなくなった）**

# 目次


1. はじめに
2. 経路積分の解釈
3. 経路積分の計算
4. Green 関数の物理的意味
5. まとめ
6. 補遺：作用関数の微分

# まとめ

量子力学：Schrödinger 方程式の Green 関数に対する経路積分．

- 経路積分表示の解釈．
  - 始点・終点をつなぐすべての経路に沿う波動関数の和．
  - 一つの経路に沿う波動関数：微小区間の平面波をつなぐ．

$$\psi(\text{path}) = C \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S(\text{path})\right), \quad S \ : \ \text{作用}.$$

  - 古典的極限 ( $\hbar \to 0$ )：古典力学的軌道の寄与のみ残る．
- 自由粒子，調和振動子に対して Green 関数の経路積分を具体的に計算した．
- Green 関数の物理的意味．

  Hamiltonian の固有状態の情報を持っている．

# 目次


1. はじめに
2. 経路積分の解釈
3. 経路積分の計算
4. Green 関数の物理的意味
5. まとめ
6. **補遺：作用関数の微分**

# 補遺：作用関数の微分

**作用関数 $S(t_F, x_F)$ の定義**

$$S(t_F, x_F) = \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t L(t, x(t), \dot{x}(t)),$$

$x(t)$ : $(t_I, x_I) \sim (t_F, x_F)$ **の実際の運動軌道．**

**このとき次が成り立つ．**

$$\textbf{運動量} \quad p_F = \frac{\partial S(t_F, x_F)}{\partial x_F},$$

$$\textbf{エネルギー} \quad E_F = -\frac{\partial S(t_F, x_F)}{\partial t_F}.$$

# 補遺：作用関数の微分

$p_F = \dfrac{\partial S(t_F, x_F)}{\partial x_F}$ の証明．

- $x(t)$ ：$(t_I, x_I) \sim (t_F, x_F)$ を結ぶ運動軌道．
- $x(t) + \delta x(t)$ ：$(t_I, x_I) \sim (t_F, x_F + \delta x_F)$ を結ぶ運動軌道．

（この両者の軌道は異なることに注意）

$$
\begin{aligned}
& S(t_F, x_F + \delta x_F) - S(t_F, x_F) \\
&= S[x + \delta x] - S[x] \\
&= \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \left\{ L(t, (x + \delta x)(t), (\dot{x} + \delta \dot{x})(t)) - L(t, x(t), \dot{x}(t)) \right\} \\
&= \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \left\{ \delta x(t) \frac{\partial L}{\partial x} + \delta \dot{x}(t) \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right\} \quad \text{（第 2 項に部分積分を施して）} \\
&= \left[ \delta x(t) \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right]_{t=t_I}^{t_F} + \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \delta x(t) \underbrace{\left\{ \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \right\}}_{0} \\
&= \delta x_F p_F .
\end{aligned}
$$

# 補遺：作用関数の微分

$E_F = -\dfrac{\partial S(t_F, x_F)}{\partial t_F}$ の証明．

- $x(t)$：$(t_I, x_I) \sim (t_F, x_F)$ を結ぶ運動軌道．
- $x(t) + \delta x(t)$：$(t_I, x_I) \sim (t_F + \delta t_F, x_F)$ を結ぶ運動軌道．

$$
\begin{aligned}
& S(t_F + \delta t_F, x_F) - S(t_F, x_F) \\
&= S[x + \delta x] - S[x] \\
&= \int_{t_I}^{t_F + \delta t_F} \mathrm{d}t L(t, (x + \delta x)(t), (\dot{x} + \delta \dot{x})(t)) - \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t L(t, x(t), \dot{x}(t)) \\
&= \int_{t_F}^{t_F + \delta t_F} \mathrm{d}t L(t, (x + \delta x)(t), (\dot{x} + \delta \dot{x})(t)) + \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \left\{ \delta x(t) \frac{\partial L}{\partial x} + \delta \dot{x}(t) \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right\} \\
&= \delta t_F \left[ L \right]_{t = t_F} + \left[ \delta x(t) \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right]_{t = t_I}^{t_F} + \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \delta x(t) \underbrace{\left\{ \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \right\}}_{0} \\
&= \delta t_F \left[ L \right]_{t = t_F} + \delta x(t_F) p_F .
\end{aligned}
$$

# 補遺：作用関数の微分

$\delta x(t_F)$ を求めなければならない．$(x+\delta x)(t_F+\delta t_F)=x_F$ より，

$$\underbrace{x(t_F)}_{x_F}+\delta t_F\dot{x}(t_F)+\delta x(t_F)=x_F,$$

$$\therefore \quad \delta x(t_F)=-\delta t_F\dot{x}(t_F).$$

これを前頁の式に代入して，

$$S(t_F+\delta t_F,x_F)-S(t_F,x_F)=\delta t_F\left[L-p\dot{x}\right]_{t=t_F}=-\delta t_F E_F.$$