解析力学

2017 年 12 月 26 日

序文

このテキストは解析力学の教科書、解説書を意図して書いたものである。しかし内容は通常の教科書とは大きく異る。通常の教科書との違いは、数学的構造の理解に努めたので、応用的なものがないこと。剛体の運動や微小振動についての記述がないこと。それから変分法のハミルトンの原理を論理上使っていないこと。ハミルトンヤコビの方程式について詳しいこと。変分法に関しては力学軌道が最小になるかを調べていること。正準変換について例を多く入れ詳しく解説したこと。等々である。

解析力学という学問は物理学というより応用数学に近いであろう。解析力学には物理法則というものは一切でてこないし、実験についても何の言及もない。物理法則というのは、事実についての記述であり、こういうときはこういうことが起きるという命題である。すべての物は引き合うとか、押せば動くとかいうことである。そういう記述が解析力学にはない。

解析力学は数学と言っても 18 世紀、19 世紀の数学である。方程式の名前から想像すると、その頃の数学者のオイラー、ラグランジュ、ヤコビ、ハミルトンたちが作ったものであろう。だから今の数学とは違う。厳密ではないし、今の数学にあるようなわけのわからない用語もでてこない。

解析力学を学ぶことによって力学をより深く理解できるようになるかというと、そういうことはないだろう。実際の計算にもほとんど役には立たないし、解析力学を学ぶことによって見通しがよくなるということもない。加速度は力に比例するという法則がわかり易すぎるのである。役に立たないと言っても、それはここで扱う内容の解析力学を形式的なラグラジアンとかハミルトニアンとかハミルトンヤコビの方程式などに限定しているからである。世間の解析力学の教科書は剛体や微小振動などの記述がある。そういうのは実際の計算にも役立つし、そういうことを学べば現象を見通しよくさせてくれるであろう。だがこのテキストにはそういうことは書いていない。

量子力学を学ぶのに解析力学が必要だというような話をたまに見かけるが、全く必要ないと思う。前期量子論では必要だったようだが、今の量子力学では必要ない。ただ、量子力学の教科書にはハミルトニアンとかラグランジアンとかいう用語が出て来るので、その言葉の意味くらいは知っていた方がいいだろう。それでも解析力学の知識は、古典論と量子論のつながりの理解に多少は役に立つ。それはハミルトンヤコビの方程式の解とシュレディンガー方程式の解の位相との関係。シュレディンガー方程式でのプロパゲーターの位相とラグランジアンの時間積分の関係などである。応用数学といってもいい解析力学が物理学科で教えられるのは単なる昔からの習慣のためであろう。

簡単に内容について紹介しよう。まず第 1 章で後の章で使う用語の説明や数学の説明をした。ここは軽く目を通すか、飛ばしてもらって適宜参照してもらえば良いと思う。次の章から解析力学の説明をする。第 2 章でラグランジュ方程式について説明した。応用的なものにはほとんど触れていない。次の第 3 章でラグランジュ方程式の幾何学的意味を考察した。この章は筆者の趣味のようなものなので飛ばしてもらえば良い。第 4 章でハミルトニアンと正準方程式について説明した。ハミルトニアンというものはラグランジアンのルジャンドル

変換であるということを強調した。第 5 章で正準変換について説明した。正準変換というのはわかりづらいので飛ばしたほうがよいかもしれない。後の理解に関係あるのはハミルトンヤコビの方程式の導出だけだが、その証明はより簡潔に次の章で行っている。正準変換の記述は、例や例題を多く入れて、わかりやすくなるように相当努力したつもりである。第 6 章ではハミルトンヤコビの方程式について説明した。一般的な議論はあとに回して、具体例を通してハミルトンヤコビの方程式を理解できるように記述した。世間の解析力学の教科書ではハミルトンヤコビの方程式についてはほんの僅かしかふれられていないので、この章の内容はそれなりの価値があると思う。量子力学とのつながりを重視した記述をした。ここで解析力学の内容は終わりと言っていい。次の第 7 章で変分法と解析力学の関わりを述べた。力学の法則を満たす軌道はラグランジアンの時間積分の停留関数になるということである。いわゆる、ハミルトンの原理なるものである。このテキストでは変分法は脇役的に扱った。多くの教科書ではこのハミルトンの原理を式の導出や証明などに使っているようだが、このテキストではそういうことはしていない。それは、まず第 1 に停留という概念が（最小なら分かり易いが）わかりづらいからである。第 2 に変分法が数学的厳密性に掛けていると思うからである。それよりも我々が慣れ親しんだ微分の方法で式を導出したほうがよいと思ったからである。ラグランジュ方程式も正準方程式もハミルトンヤコビの方程式も変分法を使わずに導出できる。この章では力学の法則を満たす軌道が停留関数であるということだけでなく、最小関数になるかということも考察した。第 8 章では最小作用の原理について説明した。ここでは 1 粒子の系に限定した。力学の法則を満たす軌道は作用積分の停留軌道になることを証明し、又、おそらく最小軌道になるであろう理由を示した。第 9 章ではファインマンの経路積分を簡単に紹介した。こんなものを解析力学のテキストに入れたのは、解析力学と変分法の知識がいかせるからである。最後に荷電粒子と電磁場のラグランジアンとハミルトニアンについて紹介した。これは量子電磁気学の準備のための章である。

解析力学の方程式、ラグランジュ方程式、ハミルトンの正準方程式、ハミルトンヤコビの偏微分方程式というのはニュートンの運動方程式から演繹されたものである。変分法のハミルトンの原理や最小作用の原理もそうである。この中で実際の計算に役立つのはラグランジュ方程式くらいなものである。解析力学も他の学問同様、深く広く研究すれば、キリがない。記述の量は私の知識と飽きの程度に依存している。

わかりやすくなるように、相当な努力はしたつもりである。そして、それはしんどい作業であった。他の本をほとんど参照していないので用語、記号などが異なるかもしれない。又、思わぬ誤りもあるかもしれない。誤りなどを下記のメールアドレスに送っていただければ幸いである。

もし内容がわかりづらければ、それは私が内容をよくわかっていないからであろう。説明の明快さと著者の理解の程度は関係があるのである。

2017 年 12 月

2018 年 10 月 27 日、誤植などの簡単な訂正をしました。内容に変更はありません。

2020 年 8 月 17 日、8 月 27 日、誤植を訂正をしました。内容に変更はありません。

2022 年 10 月　誤植の訂正、簡単な修正、誤りの訂正、追記を行いました。内容自体は変わっていません。誤りの訂正と言うのは主に、行列式が 0 であることが、逆変換可能な必要条件であると勘違いしていたところです。テキストの途中から勘違いしていました。追記はいくつか行いましたが、主に、正準変換のための必要条件についてです。一階偏微分方程式についてのおおよその知識を得たので、その観点から、ハミルトンヤコビの方程式の章を書き換えようかとも思いましたが、大変そうなので、こちらの方は、軽く追記した程度にとどめました。

記号・用語について

このテキストで使われる記号についての一般原則を記す。ただ例外も出てきていると思うので、そのつど文脈で判断して欲しい。

- $\equiv$；右辺で左辺を定義しているとする。右辺を書くのが長いので左辺のように書くという意味である。
- T ；運動エネルギー
- V ；ポテンシャル
- E ；エネルギー
- L ；ラグランジアン
- H ；ハミルトニアン
- S ；ハミルトンヤコビの方程式の解
- W ；時間を含まないハミルトンヤコビの方程式の解
- $\dot{x}, \ddot{x}$ ；$\dfrac{dx}{dt}, \dfrac{d^2x}{dt^2}$
- オイラーの方程式 ；$\dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\right) = \dfrac{\partial f}{\partial x_i}$

目次

第 1 章

数学的準備

この章では解析力学で使う数学について簡単に説明する。この章から読む必要は全くなく、適宜参照してもらえればよいと思う。

1.1　記号・用語の定義

（時間微分）

$x(t)$ を時間 t の関数とする。時間微分 $\frac{dx}{dt}$ を簡潔に

$$\dot{x} \equiv \frac{dx}{dt}$$

と書く。又 2 回微分は

$$\ddot{x} \equiv \frac{d^2x}{dt^2}$$

と書く。

$x(t)$ が時間 t の関数で、その x と $\dot{x}$ と t の関数である $f(x, \dot{x}, t)$ の時間の全微分、df/dt とは

$$\frac{d}{dt}f(x, \dot{x}, t) \equiv \lim_{\Delta t \to 0} \frac{f[x(t+\Delta t), \dot{x}(t+\Delta t), t+\Delta t] - f[x(t), \dot{x}(t), t]}{\Delta t}$$

のことである。これを $\dot{f}$ とも書く。だから $\dot{f}$ は

$$\dot{f} = \frac{\partial f}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial f}{\partial \dot{x}}\ddot{x} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

となる。この右辺に出てきた $\partial f/\partial t$ は

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{f[x(t), \dot{x}(t), t+\Delta t] - f[x(t), \dot{x}(t), t]}{\Delta t}$$

のことである。

（不変量、スカラー）

不変量というものを説明しよう。スカラーと言えばいいのかもしれない。今例えば平面座標 (x, y) に依存する量、例えば温度やポテンシャル、電場等があるとする。例えばポテンシャルとして $V(x, y)$ と書く。その (x, y) を極座標に変換する。すなわち $x = r\cos\theta, y = r\sin\theta$ である。このときポテンシャル V は r と θ に依

存する。そのことを $V(r,\theta)$ と書く。$V(x,y)$ と $V(r,\theta)$ は数学の関数、すなわち、ある数からある数を与える規則（写像）としては、異なるが、このように書く。これは空間の関数である量というのが根底にあり、その空間を表すのが (x,y) だったり、(r,θ) だったりと、異なるということである。このテキストでもこの表記を使う。このような量を不変量と呼び、このような書き方を**不変量表示**と呼ぶことにする。このような表記は物理の文献では当たり前のように使っているのだが、改めて注意してみた。

又、空間座標の変換でないときもこの表記を使う。例えば運動エネルギー T は直交座標では

$$T(x,y,\dot{x},\dot{y}) = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2)$$

で平面極座標では

$$T(r,\theta,\dot{r},\dot{\theta}) = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2+r^2\dot{\theta}^2)$$

であり[*1]、$T(x,y,\dot{x},\dot{y})$ と $T(r,\theta,\dot{r},\dot{\theta})$ は関数自体は異なるが位置と速度に依存する不変量だという意味でこう書く。

1.2 いくつかの恒等式

今後よく使う恒等式を導出しよう。$x_i(t)$ を時間の関数とする。i はそれが何個かあるという意味である。f を x_i と t の関数とする。すなわち $f(x_i,t)$ とする。この $f(x_i,t)$ について幾つか等式を証明する。$\dot{f}$ は

$$\dot{f} = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i}\dot{x}_i + \frac{\partial f}{\partial t} \tag{1.1}$$

となる。$\frac{\partial f}{\partial x}$ と $\frac{\partial f}{\partial t}$ は x_i と t の関数だから **$\dot{f}$ は x_i と $\dot{x}_i$ と t の関数になる**[*2]。そしてこのとき明らかに

$$\frac{\partial \dot{f}}{\partial \dot{x}_k} = \frac{\partial f}{\partial x_k} \tag{1.2}$$

が成り立つ。この式はよく使うし覚えやすい。**f が x_i と t のみの関数で $\dot{x}_i$ の関数ではないときに使える等式である。**左辺は $\dot{x}_k$ 以外の $\dot{x}_i$ と x_i,t を固定、右辺は x_k 以外の x_i と t を固定して偏微分するという意味である。さて式 (1.1) に戻ってそれを $\dot{x}_i$ は固定して x_j で偏微分すると

$$\frac{\partial \dot{f}}{\partial x_j} = \sum_i \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}\dot{x}_i + \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial t} \tag{1.3}$$

となる。一方

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial x_j}\right) = \sum_i \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}\dot{x}_i + \frac{\partial^2 f}{\partial t \partial x_j} \tag{1.4}$$

となる。式 (1.3)(1.4) から

$$\frac{\partial \dot{f}}{\partial x_j} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial x_j}\right) \tag{1.5}$$

[*1] 極座標での運動エネルギーがこうなることは後で導くので、とりあえずそうだと思ってもらえれば良い

[*2] 2022 年 10 月追記：$x_i(t)$ が、例えば $t=0$ から 10 の区間で与えられていれば、f の時間微分（例えば $t=5$ のときの）は、$x_i(t)$ と t で決まると言える。しかし、$x_i(5)$ のみの値だけでは $\dot{f}(t=5)$ の値は定まらない。$\dot{x}_i(5)$ も必要である。つまり、そういう意味で $\dot{f}(t=5)$ は $x_i(5)$ と $\dot{x}_i(5)$ というある瞬間での値、それと t で決まるという意味である。

が成り立つ。すなわち、**時間の全微分と座標 x_i の偏微分は順序を入れ替えても結果は同じ**ということである。この式 (1.5) の右辺に等式 (1.2) を適用すると

$$\frac{\partial \dot{f}}{\partial x_j} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}_j}\right) \tag{1.6}$$

が成り立つことがわかる。これは $\dot{f}$ がオイラーの方程式を必ず満たすことを示している。オイラーの方程式というのは

定義　オイラーの方程式　g を $x_i(t), \dot{x}_i(t), t$ の関数として

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial g}{\partial \dot{x}_j}\right) = \frac{\partial g}{\partial x_j}$$

のことである。今述べた等式は今後もよく使うのでまとめておこう。

定理 1.1　f が $x_i(t)$ と t の関数、すなわち $f(x_i(t), t)$ であるとき、

性質 1　$\dot{f}$ は $x_i, \dot{x}_i, t$ の関数である。

等式 2　$\dfrac{\partial \dot{f}}{\partial \dot{x}_k} = \dfrac{\partial f}{\partial x_k}$　（ドットの消去）

等式 3　$\dfrac{\partial \dot{f}}{\partial x_j} = \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial f}{\partial x_j}\right)$　（時間の全微分と座標偏微分は交換可能）

等式 4　$\dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial \dot{f}}{\partial \dot{x}_j}\right) = \dfrac{\partial \dot{f}}{\partial x_j}$　（$\dot{f}$ はオイラーの方程式を満たす）

例 1.1　ここで直交座標と極座標の変換式 $x = r\cos\theta$ で定理 1.1 の 4 つの関係を確認してみよう。今の場合、定理 1.1 での f, x_i はそれぞれ

$$f \to x \qquad x_1, x_2 \to r, \theta$$

に対応する。まず

$$\dot{x} = \dot{r}\cos\theta - r\sin\theta\cdot\dot{\theta} \tag{1.7}$$

であり、$\dot{x}$ は $r, \theta, \dot{r}, \dot{\theta}$ の関数となっており、確かに性質 1 の関係が成り立っている。又この式から

$$\frac{\partial \dot{x}}{\partial \dot{r}} = \cos\theta$$

一方 $x = r\cos\theta$ から

$$\frac{\partial\, x}{\partial\, r} = \cos\theta$$

よって

$$\frac{\partial \dot{x}}{\partial \dot{r}} = \frac{\partial x}{\partial r} \tag{1.8}$$

これで等式 2 の確認ができた。又

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial x}{\partial r}\right) = -\sin\theta\cdot\dot{\theta}$$

一方、式 (1.7) から

$$\frac{\partial\,\dot{x}}{\partial\,r} = -\sin\theta\cdot\dot{\theta}$$

よって

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,x}{\partial\,r}\right) = \frac{\partial\,\dot{x}}{\partial\,r}$$

これで等式 3 の確認ができた。そして式 (1.8) をこの左辺に入れれば等式 4 が確認できる。【例終】

1.3　オイラーの式の座標変換

もう一つ解析力学でよく使う等式を証明しよう

定理 1.2　いくつかの時間の関数 $x_i(t)$ があり、x_i はいくつかの変数 q_α と t の関数だとしよう。すなわち

$$\begin{aligned} x_1 &= x_1(q_1, q_2, \cdots, t) \\ x_2 &= x_2(q_1, q_2, \cdots, t) \\ &\cdots\cdots\cdots \\ &\cdots\cdots\cdots \end{aligned} \tag{1.9}$$

だとしよう。$x_1 = x_1(q_1, q_2, \cdots, t)$ というのは x_1 という量は $q_1, q_2, \cdots, t$ の関数だという意味である。f を $x_i, \dot{x}_i, t$ の関数としよう。これは f は最大でも $x_i, \dot{x}_i, t$ にしか依存しないという意味で $\ddot{x}$ 以上は含まないという意味である。だから $f = \dot{x}^2 + t$ というように x を含まなくてもよい。このとき

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,f}{\partial\,\dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial\,f}{\partial\,q_\alpha} = \sum_i \frac{\partial\,x_i}{\partial\,q_\alpha}\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,f}{\partial\,\dot{x}_i}\right) - \frac{\partial\,f}{\partial\,x_i}\right] \tag{1.10}$$

が成り立つ。

式 (1.10) の左辺は

$$f = f(q_\alpha, \dot{q}_\alpha, t)$$

と考え、例えば $\frac{\partial\,f}{\partial\,\dot{q}_1}$ なら $\dot{q}_1$ 以外の $\dot{q}_\alpha$ と q_α, t を固定して偏微分するという意味である。右辺は $f = f(x_i, \dot{x}_i, t)$ と考えての偏微分である。x_i と q_α は座標変換の関係と考えてもらえばよいのだが、必ずしも q_α が x_i で表される必要はない。すなわち式 (1.9) の逆変換は不可能でもよい。この式 (1.10) の意味は、左辺も右辺も $q_\alpha, \dot{q}_\alpha, \ddot{q}_\alpha, t$ で表されるのだが、両辺とも $q_\alpha, \dot{q}_\alpha, \ddot{q}_\alpha, t$ で表したときに、この変数の恒等式になるということである。式 (1.10) はテンソルの言葉を使えば、オイラーの方程式の式の部分は共変ベクトルとして変換するということである。証明は淡々と式変形するだけである。

【証明】

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,f}{\partial\,\dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial\,f}{\partial\,q_\alpha} &= \frac{d}{dt}\left(\sum_i \frac{\partial\,\dot{x}_i}{\partial\,\dot{q}_\alpha}\frac{\partial\,f}{\partial\,\dot{x}_i}\right) - \left(\sum_i \frac{\partial\,x_i}{\partial\,q_\alpha}\frac{\partial\,f}{\partial\,x_i} + \sum_i \frac{\partial\,\dot{x}_i}{\partial\,q_\alpha}\frac{\partial\,f}{\partial\,\dot{x}_i}\right) \\ &= \sum_i \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,\dot{x}_i}{\partial\,\dot{q}_\alpha}\right)\frac{\partial\,f}{\partial\,\dot{x}_i} + \sum_i \frac{\partial\,\dot{x}_i}{\partial\,\dot{q}_\alpha}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,f}{\partial\,\dot{x}_i}\right) - \sum_i \frac{\partial\,x_i}{\partial\,q_\alpha}\frac{\partial\,f}{\partial\,x_i} - \sum_i \frac{\partial\,\dot{x}_i}{\partial\,q_\alpha}\frac{\partial\,f}{\partial\,\dot{x}_i} \end{aligned}$$

第 2 項で定理 1.1 の等式 2 のドットの消去

$$\frac{\partial\,\dot{x}_i}{\partial\,\dot{q}_\alpha} = \frac{\partial\,x_i}{\partial\,q_\alpha}$$

を使い、第 2 項と第 3 項をまとめ、第 1 項と第 4 項をまとめると

$$\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\right)-\frac{\partial f}{\partial x_i}\right]+\sum_i \frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \dot{x}_i}{\partial \dot{q}_\alpha}\right)-\frac{\partial \dot{x}_i}{\partial q_\alpha}\right]$$

となる。そしてこの第 2 項は $\dot{x}_i$ が時間の全微分なので定理 1.1 の等式 4 の $\dot{f}$ を $\dot{x}_i$ と考えれば

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \dot{x}_i}{\partial \dot{q}_\alpha}\right)-\frac{\partial \dot{x}_i}{\partial q_\alpha}=0$$

である。よって式 (1.10) が成り立つわけである。【証明終】

定理 1.2 から、ただちに

定理 1.3　ある座標 x 系で $f(x,\dot{x},t)$ に対してオイラーの方程式が成り立ち、その x 座標を別の座標 q で表せるなら、q 座標系でも $f(q,\dot{q},t)$ に対してオイラーの方程式が成り立つ。ここでの f は不変量表示とする。

といえる。

例 1.2

$$f=\dot{x}^2+x^2 \qquad x=q^2$$

として、この等式が成り立っていることを確認してみよう。まず

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}}\right)-\frac{\partial f}{\partial x}=2\ddot{x}-2x$$

である。そして

$$\dot{x}=2q\dot{q} \qquad \ddot{x}=2\dot{q}^2+2q\ddot{q} \qquad \frac{\partial x}{\partial q}=2q$$

なので式 (1.10) の右辺を q 座標系で表すと

$$\begin{aligned}\frac{\partial x}{\partial q}\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}}\right)-\frac{\partial f}{\partial x}\right]&=2q(2\ddot{x}-2x)\\&=2q\left[2(2\dot{q}^2+2q\ddot{q})-2(q^2)\right]\\&=8q\dot{q}^2+8q^2\ddot{q}-4q^3\end{aligned}$$

となる。一方 f を q 座標系で表すと

$$\begin{aligned}f&=\dot{x}^2+x^2=(2q\dot{q})^2+(q^2)^2\\&=4q^2\dot{q}^2+q^4\end{aligned}$$

だから式 (1.10) の左辺は

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{q}}\right)-\frac{\partial f}{\partial q}&=\frac{d}{dt}(8q^2\dot{q})-(8q\dot{q}^2+4q^3)\\&=16q\dot{q}^2+8q^2\ddot{q}-8q\dot{q}^2-4q^3\\&=8q\dot{q}^2+8q^2\ddot{q}-4q^3\end{aligned}$$

となり左辺と右辺が $q,\dot{q},\ddot{q}$ の恒等式になっていることが確認できた。もちろん、これを x 座標系で表せば $x,\dot{x},\ddot{x}$ の恒等式になっているはずである。【例終】

1.4　陰関数定理

次章以降でよく使うのでここに陰関数定理を紹介しよう。x_1, x_2 から y_1, y_2 への写像を考える。

$$y_1 = f_1(x_1, x_2) \qquad y_2 = f_2(x_1, x_2)$$

で微小変位の間には

$$\begin{pmatrix} \Delta y_1 \\ \Delta y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{pmatrix}$$

の関係がある。ここで x_1, x_2 のある領域で行列

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \end{pmatrix}$$

の行列式が 0 でないときは、その領域では $\Delta y_1, \Delta y_2$ から $\Delta x_1, \Delta x_2$ への写像を一意的に定めることができる。これは線形代数の逆行列が存在する場合との類似で考えればよく分かるであろう。微小変位間での逆関数があるということは、行列式が 0 でない領域では y_1, y_2 から x_1, x_2 への写像が一意的に定まるということである。このことは変数が何個あっても同じなので

定理 1.4　陰関数定理

独立変数 x_i と従属変数 y_i の個数は同じで、x_i から y_i への写像

$$y_i = f_i(x_i)$$

で

$$\det \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right| \neq 0$$

なら y_i から x_i への写像を一意的に定めることができる[a]。

[a] 2022 年 10 月追記：尚、この逆は言えない。$f(x) = x^3$ なら、$df/dx = 3x^2$ であり、$x = 0$ で $df/dx = 0$ となるが、逆関数を一意的に定められる。

x_1, x_2, z から y_1, y_2 への写像

$$y_1 = f_1(x_1, x_2, z) \qquad y_2 = f_2(x_1, x_2, z)$$

で x_1, x_2, z のある領域で行列

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \end{pmatrix}$$

の行列式が 0 でないとき、その領域では z を固定すれば陰関数定理より y_1, y_2 から x_1, x_2 への写像が一意的に定まる。z を変化させればこの写像も変わるので y_1, y_2, z から x_1, x_2 への写像が一意的に定まる。このことは変数が何個あっても同じである。

定理 1.5　陰関数定理の系
x_i と y_i の個数は同じで、x_i, z_i から y_i への写像

$$y_i = f_i(x_i, z_i)$$

で

$$\det\left|\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right| \neq 0 \tag{1.11}$$

なら y_i, z_i から x_i への写像を一意的に定めることができる。

次の定理は第 5 章、第 6 章で使うのだが話のついでにここに載せることにした。

定理 1.6　x_i と a_i の個数は同じとする。x_i, a_i のある関数 $f(x, a)$ を使って

$$\frac{\partial f(x,a)}{\partial x_i} = y_i \qquad\qquad \frac{\partial f(x,a)}{\partial a_i} = b_i$$

と x, a から y, b への写像を定めるとする。このとき $f(x, a)$ が

$$\det\left|\frac{\partial^2 f}{\partial a_j \partial x_i}\right| \neq 0 \tag{1.12}$$

を満たすなら、変数 (x, a) と変数 (x, y) と変数 (a, b) はどの組をとっても互いに逆変換可能な変換となる。すなわち $(x, y) \leftrightarrow (x, a) \leftrightarrow (a, b)$ となる。

【証明】x, a から x, y への写像は単に

$$x_i = x_i \qquad\qquad y_i = \frac{\partial f(x,a)}{\partial x_i}$$

なので、存在する。その逆の x, y から x, a への写像が存在するかは、a が x, y で表されるかどうかということである。それは $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ を定理 1.5 の f_i の役だと考えれば、式 (1.12) が成り立つということは式 (1.11) が成り立つということだから a は x, y で表せる。すなわち x, y から x, a への写像が存在する。だから (x, a) と (x, y) は互いに逆変換可能である。a, b と x, y の役割は全く同じなので $\frac{\partial f(x,a)}{\partial a_i} = b_i$ を使えば (x, a) と (a, b) も逆変換可能だと言える。【証明終】

1.5　恒等式について

恒等式についての理解は解析力学の理解の鍵 だと思う。今から当たり前のことを述べるが大事なことである。

$$(x + y)^2 = x^2 + 2xy + y^2$$

という式は x, y がどんな値でも成り立つ。そういう式を x, y についての恒等式という。この式は

$$(x + y)^2 - (x^2 + 2xy + y^2) = 0$$

と同値なので、右辺が 0 である恒等式について説明することにする。

$$x = \alpha + \beta \qquad\qquad y = \alpha - \beta$$

という関係で結ばれているとしよう。これを上の式に代入した式

$$\left[(\alpha+\beta)+(\alpha-\beta)\right]^2-\left[(\alpha+\beta)^2+2(\alpha+\beta)(\alpha-\beta)+(\alpha-\beta)^2\right]=0$$

は α,β がどんな値でも成り立つので、この式は α,β の恒等式である。すなわち、$f(x,y)=0$ が x,y についての恒等式であるとき、この x,y が別の変数 α,β で表した $f(\alpha,\beta)=0$ という式も α,β の恒等式になる。今述べたことを 2 変数でなく一般化して言うと以下のことが言える。

定理 1.7　x_i から y_i への変換は逆変換可能だとする。このとき

$$f(x_i)=0$$

が x_i についての恒等式であることと

$$f(y_i)=0$$

が y_i についての恒等式となることは同値である。ここで f は不変量表示とする。

今 $x(t),y(t)\to\alpha(t),\beta(t)$ への変換が逆変換可能とする。変換には時間 t を含んでいても良い。このとき $x,y,\dot{x},\dot{y}$ も $\alpha,\beta,\dot{\alpha},\dot{\beta},t$ で表せる。というのは $x(t),y(t)\to\alpha(t),\beta(t)$ への変換が逆変換可能なので

$$x=x(\alpha,\beta,t)\qquad\qquad y=y(\alpha,\beta,t)$$

とあらわせる。そして $\dot{x},\dot{y}$ は

$$\dot{x}=\frac{\partial x}{\partial\alpha}\dot{\alpha}+\frac{\partial x}{\partial\beta}\dot{\beta}+\frac{\partial x}{\partial t}$$

$$\dot{y}=\frac{\partial y}{\partial\alpha}\dot{\alpha}+\frac{\partial y}{\partial\beta}\dot{\beta}+\frac{\partial y}{\partial t}$$

と表せる。だから $x,y,\dot{x},\dot{y}$ は $\alpha,\beta,\dot{\alpha},\dot{\beta},t$ で表せる。同様に、$x(t),y(t)\to\alpha(t),\beta(t)$ への変換があるというのだから、当然

$$\alpha=\alpha(x,y,t)\qquad\qquad \beta=\beta(x,y,t)$$

と表せる。そして $\dot{\alpha},\dot{\beta}$ は

$$\dot{\alpha}=\frac{\partial\alpha}{\partial x}\dot{x}+\frac{\partial\alpha}{\partial y}\dot{y}+\frac{\partial\alpha}{\partial t}$$

$$\dot{\beta}=\frac{\partial\beta}{\partial x}\dot{x}+\frac{\partial\beta}{\partial y}\dot{y}+\frac{\partial\beta}{\partial t}$$

と表せる。だから $\alpha,\beta,\dot{\alpha},\dot{\beta}$ は $x,y,\dot{x},\dot{y},t$ で表せる。だから $x,y,\dot{x},\dot{y}\to\alpha,\beta,\dot{\alpha},\dot{\beta}$ の変換も逆変換可能であるというわけである。

今は 2 変数の場合を説明したが、このことは何変数でも成り立つことである。一般には以下のように言える。

定理 1.8　$x_i(t)$ から $y_i(t)$ への変換は逆変換可能だとする。この変換は時間を含んでいても良い。この時 $x_i\dot{x}_i$ から $y_i,\dot{y}_i$ への変換も逆変換可能である。

そして定理 1.7 と定理 1.8 を組み合わせれば以下のことが言える。

定理 1.9　$x_i(t)$ から $y_i(t)$ への変換は逆変換可能だとする。この変換は時間を含んでいても良い。

$$f(x_i, \dot{x}_i, t) = 0$$

が変数 $x_i, \dot{x}_i, t$ について恒等式であることと

$$f(y_i, \dot{y}_i, t) = 0$$

が変数 $y_i, \dot{y}_i, t$ について恒等式になることは同値である。ここでも f は不変量表示とする。

1.6　偏微分についての注意

x と y の関数 $f(x,y)$ が

$$f(x,y) = x + y$$

のとき

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 1$$

である。

$$x = x \qquad\qquad y = x + z$$

というように x, y から x, z へ変数変換すると f は

$$f = x + y = x + x + z = 2x + z$$

と表される。だから不変量表示では

$$f(x,z) = 2x + z$$

である。このとき

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2$$

である。同じ x で微分するのでも f を何で表すかによって値が異なることに注意して欲しい。最初のは f という量を x, y で表したときの x による偏微分であり、それを明示したいときは

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}$$

と書く。次のは f という量を x, z で表したときの x による偏微分であり、

$$\frac{\partial f(x,z)}{\partial x}$$

と書く。ただ何で表しているかが明白なときは単に

$$\frac{\partial f}{\partial x}$$

とも書く。

第 2 章

ラグランジュ方程式

最初に直交座標でのラグランジュ方程式というものを紹介する。ラグランジュ方程式とは何かというものを知りたければそこだけ読めばよい。その後、一般の座標でのラグランジュ方程式を紹介する。例を多く入れたが、それは抽象的な式変形だけでは意味がどこまで伝わるか不安であるし、言葉だけで概念は説明できないという考えからである。例から概念をくみ取ってもらいたい。本文の説明だけで意味がよく分かるなら、例はどんどん飛ばせば良いと思う。

2.1 ラグランジュ方程式の紹介

まず簡単な例でラグランジュ方程式というものを紹介しよう。直線上を運動する質点の場合の運動方程式は

$$m\ddot{x} = F \tag{2.1}$$

である。$\ddot{x}$ は解析力学独特の記号で

$$\dot{x} \equiv \frac{dx}{dt}, \qquad \ddot{x} \equiv \frac{d^2x}{dt^2}$$

のことである。運動エネルギー

$$T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2$$

を使うと、$m\ddot{x}$ は

$$m\ddot{x} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial T}{\partial x} \tag{2.2}$$

と書き換えられることは容易にわかろう[*1]。だから式 (2.1) は

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial T}{\partial x} = F$$

と同じことである。これをラグランジュ方程式という。これは単に運動方程式を書き換えただけである。力が $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$ とポテンシャル V から導かれるときは

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial T}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

[*1] $\frac{\partial T}{\partial x}$ は今の場合必要ないが今後必要なので入れた。

となる。V は $\dot{x}$ を含んでなく、T は x を含んでいないので、さらに

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,(T-V)}{\partial\,\dot{x}}\right)=\frac{\partial\,(T-V)}{\partial\,x}$$

と書き換えられる。ラグランジアン

$$L\equiv T-V$$

というものを定義し、これを使うと

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{x}}\right)=\frac{\partial\,L}{\partial\,x}$$

と書き換えられる。これもラグランジュ方程式という。

今の話は 1 次元でなくとも、又、粒子が何個あっても同様で、今と全く同じように以下のことが言える。

定理 2.1 （直交座標でのラグランジュ方程式）
質点が n 個のときの $3n$ 個の直交座標の運動方程式

$$m_i\ddot{x}_i=F_i \qquad (i=1,2,3\cdots 3n) \tag{2.3}$$

は運動エネルギー

$$T=\sum_{i=1}^{3n}\frac{1}{2}m_i\dot{x}_i^2$$

を使うと、

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,T}{\partial\,\dot{x}_i}\right)-\frac{\partial\,T}{\partial\,x_i}=F_i \tag{2.4}$$

と書き換えられる。そして力が $F_i=-\frac{\partial\,V}{\partial\,x_i}$ とポテンシャル V から導かれるときはラグランジアン

$$L\equiv T-V$$

というものを定義し、それを使うと

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{x}_i}\right)=\frac{\partial\,L}{\partial\,x_i} \tag{2.5}$$

と書ける。式 (2.4)(2.5) もラグランジュ方程式という。式 (2.5) は式 (2.4) の特別な場合である。

今は直交座標でこのラグランジュ方程式が成り立つことを示したのだが、実はどんな座標でも成り立つ[*2]。それを今から述べていく。

2.2 一般座標でのラグランジュ方程式

さて準備ができたので一般座標でのラグランジュ方程式というものを説明しよう。一般座標というのは、直交座標を含めた任意の座標という意味である。ニュートンの運動法則を直交座標で書くと

$$m\ddot{x}=F$$

である。今、質点が n 個あるとすると、この式は $3n$ 個あることになる。各式に番号をふると

$$m_i\ddot{x}_i=F_i \qquad i=1,2\cdots 3n \tag{2.6}$$

[*2] 細かいことを言えば式 (2.4) の右辺は少し異なる。

と書ける。さて、この x_i の可能な運動を $3n$ 個又はそれより少ない変数 q_α と t の関数で表せたとしよう。すなわち

$$
\begin{aligned}
&x_1 = x_1(q_1, q_2, \cdots q_k, t)\\
&x_2 = x_2(q_1, q_2, \cdots q_k, t)\\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\
&x_{3n} = x_{3n}(q_1, q_2, \cdots q_k, t)
\end{aligned}
$$

ということである。q_α が $3n$ 個あるときとは、拘束条件がないときである。拘束条件が 1 つあれば q_α は $3n-1$ 個、2 個なら q_α は $3n-2$ 個、拘束条件が 1 つ増えるごとに q_α の自由度が 1 つ減るわけである。拘束条件とは、例えば粒子が球面上しか動けないとか、2 つの粒子の距離が不変に保たれているなどのように運動を制限するものである。さて式 (2.6) に $\frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}$ を掛けて、i で和をとった

$$
\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i = \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} F_i \tag{2.7}
$$

が実質的なラグランジュ方程式の内容を表す式である。というのは、この左辺を、恒等式に置き換えたものがラグランジュ方程式だからである。もちろん、世間一般ではラグランジュ方程式とは呼ばれてはいない。これは行列で書くと

$$
\begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial q_1} & \frac{\partial x_2}{\partial q_1} & \cdots \\ \frac{\partial x_1}{\partial q_2} & \frac{\partial x_2}{\partial q_2} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} m_1 \ddot{x}_1 \\ m_2 \ddot{x}_2 \\ \cdots \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial q_1} & \frac{\partial x_2}{\partial q_1} & \cdots \\ \frac{\partial x_1}{\partial q_2} & \frac{\partial x_2}{\partial q_2} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \cdots \end{pmatrix}
$$

となる。この左辺を変形しよう。式 (2.2) で見たように

$$
m_i \ddot{x}_i = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i}\right) - \frac{\partial T}{\partial x_i}
$$

と変形できた。だがら

$$
\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i = \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i}\right) - \frac{\partial T}{\partial x_i}\right]
$$

と書き換えられる。T は $\dot{x}_i$ の関数であり、$\ddot{x}_i$ 以上を含んでいないので定理 1.2 が使える。これを使うと

$$
\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i}\right) - \frac{\partial T}{\partial x_i}\right]
$$

である。だから式 (2.7) の左辺は

(恒等式)

$$
\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} \tag{2.8}
$$

と書き換えられる。これは最も重要な恒等式である。一方式 (2.7) の右辺は一般化力というもので

$$
f_\alpha \equiv \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} F_i \tag{2.9}
$$

と定義される。恒等式 (2.8) と定義式 (2.9) を使うと式 (2.7) は

(ラグランジュ方程式)

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = f_\alpha \tag{2.10}$$

と書き換えられる。この方程式をラグランジュ方程式という。

ところで

$$\sum_i F_i \Delta x_i$$

は変位が Δx_i のときの力 F_i がする仕事量である。Δx_i を Δq_α の変位に対応する変位とし、この式を Δq_α で割ると

$$\sum_i F_i \frac{\Delta x_i}{\Delta q_\alpha} \qquad \Longrightarrow \qquad \sum_i F_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}$$

である。よって

定理 2.2　一般化力 f_α とは座標 q_α の単位変位あたりの仕事量である。

と言える。だから q_α の変位に対して仕事をしないような力は一般化力から削除してよい。

2.3　例

例 2.1　平面極座標でのラグランジュ方程式

平面極座標でのラグランジュ方程式 (2.10) を作ってみよう。

$$x = r\cos\theta \qquad y = r\sin\theta$$

とすると、

$$\dot{x} = \dot{r}\cos\theta - r\sin\theta\cdot\dot{\theta} \qquad \dot{y} = \dot{r}\sin\theta + r\cos\theta\cdot\dot{\theta}$$

となる。だから運動エネルギー T は

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) \\ &= \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) \end{aligned} \tag{2.11}$$

となる。だからラグランジュ方程式 (2.10) は r 成分に関しては

$$m\ddot{r} - mr\dot{\theta}^2 = f_r \tag{2.12}$$

となる。ここで f_r は r 成分に関する一般化力。θ 成分に関しては

$$\frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) = f_\theta \tag{2.13}$$

となる。ここで f_θ は θ 成分に関する一般化力。【例終】

例 2.2　平面極座標での恒等式 (2.8) の確認
ラグランジュ方程式 (2.10) を導くにあたって

$$\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} \tag{2.14}$$

という恒等式を使った。これが極座標で成り立っていることを確認してみよう。左辺は今の場合、行列で表せば

$$m \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix} \tag{2.15}$$

である。

$$x = r\cos\theta \qquad y = r\sin\theta$$

を時間で 2 階微分すると

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= \ddot{r}\cos\theta - 2\,\dot{r}\,\dot{\theta}\sin\theta - r\,\ddot{\theta}\sin\theta - r\,\dot{\theta}^2\cos\theta \\ \ddot{y} &= \ddot{r}\sin\theta + 2\,\dot{r}\,\dot{\theta}\cos\theta + r\,\ddot{\theta}\cos\theta - r\,\dot{\theta}^2\sin\theta \end{aligned} \tag{2.16}$$

となる。又

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -r\sin\theta & r\cos\theta \end{pmatrix} \tag{2.17}$$

である。式 (2.16)(2.17) を式 (2.15) に代入すると

$$m \begin{pmatrix} \ddot{r} - r\dot{\theta}^2 \\ r^2\ddot{\theta} + 2r\dot{r}\dot{\theta} \end{pmatrix}$$

となる。これはそれぞれ、式 (2.12) と (2.13) の左辺に一致している。恒等式 (2.14) が平面極座標で成り立っていることが確認できた。【例終】

例 2.3　重心・相対座標のラグランジュ方程式
粒子が 2 つの場合の、いわゆる重心・相対座標のラグランジュ方程式 (2.10) を作ろう。簡単のため 1 次元とする。重心座標 x_g、相対座標 x_s は

$$\text{（重心座標）}\quad x_g = \frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1 + m_2} \qquad\qquad \text{（相対座標）}\quad x_s = x_2 - x_1$$

である。添字の $1, 2$ は粒子を区別する指標。これを逆に解くと

$$x_1 = x_g - \frac{m_2}{m_1 + m_2}x_s \qquad x_2 = x_g + \frac{m_1}{m_1 + m_2}x_s \tag{2.18}$$

である。だから運動エネルギー T は

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2}m_1\left(\dot{x}_g - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\dot{x}_s\right)^2 + \frac{1}{2}m_2\left(\dot{x}_g + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\dot{x}_s\right)^2 \\ &= \frac{1}{2}(m_1 + m_2){\dot{x}_g}^2 + \frac{1}{2}\frac{m_1m_2}{m_1 + m_2}{\dot{x}_s}^2 \end{aligned} \tag{2.19}$$

となる。だからラグランジュ方程式 (2.10) の左辺はそれぞれ

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_g}\right)-\frac{\partial T}{\partial x_g}=(m_1+m_2)\ddot{x}_g \qquad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_s}\right)-\frac{\partial T}{\partial x_s}=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\ddot{x}_s \tag{2.20}$$

となる。重心座標と相対座標の一般化力 f_g, f_s は、粒子 1,2 にかかる力をそれぞれ F_1, F_2 とすると

$$\begin{pmatrix} f_g \\ f_s \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial x_g} & \frac{\partial x_2}{\partial x_g} \\ \frac{\partial x_1}{\partial x_s} & \frac{\partial x_2}{\partial x_s} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}$$

であり、式 (2.18) より

$$\begin{pmatrix} f_g \\ f_s \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\dfrac{m_2}{m_1+m_2} & \dfrac{m_1}{m_1+m_2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} F_1+F_2 \\ -\dfrac{m_2}{m_1+m_2}F_1+\dfrac{m_1}{m_1+m_2}F_2 \end{pmatrix}$$

となる。だからラグランジュ方程式 (2.10) は

$$(m_1+m_2)\ddot{x}_g=F_1+F_2 \qquad \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\ddot{x}_s=-\frac{m_2}{m_1+m_2}F_1+\frac{m_1}{m_1+m_2}F_2$$

となる。【例終】

例 2.4　重心相対座標での恒等式 (2.8) の確認

再び恒等式

$$\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}m_i\ddot{x}_i=\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right)-\frac{\partial T}{\partial q_\alpha}$$

が重心相対座標で成り立っていることを確認してみよう。左辺は

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial x_g} & \frac{\partial x_2}{\partial x_g} \\ \frac{\partial x_1}{\partial x_s} & \frac{\partial x_2}{\partial x_s} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} m_1\ddot{x}_1 \\ m_2\ddot{x}_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\dfrac{m_2}{m_1+m_2} & \dfrac{m_1}{m_1+m_2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} m_1\ddot{x}_1 \\ m_2\ddot{x}_2 \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} m_1\ddot{x}_1+m_2\ddot{x}_2 \\ -\dfrac{m_2m_1\ddot{x}_1}{m_1+m_2}+\dfrac{m_1m_2\ddot{x}_2}{m_1+m_2} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} (m_1+m_2)\ddot{x}_g \\ \dfrac{m_1m_2}{m_1+m_2}\ddot{x}_s \end{pmatrix}$$

となり、式 (2.20) で計算したものと一致していることがわかる。【例終】

2.4　力が、ポテンシャルからの力と仕事をしない力から構成されている場合

今、力が、ポテンシャルからの力と可能な変位に対して仕事をしない力の和で構成されている場合を考えよう。すなわち

条件 1　力の直交座標成分 F_i が

$$F_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} + \mathcal{K}_i$$

と書けて、K_i は、q_α の変位に対して仕事をしない、すなわち

$$\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}\mathcal{K}_i = 0 \tag{2.21}$$

を満たす

としよう。このとき一般化力 f_α は

$$f_\alpha = \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}\left(-\frac{\partial V}{\partial x_i} + \mathcal{K}_i\right) = -\frac{\partial V}{\partial q_\alpha}$$

となってくれる。だからラグランジュ方程式 (2.10) は

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = -\frac{\partial V}{\partial q_\alpha} \tag{2.22}$$

となる。この条件 1 を満たす場合は非常に多い*3。その結果ラグランジュ方程式の一般化力が $-\frac{\partial V}{\partial q_\alpha}$ と単純なものになる。**これこそが $m_i\ddot{x}_i = F_i$ に $\frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}$ を掛けて、i で和をとった理由である。**もしこのようにラグランジュ方程式の一般化力が簡単にならないなら、$\frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}$ を掛ける必要など全くなく、$\frac{\partial q_\alpha}{\partial x_i}$ でもいいいし、又は他の数でもよいのである。さてラグランジアン L を

$$L \equiv T - V$$

と定義すると式 (2.22) は

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}$$

と書ける。この式はラグランジュ方程式として最もポピュラーな形である。これは式 (2.10) の特別な場合なのだが、普通、ラグランジュ方程式といえばこの式のことである。まとめると

*3 拘束力は私の知る限り必ず式 (2.21) を満たす。

定理 2.3　(ラグランジュ方程式)
系が条件 1 を満たすときはラグランジュ方程式 (2.10) は

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) \equiv \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \tag{2.23}$$

と書ける。ここで L はラグランジアンといい

$$L = T - V$$

で定義される。

2.5　ラグランジュ方程式の例

例 2.5　中心力ポテンシャル
例えば力が万有引力のように r のみの関数のポテンシャル V から導かれるときはラグランジュ方程式として式 (2.23) が使える。運動エネルギーとして式 (2.11) の結果を使うと、ラグランジアンは、

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - V(r) \tag{2.24}$$

となる。r 成分のラグランジュ方程式は

$$m\ddot{r} = mr\dot{\theta}^2 - \frac{\partial V}{\partial r} \tag{2.25}$$

θ 成分に関しては

$$\frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) = 0$$

となる。尚、θ 成分のラグランジュ方程式は角運動量が一定であることを述べている。【例終】

例 2.6　2 点間の距離に依存するポテンシャル
2 点間の距離のみに依存するポテンシャルからの力でそれ以外はないとき。例えば 2 つの粒子がバネでつながれているときなどである。このときもラグランジュ方程式として式 (2.23) が使える。1 次元とすると重心・相対座標のラグランジアンは式 (2.19) を使って

$$L = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{x}_g^2 + \frac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\dot{x}_s^2 - V(x_s)$$

となる。だからラグランジュ方程式は

$$(m_1 + m_2)\ddot{x}_g = 0 \qquad \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\ddot{x}_s = -\frac{\partial V}{\partial x_s}$$

となる。【例終】

例 2.7　拘束力のある運動、半径一定
図 2.1 のように一端が固定されたひもに結び付けられた質点があるとしよう。この場合運動は θ のみによって表される。力は糸の張力なので運動方向に直角で仕事をしない。だからラグランジュ方程式として式 (2.23) が使える。平面極座標でのラグランジアンは式 (2.24) で $\dot{r} = 0, V = 0$ とした

$$L = \frac{1}{2}m(r^2\dot{\theta}^2)$$

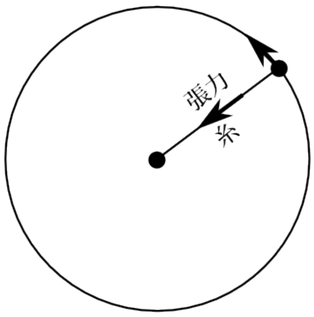

図 2.1　糸の張力によって円上を運動する粒子。拘束力である糸の張力は仕事をしない。

である。だからラグランジュ方程式は

$$mr^2\ddot{\theta} = 0 \tag{2.26}$$

となる。

拘束力を求めてみよう。

$$m\ddot{x} = F_x \qquad m\ddot{y} = F_y$$

に式 (2.26) の方程式の解を入れて F_x, F_y を求めれば良い。今の場合

$$x = r\cos\theta \qquad y = r\sin\theta$$

を $\dot{r} = \ddot{\theta} = 0$ に注意して微分すると

$$F_x = m\ddot{x} = -mr\dot{\theta}^2\cos\theta \qquad F_y = m\ddot{x} = -mr\dot{\theta}^2\sin\theta$$

となり、張力である F の大きさは $mr\dot{\theta}^2$ で向きは回転の中心方向だとわかる[*4]。【例終】

例 2.8　拘束力のある運動、2 点間の距離一定

今、2 つの質点の距離が変わらないという拘束条件があるとしよう。2 つの質点が堅い棒で結ばれているよう

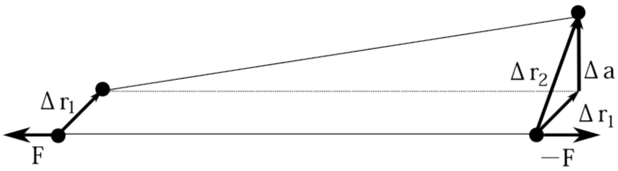

図 2.2　2 点間の距離を一定に拘束する力は仕事をしない。

な場合である。2 つの質点が互いに及ぼす力は向きが反対で大きさは等しい。力の方向は質点を結ぶ直線上で

[*4] しかし今の場合別の方法でも拘束力を求めることができる。3.2 の例 3.1 で述べるが、r 成分の一般化力 f_r というのは、力の半径方向の成分（正射影）となっている。だから f_r は糸の張力になっているのである。そして式 (2.12) から

$$f_r = -mr\dot{\theta}^2$$

と求まる。

ある。この内力が可能な変位に対して仕事をしないことを示そう。図 2.2 のように一方の質点の微小変位を $\Delta\mathbf{r}_1$、もう一方の質点の微小変位を $\Delta\mathbf{r}_2$ とする。$\Delta\mathbf{r}_2$ を

$$\Delta\mathbf{r}_2 = \Delta\mathbf{r}_1 + \Delta\mathbf{a}$$

と分解しよう。すなわち、質点 1 の微小変位とそれ以外に分けるのである。質点 1 にかかる内力を $\mathbf{F}$ とすると質点 2 にかかる内力は $-\mathbf{F}$ である。可能な微小変位に対する仕事は

$$\mathbf{F}\cdot\Delta\mathbf{r}_1 - \mathbf{F}\cdot(\Delta\mathbf{r}_1 + \Delta\mathbf{a}) = -\mathbf{F}\cdot\Delta\mathbf{a}$$

である。$\Delta\mathbf{a}$ は質点 1 を固定して質点 2 を、2 つの質点の距離を一定のまま動かすわけだから（図 2.2 参照)、2 つの質点を結ぶ線に直交する。すなわち $\mathbf{F}$ と直交する。よって内力は可能な変位に対して仕事をしない。だから、ラグランジュ方程式では、2 つの質点間の力は一般化力に入れなくてよい。このことは応用性が高い。剛体は質点間の距離が変わらない。だから剛体の内力は一般化力に入れなくてよい。

1 次元で 2 点間の距離が一定という拘束力があり、それ以外の力がないとき、この拘束力は仕事をしないのでラグランジュ方程式として式 (2.23) が使える。相対・重心座標でのラグランジアンは式 (2.19) の $\dot{x}_s = 0$ の場合で

$$L = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{x}_g^2$$

である。だからラグランジュ方程式は

$$(m_1 + m_2)\ddot{x}_g = 0$$

となる。【例終】

2.6　ラグランジアンの定義再考、時間を含むラグランジアン

この節では少し細かい話をするので飛ばしてもらっても一向に差し支えない。今までラグランジアンを $T - V$ だと安易に定義してきた。それは正しいのだが、少しそのことを反省してみよう。ラグランジアンの構成要素の運動エネルギー T についてまず考えよう。ある瞬間の運動エネルギーというのは慣性系ごとに値が異なる。例えばある慣性系で粒子が静止していたとすると運動エネルギーは 0 だが、その慣性系に対して速度 u で等速運動している慣性系から見れば、その粒子の運動エネルギーは $\frac{1}{2}mu^2$ である。次にもう一つのラグランジアンの構成要素であるポテンシャル V について考えよう。ある粒子のある瞬間でのポテンシャルというのはどの座標系でも同じである。これは同じというよりもポテンシャルというものは定義からして同じものなのである。そういうわけで、ラグランジアンというのは慣性系ごとに異なる値を持つ。だからラグランジアンというものは、どの慣性系の運動エネルギーを採用しているかにも言及しなければならない。しかし通常はそんなことは全く気にしなくて良い。それは基本的にはその座標が張り付いている慣性系の運動エネルギーを採用すればよいからである。

次に時間を含むラグランジアンというものについて述べよう。まず運動エネルギーについてまず考えよう。簡単のために 1 次元で考える。慣性系に張り付いた単位座標で運動エネルギーは $\frac{1}{2}m\dot{x}^2$ である。この座標に対して

$$x' = x + t^2$$

というように変換すると、速度の変換は

$$\dot{x}' = \dot{x} + 2t$$

となる。速度の変換も時間を含むことになり、運動エネルギーはこの座標系で表すと $\frac{1}{2}m(\dot{x}'-2t)^2$ と、時間を含むことになる。慣性系に固定された単位座標との座標変換で時間を含むと必ず運動エネルギーに時間を含むようになるかというと、そんなことはない。要は速度の変換に時間を含むかどうかである。例えばその x 系に対して速度 u で等速直線運動している慣性系 x' 系との座標変換は

$$x' = x - ut$$

であり、速度の変換は

$$\dot{x}' = \dot{x} - u$$

である。速度の変換に時間を含んでいない。だから運動エネルギーは

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{x}' + u)^2$$

となり時間を含まない。だから

> 慣性系の直交座標では、運動エネルギーとしてどの慣性系での運動エネルギーを採用しようとも時間を含まない。

今まで直交座標という言葉を安易に使ってきたが、直交座標とは慣性系に固定された直交する棒で長さを測った座標系のことである。慣性系と直交座標は同一視する場合もあるがここでは意味は異なる。詳細な議論はしないが、ここでの慣性系は架空の剛体とでも考えてもらいたい。直交座標との変換で時間を含まない座標変換なら、その座標系で運動エネルギーは時間を含まない。時間を含まない座標変換というのは要するにある座標値間の対応関係が時間によらないということである。ある座標値が 3 でそれが 6 に変換されるなら、その 1 秒後も座標 3 は 6 に変換されるという意味である。物理的に言えば、直交座標と時間を含まない変換で結ばれた座標系とは、直交座標に固定された座標系とい言うことである。直交座標は慣性系に固定された座標系なので、直交座標と時間を含まない変換で結ばれた座標系とは、慣性系に固定された座標系のことである。だから

> 慣性系に固定された座標系では、運動エネルギーとしてどの慣性系での運動エネルギーを採用しようとも時間を含まない。

一方ポテンシャルに時間を含むかどうかだが、ポテンシャルが時間を含まない座標（ポテンシャルを定義した座標系という意味だが）との変換が時間を含むときは、その座標系では必ずポテンシャルは時間を含むことになる。例えば調和振動子ポテンシャル

$$V = \frac{1}{2}kx^2$$

があるとしよう。この系に対して速度 u で等速直線運動している慣性系の単位座標とは

$$x' = x - ut$$

と変換する。するとこの座標を使うとポテンシャルは

$$V = \frac{1}{2}k(x' + ut)^2$$

というように必ず時間を含むことになる。

まとめると、まずラグランジアンは慣性系ごとに値が異なるということ。しかし通常どの慣性系での運動エネルギーを使うかは、最も式が簡単なものを採用するに決まっているので気にしなくて良い。次に時間を含む

ラグランジアンについてだが、運動エネルギーは慣性系に固定された座標系ではどの慣性系の運動エネルギーを採用しようとも時間を含まない。時間を含むのは速度の変換に時間を含む場合である。ポテンシャルについては、座標変換に時間を含む場合は、ポテンシャルに時間を含むことになる。通常、座標変換に時間を含むような特殊な座標系など考えることはない。だから時間を含むラグランジアンなど考える必要は全くない。だから、今後の説明ではラグランジアンに時間を含んでいても通用するような議論をするのだが、ラグランジアンに時間など含んでないと思って読んでもらえば良い。

2.7 ラグランジュ方程式と直交座標でのニュートンの運動方程式との同値性

ラグランジュ方程式が、これを作る元になった直交座標の $3n$ 個の式

$$m_i \ddot{x}_i = F_i \qquad i = 1, 2 \cdots 3n \tag{2.27}$$

と同値であるかについて簡単にふれたい。それにはラグランジュ方程式と同値である

$$\frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i = \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} F_i \tag{2.28}$$

との同値性を考えれば良い。もし拘束条件がないなら、すなわち一般座標でも自由度が直交座標のそれと等しいなら、式 (2.28) の両辺に $\frac{\partial q_\alpha}{\partial x_j}$ を掛けて α で和をとれば式 (2.27) に戻るわけだから、明らかに同値である。拘束条件がある場合は少しややこしい。拘束力というのは未定だから何をもって同値かというのが難しいのである。それで常識的に考えてみよう。拘束条件が例えば 2 つなら、q_α 系の自由度は $3n-2$ となり、ラグランジュ方程式 (2.28) の数も $3n-2$ 個できるわけである。この場合 $3n-2$ 個の変数に対し、$3n-2$ 個の微分方程式があるわけだから、初期条件を決めてやれば、q_α は時間の関数として決まるだろう。だから運動は完全に決まるわけである。そしてそれを使って $\ddot{x}_i$ を求めることができ、それを使って式 (2.27) から F_i の値も求まるであろう。そういう意味でラグランジュ方程式 (2.28) は直交座標の運動方程式 (2.27) と同値だと考えていいであろう。

2.8 まとめ

ラグランジュ方程式というのは、直交座標でのニュートンの運動方程式である

$$m_i \ddot{x}_i = F_i$$

の両辺に $\frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}$ を掛けて指標 i について和をとった

$$\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i = \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} F_i \tag{2.29}$$

という式を、他の式に置き換えたものである。この式は行列で書くと

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial q_1} & \frac{\partial x_2}{\partial q_1} & \cdots \\ \frac{\partial x_1}{\partial q_2} & \frac{\partial x_2}{\partial q_2} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 \ddot{x}_1 \\ m_2 \ddot{x}_2 \\ \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial q_1} & \frac{\partial x_2}{\partial q_1} & \cdots \\ \frac{\partial x_1}{\partial q_2} & \frac{\partial x_2}{\partial q_2} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \cdots \end{pmatrix}$$

である。$q, \dot{q}, \ddot{q}$ 系についての恒等式

$$\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha}$$

と一般化力の定義

$$f_\alpha \equiv \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} F_i$$

を使うと式 (2.29) は

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = f_\alpha \tag{2.30}$$

と書き換えられる。これは単に式 (2.29) を別の記号で置き換えただけであり、何の物理的内容も追加していない。この式をラグランジュ方程式という。一般化力 f_α というのは q_α の単位変化あたりの仕事量のことである。もし条件 1(2.4 節参照) が満たされるなら、すなわち力が、ポテンシャル V からの力と仕事をしない力以外は含まないときは、一般化力は

$$f_\alpha = -\frac{\partial V}{\partial q_\alpha}$$

となり、ラグランジアン $L \equiv T - V$ を使うと、式 (2.30) は

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \tag{2.31}$$

と書き換えられる。直交座標での運動方程式 $m_i \ddot{x}_i = F_i$ に $\frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}$ を掛けて i で和をとっているのは、条件 1 を満たせばラグランジュ方程式 (2.30) の右辺が $f_\alpha = -\frac{\partial V}{\partial q_\alpha}$ と簡単になるからである。まとめると式 (2.29) を q_α 座標系で表したものがラグランジュ方程式であり、それを書き換えたものが式 (2.30) であり、状況が特別な場合はそれは式 (2.31) とも書けるということである。

第 3 章

ラグランジュ方程式の幾何学的意味

この章は著者個人の趣味的な考察なので気軽に飛ばしてもらえばよい。今までラグランジュ方程式を導出し、その例を見てきた。ここではラグランジュ方程式の幾何学的意味を考察したい。ニュートンの運動方程式というのは元々加速度は力に比例し、質量に反比例する。そして力の向きと等しい。というもので座標で表されたものではなく、図 3.1 のように幾何学的なものである。ベクトル記号で書けば

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$$

というものである。その法則を様々な一般座標で表したものがラグランジュ方程式である。ラグランジュ方程式を導く際に、直交座標でのニュートンの運動方程式

$$m_i\ddot{x}_i = F_i$$

に $\frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha}$ を掛けて i で和をとるという方法をとった。その和をとった式が一般座標でのラグランジュ方程式なわけである。しかしながら直交座標も一般座標の 1 つであり、特別視するいわれはないような気がする。そこで直交座標を特別視せずにラグランジュ方程式の意味というものを考えてみたいわけである。

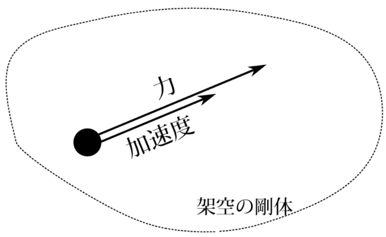

図 3.1　ニュートンの運動法則は加速度は力に比例し、向きが等しいというもので、座標によるものではない。

3.1　直交座標

1 粒子の系を考える。ニュートンの法則の座標によらない表現として $\mathbf{r}$ を位置ベクトルとすると

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F} \tag{3.1}$$

と表される。位置ベクトルは単位直交基底を用いて

$$\mathbf{r} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3$$

と表される。これを時間で 2 回微分して、ベクトルの和差が順序を入れ替えることができることができる性質を使うと

$$\ddot{\mathbf{r}} = \ddot{x}_1\mathbf{e}_1 + \ddot{x}_2\mathbf{e}_2 + \ddot{x}_3\mathbf{e}_3 \tag{3.2}$$

となる。力 $\mathbf{F}$ も同様に単位直交基底で分解して

$$\mathbf{F} = F_1\mathbf{e}_1 + F_2\mathbf{e}_2 + F_3\mathbf{e}_3 \tag{3.3}$$

とする。式 (3.2)(3.3) を式 (3.1) に入れる。各基底の係数は等しくならなければならないので

$$m\ddot{x}_1 = F_1 \qquad m\ddot{x}_2 = F_2 \qquad m\ddot{x}_3 = F_3$$

でなければならない。これが直交座標での運動方程式が成り立つ根拠である。この式はこの直交座標でのラグランジュ方程式でもある。さてこの式は

$$\mathbf{e}_1 \cdot m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{F} \qquad \mathbf{e}_2 \cdot m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{F} \qquad \mathbf{e}_3 \cdot m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{F}$$

と同じことである。すなわち $m\ddot{\mathbf{r}}$ を x_i 軸へ正射影したものと、力をそれへ正射影したものは等しいという式である。正射影というのは図 3.2 のようにベクトルの視点と終点からその軸へ垂線を下ろした影の部分のことである。

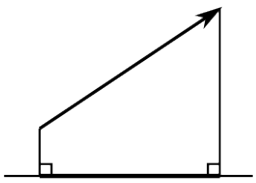

図 3.2　ベクトルの視点と終点からその軸へ垂線を下ろした影の部分を正射影という。

> 単位直交座標のラグランジュ方程式とは $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$ を各軸に正射影したもの、すなわち $\mathbf{e}_i \cdot m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{F}$ である。

と言えるわけである。

3.2　一般座標・1 粒子

次に一般座標でのラグランジュ方程式の幾何学的意味を考えよう。まず 1 粒子の場合を考える。一般座標 q_α のラグランジュ方程式は

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} F_i \tag{3.4}$$

であった。一般座標 q_α が 1 変化したあたりの位置 $\mathbf{r}$ の変化量を $\mathbf{e}_\alpha$ と書こう。すなわち

$$\mathbf{e}_\alpha \equiv \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_\alpha}$$

である。

$$\mathbf{r} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3$$

なので

$$\mathbf{e}_\alpha = \frac{\partial x_1}{\partial q_\alpha}\mathbf{e}_1 + \frac{\partial x_2}{\partial q_\alpha}\mathbf{e}_2 + \frac{\partial x_3}{\partial q_\alpha}\mathbf{e}_3$$

である。一方 $m\ddot{\mathbf{r}}$ は直交成分に分解すると

$$m\ddot{\mathbf{r}} = m\ddot{x}_1\mathbf{e}_1 + m\ddot{x}_2\mathbf{e}_2 + m\ddot{x}_3\mathbf{e}_3$$

であった。又 $\mathbf{F}$ は

$$\mathbf{F} = F_1\mathbf{e}_1 + F_2\mathbf{e}_2 + F_3\mathbf{e}_3$$

である。だから

$$\mathbf{e}_\alpha \cdot m\ddot{\mathbf{r}} = \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i \qquad \mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{F} = \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} F_i$$

である。だからラグランジュ方程式 (3.4) は

$$\mathbf{e}_\alpha \cdot m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{F} \tag{3.5}$$

ということである。これを q_α 座標系で表現したものが q_α 成分のラグランジュ方程式である。式 (3.5) は $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$ という式を $\mathbf{e}_\alpha$ の方向に正射影して $|\mathbf{e}_\alpha|$ を掛けたものになっている。本質的には正射影したものである (図 8.1)。だから

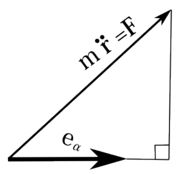

図 3.3　1 粒子のラグランジュ方程式は $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$ の正射影× $|\mathbf{e}_\alpha|$ 倍である。

定理 3.1　1 粒子の q_α 成分のラグランジュ方程式というのは $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$ という式を、座標 q_α が増える方向に正射影し、両辺を $|\mathbf{e}_\alpha|$ 倍したものである。

と言える。これは直交座標でもあてはまることである。式 (3.4) というのは $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$ をいったん直交成分へ正射影して、それを再び $\mathbf{e}_\alpha$ 方向へ正射影して $|\mathbf{e}_\alpha|$ 倍したものなわけである。もちろんいきなり $\mathbf{e}_\alpha$ へ正射影しても同じ式が得られる。

例 3.1　例として 2 次元極座標を考えよう。位置ベクトルを

$$\mathbf{r} = r\cos\theta \cdot \mathbf{e}_x + r\sin\theta \cdot \mathbf{e}_y$$

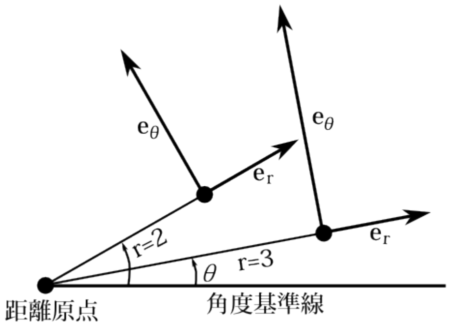

図 3.4　$r=2, r=3$ のときの $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta$

と表すと、r に対応する $\mathbf{e}_r$ は

$$\mathbf{e}_r = \cos\theta \cdot \mathbf{e}_x + \sin\theta \cdot \mathbf{e}_y$$

であるので、$|\mathbf{e}_r| = 1$ である。だから r 成分のラグランジュ方程式というのは $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$ の r 方向への正射影そのままである。だから r 方向の一般化力 f_r というのは r 方向の力の大きさを表している。これが例 2.7 で f_r が拘束力であると述べた理由である。又 θ に対応する $\mathbf{e}_\theta$ は

$$\mathbf{e}_\theta = -r\sin\theta \cdot \mathbf{e}_x + r\cos\theta \cdot \mathbf{e}_y$$

なので $|\mathbf{e}_\theta| = r$ である。だから θ 成分のラグランジュ方程式というのは $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$ の θ 方向へ正射影して両辺に r を掛けたものになる。図 3.4 に $r=2, r=3$ のときの $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta$ を図示した。【例終】

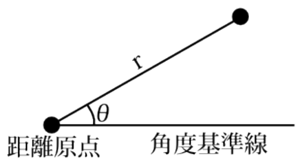

図 3.5　極座標。直交座標という概念自体が不要である。

例 3.2　定理 3.1 の考えを使って直接正射影してラグランジュ方程式を導こう。いっさい直交座標という概念を除去して導こうというわけである。極座標というのは図 3.5 のように r を測る原点があり、角度を測る原点から伸びた基準線があればよいわけである。だから直交座標の概念は不要である。極座標の場合 $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta$ とも粒子の運動に伴って変化するので、直交座標へ正射影してから $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta$ 方向へ正射影する方法より面倒である。

計算のため

$$\mathbf{n}_r = \frac{\mathbf{e}_r}{|\mathbf{e}_r|} \qquad \mathbf{n}_\theta = \frac{\mathbf{e}_\theta}{|\mathbf{e}_\theta|}$$

という単位ベクトルを導入しよう。時間 t でのそれぞれの値を $r(t), \theta(t), \dot{r}(t), \dot{\theta}(t), \mathbf{n}_r(t), \mathbf{n}_\theta(t)$ と書くと、時間 t での速度 $\mathbf{v}$ は

$$\mathbf{v}(t) = \dot{r}(t)\mathbf{n}_r(t) + r(t)\dot{\theta}(t)\mathbf{n}_\theta(t)$$

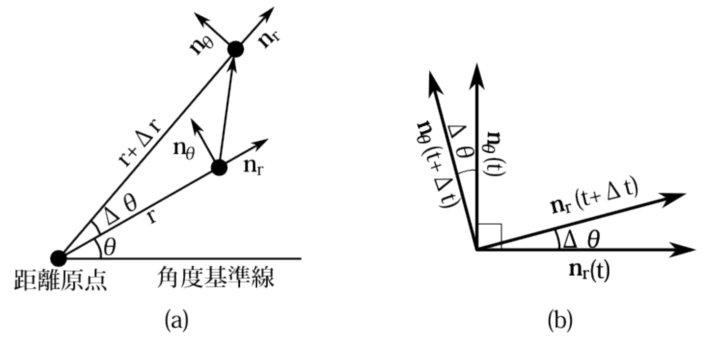

図 3.6　(a):$\mathbf{n}_r = \frac{\mathbf{e}_r}{|\mathbf{e}_r|}$　$\mathbf{n}_\theta = \frac{\mathbf{e}_\theta}{|\mathbf{e}_\theta|}$、$\mathbf{n}_r$ と $\mathbf{n}_\theta$ は単位ベクトルで粒子の位置（角度）によって向きを変える。(b):$\mathbf{n}_r$ と $\mathbf{n}_\theta$ の関係。$\Delta\theta$ だけ粒子が動くと $\mathbf{n}_r$ と $\mathbf{n}_\theta$ は $\Delta\theta$ だけ回転する。

である。これを成分表示で

$$\mathbf{v}(t) = \begin{pmatrix} \dot{r}(t) \\ r(t)\dot{\theta}(t) \end{pmatrix}$$

と書こう。時間が t から Δt 増える間に角度は $\Delta\theta$ 増えるとしよう。時間 $t+\Delta t$ での $\mathbf{n}_r(t+\Delta t), \mathbf{n}_\theta(t+\Delta t)$ は図 3.6 のように、時間 t でのそれより角度が $\Delta\theta$ 回転している。だから $t+\Delta t$ での速度 $\mathbf{v}(t+\Delta t)$ は $\mathbf{n}_r(t), \mathbf{n}_\theta(t)$ を基底とした成分表示では

$$\begin{aligned}\mathbf{v}(t+\Delta t) &= \begin{pmatrix} \cos\Delta\theta & -\sin\Delta\theta \\ \sin\Delta\theta & \cos\Delta\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{r}(t+\Delta t) \\ r(t+\Delta t)\dot{\theta}(t+\Delta t) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\Delta\theta \cdot \dot{r}(t+\Delta t) - \sin\Delta\theta \cdot r(t+\Delta t)\dot{\theta}(t+\Delta t) \\ \sin\Delta\theta \cdot \dot{r}(t+\Delta t) + \cos\Delta\theta \cdot r(t+\Delta t)\dot{\theta}(t+\Delta t) \end{pmatrix}\end{aligned}$$

となる。だから

$$\frac{\mathbf{v}(t+\Delta t) - \mathbf{v}(t)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} \cos\Delta\theta \cdot \dot{r}(t+\Delta t) - \sin\Delta\theta \cdot r(t+\Delta t)\dot{\theta}(t+\Delta t) - \dot{r}(t) \\ \sin\Delta\theta \cdot \dot{r}(t+\Delta t) + \cos\Delta\theta \cdot r(t+\Delta t)\dot{\theta}(t+\Delta t) - r(t)\dot{\theta}(t) \end{pmatrix} \tag{3.6}$$

となり、$\Delta t \to 0$ の極限では

$$\dot{\mathbf{v}} = \begin{pmatrix} \ddot{r} - r\dot{\theta}^2 \\ 2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta} \end{pmatrix} \tag{3.7}$$

となる。式 (3.6) から (3.7) へ至った計算の詳細は省くが、微小量の 1 次の項まで考慮すれば容易に導けると思う。さてこの加速度の r 方向への正射影は $\ddot{r} - r\dot{\theta}^2$ であり $|\mathbf{e}_r| = 1$ なので r 成分のラグランジュ方程式は

$$m(\ddot{r} - r\,\dot{\theta}^2) = f_r \tag{3.8}$$

である。f_r は r 成分の一般化力。又、加速度の θ 方向への正射影は $(2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta})$ であり、$|\mathbf{e}_\theta| = r$ なので θ 成分のラグランジュ方程式は

$$m(2\,r\,\dot{r}\,\dot{\theta} + r^2\ddot{\theta}) = f_\theta \tag{3.9}$$

である。f_θ は θ 成分の一般化力。式 (3.8)(3.9) とも以前に導いた式 (2.12)(2.13) と一致している。【例終】

3.3　多粒子系

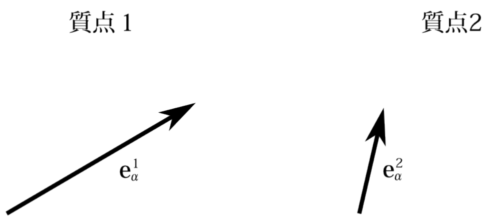

図 3.7　各質点ごとに $\mathbf{e}_\alpha^1 \equiv \frac{\partial \mathbf{r}^1}{\partial q_\alpha}, \mathbf{e}_\alpha^2 \equiv \frac{\partial \mathbf{r}^2}{\partial q_\alpha}, \cdots$ を作る。

次に粒子が幾つかある場合のラグランジュ方程式

$$\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i = \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} F_i$$

を考察する。1 つ 1 つの粒子に番号をつけ、λ 番目の質量、位置、力を $m^\lambda, \mathbf{r}^\lambda, \mathbf{F}^\lambda$ と書く。そして座標 q_α が 1 増えるあたりの λ 番目の粒子の位置の変化量を $\mathbf{e}_\alpha^\lambda$ とする。すなわち

$$\mathbf{e}_\alpha^\lambda \equiv \frac{\partial \mathbf{r}^\lambda}{\partial q_\alpha}$$

であり (図 3.7)、直交座標に分解すると

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_\alpha^1 &= \frac{\partial x_1}{\partial q_\alpha}\mathbf{e}_1 + \frac{\partial x_2}{\partial q_\alpha}\mathbf{e}_2 + \frac{\partial x_3}{\partial q_\alpha}\mathbf{e}_3 \\ \mathbf{e}_\alpha^2 &= \frac{\partial x_4}{\partial q_\alpha}\mathbf{e}_1 + \frac{\partial x_5}{\partial q_\alpha}\mathbf{e}_2 + \frac{\partial x_6}{\partial q_\alpha}\mathbf{e}_3 \end{aligned}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

である。一方

$$\begin{aligned} m^1\ddot{\mathbf{r}}^1 &= m_1\ddot{x}_1\mathbf{e}_1 + m_2\ddot{x}_2\mathbf{e}_2 + m_3\ddot{x}_3\mathbf{e}_3 \\ m^2\ddot{\mathbf{r}}^2 &= m_4\ddot{x}_4\mathbf{e}_1 + m_5\ddot{x}_5\mathbf{e}_2 + m_6\ddot{x}_6\mathbf{e}_3 \end{aligned}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

である。だから

$$\sum_\lambda \mathbf{e}_\alpha^\lambda \cdot m^\lambda \ddot{\mathbf{r}}^\lambda = \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i \tag{3.10}$$

となる。これは 1 つ目の質点について $m^1\ddot{\mathbf{r}}^1$ を $\mathbf{e}_\alpha^1$ 方向へ正射影して $|\mathbf{e}_\alpha^1|$ 倍し、2 つ目の質点について $m^2\ddot{\mathbf{r}}^2$ を $\mathbf{e}_\alpha^2$ 方向へ正射影して $|\mathbf{e}_\alpha^2|$ 倍し、・・・ということをすべての質点にして、それをすべて足し合わせたものが $\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i$ になっているということである。同様に $\mathbf{F}^1, \mathbf{F}^2, \mathbf{F}^3, \cdots$ をそれぞれ直交成分に分解すると

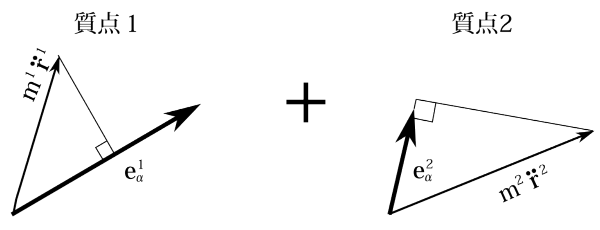

図 3.8　$m^1\ddot{\mathbf{r}}^1$ を $\mathbf{e}^1_\alpha$ 方向へ正射影して $|\mathbf{e}^1_\alpha|$ 倍、$m^2\ddot{\mathbf{r}}^2$ を $\mathbf{e}^2_\alpha$ 方向へ正射影して $|\mathbf{e}^2_\alpha|$ 倍、・・・・をすべて合わせたものがラグランジュ方程式

$$\mathbf{F}^1 = F_1\mathbf{e}_1 + F_2\mathbf{e}_2 + F_3\mathbf{e}_3$$
$$\mathbf{F}^2 = F_4\mathbf{e}_1 + F_5\mathbf{e}_2 + F_6\mathbf{e}_3$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

であり

$$\sum_\lambda \mathbf{e}^\lambda_\alpha \cdot \mathbf{F}^\lambda = \sum_i \frac{\partial\, x_i}{\partial\, q_\alpha} F_i \tag{3.11}$$

となる。式 (3.10)(3.11) からラグランジュ方程式は

$$\sum_\lambda \mathbf{e}^\lambda_\alpha \cdot m^\lambda \ddot{\mathbf{r}}^\lambda = \sum_\lambda \mathbf{e}^\lambda_\alpha \cdot \mathbf{F}^\lambda$$

と表せる。だから一般に

定理 3.2　ラグランジュ方程式の座標 q_α 成分というのは、個々の粒子で $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$ という式を、その座標が増える方向に正射影して、その座標が 1 増えるときの長さ $|\mathbf{e}^\lambda_\alpha|$ 倍して、それをすべての粒子について足し合わせたものである。

と言える。だからどうということもないのだが、一応、直交座標を特別視せずにラグランジュ方程式の内容（内容と述べるのは、この式自体はラグランジュ方程式ではないが、ラグランジュ方程式は、この式の両辺を別の式に置き換えたものだからである）を書き下したことになるわけである。粒子が幾つかある場合は 1 粒子の場合のような幾何学的な簡単さはない。

3.4　まとめ

ラグランジュ方程式は

$$\sum_\lambda \mathbf{e}^\lambda_\alpha \cdot m^\lambda \ddot{\mathbf{r}}^\lambda = \sum_\lambda \mathbf{e}^\lambda_\alpha \cdot \mathbf{F}^\lambda$$

と表せる。ラグランジュ方程式の本質というのは、運動方程式の q_α 軸への正射影である。一般座標を使っての運動方程式であることがラグランジュ方程式の本質ではない。直交座標の $m\ddot{x}_i = F_i$ を一般座標で表すことも可能なのである[*1]。そうではなくこの式に $\frac{\partial\, x_i}{\partial\, q_\alpha}$ を掛けて q_α 軸に正射影することが本質である。

[*1] 例えば式 (2.16) のように

第 4 章

ハミルトンの正準方程式

この章ではハミルトニアンと正準方程式について説明する。ハミルトニアンというものが考えられるには、2.4 節の条件 1 が成り立ち、ラグランジュ方程式 $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = \frac{\partial L}{\partial q}$ が成り立つ系である。最初に、準備としてルジャンドル変換について述べる。数学的にはハミルトニアンはラグランジアンをルジャンドル変換したものである。必ずしもルジャンドル変換の箇所を読まなくても、後の部分は理解できると思う。数学的には正準方程式というものはラグランジュ方程式という微分方程式を他の座標で表したものにほかならない。この章でも例を多く入れたが適宜飛ばしてもらえば良いと思う。この章の内容自体は難しくないと思う。

4.1　ルジャンドル変換

数学でのルジャンドル変換の正しい定義についてはよく知らないが、このテキストを読むのに必要な知識をここに説明する。

4.1.1　1 変数

まず 1 変数のルジャンドル変換について考えよう。関数 $f(x)$ から

$$g = f_x \cdot x - f \tag{4.1}$$

という量 g を作る変換をルジャンドル変換という[*1]。ここで

$$f_x \equiv \frac{df}{dx}$$

微小変化量 Δx に対応する g, f_x, f の変化量を $\Delta g, \Delta f_x, \Delta f$ と書くと 1 次の範囲で

$$\Delta g = (\Delta f_x \cdot x + f_x \cdot \Delta x) - f_x \cdot \Delta x \tag{4.2}$$

の関係が成り立ち、これは

$$\Delta g = \Delta f_x \cdot x$$

[*1] この式の符号を逆にした

$$g = f - f_x \cdot x$$

もルジャンドル変換という。このテキストではラグランジアンからハミルトニアンへのルジャンドル変換は式 (4.1) の方なので、ルジャンドル変換を式 (4.1) のように定義した。

となる。よって

$$\frac{dg}{d\,f_x} = x \tag{4.3}$$

である。量 x と量 f_x の独立な関係式は 1 つしか無いはずなので、この式は $f_x = f_x(x)$ を x について解いた式になっているということである。すなわち $f_x = f_x(x)$ と $x = \frac{d}{d\,f_x}g(f_x)$ **は互いに逆関数になっている**ということである。尚、g が f_x で表せるためには、x が f_x で表されなければならないが、そのためには

$$\frac{d\,f_x}{dx} \neq 0$$

であればよい (定理 1.4 **陰関数定理**参照)。式 (4.2) のような微小量の取扱は数学の本ではしないが、物理ではいつも使っている。数学の本では式 (4.1) を f_x で微分するときは

$$\frac{dg}{d\,f_x} = x + f_x \cdot \frac{dx}{d\,f_x} - \frac{dx}{d\,f_x}\frac{df}{dx}$$

とするだろう。しかし、この式は式 (4.2) を Δf_x で割った式と形式上は同じであるから、式 (4.2) のような扱いをした方が簡潔でよいのである。

例 4.1　$f = x^2$ をルジャンドル変換しよう。

$$f_x = 2x$$

なので

$$g = f_x \cdot x - x^2 = \frac{f_x^2}{4}$$

である。だから $\frac{dg}{df_x} = x$ という式は今の場合

$$\frac{f_x}{2} = x$$

となる。$f_x = 2x$ なので確かに $\frac{dg}{df_x} = x$ が成り立っていることがわかる。$f_x = f_x(x)$ と $x = \frac{dg}{d\,f_x}(f_x)$ は互いに逆関数になっているのである。【例終】

4.1.2　多変数

次に、何変数でもよいのだが、3 変数関数 $f(x, y, z)$ を考え、x, y についてルジャンドル変換しよう。すなわち

$$g = f_x \cdot x + f_y \cdot y - f$$

という量を作る。独立変数 x, y, z が微小量 $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ だけ変化したときの、g, f_x, f_y, f_z, f の変化量を $\Delta g, \Delta f_x, \Delta f_y, \Delta f_z, \Delta f$ と書く。すると 1 次の範囲で

$$\begin{aligned}\Delta g &= \Delta f_x \cdot x + f_x \Delta x + \Delta f_y \cdot y + f_y \Delta y - (f_x \Delta x + f_y \Delta y + f_z \Delta z)\\ &= \Delta f_x \cdot x + \Delta f_y \cdot y - f_z \Delta z\end{aligned}$$

となる。よって g を f_x, f_y, z で表して f_x, f_y, z で微分すると

$$\frac{\partial\, g(f_x, f_y, z)}{\partial\, f_x} = x \qquad \frac{\partial\, g(f_x, f_y, z)}{\partial\, f_y} = y \qquad \frac{\partial\, g(f_x, f_y, z)}{\partial\, y} = -\frac{\partial\, f(x, y, z)}{\partial\, z} \tag{4.4}$$

が成り立つ。ルジャンドル変換に使った変数 x, y については、元の量 f のその変数での微分係数で新しい量 g を微分すると、その変数 x, y になり、ルジャンドル変換に使わなかった変数 z については、それで新しい量 g を微分したものは、元の量 f を同じ z で微分したもののマイナス符号をつけたものになる。ただし偏微分する際に固定しているものが異なる。$\frac{\partial g}{\partial z}$ は f_x, f_y を固定しており、$\frac{\partial f}{\partial z}$ は x, y を固定している。

式 (4.4) の意味だが、導関数から

$$f_x = f_x(x, y, z) \qquad f_y = f_y(x, y, z)$$

と f_x, f_y, x, y は関係があり、これを満たすなら式 (4.4) は恒等式になるという意味である。$\frac{\partial g}{\partial f_x}$ を x, y, z で表せば x になるということである。尚、g が f_x, f_y と z で表せるためには、x, y が f_x, f_y と z で表されなければならないが、そのためには

$$\det \begin{vmatrix} \frac{\partial f_x(x,y,z)}{\partial x} & \frac{\partial f_x(x,y,z)}{\partial y} \\ \frac{\partial f_y(x,y,z)}{\partial x} & \frac{\partial f_y(x,y,z)}{\partial y} \end{vmatrix} \neq 0$$

であればよい (定理 1.5 **陰関数定理の系**参照)。4.1.1 小節でも述べたが、

$$f_x = f_x(x, y, z) \qquad f_y = f_y(x, y, z) \tag{4.5}$$

という関係が成り立つなら

$$\frac{\partial g(f_x, f_y, z)}{\partial f_x} = x \qquad \frac{\partial g(f_x, f_y, z)}{\partial f_y} = y$$

が成り立つということは、この式は (4.5) を x, y で解いた式、すなわち逆関数になっているということである。これから述べる正準方程式に関して言えば、この逆関数になっているという視点の方が重要だと思う。

次の例で式 (4.4) が成り立っていることを確認してみよう。

例 4.2 $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$ を x, y に関してルジャンドル変換しよう。$f_x = 2x, f_y = 2y$ なので

$$\begin{aligned} g &= f_x \cdot x + f_y \cdot y - f \\ &= 2x \cdot x + 2y \cdot y - (x^2 + y^2 + z^2) \\ &= x^2 + y^2 - z^2 \\ &= \frac{f_x^2}{4} + \frac{f_y^2}{4} - z^2 \end{aligned}$$

となる。そして

$$\frac{\partial g(f_x, f_y, z)}{\partial f_x} = \frac{f_x}{2} \qquad \frac{\partial g(f_x, f_y, z)}{\partial f_y} = \frac{f_y}{2} \tag{4.6}$$

である。$f_x = 2x, f_y = 2y$ なので

$$\frac{\partial g(f_x, f_y, z)}{\partial f_x} = x \qquad \frac{\partial g(f_x, f_y, z)}{\partial f_x} = y$$

が成り立っているわけである。そしてこの式は (4.6) より

$$\frac{f_x}{2} = x \qquad \frac{f_y}{2} = y$$

なので確かに $f_x = 2x, f_y = 2y$ の逆関数になっている。又

$$\frac{\partial g(f_x, f_y, z)}{\partial z} = -2z \qquad \frac{\partial f(x, y, z)}{\partial z} = 2z$$

であり、確かに

$$\frac{\partial\, g(f_x, f_y, z)}{\partial\, z} = -\frac{\partial\, f(x,y,z)}{\partial\, z}$$

が成り立っていることがわかる。【例終】

今は 3 変数関数で、2 つの変数についてルジャンドル変換したが、これは何変数関数で、何個の変数についてルジャンドル変換しようと同じことである。だから以下の定理が成り立つ。

定理 4.1 関数 $f = f(x_i, y_i)$ で x_i をルジャンドル変換する変数の組。y_i をしない方の変数の組とするとルジャンドル変換は

$$g = \sum_i f_{x_i} \cdot x_i - f$$

で定義され、

$$\frac{\partial\, g(f_{x_i}, y_i)}{\partial\, f_{x_i}} = x_i \qquad\qquad \frac{\partial\, g(f_{x_i}, y_i)}{\partial\, y_i} = -\frac{\partial\, f(x_i, y_i)}{\partial\, y_i}$$

が成り立つ。尚、$\dfrac{\partial\, g(f_{x_i}, y_i)}{\partial\, f_{x_i}} = x_i$ は $f_{x_i} = f_{x_i}(x_i, y_i)$ を x_i について解いた式になっている。

4.2 ハミルトニアンと正準方程式

ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\, L}{\partial\, \dot{q}_i}\right) = \frac{\partial\, L}{\partial\, q_i}$$

が成り立つ系を考える。すなわちポテンシャルからの力と、仕事をしない力しか存在しない条件 1（2.4 節）を満たす系を考えるのである。ラグランジアン $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ をすべての $\dot{q}_i$ についてルジャンドル変換した量をハミルトニアンといい、H と書く。すなわち

$$H \equiv \sum_i \frac{\partial\, L}{\partial\, \dot{q}_i}\dot{q}_i - L$$

である。一般化運動量 p_i を

$$p_i \equiv \frac{\partial\, L}{\partial\, \dot{q}_i} \tag{4.7}$$

と定義しよう[*2]。ルジャンドル変換の結果として、定理 4.1 より必然的に

$$\frac{\partial\, H(p_i, q_i, t)}{\partial\, p_i} = \dot{q}_i$$

$$\frac{\partial\, H(p_i, q_i, t)}{\partial\, q_i} = -\frac{\partial\, L(q_i, \dot{q}_i, t)}{\partial\, q_i} \tag{4.8}$$

[*2] ラグランジアンは慣性系ごとに値が異なるので、ハミルトニアンも一般化運動量も慣性系ごとに値が異なることになる。

が成り立つ[*3]。これは定義式 (4.7) の関係があるならば、必ず成り立つ恒等式であり、L がどんな量であろうと q_i がどんな軌道をとろうが成り立つ式である。今はラグランジュ方程式

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \dot{p}_i \tag{4.9}$$

が成り立つ系を考えている。だからこの式を使うと、式 (4.8) は

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i$$

となる。定理 4.1 で述べたように $\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i$ と言うのは、$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ の逆関数になっており、p_i の定義であり物理的内容は一切含んでいない。一方 $\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i$ というのがニュートンの運動方程式に対応するものであり、物理的内容を含んだ式である。正準方程式が成り立つのはラグランジュ方程式 (4.9) が成り立つときであり、それはポテンシャルからの力と、仕事をしない力しか存在しないときであることに注意。まとめると

> ハミルトニアン H はラグランジアン L から
>
> $$H \equiv \sum_i p_i q_i - L \tag{4.10}$$
>
> で定義される。一般化運動量 p_i を
>
> $$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{4.11}$$
>
> と定義する。p_i を使って $\dot{q}_i$ を消去し、H を p, q の関数で表したとき
>
> $$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p_i} &= \dot{q}_i \qquad && (p_i\text{の定義式} \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i\text{の逆関数}) \\ \frac{\partial H}{\partial q_i} &= -\dot{p}_i \qquad && (\text{運動方程式} \quad \frac{\partial L}{\partial q_i} = \dot{p}_i\text{に対応}) \end{aligned}$$
>
> が成り立つ。この 2 つの式を正準方程式という。p, q を正準変数という。

4.3 ラグランジュ方程式と正準方程式の数学的関係

数学的には正準方程式というのはラグランジュ方程式の変数を変換したものにすぎない。そのことを文字を変え、より見やすい形で説明しよう。ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}}\right) = \frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial q}$$

という微分方程式は、$q, \dot{q}$ を x, y と書き $\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}}$ を $f(x,y,t)$ と書き、$\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial q}$ を $g(x,y,t)$ と書くと

$$\frac{d}{dt} f(x,y,t) = g(x,y,t)$$

[*3] H が p, q, t で表すことができるためには

$$\det\left|\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j \dot{q}_i}\right| \neq 0$$

であればよい (定理 1.5 陰関数定理の系参照)。

となる。

$$f = f(x, y, t)$$

と置いて、この式を x, f で表すと

$$\frac{df}{dt} = g(x, f, t)$$

となる[*4]。これが正準方程式に対応するわけである。ラグランジュ方程式から正準方程式に変換するというのはただこれだけのことをしただけである。だからラグランジュ方程式と正準方程式が同値なのは言うまでもない。単に文字を書き換えたに過ぎないからである。尚ラグランジュ方程式も正準方程式も $\frac{dx}{dt} = y$ という関係も付け加えなければならない。

4.4 例

例 4.3　1 粒子の 1 次元でのハミルトニアンを求めよう。ラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x)$$

なので

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m \dot{x}_i$$

である。だから一般化運動量 p は

$$p = m \dot{x} \tag{4.12}$$

である。これは通常の運動量と同じである。これを使うとハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= p \dot{x} - \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right) \\ &= \frac{p^2}{2m} + V(x) \end{aligned}$$

となる。これはエネルギーと一致している。1 つ目の正準方程式 $\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x}$ は

$$\frac{p}{m} = \dot{x} \tag{4.13}$$

であり、これは式 (4.12) の逆関数である。つまり p の定義になっている。又、2 つ目の正準方程式 $\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{p}$ は

$$\frac{\partial V}{\partial x} = -\dot{p}$$

である。これは、式 (4.13) の $p = m\dot{x}$ を使うと

$$m \ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

となる。すなわちニュートンの運動方程式である。だから

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{p}$$

こそが物理的内容を表していることがわかる。【例終】

[*4] ここでの g は不変量表示とする。

今の例からわかると思うが

定理 4.2　直交座標ではハミルトニアンは

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V$$

であり、系のエネルギーと一致している。正準方程式は

$$\frac{p_i}{m_i} = \dot{x}_i \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i}$$

となる。

例 4.4　平面極座標を考えよう。式 (2.11) の結果を使うと、この場合のラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - V$$

である。この場合一般化運動量の定義式 $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p$ は

$$m\dot{r} = p_r \qquad mr^2\dot{\theta} = p_\theta \tag{4.14}$$

となる。尚、p_r は通常の運動量の r 方向への正射影、p_θ は角運動量になっている。ラグランジュ方程式は

$$m\ddot{r} = -\frac{\partial V}{\partial r} + mr\dot{\theta}^2 \qquad \frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) = -\frac{\partial V}{\partial \theta} \tag{4.15}$$

である。ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= p_r \cdot \dot{r} + p_\theta \cdot \dot{\theta} - \left(\frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - V\right) \\ &= \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) + V \\ &= \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2}\right) + V \end{aligned} \tag{4.16}$$

となる。この場合も 2 段目の式の $\frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2)$ は運動エネルギーなので、ハミルトニアンは $T + V$ となり、エネルギーと一致していることがわかる。1 つ目の正準方程式 $\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}$ は

$$\frac{p_r}{m} = \dot{r} \qquad \frac{p_\theta}{mr^2} = \dot{\theta} \tag{4.17}$$

であり運動量の定義式 (4.14) の逆関数になっている。又、r についての 2 つ目の正準方程式 $\frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p}$ は

$$-\frac{1}{m}\frac{p_\theta^2}{r^3} + \frac{\partial V}{\partial r} = -\dot{p}_r \qquad \frac{\partial V}{\partial \theta} = -\dot{p}_\theta$$

であり、これは式 (4.17) を使って p_r, p_θ を消去すると

$$-m\ddot{r} = \frac{\partial V}{\partial r} - mr\dot{\theta}^2 \qquad \frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) = -\frac{\partial V}{\partial \theta}$$

となる。これはラグランジュ方程式 (4.15) と同じである。【例終】

表 4.1　ラグランジアン、ラグランジュ方程式、ハミルトニアン、正準方程式

	一般式	直交座標	平面極座標	
ラグランジアン	$L \equiv T - V$	$L = \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2 - V$	$L = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2)$	
一般化運動量	$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$	$p_i = m_i \dot{x}_i$	$p_r = m\dot{r}$	$p_\theta = mr^2\dot{\theta}$
ラグランジュ方程式	$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \dot{p}_i$	$-\frac{\partial V}{\partial x_i} = \dot{p}_i$	$mr\dot{\theta}^2 - \frac{\partial V}{\partial r} = \dot{p}_r$	$-\frac{\partial V}{\partial \theta} = \dot{p}_\theta$
ハミルトニアン	$H \equiv \sum_i p_i q_i - L$	$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V$	$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2}\right) + V$	
正準方程式 1	$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i$	$\frac{p_i}{m_i} = \dot{x}_i$	$\frac{p_r}{m} = \dot{r}$	$\frac{p_\theta}{mr^2} = \dot{\theta}$
正準方程式 2	$\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i$	$\frac{\partial V}{\partial x_i} = -\dot{p}_i$	$-\frac{1}{m}\frac{p_\theta^2}{r^3} + \frac{\partial V}{\partial r} = -\dot{p}_r$	$\frac{\partial V}{\partial \theta} = -\dot{p}_\theta$

尚、参考までに 3 次元極座標のハミルトニアンを書くと

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2\theta}\right) + V$$

となる。今の結果を表にすると、表 4.1 になる。このようにラグランジュ方程式とハミルトンの正準方程式は同じことなので、正準方程式に書き換えることは方程式を解くという点では何の利点も無い。

4.5　一般化運動量、ハミルトニアンの変換

一般化運動量の変換式を導こう。一般化運動量は同じラグランジアンから定義されているとする。ラグランジアンは慣性系ごとに値が異なるので、同じ慣性系でのラグランジアンを使っているということである。2 つの座標系を q_α 系、q'_i 系とする。定義より

$$p'_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} \qquad p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}$$

である。両座標系で同じラグランジアンを使っているとしているので

$$p'_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} = \sum_\alpha \frac{\partial \dot{q}_\alpha}{\partial \dot{q}_i}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} = \sum_\alpha \frac{\partial q_\alpha}{\partial q'_i} p_\alpha$$

である。ここで定理 1.1 等式 2 のドットの消去を使った。よって

定理 4.3　同じ慣性系のラグランジアンから定義された一般化運動量は

$$p'_i = \sum_\alpha \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, q'_i} p_\alpha$$

と変換する。

テンソルの言葉で言えば、一般化運動量は共変ベクトルなのである。

次にハミルトニアンの変換を考えよう。一般化運動量のとき同様に、同じラグランジアンから定義されているとする。q_α 系から q'_i 系の**変換は時間を含まない**とする。そうすると

$$\dot{q}_\alpha = \sum_i \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, q'_i} \dot{q}'_i$$

である。だから

$$\begin{aligned} H &= \sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - L \\ &= \sum_\alpha p_\alpha \left(\sum_i \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, q'_i} \dot{q}'_i \right) - L \\ &= \sum_i \left(\sum_\alpha p_\alpha \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, q'_i} \right) \dot{q}'_i - L \\ &= \sum_i p'_i \dot{q}'_i - L \\ &= H' \end{aligned}$$

である。だから $H = H'$ である。よって

定理 4.4　同じ慣性系のラグランジアンから定義され、そして座標変換に時間を含まないなら両座標系のハミルトニアンは等しい

例 4.5　定理 4.3、定理 4.4 を使って、2 次元直交座標系のハミルトニアンを平面極座標で表示してみよう。直交座標でのハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + V$$

である。定理 4.3 から

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{\partial\, r}{\partial\, x} p_r + \frac{\partial\, \theta}{\partial\, x} p_\theta \\ p_y &= \frac{\partial\, r}{\partial\, y} p_r + \frac{\partial\, \theta}{\partial\, y} p_\theta \end{aligned}$$

である。微分係数の導出は省くが、この式は

$$\begin{aligned} p_x &= \cos\theta \cdot p_r - \frac{\sin\theta}{r} \cdot p_\theta \\ p_y &= \sin\theta \cdot p_r + \frac{\cos\theta}{r} \cdot p_\theta \end{aligned}$$

となる。これを直交座標のハミルトニアンに代入すると

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2}\right) + V$$

となり定義から導いた式 (4.16) での結果と一致する。【例終】

ところで直交座標でのハミルトニアンは系のエネルギーと一致しているのであった。だからもし直交座標と時間を含まない変換で結ばれた座標系のハミルトニアンは、定理 4.4 より、その系のエネルギーと等しくなる。直交座標と時間によらない変換で結ばれた座標系とは、ある慣性系に固定された座標系である*5。

定理 4.5 慣性系に固定された座標系のハミルトニアンはその系のエネルギーに等しい。

4.6 まとめ

ラグランジアン L を $\dot{q}_i$ に関してルジャンドル変換したものをハミルトニアンという。すなわちハミルトニアン H を

$$H \equiv \sum_i p_i \dot{q}_i - L$$

と定義する。p_i は一般化運動量といい

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

で定義される。H を p, q で表すと

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i \qquad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i$$

が成り立つ。これを正準方程式という。1 つ目の式は p_i の定義式の役割を持ち、2 つ目の式が物理的法則（ニュートンの運動法則）を表している。これはラグランジュ方程式の

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i \qquad \frac{\partial L}{\partial q} = \dot{p}_i$$

にそれぞれ対応している。$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i$ と $\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i$ は互いに逆関数になっている。正準方程式が成り立つ系というのはラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

が成り立つ系である。

座標変換したときの運動量やハミルトニアンの変換についてだが、運動量の変換式は

$$p'_i = \sum_\alpha \frac{\partial q_\alpha}{\partial q'_i} p_\alpha$$

である。又ハミルトニアンは、座標変換に時間を含まなければ、不変である。そして慣性系に固定された座標系ではハミルトニアンはエネルギーに等しい。

*5 慣性系に固定された座標系とは、例えば極座標とすると $r = 1, \theta = 2$ なら、その座標の示す位置は、時間がたっても同じ位置を示すということである。

第 5 章

正準変換

この章は飛ばしてもらっても後の章の理解に一切関係ない。正準変換というのは微分方程式の変数変換なのだが、実際問題に役に立つわけではない。役に立つ場合もあるのかもしれないが私は知らない。後の章との関係では単にハミルトンヤコビの方程式の導出に使っているだけである。しかしながらハミルトンヤコビの方程式の解から正準方程式の解が得られることの証明は次の章で簡潔に記してある。ここでの導出は単に歴史的な興味しか無いと思う。例題を多く入れたが、計算自体は簡単なものなので、概念がわかりづらいときは飛ばさずにした方がいいと思う。概要としてはまず正準変換の定義をした。しかしこの定義は世間一般の定義とは異なるようなので注意してほしい。このテキストで正準変換に含まれる変換で、世間一般での正準変換に含まれないものもある (付録 B 参照)。それから正準変換というものの性質について説明した。正準変換というものは解軌道を対応させるものなのである。その後、母関数による正準変換の説明をした。これが世間でいう正準変換というもののようである。これは巧妙ゆえにわかりづらいものである。他の本にあるような変分法に基礎を置かず微分に基礎をおいた説明をしている。変分法の（最小ならまだわかりやすいのだが）停留というのはわかりづらいし数学的に厳密性にかけているような気がするからである。

5.1　正準変換の定義

正準変換というのは、大ざっぱに言えば、正準変数 q, p を変数変換して、新たな変数でも正準方程式を満たす変換のことである。以下で正準変換の明確な定義を与えるが言葉の意味というのは文脈によって異なるものなので、柔軟にとらえてもらいたい。また、世間一般の正準変換より広い意味で定義している。尚、この章での H, K はハミルトニアンの定義である $\sum_i p_i \dot{q}_i - L$ である必要は全くない。

正準変換の定義

1. $q, p, H(q,p,t)$ は正準方程式

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i \qquad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \tag{5.1}$$

を満たす。

2. $q, p \to Q, P$ という変換があり、それは逆変換可能である、

3. 1 を満たすなら、Q, P, t の関数 $K(Q,P,t)$ と q, p から変換された Q, P は正準方程式

$$\frac{\partial K}{\partial P_i} = \dot{Q}_i \qquad \frac{\partial K}{\partial Q_i} = -\dot{P}_i$$

を満たす。

このとき $q, p, H \to Q, P, K$ の変換を正準変換と呼ぶことにしよう。

例えば直交座標を極座標に変換し、$H = K$ とするのも正準変換である。この場合は位置座標同士の変換であり、$H = K$ であるが、正準変換は位置座標同士の変換である必要はないし、$H = K$ である必要もない。

例 5.1

$$Q = p \qquad P = -q \qquad K = H$$

は正準変換である。実際

$$\frac{\partial K}{\partial P} = \frac{\partial H}{\partial(-q)} = \dot{p} = \dot{Q}$$

すなわち正準方程式

$$\frac{\partial K}{\partial P} = \dot{Q}$$

が成り立っている。又

$$\frac{\partial K}{\partial Q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q} = -\dot{P}$$

すなわち正準方程式

$$\frac{\partial K}{\partial Q} = -\dot{P}$$

が成り立っている。【例終】

5.2 正準変換についての幾つかの性質

この節では、記述の簡潔性と図での扱いのため、正準変数を q を 1 つ、p を 1 つとするが、それで本質的なことは何ら変わることはない。この節での主張は q, p が何個あっても通じる内容である。

5.2.1 任意の座標変換に対する正準変換

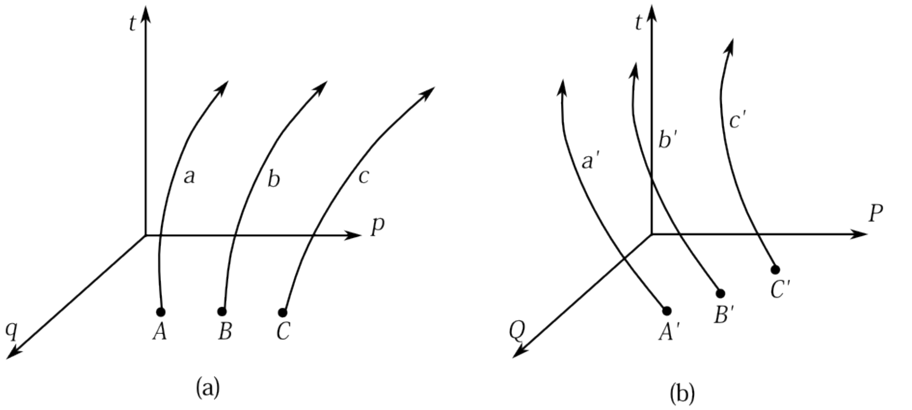

図 5.1 座標変換による軌道の変化。(a) : $\dot{q} = \frac{\partial H(q,p,t)}{\partial p}$, $\dot{p} = -\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial q}$ なので q, p, t を決めれば $\dot{q}, \dot{p}$ は決まる。(b) : a,b,c 軌道を Q, P 座標へ変換したものが a’,b’,c’ 軌道。座標 Q, P が決まれば $\dot{Q}, \dot{P}$ も決まる。

正準変換というものを図形的に考えてみよう。$\dot{q}, \dot{p}$ は正準方程式 (5.1) によって決まり、$\partial H/\partial p, \partial H/\partial q$ は q, p, t の関数だから、$\dot{q}, \dot{p}$ は q, p, t で決まる。だから q, p, t 空間では図 5.1(a) のように解軌道の流れ場があるのである。$q, p \to QP$ へ変換すると、この解軌道群は QP, t 空間上での軌道群に変換される (図 5.1(b))。だから変換 $q, p \to Q, P$ が与えられれば $\dot{Q}, \dot{P}$ は Q, P, t の関数として定まる。その関数を $\dot{Q}(Q, P, t), \dot{P}(Q, P, t)$ と書こう[*1]。この変換が正準変換の条件を満たすためには、K は

$$\frac{\partial K}{\partial P} = \dot{Q}(Q, P, t) \qquad \frac{\partial K}{\partial Q} = -\dot{P}(Q, P, t)$$

を満たさなければならない。そのような K が存在するための必要十分条件は、よく知られているように、

$$-\frac{\partial \dot{P}(Q, P, t)}{\partial P} = \frac{\partial \dot{Q}(Q, P, t)}{\partial Q} \tag{5.2}$$

を満たすことである[*2]。しかしながら、任意の変換 $q, p \to Q, P$ が必ずしもこの式を満たすわけではない。だから

[*1] $\dot{Q}, \dot{P}$ は

$$\begin{aligned}\dot{Q} &= \frac{\partial Q}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial Q}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial Q}{\partial t} \\ &= \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial Q}{\partial t}\end{aligned}$$

である。同様に

$$\begin{aligned}\dot{P} &= \frac{\partial P}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial P}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial P}{\partial t} \\ &= \frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial P}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial P}{\partial t}\end{aligned}$$

である。この右辺を Q, P, t で表したものが関数 $\dot{Q}(Q, P, t), \dot{P}(Q, P, t)$ となる。

[*2] これは正準変数が q, p が 1 つづつの場合である。2 つ以上のときは、もう少し必要な式が増える。

> **定理 5.1**　任意の座標・運動量変換 $q, p \to Q, P$ に対して、正準方程式を満たす K が必ず存在するわけではない。

と言える。今のことを図 5.2 を使って図式的に説明しよう。$\dot{Q}, \dot{P}$ は変換式より $q, p, \dot{q}, \dot{p}, t$ の関数として表せ

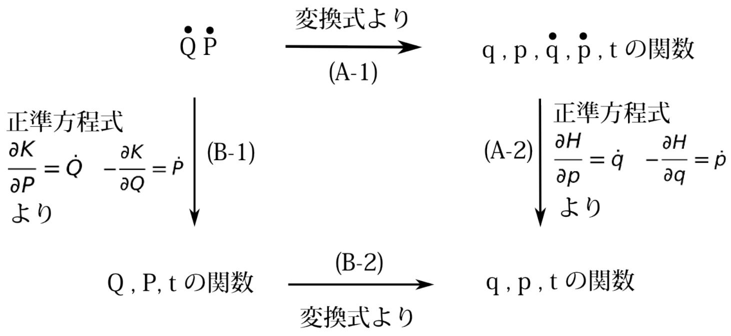

図 5.2　正準変換であるかを調べるための手順

る (A-1)。$\dot{q}, \dot{p}$ は正準方程式より q, p, t の関数として表せるので $\dot{Q}, \dot{P}$ は q, p, t の関数として表せる (A-2)。そして変換式より q, p は Q, P, t で表されるので $\dot{Q}, \dot{P}$ は Q, P, t の関数として表せる (B-2 の逆)。その表した式がそれぞれ $\frac{\partial K}{\partial P}, -\frac{\partial K}{\partial Q}$ になっていなければ正準変換にはならないのである (B-1)。そうなる K は必ずしも存在するわけではない。今の説明からわかると思うが、与えられた変換 $q, p, H \to Q, P, K$ が正準変換かどうかは $\dot{Q}, \dot{P}$ を (A-1)(A-2) の手順で q, p, t で表したものと (B-1)(B-2) の手順で q, p, t で表したものが一致しているかどうかで判定できる。一致していればそれは正準変換であり、一致していなければ正準変換ではない。

例題 5.1

$$H = \frac{p^2}{2}$$

として

$$Q = q + p, \quad P = p \tag{5.3}$$

という変換で、正準方程式を満たす K は存在するか。もし存在するなら求めよ。

【解】変換を逆に解くと

$$q = Q - P \qquad\qquad p = P \tag{5.4}$$

である。又、変換式 (5.3) より

$$\dot{Q} = \dot{q} + \dot{p}, \quad \dot{P} = \dot{p} \tag{5.5}$$

である (図 5.2、A-1)。正準方程式から

$$p = \dot{q} \qquad\qquad 0 = \dot{p}$$

である。これを式 (5.5) に入れると

$$\dot{Q} = p \qquad\qquad \dot{P} = 0$$

となる (図 5.2、A-2)。式 (5.4) を使うと

$$\dot{Q} = P \qquad \dot{P} = 0 \tag{5.6}$$

である (図 5.2、B-2 の逆)。これで $\dot{Q}, \dot{P}$ が Q, P, t の関数で表せた。K が存在するための条件式 (5.2) は

$$-\frac{\partial \dot{P}}{\partial P} = 0 \qquad \frac{\partial \dot{Q}}{\partial Q} = 0$$

となって満たされる。よって正準方程式を満たす K が存在する。K は正準方程式を満たすように決めればよい。式 (5.6) を使うと

$$\frac{\partial K}{\partial P} = P \qquad \frac{\partial K}{\partial Q} = 0$$

を満たしていれば良いわけである。だから

$$K = \frac{P^2}{2}$$

とすればよい。これが正準方程式を満たす K である。【解答終】

5.2.2 K に対応する正準変換

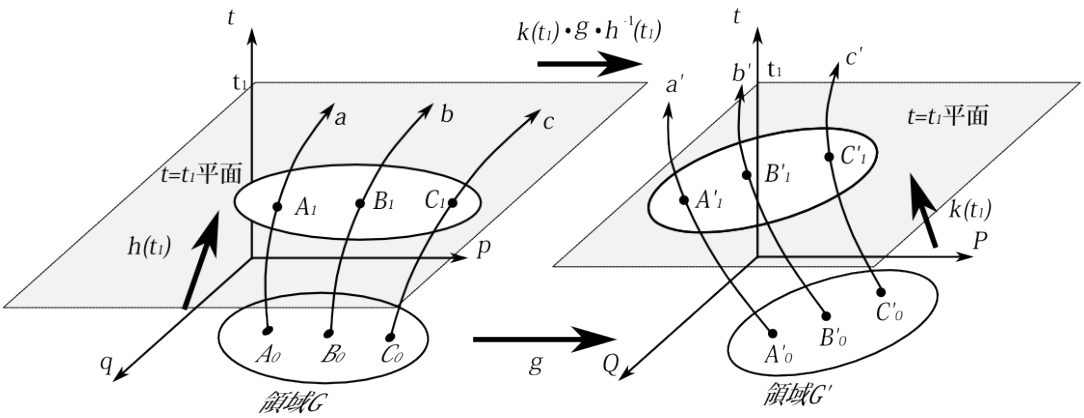

図 5.3　$t = 0$ での変換 $q, p \to Q, P$ を任意に決める。解軌道を対応させれば変換は決まる。

一方、

定理 5.2　与えられた K に対応する正準変換は必ず存在する。

【証明】q, p, t 空間で $t = 0$ のある領域 G を、連続という条件を満たして、G' に変換する (図 5.3)。これでまず $t = 0$ での q, p から Q, P への変換を決めたわけである。領域 G のある点 A_0 を初期条件とすると q, p, t 空間では軌道 a が決まる。A_0 に対応する Q, P, t 空間での点を A'_0 としよう。K は与えられているので、これによって軌道の時間発展は完全に決まる。その軌道を a' としよう。$t = 0$ 以外の時間での変換だが、$t = t_1$ で軌道 a が A_1、軌道 a' が A'_1 にあるなら、$t = t_1$ では $A_1 \to A'_1$ と変換させればよい。このようにして初期条件を変えれば他の軌道ができ、同様にその軌道と、それに対応する軌道ができ、$t = t_1$ での変換がきまる。同じ論法であらゆる時刻での変換が決まる。すなわち、ある時刻、今の場合 $t = 0$、での q, p から Q, P への変換を決めてやれば、他の時刻での変換は一意的に決まる。そしてこの Q, P の軌道は

$$\frac{\partial K}{\partial P} = \dot{Q} \qquad \frac{\partial K}{\partial Q} = -\dot{P}$$

を満たすように決めたのだから、その新しい変数 Q, P は与えられた K に対して正準方程式を満たす。【証明終】

さて今のことを記号を使って簡潔に書こう。q, p 空間上の $t=0$ の点は解軌道にそって動き、$t=t_1$ のときは

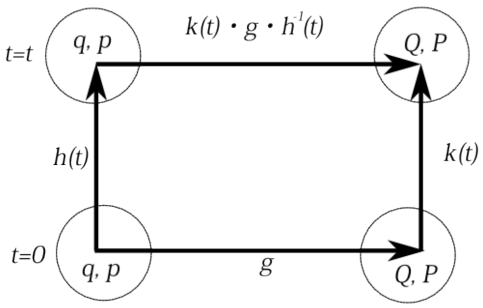

図 5.4　変換の模式図。任意の時間 t での変換 $q, p \to Q, P$ は、一端, 解軌道上を $t=0$ の点まで戻す、$t=0$ での任意の変換 g で QP 上の点に移し、そこから解軌道にそって時間 t での点に移せば良い。

q, p 空間上のある点に移る。この $q, p \to q, p$ への写像を $h(t_1)$ と書こう (図 5.3、図 5.4)。同様に Q, P 空間上の $t=0$ の点が $t=t_1$ のときに移る写像を $k(t_1)$ と書こう。$t=0$ での $q, p \to QP$ の写像を g と書こう。すると $t=t_1$ での $q, p \to Q, P$ の写像は

$$k(t_1) \cdot g \cdot h^{-1}(t_1) \tag{5.7}$$

となるわけである。

さて、今証明したように $q, p, H \to Q, P, K$ の変換が正準変換だというのは q, p, t 空間の解軌道と Q, P, t 空間の解軌道が対応しているということであった。となると、この逆の $Q, P, K \to q, p, H$ という変換も解軌道が対応しているので、正準変換になる。すなわち

> **定理 5.3**　正準変換の逆変換も正準変換になる。

そして $q, p, H \to Q, P, K$ が正準変換で、さらに $Q, P, K \to Q', P', K'$ が正準変換なら、これを続けて行った、$q, p, H \to Q', P', K'$ も正準変換になる。このことと、今述べた定理 5.3 から、

> **定理 5.4**　正準変換は群をなす

と言える。ただ、群をなすからといってこの性質をあとで使うわけではない。

例題 5.2

$$H = \frac{p^2}{2m} - mgq \qquad K = Q$$

のときの正準変換を求めよ。H は自由落下でのハミルトニアンである。

【解】q, p についての正準方程式は

$$\frac{p}{m} = \dot{q} \qquad mg = \dot{p}$$

となり、これから

$$q = \frac{1}{2}\, g\, t^2 + \frac{p_0}{m}\, t + q_0 \qquad\qquad p = mgt + p_0$$

と求まる。ここで q_0, p_0 は $t=0$ での q, p の値。一方 Q, P の正準方程式は

$$0 = \dot{Q} \qquad\qquad -1 = \dot{P}$$

であり、これから

$$Q = Q_0 \qquad\qquad P = -t + P_0$$

と求まる。ここで Q_0, P_0 は $t=0$ での q, p の値。式 (5.7) での $h^{-1}(t)$ は

$$h^{-1}(t): \quad q_0 = q - \frac{1}{2}gt^2 - \frac{p - mgt}{m}\,t \qquad p_0 = p - mgt$$

となる。$k(t)$ は

$$k(t): \quad Q = Q_0 \qquad\qquad P = P_0 - t$$

となる。g として恒等変換を選ぶ、すなわち g を

$$g: \quad Q_0 = q_0 \qquad\qquad\qquad P_0 = p_0$$

とすると $k(t)\cdot g\cdot h^{-1}(t)$ は

$$k(t)\cdot g\cdot h^{-1}(t): \quad Q = q - \frac{1}{2}\,g\,t^2 - \frac{p - mgt}{m}\,t \qquad\qquad P = p - mgt - t$$

となる。

念のためにこの変換が正準変換となっていることを図 5.2 の方法で直接確かめてみよう。まず変換式より (A-1)

$$\dot{Q} = \dot{q} - gt - \frac{\dot{p} - mg}{m}t - \frac{p - mgt}{m} \qquad\qquad \dot{P} = \dot{p} - mg - 1$$

となる。そして正準方程式 $\frac{p}{m} = \dot{q}, mg = \dot{p}$ を使って $\dot{q}, \dot{p}$ を消すと (A-2)

$$\dot{Q} = \frac{p}{m} - gt - \frac{mg - mg}{m}t - \frac{mg - mgt}{m} = 0 \qquad\qquad \dot{P} = mg - mg - 1 = -1$$

となる。一方 Q, P 系の正準方程式を使うと (B-1)

$$\dot{Q} = 0 \qquad \dot{P} = -1$$

となり、この 2 つの方法で求めた $\dot{Q}, \dot{P}$ は一致する。よって正準変換であることが確かめられた。【解答終】

5.3 母関数による正準変換 1

さて、これから母関数による正準変換について説明する。それは巧妙で、わかりづらい理屈である。まず準備として次の命題を述べよう。

定理 5.5 q, p が、q, p, t の関数（ではあるが $\dot{q}, \dot{p}$ の関数ではない）$H(q, p, t)$ に対して、正準方程式を満たすことと、q, p が

$$\mathcal{L} \equiv \sum_i p_i \dot{q}_i - H(q, p, t)$$

についてのオイラーの方程式を満たすことは同値である。

【証明】$\mathcal{L}$ に対して p_i, q_i についてのオイラーの方程式は、p_i については

$$0 = \dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

q_i については

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

となり、正準方程式と一致する。【証明終】

だから、

1.　P, Q が $K(Q, P, t)$ に対して正準方程式を満たすためには

$$\mathcal{L}' \equiv \sum_i P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t)$$

が P, Q についてのオイラーの方程式を満たしていればよい。

さて定理 1.1 の等式 4 で述べたように q, p, t の任意の関数 F の時間微分 $dF(q, p, t)/dt$ は q, p について、オイラーの方程式を満たす[*3]。q, p が H に対して正準方程式を満たしているのだから

$$\mathcal{L} + \frac{dF(q, p, t)}{dt}$$

は q, p についてのオイラーの方程式を満たしている。定理 1.3 で述べたように、ある変数に対してオイラーの方程式が成り立つなら、逆変換可能な変数変換 $q, p \to Q, P$ で[*4]、その新たな変数 Q, P についてもオイラーの方程式が成り立つのであった。だから

2.　$\mathcal{L} + dF(q, p, t)/dt$ は Q, P についてもオイラーの方程式を満たしている[*5]。

$\mathcal{L} + dF(q, p, t)/dt$ は

$$\mathcal{L} + \frac{dF(q, p, t)}{dt} = \sum_i p_i \dot{q}_i - H + \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial F}{\partial t}$$

であり、$q, p, \dot{q}, \dot{p}, t$ の関数である。そして定理 1.8 より $Q, P, \dot{Q}, \dot{P}, t$ の関数である。それでもし

3.　変換 $q, p \to Q, P$ を使って、$\mathcal{L} + dF(q, p, t)/dt$ を $Q, P, \dot{Q}, \dot{P}, t$ の関数で表したとき、これが $\mathcal{L}'$ となるなら、1 と 2 より Q, P, K は正準方程式を満たす。

まとめると

[*3] 等式 4 での f が F、q が q, p に対応

[*4] 逆変換可能なことが必要なのは定理 1.2 で述べたように q, p が Q, P で表されることが必要だから。

[*5] もちろん、これを $Q, P, \dot{Q}, \dot{P}, t$ の関数であらわしたときにオイラーの方程式を満たしているという意味である。

定理 5.6

1.　q, p, H が正準方程式を満たす。

2.　変換 $q, p \to Q, P$ は逆変換可能である。

3.　この変換 $q, p \to Q, P$ を使うと

$$\sum_i P_i \dot{Q}_i - K = \sum_i p_i \dot{q}_i - H + \frac{dF(q,p,t)}{dt} \tag{5.8}$$

は $Q, P, \dot{Q}, \dot{P}, t$ についての恒等式となる。

このとき Q, P は K に対して正準方程式を満たす。すなわち $q, p, H \to Q, P, K$ は正準変換となる。

式 (5.8) が成り立つことの意味は、$Q, P, \dot{Q}, \dot{P}, t$ についての恒等式になることであり、定理 1.9 より $q, p, \dot{q}, \dot{p}, t$ についての恒等式になることである。しかし、決して正準方程式を使って $\dot{q}, \dot{p}$ を q, p, t で表し、その結果 q, p, t の（同じことだが Q, P, t の）恒等式になるという意味ではない (例題 5.4 参照)。尚、F は母関数という[*6]。

式 (5.8) を満たす正準変換が世間一般での正準変換の定義である。正準変換ではあるが式 (5.8) を満たさないものもある。すなわち

定理 5.7

$$\sum_i P_i \dot{Q}_i - K = \sum_i p_i \dot{q}_i - H + \frac{dF(q,p,t)}{dt}$$

を満たすことは正準変換のための必要条件ではない。

その例は本筋と関係ないことなので付録 B に記した[*7]。

例題 5.3

$$Q = -p - qt \qquad P = q \tag{5.9}$$

$$H = q \qquad K = P - \frac{P^2}{2}$$

という変換は正準変換になる。そのことを式 (5.8) が

$$F = -qp - \frac{1}{2}q^2 t$$

とすれば成り立つことを示し、確認せよ。

【解】式 (5.9) を逆に解くと

$$q = P \qquad p = -Q - Pt$$

---

*6　母関数 F の定義が通常の文献とは符号が逆になっていることに注意。

*7　2022 年 10 月追記：正準変換のための必要十分条件は

$$\sum_i P_i \dot{Q}_i - K = \sum_i p_i \dot{q}_i - H + G(q, \dot{q}, p, \dot{p}, t)$$

で、G がオイラーの方程式を満たすことである。G が dF/dt なら、もちろんオイラーの方程式を満たすが、必ずしも時間の全微分である必要はない（付録 B 参照）。

となるので、この変換は逆変換可能であり、定理 5.6 の 2 が満たされる。これを使って F を Q, P, t で表すと

$$\begin{aligned} F &= -P(-Q-Pt) - \frac{1}{2}P^2 t \\ &= PQ + \frac{1}{2}P^2 t \end{aligned}$$

となる。$\mathcal{L} + dF(q,p,t)/dt$ を $Q, P, \dot{Q}, \dot{P}, t$ で表すと

$$\begin{aligned} p\dot{q} - H + \frac{dF}{dt} &= (-Q-Pt)\dot{P} - P + \left(\dot{P}Q + P\dot{Q} + Pt\dot{P} + \frac{P^2}{2}\right) \\ &= P\dot{Q} - \left(P - \frac{P^2}{2}\right) \end{aligned}$$

となる。これは $\mathcal{L}'$ になっている。だからこの変換は正準変換になっている。

念のためにこの変換が正準変換となっていることを図 5.2 の方法で直接確かめてみよう。まず変換式より (A-1)

$$\dot{Q} = -\dot{p} - \dot{q}t - q \qquad \dot{P} = \dot{q}$$

となる。そして正準方程式より $0 = \dot{q}, -1 = \dot{p}$ である。これを使って $\dot{q}, \dot{p}$ を消すと (A-2)

$$\dot{Q} = 1 - q \qquad \dot{P} = 0$$

となる。一方 Q, P 系の正準方程式を使うと (B-1)

$$\dot{Q} = 1 - P \qquad \dot{P} = 0$$

となる。そして変換式より (B-2)

$$\dot{Q} = 1 - q \qquad \dot{P} = 0$$

となり、この 2 つの方法で求めた $\dot{Q}, \dot{P}$ は一致する。よって正準変換であることが確かめられた。【解答終】

例題 5.4　変換式 $q, p \to Q, P$ が恒等変換、すなわち

$$Q = q \qquad P = p \tag{5.10}$$

で、H, K がそれぞれ

$$H = \frac{p^2}{2} - \frac{q^2}{2} \qquad K = -\frac{P^2}{2} - \frac{3}{2}Q^2$$

のときは正準変換ではない。そして

$$F = pq$$

のときは式 (5.8) も満たされない。しかし、正準方程式の結果を使って、式 (5.8) を q, p, t 又は Q, P, t で表せば、式 (5.8) は満たされてしまう。以上のことを示せ。

【解】まず正準変換ではないことを示そう。図 5.2 の手順に沿って示すことにする。

(A-1) 変換式から

$$\dot{Q} = \dot{q} \qquad \dot{P} = \dot{p}$$

(A-2) 正準方程式から $\dot{q} = p, \dot{p} = q$ なので

$$\dot{Q} = p \qquad \dot{P} = q$$

となる。もう一つの方法で $\dot{Q}, \dot{P}$ を計算する。
(B-1) 正準方程式から

$$\dot{Q} = -P \qquad \dot{P} = 3Q$$

(B-2) 変換式から

$$\dot{Q} = -p \qquad \dot{P} = 3q$$

2 つの方法で得られた $\dot{Q}, \dot{P}$ が一致しないのでこれは正準変換ではない。
　次に

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + \frac{dF}{dt} \tag{5.11}$$

が $q, p, \dot{q}, \dot{p}, t$ の恒等式になっていないことを示そう。$\mathcal{L}'$ を $q, p, \dot{q}, \dot{p}, t$ で表すと

$$\mathcal{L}' = P\dot{Q} - \left(-\frac{P^2}{2} - \frac{3}{2}Q^2\right) = p\dot{q} + \frac{p^2}{2} + \frac{3}{2}q^2 \tag{5.12}$$

となる。一方、$\mathcal{L} + \frac{dF}{dt}$ を $q, p, \dot{q}, \dot{p}, t$ で表すと

$$\mathcal{L} + \frac{dF}{dt} = p\dot{q} - \left(\frac{p^2}{2} - \frac{q^2}{2}\right) + (p\dot{q} + q\dot{p}) = 2p\dot{q} + q\dot{p} - \frac{p^2}{2} + \frac{q^2}{2} \tag{5.13}$$

である。式 (5.12)、(5.13) より、式 (5.11) は $q, p, \dot{q}, \dot{p}, t$ の恒等式になっていない。
　ところが正準方程式から得られる

$$\dot{q} = p \qquad \dot{p} = q$$

を使うと

$$\mathcal{L}' = \frac{3}{2}p^2 + \frac{3}{2}q^2$$

となり、

$$\mathcal{L} + \frac{dF}{dt} = \frac{3}{2}p^2 + \frac{3}{2}q^2$$

となり、式 (5.11) は q, p, t についての恒等式となる。【解答終】

5.4　母関数による正準変換 2

　さて、正準変換になるためには式 (5.8) を満たせばよいということはわかったが、このままでは使いづらいので、式 (5.8) をもっと具体的な形にしてみよう。そこでやや天下り的だが、

> 変換 $q, p \to Q, P$ は逆変換可能なことは当然として、そのうえ q, p が q, Q で表せるような変換に限定する

としよう。例えば

$$Q = q + p \qquad P = q - p$$

という変換なら

$$q = q \qquad p = Q - q$$

というように q,p は q,Q で表せる。しかし

$$Q = 2q \qquad\qquad P = q - p$$

は q,Q で p を表すことが出来ない。尚、q,p が q,Q で表せる変換であるためには、

$$\det\left|\frac{\partial Q_i(q,p,t)}{\partial p_j}\right| \neq 0$$

であればよい (定理 1.5 **陰関数定理の系**参照)。

q,Q は当然 q,p で表せる。だから q,Q と q,p は逆変換可能な変換だということである。そして q,Q と Q,P も逆変換可能な変換だと言える（図 5.5 参照)。すなわち、座標空間が q,Q で表せるということである。

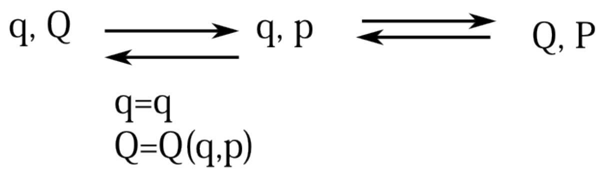

図 5.5

まとめると

補題 5.1 q,p が q,Q で表せるなら、q,Q から q,p の変換も q,Q から Q,P の変換も逆変換可能な変換である。

そして定理 1.8 を適応すると、q,p が q,Q で表せるなら、$q,Q,\dot{q},\dot{Q}$ から $q,p,\dot{q},\dot{p}$ の変換も逆変換可能な変換であると言える。だから式 (5.8)、すなわち $\mathcal{L}' = L + \frac{dF}{dt}$ は変数 $q,Q,\dot{q},\dot{Q},t$ で表すことができる。そして定理 1.9 を適応すると、

$\mathcal{L}' = L + \frac{dF}{dt}$ が変数 $q,Q,\dot{q},\dot{Q},t$ について恒等式になることと、変数 $q,p,\dot{q},\dot{p},t$ について恒等式になることは同値である。

と言える。そこで $q,Q,\dot{q},\dot{Q},t$ についての恒等式になるような条件を求めよう。母関数 F を q,Q,t で表して時間微分すると式 (5.8) は

$$\sum_i P_i\dot{Q}_i - K = \sum_i p_i\dot{q}_i - H + \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial F}{\partial Q_i}\dot{Q}_i + \frac{\partial F}{\partial t} \tag{5.14}$$

となる。もし

$$P_i = \frac{\partial F(Q.q,t)}{\partial Q_i} \qquad\qquad -p_i = \frac{\partial F(Q.q,t)}{\partial q_i}$$

$$-K = -H + \frac{\partial F(Q,q,t)}{\partial t}$$

が変数 q,Q,t の恒等式になるなら式 (5.14) は $q,Q,\dot{q},\dot{Q},t$ についての恒等式になる。だから $Q,P,\dot{Q},\dot{P},t$ の恒等式にもなる。よって $q,p,H \to Q,P,K$ は正準変換となる。以上、まとめると

定理 5.8

1.　変換 $q,p \to Q,P$ は逆変換可能であり、

2,　かつ、変換 $q,p \to Q,P$ は変換 $q,Q \to q,p$ が存在するような変換である。

3.

$$P_i = \frac{\partial F(Q.q,t)}{\partial Q_i} \qquad -p_i = \frac{\partial F(Q.q,t)}{\partial q_i} \tag{5.15}$$

が q,Q の恒等式になる。

4.

$$K = H - \frac{\partial F(Q,q,t)}{\partial t} \tag{5.16}$$

が q,Q の恒等式になる。

このとき Q,P,K は正準方程式を満たす。すなわち $q,p,H \to Q,P,K$ は正準変換となる。

例題 5.5　例題 5.3 でも示したように

$$Q = -p - qt \qquad P = q \tag{5.17}$$

$$H = q \qquad K = P - \frac{P^2}{2}$$

$$F = -qp - \frac{1}{2}q^2 t$$

とすれば

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + \frac{dF}{dt}$$

を満たすことを示した。この $q,p,H \to Q,P,K$ の変換と F が式 (5.15)(5.16) を満たしていることを確かめよ。

【解】まず、この定理 5.8 の 2 が可能かを確認しよう。q,p を q,Q で表すと

$$q = q \qquad p = -qt - Q$$

となるので可能である。次に式 (5.15) を確かめよう。この式を使って F から p を消去すると

$$\begin{aligned} F &= -q(-qt - Q) - \frac{1}{2}q^2 t \\ &= \frac{1}{2}q^2 t + qQ \end{aligned}$$

となる。だから

$$\frac{\partial F}{\partial Q} = q \qquad \frac{\partial F}{\partial q} = qt + Q$$

である。一方、変換式 (5.17) を使って、p,P を q,Q で表すと

$$P = q \qquad p = -qt - Q$$

である。よって式 (5.15) が成り立っていることがわかる。最後に式 (5.16) が成り立っていることを確かめよう。

$$H - \frac{\partial F(q, Q, t)}{\partial t} = q - \frac{1}{2}q^2$$

である。一方 K を q, Q で表すと

$$\begin{aligned} K &= P - \frac{P^2}{2} \\ &= q - \frac{q^2}{2} \end{aligned}$$

である。よって式 (5.16) が成り立っていることが確かめられた。だからこの変換は正準変換になると言えるわけである。【解答終】

定理 5.8 を使って、与えられた母関数 F から正準変換を作り出す方法と与えられた K から正準変換を作り出す方法を示そう。定理 1.6 から次のことが言える。

補題 5.2　関数 $F(q, Q, t)$ が

$$\det \left| \frac{\partial^2 F}{\partial Q_j \, \partial q_i} \right| \neq 0 \tag{5.18}$$

を満たすなら、

$$\frac{\partial F(q, Q, t)}{\partial Q_i} = P_i \tag{5.19}$$

$$\frac{\partial F(q, Q, t)}{\partial q_i} = -p_i \tag{5.20}$$

の陰関数から変換 $q, p \to Q, P$ を定めることができ、それは逆変換可能である。

では、準備ができたので母関数 F から正準変換を作る方法を述べよう。

定理 5.9　母関数 F から正準変換を作る

1.　$F(q,Q,t)$ は

$$\det\left|\frac{\partial^2 F}{\partial Q_j\,\partial q_i}\right| \neq 0 \tag{5.21}$$

を満たし、

2.　変換 $q,p \to Q,P$ を

$$\frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial Q_i} = P_i \qquad\qquad \frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial q_i} = -p_i \tag{5.22}$$

の陰関数から定め、

3.　K を

$$K \equiv H\left(q,p,t\right) - \frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial t} \tag{5.23}$$

と定め、

4.　2 を使ってこの式の q,p を消去し K を Q,P,t で表す。

このとき Q,P,K は正準方程式を満たす。すなわち $q,p,H \to Q,P,K$ は正準変換となる。

【証明】定理 5.8 の条件を満たしていることを確認すればよい。
定理 5.8 の 1：式 (5.21) が成り立つので補題 5.2 より逆変換可能といえる。
定理 5.8 の 2：ここでの 2 から p が Q,q で表わせているので q,p は q,Q で表せる。
定理 5.8 の 3：ここでの 2 そのままである。
定理 5.8 の 4：式 (5.23) で K を定理 5.8 の 4 が成り立つように決めているのだから成り立つ。【証明終】

例題 5.6　母関数 $F=qQ+qt$、$H=q^2$ として、これから正準変換となるように q,p から Q,P への変換と K をもとめよ。
【解】式 (5.22) をこれに適用すると

$$q = P \qquad\qquad Q+t=-p$$

これから変換 $q,p \to Q,P$ は

$$Q=-p-t \qquad P=q$$

となる。又式 (5.23) を適用すると

$$\begin{aligned} K &= q^2 - q \\ &= P^2 - P \end{aligned}$$

となる。【解答終】

次に与えられた K から正準変換を作る方法を示そう。

定理 5.10　与えられた K から正準変換を作る

$K\left(Q,\frac{\partial F}{\partial Q},t\right)$ は $K(Q,P,t)$ の P_j のところに $\frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial Q_i}$ を代入したもの。同じく $H\left(q,-\frac{\partial F}{\partial q},t\right)$ は $H(q,p,t)$ の p_i のところに $-\frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial q_i}$ を代入したものとする。

1.　$F(q,Q,t)$ は偏微分方程式

$$K\left(Q,\frac{\partial F}{\partial Q},t\right)=H\left(q,-\frac{\partial F}{\partial q},t\right)-\frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial t} \tag{5.24}$$

の解である。

2.　そして $F(q,Q,t)$ は

$$\det\left|\frac{\partial^2 F}{\partial Q_j\,\partial q_i}\right|\neq 0 \tag{5.25}$$

を満たす

3.　そして

$$\frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial Q_i}=P_i \qquad\qquad \frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial q_i}=-p_i \tag{5.26}$$

の陰関数から変換 $q,p\to Q,P$ を定める。

このとき Q,P,K は正準方程式を満たす。すなわち $q,p,H\to Q,P,K$ は正準変換となる。

【証明】定理 5.8 の条件を満たしていることを確認すればよい。
定理 5.8 の 1：ここでの 2 が成り立つので補題 5.2 を使うと逆変換可能といえる。
定理 5.8 の 2：ここでの 3 から p が Q,q で表わせているので q,p は q,Q で表せる。
定理 5.8 の 3：ここでの 3 の陰関数から変換 $q,p\to Q,P$ を定めるということは、当然成り立つ。
定理 5.8 の 4：式 (5.24) を満たしているということは、式 (5.24) は q,Q,t についての恒等式になっているということである。定理 5.8 の 4 はある変数系 q,p,t でもいいし Q,P,t でもよいし q,Q,t でもいいので、それで恒等式になるという意味である。だから q,Q,t で恒等式なら成り立つのである。【証明終】

今は、変換は q,p が q,Q で表せる場合に限定していたが、q,Q で表せないときもある。その場合の条件も記述したいが本筋から離れるので付録 C とした。

例題 5.7

$$H=q \qquad K=P$$

のとき、偏微分方程式式 (5.24) を解いて、K,Q,P が正準方程式を満たすような変換 $q,p\to Q,P$ を求めよ。
【解答】この場合偏微分方程式 (5.24) は

$$\frac{\partial F}{\partial Q}=q-\frac{\partial F}{\partial t}$$

となる。この解として $F = qQ$ がある。そしてこの F は

$$\frac{\partial^2 F}{\partial Q \partial q} = 1$$

なので、式 (5.25) を満たしている。そして式 (5.26) より

$$q = P \qquad Q = -p$$

を得る。だから変換 $q, p \to Q, P$ は

$$Q = -p \qquad\qquad P = q$$

と求まる。【解答終】

5.5　ハミルトンヤコビの方程式の導出

さて、今式 (5.24) で $H = 0$ の場合を考えよう。すると式 (5.24) は

$$K\left(Q, \frac{\partial F}{\partial Q}, t\right) + \frac{\partial F(q, Q, t)}{\partial t} = 0 \tag{5.27}$$

となる。$H = 0$ で、q, p は H に対して正準方程式を満たすわけだから、q も p も時間に依存しない定数となる。だから

$$\frac{\partial F(q, Q, t)}{\partial Q_i} = P_i \qquad\qquad \frac{\partial F(q, Q, t)}{\partial q_i} = -p_i$$

の陰関数から求めた Q, P は正準方程式のいわゆる解になる。この偏微分方程式 (5.27) をハミルトンヤコビの方程式という。変換を図形的に表すと図 5.6 のようになる。q, p は時間経過しても変化しない。

今述べたことを通常の文献に合わせた記号に改め、記号を整理してまとめよう。q_i, p_i は時間に依存しない定数なので $\alpha_i, -\beta_i$ とする。そして K, Q, P を H, q, p と書き改めよう。F は S と改める。その記号で以下のことが言える。

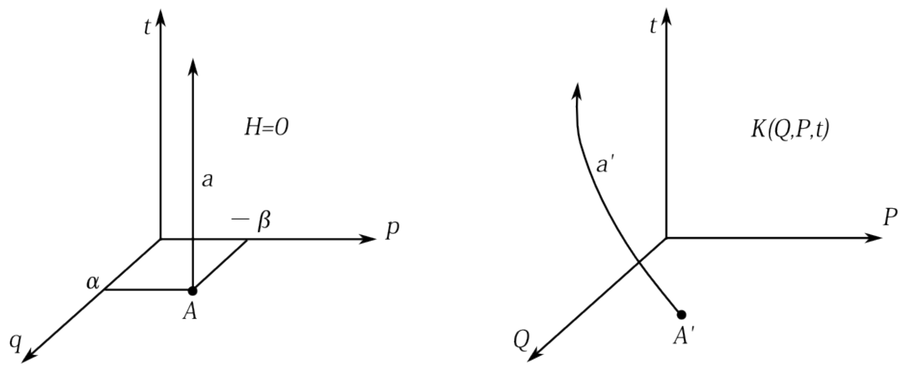

図 5.6

定理 5.11　ハミルトニアン $H(q,p,t)$ に対して、未知関数 $S(q,\alpha,t)$ についての偏微分方程式

$$H\left(q,\frac{\partial S}{\partial q},t\right)+\frac{\partial S}{\partial t}=0$$

をハミルトンヤコビの方程式という。$H\left(q,\partial S/\partial q,t\right)$ は $H(q,p,t)$ の p_i のところに $\partial S/\partial q_i$ を代入したもの。さらに S は

$$\det\left|\frac{\partial^2 S}{\partial q_j\,\partial \alpha_i}\right|\neq 0$$

も満たす。そして、この方程式の解 S を使った式で

$$\frac{\partial S(q,\alpha,t)}{\partial q_i}=p_i \qquad\qquad \frac{\partial S(q,\alpha,t)}{\partial \alpha_i}=\beta_i$$

の陰関数から求まる q,p は H に対して正準方程式

$$\frac{\partial H}{\partial q_i}=-\dot{p}_i \qquad\qquad \frac{\partial H}{\partial p_i}=\dot{q}_i$$

を満たす。

5.6　まとめ

正準変換とは q,p,H が正準方程式を満たしているとき、$q,p\to Q,P$ と変数変換して、$H\to K$ と変換して、その変換によって Q,P,K が正準方程式を満たすような変換である。簡単に言えば微分方程式の変数変換である。この定義は世間一般での正準変換の定義とは異なることに注意。範囲が広いのである。

任意の変換 $q,p\to Q,P$ に対して Q,P と正準方程式を満たすような K が必ず存在するわけではないが (定理 5.1)。しかし与えられた K に対して、Q,P,K が正準方程式を満たすような変換 $q,p\to Q,P$ は必ずある (定理 5.2)。それは q,p,H 系と Q,P,K 系の解軌道を対応させればよいからである。このことから、正準変換の逆変換も正準変換になると言える。又、正準変換を続けて行っても正準変換になるので、正準変換は群をなすと言える。

正準変換を実際に作り出す方法として母関数を使った方法がある。それは

$$\mathcal{L}'=\mathcal{L}+\frac{dF}{dt} \tag{5.28}$$

を満たせば、正準変換になるというものである。ここで $\mathcal{L}$ は $\sum_i p_i\dot{q}_i-H$ のこと。F を母関数という。その根拠は

1. 　$\mathcal{L}$ に対して q,p がオイラーの方程式を満たすことと正準方程式は同値 (定理 5.5)

2. 　q,p,t の任意の関数 $F(q,p,t)$ の時間微分はオイラーの方程式を満たす (定理 1.1 等式 4)。

3. 　ある系でオイラーの方程式を満たすなら他の系でも満たす。(定理 1.3)

である。この (5.28) 式を満たす正準変換が世間一般での正準変換の定義である。(5.28) 式を満たすことは正準変換のために必要条件ではない (定理 5.7)。その証明は付録 B に記した。

変換 $q,p \to Q,P$ が、q,p が q,Q で表せるような変換の場合 (他の場合は付録 C 参照)、式 (5.28) は

$$P_i = \frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial Q_i} \qquad\qquad -p = \frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial q} \tag{5.29}$$

$$K - H + \frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial t} = 0 \tag{5.30}$$

と同値である。そこで与えられた母関数 $F(q,Q,t)$ から式 (5.29) を使って変換 $q,p \to Q,P$ を定め、式 (5.30) から K を定めて正準変換を作るという方法がある。又、与えられた K から F を未知関数とする偏微分方程式

$$K\left(Q, \frac{\partial F}{\partial Q}, t\right) = H\left(q, -\frac{\partial F}{\partial q}, t\right) - \frac{\partial F(q,Q,t)}{\partial t} \tag{5.31}$$

を解き、その解 F から式 (5.29) を使って変換 $q,p \to Q,P$ を定めるという方法もある。尚、どちらの場合も式 (5.29) から変換 $q,p \to Q,P$ を定めることができるためには

$$\det\left|\frac{\partial^2 F}{\partial Q_j \partial q_i}\right| \neq 0$$

であればよい。式 (5.31) で $H = 0$ とした偏微分方程式をハミルトンヤコビの方程式という。$H = 0$ なので q,p は時間によらない定数となる。だから式 (5.29) を使って Q,P を q,p,t の関数として求めたものは正準方程式のいわゆる解となる。

第 6 章

ハミルトンヤコビの方程式

前章でハミルトンヤコビの方程式を導出したが、この章ではその解について考察する。ハミルトンヤコビの方程式というのは具体的な問題について解いてみないとわかった気がしないと思う。いくつか解いていけば、その物理的な意味が感覚的にわかってくると思う。ハミルトンヤコビの方程式から正準方程式の解軌道を求めるというのは実用上は全く役に立たない。しかし、ハミルトンヤコビの方程式の解 S をプランク定数 $\hbar$ で割ったものが、シュレディンガー方程式の解 ψ の位相と近似できる。すなわち

$$\exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right) \cong \psi$$

とできるということにその意義があると思う。そのように近似できることの証明は最後の第 6.14 節で述べる。1 粒子の系のみを扱うが、多粒子系でもその本質は変わらないと思う。概要としてはまずハミルトンヤコビの方程式の解から正準方程式の解が得られることを証明した。具体例としては直交座標と平面極座標でのハミルトンヤコビの方程式の解と軌道の性質について調べた。常にハミルトンヤコビの方程式の解が波動関数の位相と関係あるということを前提として説明した。ハミルトンヤコビの方程式の解の図形的な側面を個々の場合で調べた。具体例を考えながらハミルトンヤコビの方程式の解の一般的な特徴を述べるという帰納的な方法を取った。ハミルトンヤコビの方程式というのは 1 階偏微分方程式であり、その一般論というのがあるようだが、私自身その知識がないので扱わない[*1]。ハミルトンヤコビの方程式は不変方程式であり、その解が不変量であることを示した。またハミルトンヤコビの方程式の解とラグランジアンの関係、ハミルトンヤコビの方程式の解の等高線と軌道が直交すること、等高線の間隔は p に逆比例すること、近似波動関数の群速度が古典軌道の速度と一致していること、角運動量の量子化などについて述べた。

6.1 ハミルトンヤコビの方程式の解から正準方程式の解が得られること

前章でハミルトンヤコビの方程式を導出し、その解から正準方程式の解が得られることを示した。しかしその導出は長く紆余曲折したものであった。歴史的にはそうやってハミルトンヤコビの方程式を見つけたのだろうが決してわかりやすいものではない。そこでこの章の初めにハミルトンヤコビの方程式の解から正準方程式の解が得られるということを簡明な方法で証明しよう。そうすれば前章を飛ばした読者にも役立とう。

[*1] 2022 年 10 月追記 : 筆者の個人的な話だが、その後、スミルノフ高等数学教程 9 巻から、1 階偏微分方程式についての知識を得た。このテキストで扱っているハミルトンヤコビの方程式の解というのは、エネルギーの等しい軌道群が得られる解だけである。正準方程式を解くという観点からは、それで十分だと思う。

定理 6.1　ハミルトンヤコビの方程式は未知関数 S についての偏微分方程式

$$H\left(q,\frac{\partial S}{\partial q},t\right)+\frac{\partial S}{\partial t}=0 \tag{6.1}$$

である。H は系のハミルトニアンである。$H\left(q,\partial S/\partial q,t\right)$ は $H(q,p,t)$ の p_i のところに $\partial S/\partial q_i$ を代入したものである。S は q_i,α_i,t の関数である。q_i と α_i の個数は等しい。例えば q が 2 個、q_1,q_2 なら、α も α_1,α_2 と 2 個あるいうことである。α_i は t に依存しない定数である。ハミルトンヤコビの方程式の解 S から

$$\frac{\partial S(q,\alpha,t)}{\partial q_i}=p_i \tag{6.2}$$

$$\frac{\partial S(q,\alpha,t)}{\partial \alpha_i}=\beta_i \tag{6.3}$$

という式を作る。β_i は t に依存しない定数である。そして S は式 (6.1) と共に

$$\det\left|\frac{\partial^2 S}{\partial q_j\,\partial \alpha_i}\right|\neq 0 \tag{6.4}$$

も満たしていればならないとする。そうすれば定理 1.6 より、式 (6.2),(6.3) の陰関数として q,p が α,β,t の関数として求まり、その q_i,p_i は正準方程式

$$\frac{\partial H}{\partial p_i}=\dot{q}_i \qquad \frac{\partial H}{\partial q_i}=-\dot{p}_i \qquad (i=1,\cdots,k)$$

を満たす。α_i,β_i を正準定数と呼ぶことにする。

【証明】少し長く冗長な定理となってしまったが、ここで主張していることは S が式 (6.1) を満たし、α,β が時間に依存しないなら、式 (6.2)、式 (6.3) の陰関数から求まった q,p が正準方程式

$$\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial p_i}=\dot{q}_i \qquad \frac{\partial H(q,p,t)}{\partial q_i}=-\dot{p}_i$$

を満たすということである。すなわち、q,p は式 (6.2)、式 (6.3) の陰関数から α,β,t の関数として求まり、それを時間で微分すれば $\dot{p},\dot{q}$ も α,β,t の関数として求まる。そして $\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial p},-\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial q}$ も、その q,p を使えば α,β,t の関数として求まる。それが一致するということである。すなわち正準方程式の左辺と右辺が α,β,t の恒等式になるということである。定理 1.6 より、α,β から q,α への変換は互いに逆変換可能なので定理 1.7 より q,α,t の恒等式であることが示されればよいことになる。もちろん q,p,t の恒等式であることを示してもいいのだが、ハミルトンヤコビの方程式の解が q,α,t の関数として表されているので q,α,t の方が楽なのである。そういうわけで q,α,t の恒等式であることを証明しよう。

式 (6.3) を時間で全微分すると

$$\sum_j\frac{\partial^2 S(q,\alpha,t)}{\partial q_j\,\partial \alpha_i}\dot{q}_j+\frac{\partial^2 S(q,\alpha,t)}{\partial t\,\partial \alpha_i}=0 \tag{6.5}$$

が成り立つ。これを $\dot{q}$ について解けば $\dot{q}$ が q,α,t で表せるわけである。ところでハミルトンヤコビの方程式 (6.1) での $H\left(q,\frac{\partial S}{\partial q},t\right)$ というのは $H(q,p,t)$ の p_j のところに $\frac{\partial S}{\partial q_j}$ を代入したものであった。そして p 自体も $p_j=\frac{\partial S(q,\alpha,t)}{\partial q_j}$ という式で q,α,t の関数として表されるのであった。だから $\frac{\partial S(q,\alpha,t)}{\partial q_j}$ を $p_j(q,\alpha,t)$ と書けば、

ハミルトンヤコビの方程式は

$$H\Big(q,p(q,\alpha,t),t\Big)+\frac{\partial S(q,\alpha,t)}{\partial t}=0 \tag{6.6}$$

と書ける。これは q,α,t の恒等式なので、α_i で偏微分すると

$$\sum_j \frac{\partial p_j(q,\alpha,t)}{\partial \alpha_i}\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial p_j}+\frac{\partial^2 S(q,\alpha,t)}{\partial \alpha_i \partial t}=0 \tag{6.7}$$

が成り立つ。さて $\frac{\partial^2 S(q,\alpha,t)}{\partial q_j \partial \alpha_i}=\frac{\partial p_j(q,\alpha,t)}{\partial \alpha_i}$ であることを思い出して、式 (6.5) と式 (6.7) を見比べると $\dot{q}_j$ の部分が $\frac{\partial H}{\partial p_j}$ に置き換わっただけである。だからそれぞれの式で $\dot{q}_j$ と $\frac{\partial H}{\partial p_j}$ について解くことができるならば、解は同じものになる。そして条件式 (6.4) より解くことは可能である。だから正準方程式 $\frac{\partial H}{\partial p_j}=\dot{q}_j$ の両辺を q,α,t で表せばそれは q,α,t の恒等式になる。

もう 1 つの方を証明しよう。式 (6.2) を時間で全微分すると

$$\sum_j \frac{\partial^2 S(q,\alpha,t)}{\partial q_j \partial q_i}\dot{q}_j+\frac{\partial^2 S(q,\alpha,t)}{\partial t \partial q_i}=\dot{p}_i \tag{6.8}$$

が成り立つ。一方ハミルトンヤコビの方程式 (6.6) は q,α,t の恒等式なので q_i で偏微分すると

$$\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial q_i}+\sum_j \frac{\partial p_j(q,\alpha,t)}{\partial q_i}\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial p_j}+\frac{\partial^2 S(q,\alpha,t)}{\partial q_i \partial t}=0 \tag{6.9}$$

が成り立つ。さて式 (6.8) と式 (6.9) を比べると、$\frac{\partial^2 S(q,\alpha,t)}{\partial q_j \partial q_i}=\frac{\partial p_j(q,\alpha,t)}{\partial q_i}$ であり、$\frac{\partial H}{\partial p_j}=\dot{q}_j$ であるので、$\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial q_i}=-\dot{p}_i$ の両辺を q,α,t で表せばそれは q,α,t の恒等式になる。【証明終】

ある時間での系の状態は q と $\dot{q}$ を定めれば決まる。$q,\dot{q}$ から q,p への変換は逆変換可能なので、系の状態は q,p を定めても決まる。又、定理 1.6 より、α,β から q,α への変換は互いに逆変換可能なのだから

ある時間での系の状態は q と α を指定すれば決まる。

と言える。大ざっぱに言えばラグランジュ方程式は系の状態を $q,\dot{q}$ で指定するもの、正準方程式は系の状態を q,p で指定するもの、ハミルトンヤコビの方程式は系の状態を q,α で指定するものと言える。

6.2　1 次元自由粒子

最も簡単な例として、1 次元自由粒子の場合を考えよう。1 次元自由粒子のハミルトニアンは

$$H=\frac{p^2}{2m}$$

である。だからハミルトンヤコビの方程式は p のところに $\frac{\partial S}{\partial x}$ を代入した

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S(x,\alpha,t)}{\partial x}\right)^2+\frac{\partial S(x,\alpha,t)}{\partial t}=0 \tag{6.10}$$

である。この偏微分方程式を満たす $S(x,\alpha,t)$ を求めればよいわけである。そこで

$$S=-Et+\alpha x+c \tag{6.11}$$

とおいてみよう。E と c は x,t に依存しない定数である。これを式 (6.10) に代入すると、

$$\frac{\alpha^2}{2m} = E \tag{6.12}$$

が成り立つなら式 (6.11) はハミルトンヤコビの方程式の解になることがわかる。だから

$$S = -\frac{\alpha^2}{2m}t + \alpha x + c \tag{6.13}$$

が 1 次元自由粒子のハミルトンヤコビの方程式の解である。そして S の満たすべき条件式 (6.4) が満たされていることを確認しなければならない。今の場合 $\det \left| \frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial \alpha_i} \right|$ は 1 行 1 列の行列で成分は

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x \partial \alpha} = 1$$

である。行列式の値は 1 であり、条件式 (6.4) は満たされている。

次にこの S から x と p を時間の関数として求めてみよう。前章で述べたように

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = \beta \qquad\qquad \frac{\partial S}{\partial x} = p$$

から x,p を求める。そうすると

$$-\frac{\alpha}{m}t + x = \beta \qquad\qquad \alpha = p$$

を得る。よって

$$x = \frac{\alpha}{m}t + \beta \qquad\qquad p = \alpha$$

と求まる。これがハミルトニアン $H = p^2/2m$ のときの正準方程式の解である。

6.3 正準定数について

さて、もう少し 1 次元自由粒子の例を考察して理解を深めよう。解は

$$S = -\frac{\alpha^2}{2m}t + \alpha x + c$$

であったが、正準定数 α の役は、この式の α でなくてもよい。正準定数としての α の役割とは、$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = \beta$ に使う定数のことである。式 (6.12) に立ち戻って、(条件式 (6.4) さえ満たしていれば、) E をその役としても良いわけである。この場合、解 S は

$$S = -E\, t + \sqrt{2mE}\, x + c$$

と表される。条件式 (6.4) は今の場合

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x \partial E} \neq 0$$

なので満たされている。そして

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \beta \qquad\qquad \frac{\partial S}{\partial x} = p$$

より

$$-t + \frac{m}{\sqrt{2mE}}x = \beta \qquad\qquad \sqrt{2mE} = p$$

を得る。これから

$$x = \frac{\sqrt{2mE}}{m}t + \frac{\sqrt{2mE}}{m}\beta \qquad\qquad p = \sqrt{2mE}$$

と求まる。

ところで、ハミルトンヤコビの方程式の解 (6.13) の

$$S = -\frac{\alpha^2}{2m}t + \alpha x + c$$

で、この c を正準変数としての定数とできるだろうか。この場合

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x \partial c} = 0$$

となり、条件式 (6.4) は満たされないので、だめなのである。実際

$$\frac{\partial S}{\partial c} = \beta \qquad\qquad \frac{\partial S}{\partial x} = p$$

より

$$1 = \beta \qquad\qquad \alpha = \beta$$

となる。これでは x, p が求まらないのである。

一般に

> α が正準定数で、$\alpha \to \alpha'$ と変換したとき、$\det\left|\frac{\partial \alpha'_j}{\partial \alpha_i}\right| \neq 0$ なら、α' も正準定数となる。

【証明】$\det\left|\frac{\partial \alpha'_j}{\partial \alpha_i}\right| \neq 0$ なら

$$\det\left|\frac{\partial \alpha_j}{\partial \alpha'_i}\right| \neq 0$$

である。そして

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \alpha'_i \partial q_j} = \sum_k \frac{\partial \alpha_k}{\partial \alpha'_i}\frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_k \partial q_j}$$

である。だから

$$\det\left|\frac{\partial^2 S}{\partial \alpha'_i \partial q_j}\right| = \det\left|\frac{\partial \alpha_k}{\partial \alpha'_i}\right| \det\left|\frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_k \partial q_j}\right| \neq 0$$

となる。だから α' も正準定数となる。【証明終】

6.4 時間を含まないハミルトニアンのハミルトンヤコビの方程式

さて今のようにハミルトニアンが時間を含まない場合（基本的には時間を含まない場合しか扱わないのだが)、E を定数として

$$S(q, \alpha, t) = -Et + W(q, \alpha)$$

とおくとハミルトンヤコビの方程式は

$$H\left(q, \frac{\partial W(q, \alpha)}{\partial q}\right) = E \tag{6.14}$$

となる。この E というのはハミルトンヤコビの方程式から求められた軌道のエネルギーに対応することになる。それは $\partial w/\partial q = p$ だからである。

6.5　1 次元でポテンシャルがある場合

次に 1 次元でポテンシャルがある場合のハミルトンヤコビの方程式を考えよう。

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

なのでハミルトンヤコビの方程式は $S = -Et + W(x, \alpha)$ とおいて

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + V(x) = E$$

である。これから

$$\frac{\partial W}{\partial x} = \pm\sqrt{2m[E - V(x)]} \tag{6.15}$$

であればよいわけである。だから

$$W = \pm\int^x \sqrt{2m[E - V(x')]}dx'$$

であれば良く、

$$S = -E\,t \pm \int^x \sqrt{2m[E - V(x')]}dx'$$

と解が求まる。この場合において E をそのまま正準定数としてみよう。このとき

$$\frac{\partial^2 S}{\partial E \partial x} = \frac{m}{\sqrt{2m[E - V(x)]}}$$

なので、$E - V(x) = 0$ でない領域で正準定数として使える。

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \beta \qquad \frac{\partial S}{\partial x} = p$$

より

$$-t \pm \int^x \frac{m}{\sqrt{2m[E - V(x')]}}dx' = \beta \qquad \sqrt{2m[E - V(x)]} = p$$

が得られる。尚、ハミルトンヤコビの方程式の解の定義域は式 (6.15) より、$E - V(x) \geq 0$ という領域に限られる。

6.6　2 次元自由粒子

6.6.1　解と軌道

次に自由粒子の 2 次元の場合を考える。解き方は 1 次元の場合と全く同じである。直交座標でハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2\right)$$

なので時間を含まないハミルトンヤコビの方程式 (6.14) は

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2\right] = E$$

である。

$$W = \alpha_x x + \alpha_y y$$

として代入すると

$$\frac{1}{2m}(\alpha_x^2 + \alpha_y^2) = E$$

であればよい。だからハミルトンヤコビの方程式の解は

$$S = -\frac{1}{2m}(\alpha_x^2 + \alpha_y^2)t + \alpha_x x + \alpha_y y \tag{6.16}$$

である。

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_x} = \beta_x, \quad \frac{\partial S}{\partial x} = p_x, \quad \frac{\partial S}{\partial \alpha_y} = \beta_y, \quad \frac{\partial S}{\partial y} = p_y$$

より

$$-\frac{\alpha_x}{m}t + x = \beta_x, \qquad \alpha_x = p_x \qquad -\frac{\alpha_y}{m}t + y = \beta_y, \qquad \alpha_y = p_y$$

を得る。よって正準方程式の解は

$$x = \frac{\alpha_x}{m}t + \beta_x, \qquad p_x = \alpha_x \qquad y = \frac{\alpha_y}{m}t + \beta_y, \qquad p_y = \alpha_y$$

と求まる。尚、2 次元自由粒子のハミルトンヤコビの方程式の解はもう 1 つある[*2]。それは 6.9.2 小節で簡単に紹介する。

6.6.2 軌道と S の図形関係

さて、今から 2 次元自由粒子の S と軌道の図形的な関係を見よう。まず S の空間部分 $W(x, y, \alpha_x, \alpha_y) = \alpha_x x + \alpha_y y$ について考える。α_x, α_y が与えられれば、すなわち運動量が与えられれば、W は位置座標 x, y のみの関数となる。そこで W が一定となる線、いわゆる等高線を、W の変化が等しい間隔ごとに描いてみよう。$W = \alpha_x x + \alpha_y y$ で例えば $(\alpha_x, \alpha_y) = (2, 1)$ とし $W = 0$ として、その線を描き、次に $W = 1, W = 2$ と

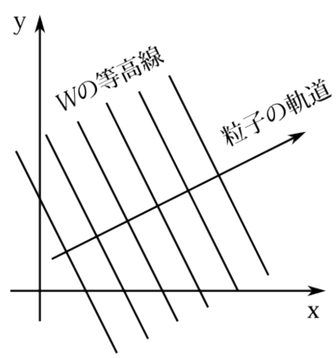

図 6.1　$W = 2x + y$ としたときの軌道と W の等高線の関係

[*2] 2022 年 10 月追記：ハミルトンヤコビの方程式の解は無限にあるが、ここでは代表的なものがもう 1 つある程度の意味と考えてもらいたい。

変えて、その線を描けば良いわけである。図 6.1 がその様子である。ところで等高線の方向の変位ベクトル $(\Delta x, \Delta y)$ は、それに対応する W の変化 ΔW は 0 だというのだから

$$\frac{\partial W}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial W}{\partial y}\Delta y = 0$$

である。すなわち等高線と $\nabla W = \left(\frac{\partial W}{\partial x}, \frac{\partial W}{\partial y}\right)$ は直交する。又

$$\left(\frac{\partial W}{\partial x}, \frac{\partial W}{\partial y}\right) = (p_x, p_y)$$

なので、等高線と (p_x, p_y) を成分とするベクトルは直交する。(p_x, p_y) は軌道の進行方向なので**等高線は軌道と直交する**と言える[*3] 。等高線と軌道が直交することはポテンシャルがある場合でも成り立つことである。それは今の証明からわかろう。そして、等高線と軌道が直交することは、どの座標でハミルトンヤコビの方程式の方程式を解いた場合でも成り立つことである。その証明は 6.12 節で述べる。もしシュレディンガーの波動関数 ψ が

$$\psi \cong \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$$

と近似できるなら、等高線というのは同位相線となるから、同位相線と軌道は直交すると言える。

6.6.3　S 一定の点の動き

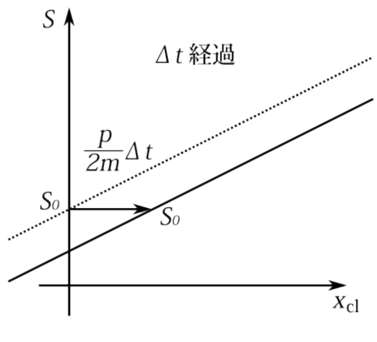

図 6.2　一つの軌道をとりだし、その軌道に沿った S 一定の点の動き。点線が最初の S の値。実線が Δt 後の S の値。S が一定の点 S_0 は $\frac{p}{2m}\Delta t$ 動く。

次に時間を含めて、等高線がどう動くかを見てみよう。そこで粒子の運動方向を x_{cl} 軸としてみると、

$$S = -\frac{p^2}{2m}t + p\,x_{\mathrm{cl}} \tag{6.17}$$

となる。ここで p は運動量の大きさ。そして図 6.2 のように横軸を粒子の進行方向の x_{cl}、縦軸を S とする。ある瞬間では、x と S の関係は図 6.2 の点線のようであり、それから Δt たつと S は $\frac{p^2}{2m}\Delta t$ 下がって図 6.2 の

[*3] 2022 年 10 月追記 : 多粒子系の場合は、個々の粒子の質量が異なれば、運動量は軌道の向きと一致しなくなるので、等高面と軌道が直交するとは言えない。

実線になる。S 一定の点がどう動くかというと、式 (6.17) より

$$x_{\mathrm{cl}} = \frac{p}{2m}t + \frac{S}{p}$$

だから $p/2m$ の速さで動く。すなわち粒子の速さの半分で動くわけである。自由粒子の場合 $\exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$ はシュレディンガー方程式の解になっている。だから S 一定は、位相が一定ということであり、それが $p/2m$ の速さで動くということは、位相速度が $p/2m$ だということである。

6.7　2 次元一様重力場

6.7.1　解と軌道

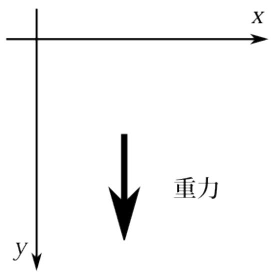

図 6.3　下向き＝重力の向きに y 軸の正の向きをとる。

次に自由落下粒子のハミルトンヤコビの方程式を解こう。この場合の解 S を研究すれば、他の場合の S の概要も予想がつく。というのは他のポテンシャルのときでも、狭い領域では力の大きさ、向きは共に一定と考えられるからである。空間を 2 次元として座標軸は図 6.3 のように重力の方向に y 軸の正の向きをとるとハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2\right) - mgy$$

となる。だから時間を含まないハミルトンヤコビの方程式は

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2\right] - mgy = E \tag{6.18}$$

となる。左辺に x は現れないので

$$W = \alpha_x x + Y(y)$$

とおこう。ここで $Y(y)$ は y のみの関数という意味である。これを式 (6.18) に代入すると

$$\frac{1}{2m}\left[\alpha_x^2 + \left(\frac{\partial Y}{\partial y}\right)^2\right] - mgy = E$$

となる。だから

$$\frac{dY}{dy} = \pm\sqrt{2m\left(E - \frac{\alpha_x^2}{2m} + mgy\right)}$$

であれば良いわけである。ここでの $\pm$ は $\frac{dY}{dy}$ が運動量なので、運動量の正負に、今の場合下向きか上向きに対応している。そして

$$S = -Et + \alpha_x x \pm \int^y \sqrt{2m\left(E - \frac{\alpha_x^2}{2m} + mgy'\right)} dy' \tag{6.19}$$

が解である。さて、E と α_x を正準変数としての定数としてもよいが、式を簡単にするために

$$E = E_y + \frac{\alpha_x^2}{2m}$$

とおこう。すると

$$Y = \pm \int^y \sqrt{2m}\sqrt{E_y + mgy'}\ \ dy'$$

となる。これを積分すると

$$Y = \pm \frac{2\sqrt{2m}}{3mg}(E_y + mgy)^{\frac{3}{2}}$$

となる。だからハミルトンヤコビの方程式の解 S は

2 次元自由落下のハミルトンヤコビの方程式の解

$$S = -\left(E_y + \frac{\alpha_x^2}{2m}\right) t + \alpha_x x \pm \frac{2\sqrt{2m}}{3mg}(E_y + mgy)^{\frac{3}{2}} \tag{6.20}$$

となる。$\pm$ とあるのは $+$ のときも $-$ のときも解となるという意味である。この S から軌道を求めよう。

(x 成分)　$\partial S/\partial \alpha_x = \beta_x, \partial S/\partial x = p_x$ より

$$-\frac{\alpha_x}{m}t + x = \beta_x, \qquad \alpha_x = p_x$$

これから

$$x = \frac{\alpha_x}{m}t + \beta_x \qquad p_x = \alpha_x$$

(y 成分)　$\partial S/\partial E_y = \beta_y, \partial S/\partial y = p_y$ より

$$-t \pm \frac{\sqrt{2m(E_y + mgy)}}{mg} = \beta_y \qquad \pm\sqrt{2m(E_y + mgy)} = p_y \tag{6.21}$$

右の式を左の式に入れて

$$p_y = mg(t + \beta_y)$$

式 (6.21) の右の式を自乗して

$$y = \frac{1}{mg}\left(\frac{p_y^2}{2m} - E_y\right)$$

を得る。まとめると解軌道は

2 次元自由落下の解軌道

$$\begin{aligned} x &= \frac{\alpha_x}{m}t + \beta_x & p_x &= \alpha_x \\ y &= \frac{1}{mg}\left(\frac{p_y^2}{2m} - E_y\right) & p_y &= mg(t + \beta_y) \end{aligned}$$

となる。

6.7.2　軌道と W の図形関係

次にこの W の等高線と軌道の関係を図示してみよう。まず式 (6.20) での ± の + の場合を図示しよう。これは落下している場合である。

$$W = \alpha_x x + \frac{2\sqrt{2m}}{3mg}(E_y + mgy)^{\frac{3}{2}}$$

を文字を改めて

$$W = \alpha_x x + \kappa(y + y_0)^{\frac{3}{2}} \tag{6.22}$$

としよう。ここで $\kappa = \frac{2m\sqrt{2g}}{3}$, $y_0 = E_y/mg$ である。この式を x に関して解くと

$$x = -\frac{\kappa}{\alpha_x}(y + y_0)^{\frac{3}{2}} + \frac{W}{\alpha_x} \tag{6.23}$$

となる。W 一定の等高線は

$$x = -\frac{\kappa}{\alpha_x}y^{\frac{3}{2}}$$

という曲線を y 方向に $-y_0$ ずらして x 方向に W/α_x ずらしたものになる。図 6.4(a) に $y_0 = 0$ のときの W の等高線と軌道の模式図を描いた。等高線の間隔は W の変化量が等しいように描いてある。一つ一つの等高線は $x = -\frac{\kappa}{\alpha_x}y^{\frac{3}{2}}$ の曲線を x 軸方向へ等間隔に平行移動したものである。又、軌道は等高線と直交するので、一つ一つの軌道は、すべて互いに x 軸方向へ平行移動したものになっている。

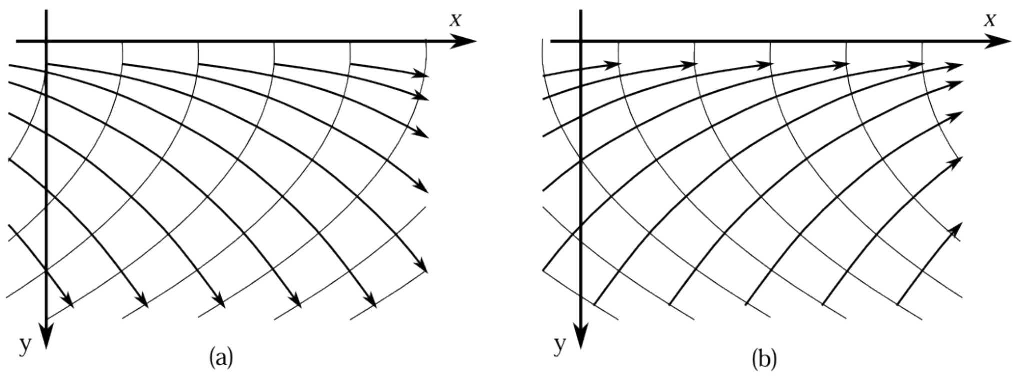

図 6.4　自由落下の等高線と軌道線。(a)：下降しているとき。(b)：上昇しているとき

次に運動方向が上向きの場合の S の等高線を描こう。それは式 (6.20) で ± の − の方の S である。だから式 (6.22)(6.23) はそれぞれ

$$W = \alpha_x x - \kappa(y + y_0)^{\frac{3}{2}}$$

$$x = \frac{\kappa}{\alpha_x}(y + y_0)^{\frac{3}{2}} + \frac{W}{\alpha_x}$$

となる。図 6.4(b) に $y_0 = 0$ のときの等高線と軌道を描いた。等高線は図 6.4(a) で y 軸で反転したものになる。

どんなポテンシャルでも狭い領域では力の大きさと向きは一定と考えられるので、そのような領域では図 6.4 のような W と軌道の関係が得られるであろう。だから一般に次のことが言えると思う。

仮説 6.1　力の大きさと向きが一定と考えられるほどの十分狭い領域では、ハミルトンヤコビの方程式の解 S からなる軌道群は 1 つの軌道を力の方向に直角にずらしたものの集まりとなる。そして、力の方向の運動量が反転するときは、運動量部分のプラスマイナスを反転させた S を用いなければならない。

6.8　位相としての S について

一般のポテンシャルでのハミルトンヤコビの方程式の解 S の位相としての性質を考察する。すなわちシュレディンガー方程式の波動関数を

$$\psi \cong \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$$

と近似できるとして、その波動関数の波長、振動数、位相速度、群速度について調べる。この節の考察は 1 粒子の系に限定する。x_i を直交座標とする。正準定数 α は与えられていて変化しないとする。x_i, t の微小変位 $\Delta x_i, \Delta t$ とそれに対応する S の変位 ΔS との関係は、1 次まででは

$$\Delta S = \frac{\partial S}{\partial t}\Delta t + \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial S}{\partial x_i}\Delta x_i$$

である。$\partial S/\partial x_i = p_i$ であり、ハミルトンヤコビの方程式より $H + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$ で $H = E$ なので $\frac{\partial S}{\partial t} = -E$ である。だから

$$\Delta S = -E\Delta t + \sum_{i=1}^{3} p_i \Delta x_i$$

となる。今、変位 Δx_i の向きを軌道の動く方向と同じ向きにとる。そしてその大きさを Δx_{cl} と書こう。又、運動量の大きさを p と書くとしよう。軌道の動く方向と運動量の向きは同じなので、このときは

$$\sum_{i=1}^{3} p_i \Delta x_i = p\Delta x_{cl}$$

となる。だから Δx_i の向きが運動方向と同じときは

$$\Delta S = -E\Delta t + p\Delta x_{\mathrm{cl}}$$

となる。だから運動方向の等高線の間隔は運動量の大きさ p に逆比例する。一様重力場の場合、位置が下がるほど運動量は大きくなり、等高線の間隔は狭くなる (図 6.4 参)。等高線の間隔というのは波長のことなので（正確には波長に比例した長さ）波長は運動量の大きさに逆比例する。又、軌道方向への S 一定の点の速さは

$$\frac{E}{p} \tag{6.24}$$

となる。E 一定なので、運動量が大きいほど速さが遅くなる。ただ E の大きさはポテンシャルの 0 点のとり方によって変わるので、この速さ自体には意味がない。図 6.5 に自由落下ポテンシャルでの軌道に沿った S 一定の点の動きを書いた。これは図 6.4(a) の一つの軌道を取り出しその軌道上での S と Δt 後の S を書いたものである。軌道に沿って運動量は大きくなるので S の傾きも大きくなる。S 一定の点の速さというのは位相速度のことである。次に $\psi \cong \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$ とした場合の群速度を考えよう。群速度というのは、方向は同じだが

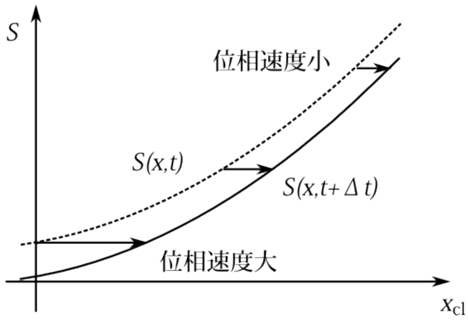

図 6.5　図 6.4(a) の一つの軌道をとりだし、その軌道に沿った S 一定の点の動き。点線が最初の S の値。実線が Δt 後の S の値

大きさが異なる運動量の波動関数を重ね合わせたときに意味を持つ。位相の変化は

$$\frac{\Delta S}{\hbar} = -\frac{E}{\hbar}\Delta t + \frac{p}{\hbar}\Delta x_{\rm cl}$$

なので、角振動数 $w = E/\hbar$、波数 $k = p/\hbar$ となる。群速度は dw/dk なので、群速度は

$$\frac{dW}{dk} = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{p^2}{2m} + V\right) = \frac{p}{m}$$

となる。群速度は軌道の速さと一致する。ただこれは近似式で波動関数の群速度が古典軌道の速さと一致していると言っているだけである。ここでの結果をまとめると

定理 6.2　1 粒子の系では、波動関数 ψ を

$$\psi \cong \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$$

と近似すると、古典軌道に沿った線上では

1. 波長は運動量に逆比例する
2. 位相速度は $\frac{E}{p}$ である。
3. 群速度は古典速度に一致する。

となる。

6.9　平面極座標

6.9.1　中心力場

今までは直交座標でのハミルトンヤコビの方程式を扱ってきたが、それ以外の座標系の例として、2 次元中心力場の極座標でのハミルトンヤコビの方程式を考えよう。この場合ハミルトニアンは式 (4.16) より

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2}\right) + V(r)$$

である。だから時間を含まないハミルトンヤコビの方程式は

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial W}{\partial r}\right)^2+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial W}{\partial \theta}\right)^2\right]+V(r)=E$$

となる。H に θ が含まれないので

$$W=\alpha_\theta\theta+R(r)$$

とおく。$R(r)$ は r のみの関数という意味。R は

$$\frac{\partial R}{\partial r}=\pm\sqrt{2m\left(E-\frac{\alpha_\theta^2}{2mr^2}-V\right)}$$

を満たしていればよい。だからハミルトンヤコビの方程式の解は

$$S=-E\,t+\alpha_\theta\theta\pm\int^r\sqrt{2m\left(E-\frac{\alpha_\theta^2}{2mr'^2}-V\right)}\,dr' \tag{6.25}$$

となる。S は

$$E-\left(\frac{\alpha_\theta^2}{2mr^2}+V\right)\geq 0$$

の範囲で定義される。この S から軌道を求めよう。

(θ について)　$\partial S/\partial\theta=p_\theta,\ \partial S/\partial\alpha_\theta=\beta_\theta$ より

$$\alpha_\theta=p_\theta \qquad \theta\mp\alpha_\theta\int^r\frac{1}{r'^2\sqrt{2m\left(E-\frac{\alpha_\theta^2}{2mr'^2}-V\right)}}\,dr'=\beta_\theta \tag{6.26}$$

(r について)　$\partial S/\partial r=p_r,\ \partial S/\partial E=\beta_r$ より

$$\pm\sqrt{2m\left(E-\frac{\alpha_\theta^2}{2mr^2}-V\right)}=p_r \qquad -t\pm\frac{\sqrt{2m}}{2}\int^r\frac{1}{\sqrt{2m\left(E-\frac{\alpha_\theta^2}{2mr'^2}-V\right)}}\,dr'=\beta_r \tag{6.27}$$

となる。実際に積分するのは困難なのでここでやめておく。

次にこの W の等高線と軌道の関係を図示してみよう。そしてポテンシャルとして万有引力型の $V=-\frac{k}{r}$ としてみよう。k は定数。$E<0$ なら楕円。$E=0$ なら放物線。$E>0$ なら双曲線になることはよく知られたことである。今 $E<0$ だとして $W(r,\theta)$ の等高線の概略を描いてみよう。式 (6.25) の $\pm$ の $+$ としよう。これは式 (6.27) より $p_r\geq 0$ の場合である。第 4 章の式 (4.14) で見たとおり、$p_r=m\dot{r}$ なので、$\dot{r}\geq 0$ の軌道である。だから、この S に含まれるのは、楕円の近日点から遠日点への軌道である。等高線は軌道と直交することを利用して等高線の様子を概観する。近日点と遠日点では $\dot{r}=0$ なので等高線は半径方向となる。それ以外では $\dot{r}>0$ なので等高線は図 6.6 のようになろう。W の θ への依存は $\alpha_\theta\theta$ という項からで、線形になっている。だから等高線は ΔW を一定の間隔にすると、図 6.6 のように θ 方向にずらしたものになる。$W(r,\theta)$ は θ が一周すると元の W と異なった値となる。1 つの S からなる軌道群は、1 つの軌道を角 θ だけずらしたものの集まりになる。すなわち 1 つの軌道を回転したものの集まりになる。それはハミルトニアン H に θ が含まれないからである。

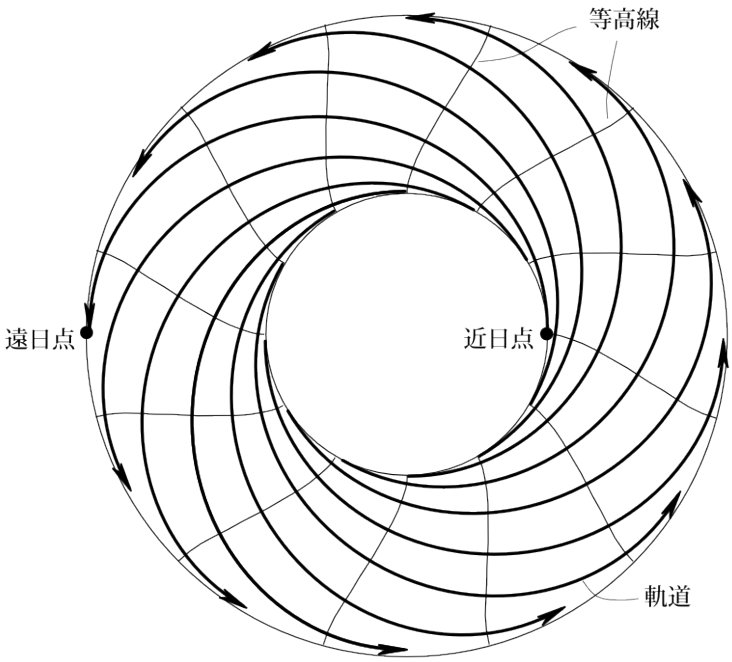

図 6.6　楕円軌道群での W の等高線と軌道の模式図

6.9.2　再び 2 次元自由粒子

2 次元自由粒子のハミルトンヤコビの方程式の円対称な解を紹介しよう。解は式 (6.25) で $V = 0$ とした

$$S = -E\,t + \alpha_\theta \theta \pm \int^r \sqrt{2m\left(E - \frac{\alpha_\theta^2}{2mr'^2}\right)}\,dr'$$

である。これは最初に紹介した解 (6.16) とは異なる。これを積分すると（過程は省略するが）

$$S = -Et + \alpha_\theta \theta \pm \alpha_\theta(\tan\phi - \phi)$$

となる。ここで ϕ は $r\cos\phi = \alpha_\theta/\sqrt{2mE}$ を満たすものである。ここで $\pm$ の $+$ を選択すると、等高線と軌道は図 6.7 のようになるであろう。

6.9.3　角運動量の量子化

ここで量子力学との関係を少し述べたい。もしシュレディンガーの波動関数が

$$\psi \cong \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right) \tag{6.28}$$

と近似してよいなら、θ が一回転したとき ψ の値は同じにならなければならない。だから θ が 2π 増えたとき $S/\hbar$ はちょうど 2π の整数倍だけ変化しなければならない。すなわち n を整数として

$$\frac{\alpha_\theta \cdot 2\pi}{\hbar} = 2\pi n$$

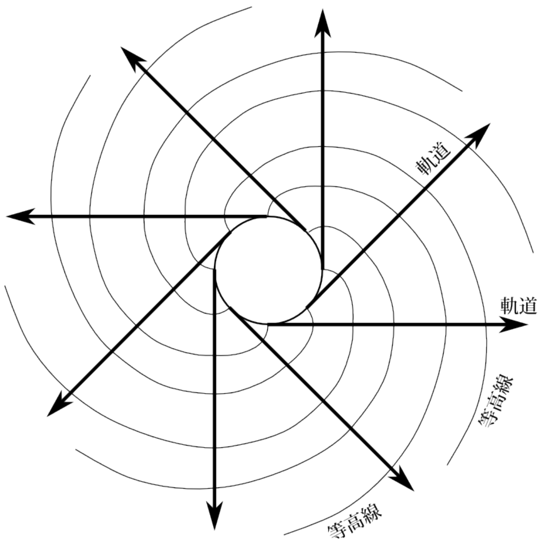

図 6.7　2 次元自由粒子の円対称な解の等高線と軌道。

でなければならない。式 (6.26) より

$$p_\theta = \alpha_\theta$$

なので、

$$p_\theta = n\hbar \tag{6.29}$$

という条件が出る。第 4 章式 (4.14) で見たように、p_θ というのは角運動量なので、これは量子力学でよく知られた角運動量の量子化である。ただ式 (6.28) というのは近似なので、式 (6.29) という量子力学と同じ式が導出されたのは、何か意味があるのではなく、単なる偶然なのかもしれない。

6.10　S が不変量であること

ハミルトンヤコビの方程式というのは一見すると各座標で異なる方程式のように見える。例えば 2 次元自由粒子の場合、直交座標では

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2\right] + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

であり、平面極座標では

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial S}{\partial \theta}\right)^2\right] + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

である。しかし実際この 2 つの偏微分方程式の解は共通である。一方の方程式の解は必ずもう一方の方程式の解になる。それを証明しよう。

q 系のハミルトニアンは関数として、すなわち q, p, t からある数を与える規則として

$$H = h(q_i, p_i, t)$$

であるとしよう。するとハミルトンヤコビの方程式は

$$h\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

となる。偏微分 $\partial/\partial q$ を q' の偏微分に書き改めると

$$h\left(q_i, \sum_k \frac{\partial q'_k}{\partial q_i}\frac{\partial S}{\partial q'_k}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{6.30}$$

となる。次に q' 系のハミルトンヤコビの方程式を作ろう。p と p'、H と H' の関係は定理 4.3 で示したように

$$p_i = \sum_k \frac{\partial q'_k}{\partial q_i} p'_k$$

であり、**座標変換に時間を含まないとき**は定理 4.4 で示したように

$$H = H'$$

であった。だから q' 系のハミルトニアンは

$$H' = h\left(q_i(q'_k), \sum_k \frac{\partial q'_k}{\partial q_i} p'_k, t\right)$$

である。そしてハミルトンヤコビの方程式は

$$h\left(q_i(q'_k), \sum_k \frac{\partial q'_k}{\partial q_i}\frac{\partial S}{\partial q'_k}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

である。これは式 (6.30) と同じ方程式である。よって 2 つの座標系のハミルトンヤコビの方程式の解は共通なのである。

定理 6.3　座標の変換に時間を含まないときハミルトンヤコビの方程式の解は同じである。すなわち S は不変量である。

要するにある座標系のハミルトンヤコビの方程式を偏微分方程式の変数変換をして（例えばシュレディンガー方程式でも直交座標を極座標に変数変換するであろう。それと同じことをするということ）別の座標系で表すと、それはその座標系でのハミルトニアンから作られたハミルトンヤコビの方程式と一致するというわけである。以下の具体例を見ればよくわかると思う。

例 6.1　2 次元自由粒子の直交座標でのハミルトンヤコビの方程式は

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2\right] + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

である。この偏微分方程式を平面極座標に変数変換すると

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial S}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial S}{\partial \theta}\right)^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial S}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial S}{\partial \theta}\right)^2\right] + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

である。これに

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \cos\theta \qquad \frac{\partial \theta}{\partial x} = -\frac{\sin\theta}{r} \qquad \frac{\partial r}{\partial y} = \sin\theta \qquad \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta}{r}$$

を代入すると

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial S}{\partial \theta}\right)^2\right]+\frac{\partial S}{\partial t}=0$$

となる。一方平面極座標の自由粒子のハミルトニアンは

$$H=\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{p_\theta^2}{r^2}\right)$$

であり、ハミルトンヤコビの方程式は

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial S}{\partial \theta}\right)^2\right]+\frac{\partial S}{\partial t}=0 \tag{6.31}$$

である。だから 2 つの偏微分方程式は一致するのである。節 6.6 で求めた

$$S=-\frac{1}{2m}(\alpha_x^2+\alpha_y^2)t+\alpha_x x+\alpha_y y$$

が両者に共通な解である[*4] 。

このSが平面極座標のハミルトンヤコビの方程式の解になっていることを代入して確かめてみよう。Sに $x=r\cos\theta, y=r\sin\theta$ を代入した

$$S=-\frac{1}{2m}(\alpha_x^2+\alpha_y^2)t+\alpha_x r\cos\theta+\alpha_y r\sin\theta \tag{6.32}$$

を偏微分方程式 (6.31) の左辺に代入すると

$$\frac{1}{2m}\left[(\alpha_x\cos\theta+\alpha_y\sin\theta)^2+\frac{1}{r^2}(-\alpha_x r\sin\theta+\alpha_y r\cos\theta)^2\right]-\frac{1}{2m}(\alpha_x^2+\alpha_y^2)$$

となり、これは 0 となることが容易に確かめられる。【例終】

6.11 解軌道も同じであること

2 つの座標系でのハミルトンヤコビの方程式の解が共通なのはわかったが、それから

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_i}=\beta_i \qquad\qquad \frac{\partial S}{\partial q_i}=p_i \tag{6.33}$$

によって得られる解軌道は同じなのだろうか。当然一致すると考えられるが、それを証明しよう。

q 系と q' 系の変換は時間を含まないとする。q 系のハミルトンヤコビの方程式の解を

$$S=Y(q_i,\alpha_i,t)$$

とする。$Y(q_i,\alpha_i,t)$ は不変量表示でなく関数形での表示とする。すると、今証明した定理 6.3 より、q' 系でのハミルトンヤコビの方程式の解は

$$S=Y(q_i(q'_k),\alpha_i,t)$$

[*4] 6.9.2 小節で紹介した

$$S=-Et+\alpha_\theta\theta\pm\alpha_\theta(\tan\phi-\phi)$$

も両者に共通な解である。

となる。q_i についての q 系の解軌道を求める式は

$$\frac{\partial Y(q_i,\alpha_i,t)}{\partial\,\alpha_i}=\beta_i \tag{6.34}$$

である。q'_i についての q' 系の解軌道を求める式は

$$\frac{\partial Y(q_i(q'_k),\alpha_i,t)}{\partial\,\alpha_i}=\beta_i \tag{6.35}$$

である。α_i,β_i,t から q'_k への写像は、式 (6.34) の陰関数から求まった α_i,β_i,t から q_i への写像に、さらに q_i から q'_k への座標変換での写像をしたものになる。すなわち q については q 系の解軌道は q' 系の解軌道に一致する。

p_i についての q 系の解軌道を求める式は

$$\frac{\partial Y(q_i,\alpha_i,t)}{\partial\,q_i}=p_i \tag{6.36}$$

である。この q_i のところには式 (6.34) で求まった q_i を入れるわけである。そうすれば α_i,β_i,t の関数として p_i が求まる。p'_i についての q' 系の解軌道を求める式は

$$\frac{\partial Y(q_i(q'_k),\alpha_i,t)}{\partial\,q'_k}=p'_k \tag{6.37}$$

である。この q'_i のところには式 (6.35) で求まった q'_i を入れるわけである。そうすれば α_i,β_i,t の関数として p'_k が求まる。式 (6.37) は

$$\sum_i\frac{\partial\,q_i}{\partial\,q'_k}\frac{\partial Y(q_i(q'_k),\alpha_i,t)}{\partial\,q_i}=p'_k$$

と変形できる。だから式 (6.36) を使うとこれは

$$\sum_i\frac{\partial\,q_i}{\partial\,q'_k}p_i=p'_k$$

となる。これは定理 4.3 で示した運動量の変換式と同一である。だから α_i,β_i,t から p'_k への写像は、α_i,β_i,t から p_i への写像して、さらに p_i から p'_k への運動量の変換式に従った写像を続けたものになる。すなわち p についても q 系の解軌道は q' 系の解軌道と一致する。解軌道が一致するのはハミルトンヤコビの方程式の解が同じときであり、それは座標変換に時間を含まないときである。だから今は

定理 6.4　2 つの座標系が時間を含まない座標変換で結ばれているとき、それぞれのハミルトンヤコビの方程式から導かれる解軌道は等しい。

ということを証明したわけである。

今の証明は少しピンとこないところがあったかもしれない。例 6.2 を見てもらえば、当たり前のことを言っているということがわかると思う。要するに

$$\frac{\partial\,S}{\partial\,\alpha_i}=\beta_i$$

は両座標系で共通であり、

$$\frac{\partial\,S}{\partial\,q_i}=p_i$$

は左辺右辺ともに共変ベクトルとして変換するということである。

例 6.2　例 6.1 で述べた、2 次元自由粒子のハミルトンヤコビの方程式の解の極座標表示 (6.32) の

$$S = -\frac{1}{2m}(\alpha_x^2 + \alpha_y^2)t + \alpha_x r\cos\theta + \alpha_y r\sin\theta$$

から解軌道を求めよう。解軌道を求める式 $\partial S/\partial \alpha_x = \beta_x,\ \partial S/\partial \alpha_y = \beta_y$ は

$$-\frac{\alpha_x}{m}t + r\cos\theta = \beta_x \qquad -\frac{\alpha_y}{m}t + r\sin\theta = \beta_y$$

となる。これは

$$r\cos\theta = \frac{\alpha_x}{m}t + \beta_x \qquad r\sin\theta = \frac{\alpha_y}{m}t + \beta_y$$

となる。$r\cos\theta = x,\ r\sin\theta = y$ と変換されるので、これは節 6.6 で求めた

$$x = \frac{\alpha_x}{m}t + \beta_x \qquad y = \frac{\alpha_y}{m}t + \beta_y$$

と同じである。又もう一つの解軌道を求める式 $\partial S/\partial r = p_r,\ \partial S/\partial \theta = p_\theta$ は

$$\alpha_x\cos\theta + \alpha_y\sin\theta = p_r \qquad -\alpha_x r\sin\theta + \alpha_y r\cos\theta = p_\theta \tag{6.38}$$

となる。一方定理 4.3 より運動量は

$$\begin{aligned} p_r &= \frac{\partial x}{\partial r}\,p_x + \frac{\partial y}{\partial r}\,p_y \\ &= \cos\theta\,p_x + \sin\theta\,p_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p_\theta &= \frac{\partial x}{\partial \theta}\,p_x + \frac{\partial y}{\partial \theta}\,p_y \\ &= -r\sin\theta\,p_x + r\cos\theta\,p_y \end{aligned}$$

と変換するのであった。節 6.6 で述べたように $p_x = \alpha_x,\ p_y = \alpha_y$ であった。だから式 (6.38) は運動量の変換と一致しており、同じ運動量軌道を意味する。【例終】

6.12　等高線と軌道が直交すること

中心力場のとき、極座標でのハミルトンヤコビの方程式の解 S と、それに含まれる軌道は図 6.6 のように直交するとしていたが、証明はしていなかった。このことは S が不変量で解軌道が同じであることからただちにわかる。というのは、ある座標での解 S とそれから導かれる解軌道は直交座標での解と解軌道でもあり、直交座標での S と軌道は直交するからである。すなわち

> **定理 6.5**　1 粒子の系で、直交座標でない座標系でハミルトンヤコビの方程式の解 S を求め、その S から軌道を求めたとしよう。その座標系は直交座標との座標変換では時間を含まないとする。その S の等高線と軌道は、それを直交座標で描くと、直交する。

といえる。

6.13 S とラグラジアンの関係

ハミルトンヤコビの方程式の解 S とラグランジアン L の関係を述べよう。$q_i(t)$ をハミルトンヤコビの方程式の解 S から導かれる力学の法則を満たす軌道としよう。その軌道にそって S を時間微分すると

$$\frac{dS}{dt}=\sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial S}{\partial t}$$

となる。

$$\frac{\partial S}{\partial q_i}=p_i \qquad \frac{\partial S}{\partial t}=-H$$

なので

$$\frac{dS}{dt}=\sum_i p_i\dot{q}_i-H$$

である。ハミルトニアンの定義式

$$H=\sum_i p_i\dot{q}_i-L$$

を使うと、これは系のラグランジアン L に等しい。だから

定理 6.6 力学の法則を満たす軌道にそって、その軌道に対応するハミルトンヤコビの方程式の解を時間で全微分したものは、ラグランジアンに等しい。すなわち

$$\frac{dS(q,t)}{dt}=L(q,\dot{q},t) \tag{6.39}$$

といえるわけである[*5]。これをある軌道 $q(t)$ で t_a から t_b まで積分すると

$$\int_{t_a}^{t_b} Ldt=S[q(t_b),t_b]-S[q(t_a),t_a]$$

となる。又、H に時間を含まないときは $S=-Et+W(q)$ と置けるので

$$\int_{t_a}^{t_b} Ldt=-E(t_b-t_a)+W[q(t_b)]-W[q(t_a)]$$

が成り立つ。

例 6.3 1 次元自由粒子で式 (6.39) が成り立っていることを確かめてみよう。この場合のハミルトンヤコビの方程式の解 S は、式 (6.13) より

$$S=-\frac{p^2}{2m}t+px$$

[*5] 第 5 章を読んだ読者向けに言うと、ハミルトンヤコビの解というのは母関数であった。すなわち、ハミルトンヤコビの方程式の解というのは

$$\sum_i p_i\dot{q}_i-H=\frac{dS}{dt}$$

という式を満たすのであった。これが式 (6.39) のわけである。

である。p は定数である。そして

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{p^2}{2m} + p\dot{x}$$

である。$p = m\dot{x}$ なので

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2}m\dot{x}^2$$

となる。これはラグランジアン

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2$$

に等しい。【例終】

6.14 波動関数の位相とハミルトンヤコビの方程式の解

6.14.1 近似の条件

今まで、ある条件を満たせば、ハミルトンヤコビの方程式の解 S を使って、シュレディンガー方程式の解 ψ は

$$\psi \cong \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$$

と近似できると述べてきた。その条件をここで考えよう。簡単のため 1 粒子とするが何粒子でも考え方は同じである。波動関数を

$$\psi = \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$$

とおいて、1 粒子のシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

に代入してみよう。すると

$$\frac{1}{2m}\left[|\nabla S|^2 - i\hbar\triangle S\right] + V = -\frac{\partial S}{\partial t} \tag{6.40}$$

となる。S の空間部分の変化は $|\nabla S|^2$ と $i\hbar\triangle S$ によって決定される。もし

$$|\nabla S|^2 \gg |\hbar\triangle S| \tag{6.41}$$

ならば、$i\hbar\triangle S$ は無視してよいということである。すると式 (6.40) は

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2\right] + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

となり、ハミルトンヤコビの方程式と一致する。

6.14.2 自由粒子

具体的な例で見てみよう。まず自由粒子の場合を考えよう。この場合 S は式 (6.16) より

$$S = -Et + p_x x + p_y y + p_z z$$

なので、S の 2 階微分は 0 である。だから、$\exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$ すなわち

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar}(-Et+p_x x+p_y y+p_z z)\right]$$

はシュレディンガー方程式の解になる。

6.14.3 ポテンシャルのある場合

次に x, y 座標で、ポテンシャルは y 方向のみに依存する場合を考える。具体的には一様重力場と思ってもらえればよい。この場合のハミルトンヤコビの方程式の解は、

$$S=-Et+p_x x+\int^y\sqrt{2m\left(E-\frac{p_x^2}{2m}-V(y')\right)}dy'$$

である (これが解であることは入れてみればすぐわかる。式 (6.19) 参照)。これは y 方向の運動量が正の場合である。条件式 (6.41) を今の場合に適用しよう。

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 S}{\partial y^2}=-m\frac{dV}{dy}\frac{1}{\sqrt{2m\left(E-\frac{p_x^2}{2m}-V(y)\right)}}$$

であり、$-\frac{dV}{dy}$ は y 方向の力なので F_y と書き、$\sqrt{2m\left(E-\frac{p_x^2}{2m}-V(y)\right)}=p_y$ なので

$$\hbar\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right)=\hbar\frac{F_y}{v_y}$$

である。一方

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2=p_x^2+p_y^2$$

である。だから

$$\frac{\left|\hbar\frac{F_y}{v_y}\right|}{p_x^2+p_y^2}\ll 1 \tag{6.42}$$

なら条件式 (6.41) が満たされることになり、ハミルトンヤコビの方程式の解 S を $\exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$ としたものはシュレディンガー方程式の解に近いといえる。式 (6.42) をながめれば、運動量が大きく、力が弱ければこの近似は成り立つということがわかる。$\hbar=10^{-34}\mathrm{J}\cdot\mathrm{s}$ 程度なので、m, F が 1kg,1N 程度なら成り立つわけである。又、$|F_y/v_y|$ という項があるので、力の方向の速さが小さいときは、例え力に直角の向きの運動量が大きくてもこの近似は使えない。

6.14.4 一様重力場

さて、一様重力場で図 6.8 のような上昇して下降する運動に対応する波動関数の様子をハミルトンヤコビの方程式の解 S を使って想像してみよう。この場合、力 F_y は一定なので粒子が下の方にあり、そのために運動量が大きければ条件 (6.42) は満たされる。しかし最上点付近では $v_y\to 0$ となるので条件 (6.42) は満たされ

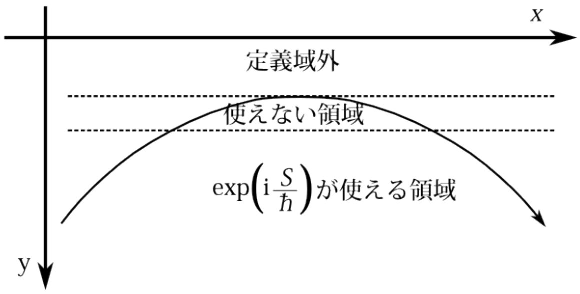

図 6.8　自由落下の粒子では $\psi \cong \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$ という近似は粒子が最上点にいる場合は使えない。最上点より上は S の定義外である。

なくなる。そして最上点より上では S が定義されていないので、ここはシュレディンガー方程式から求めるしかない。粒子が上昇するときは、式 (6.19) より、

$$S_{(-)} = -Et + p_x x - \int^y \sqrt{2m\left(E - \frac{p_x^2}{2m} + mgy'\right)}dy'$$

であり、下降するときは

$$S_{(+)} = -Et + p_x x + \int^y \sqrt{2m\left(E - \frac{p_x^2}{2m} + mgy'\right)}dy'$$

である。これを重ね合わせた

$$A\exp\left(i\frac{S_{(-)}}{\hbar}\right) + B\exp\left(i\frac{S_{(+)}}{\hbar}\right)$$

というのが最上点より少し下でのシュレディンガー方程式の解に近いであろう。

6.15　まとめ

ハミルトンヤコビの方程式の解から正準方程式という微分方程式の解が得られるわけだが、実際の微分方程式を解く手法としてのこの方法は何のメリットもない。そうではなく、その逆にメリットが有る。すなわち古典力学の軌道からハミルトンヤコビの方程式の解の概要が得られるということである。その方法とは

1. 1つの古典軌道を力と直角の方に平行移動して軌道群を作る（仮説 6.1)。
2. その軌道群に直角な線を引く（定理 6.5)。これが W 一定の線である。
3. W 一定の線の間隔は p に逆比例するということを使って、又は等高線群は力に直角の方向に平行移動したものであるという性質を使って、等高線群を引く。

正準方程式の解からハミルトンヤコビの方程式の解が得られるということは証明はしていないし、私自身調べてもいないが、おそらく得られると思う[*6]。ハミルトンヤコビの方程式の解は、ある条件下では量子力学の波動関数の位相に近似できる。だから上記 1,2,3 の方法によって古典軌道から波動関数の概要が得られるという

[*6] 2022 年 10 月追記：ハミルトンヤコビの方程式の解は正準方程式から得られる。私はそのことをスミルノフ高等数学教程 9 巻で学んだ。

ことである (例えば節 6.7 の一様重力場)。我々は多くの経験から古典軌道というものの予想がつく。しかしシュレディンガー方程式の解の概略は予想がつかない。しかしながら、ハミルトンヤコビの方程式の解がそれを結びつけてくれるわけである。ここにハミルトンヤコビの方程式の最大のメリットが有る。

この章の説明は具体例から一般論へと言う説明をとったのでややまとまりが欠けたと思っている。

第 7 章

変分法とハミルトンの原理

この章では解析力学と変分法の関係について述べたい。どういう関係かというと、簡単に言えば、力学の法則を満たす軌道はラグランジアンの時間積分の停留関数となるということ（ハミルトンの原理）である。これは単なる数学的事実である。そんなことを知ったからと言って、物理をより深く理解できるようになるということは全くないだろう。ただファインマンの経路積分の考えの理解には役立つと思う。解析力学の方程式を導出するのに変分法は必要なかったことは今までに示したことである。後半では力学の法則を満たす軌道は最小関数になるのかを考察した。この部分は興味のある人だけ読めばいいと思う。後の章で使うこともない。7.3 節と 7.4 節は脱線した話なので飛ばしてもらえば良い。

7.1 変分法について

まず簡単に変分法というものについて述べよう。$x(t)$ を時間の関数とする。x と $\dot{x}$ と t の関数 $f(x, \dot{x}, t)$ が与えられているとしよう。例えばラグランジアン $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$ は x と $\dot{x}$ の関数なので、そういう関数の 1 つである。さて

$$I[x(t)] \equiv \int_{t_a}^{t_b} f(x(t), \dot{x}(t), t)dt \tag{7.1}$$

という積分は $x(t)$ を変化させれば、その積分値がかわる。だからこの積分は、時間の関数 $x(t)$ の関数である。それで左辺を $I[x(t)]$ と書いたのである。これは関数の関数だから汎関数という。$x(t)$ を**変関数**と呼ぶことにしよう。ここでの主題というのは $x(t)$ を、積分区間の両端では変化させないという条件のもとで、図 7.1 のように微小量 δx だけ変化させたとき、その微小量の 1 次の範囲では、この積分値が変化しないという $x(t)$ を探すことである。このような関数 $x(t)$ を停留関数と呼ぼう。それで $x(t)$ が停留関数となるための必要十分条件を見つけよう。

$$\begin{aligned} I[x+\delta x] - I[x] &= \int_{t_a}^{t_b} f(x+\delta x, \dot{x}+\delta\dot{x}, t)dt - \int_{t_a}^{t_b} f(x(t), \dot{x}(t), t)dt \\ &= \int_{t_a}^{t_b} f(x+\delta x, \dot{x}+\delta\dot{x}, t) - f(x(t), \dot{x}(t), t)\ dt \end{aligned}$$

そして δx と $\delta\dot{x}$ の 1 次の範囲では

$$I[x+\delta x] - I[x] \cong \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{\partial f}{\partial x}\delta x + \frac{\partial f}{\partial \dot{x}}\delta\dot{x} \right) dt$$

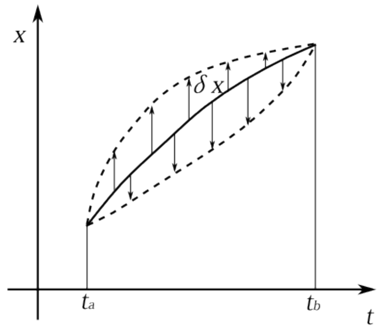

図 7.1　始点 t_a と終点 t_b では x の値を固定して、x を変化させる。

である。部分積分により

$$\int_{t_a}^{t_b} \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} dt = \left[\frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \delta x \right]_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \right) \delta x dt$$

となる。δx は積分区間の両端で 0 なので第 1 項は 0 である。だから

$$I[x + \delta x] - I[x] \cong \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \right) \right] \delta x \ dt \tag{7.2}$$

となる。$x(t)$ が停留関数となるための必要十分条件は

$$\int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \right) \right] \delta x \ dt \tag{7.3}$$

が、任意の δx で 0 となることである。そうなるためには

$$\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \right)$$

がこの区間で常に 0 であればもちろんよいが、もし、0 とならない区間があったとしたら、これを $a(t)$ と置いて、ϵ をただの定数として、$\delta x = \epsilon a(t)$ とすれば式 (7.3) は

$$\epsilon \int_{t_a}^{t_b} a(t)^2 \ dt \neq 0$$

となってしまう。だから $a(t)$ は常に 0 でなければならない。すなわち

定理 7.1　$x(t)$ が汎関数

$$I[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} f(x(t), \dot{x}(t), t) dt$$

の停留関数となるための必要十分条件は f に対する x のオイラーの方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial f}{\partial x} \tag{7.4}$$

をこの積分区間で満たすことである。

今、停留の定義を汎関数 $I[x(t)]$ の $\delta x, \delta \dot{x}$ の 1 次までの変化量が 0 であることとしていた。これをもう少し

厳密にすると、次のようなことが停留の定義でいいと思う。$\delta x, \delta\dot{x}$ の積分区間での最大値が 0 に近づくとき、$I[x+\delta x]-I[x]$ がそれより速く 0 に収束すること。数学的記号を使うと、$\delta x, \delta\dot{x}$ のうち積分区間内での最大値を M とすると

$$\lim_{M\to 0}\frac{I[x+\delta x]-I[x]}{M}=0$$

となること。私は数学者でもなく、この分野の現代的な数学書も読んだことはないが、これが停留の定義でいいと思う。

今の定義での停留のための必要十分条件がオイラーの方程式 (7.4) を満たすことである、ということは当然変わらないであろう。ただその証明は難しいことではないと思うのだが、技術的でつまならい細かさがありそうなのでやめておくことにする。

7.2 変関数が 2 つ以上のとき

今は汎関数 $I[x(t)]$ の変換数として 1 つの場合を扱ったが、次に変関数が $x(t), y(t)$ と 2 つの場合を考えよう。すなわち汎関数

$$I[x(t),y(t)]=\int_{t_a}^{t_b} f\big(x(t),\dot{x}(t),y(t),\dot{y}(t),t\big)dt \tag{7.5}$$

の停留関数を考えるのである。2 変数関数のときの停留関数の意味も、1 変関数のときと同じで $x(t), y(t)$ を積分区間の両端で変化させないという条件で変化させ、その変化量の 1 次の範囲では $I[x,y]$ が変化しないときに、その $x(t), y(t)$ を停留関数と呼ぶのである。このときも 1 変関数のときと同様に考えれば、停留のための必要十分条件が 1 変関数のときと同じであることは明らかであろう。すなわち汎関数 (7.5) で $x(t), y(t)$ が停留関数であるための必要十分条件は積分区間内で、f に対して $x(t), y(t)$ 共にオイラーの方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}}\right)=\frac{\partial f}{\partial x} \qquad\qquad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\right)=\frac{\partial f}{\partial y}$$

を満たすことである。これは変関数が何個あっても同じであり、いつものようにそれぞれの変関数を指標で分類して $x_i(t)$ とかくと

定理 7.2 汎関数

$$I[x_i(t)]=\int_{t_a}^{t_b} f\big(x_i(t),\dot{x}_i(t),t\big)dt$$

で $x_i(t)$ が停留関数となるための必要十分条件はすべての x_i がこの積分区間で f に対してオイラーの

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\right)=\frac{\partial f}{\partial x_i}$$

を満たすことである。

といえる。

7.3 時間で全微分した関数がオイラーの方程式をみたすことの変分法的意味

少し、脱線した話をするのでこの節は飛ばしてもらって良い。

さて、定理 1.1 の等式 4 で任意の関数 $f(x_i(t),t)$ の時間での全微分 $\frac{df}{dt}$ は任意の $x_i(t)$ についてオイラーの方程式を満たすということを述べた。このことを変分法との関係で見てみよう。今汎関数

$$I[x_i(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \frac{d}{dt} f(x_i(t),t)dt$$

の停留関数を考える。この積分は

$$I[x_i(t)] = f(x_i(t_b),t_b) - f(x_i(t_a),t_a)$$

である。すなわち、この汎関数は $x_i(t)$ の積分区間の両端の値で決まってしまい、積分区間内で x_i を変化させても汎関数 $I[x_i(t)]$ は変化しない。すなわち、任意の $x_i(t)$ が停留関数になるということである。$x_i(t)$ が停留関数ならばオイラーの方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \dot{f}}{\partial \dot{x}}\right) = \frac{\partial \dot{f}}{\partial x}$$

を満たすということである。このことは任意の関数 $f(x_i,t)$ に言えることである。このように $x_i(t), f(x_i,t)$ がどんな関数であろうとも、x_i が $\dot{f}$ に対してオイラーの方程式を満たすことが変分法の方法でも証明できたわけである。

7.4 変分法を多変数関数として考える

ここも少し脱線した話なので飛ばしてもらって良い。

変分法というのは少しわかりづらいかもしれない。そこで変分法を多変数関数の微分と考え、変数の個数が無限に多くなる極限が変分問題であるとして扱ってみよう。簡潔なため、1 変関数の変分

$$I[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} f(x(t),\dot{x}(t),t)dt \tag{7.6}$$

を考える。積分区間を図 7.2 のように Δt ごとに n 等分し (図 7.2 では 4 等分している)、始点を t_0 とし、Δt

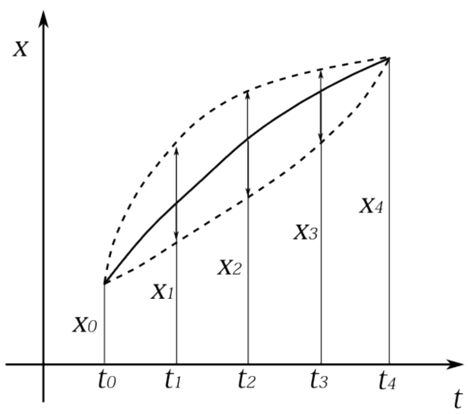

図 7.2

増えるごとに $t_1, t_2, \cdots$ として終点を t_n とする。そして

$$x_m \equiv x(t_m), \qquad \dot{x}_m \equiv \frac{x_{m+1} - x_m}{\Delta t}, \qquad f_m \equiv f(x_m, \dot{x}_m, t)$$

と書くことにする。式 (7.6) の右辺をこの記号を使って離散的に書くと

$$\sum_{m=0}^{n-1} f_m \Delta t$$

となる。これを $\Delta t \to 0$ とした極限が式 (7.6) の右辺である。ここでは $x_1, x_2 \cdots, x_{n-1}$ を変数と考える。$x_1, x_2 \cdots, x_{n-1}$ が停留点であるため必要十分条件は

$$\frac{\partial}{\partial x_m} \sum_{j=0}^{n-1} f_j \Delta t = 0 \qquad\qquad (m = 1, 2, \cdots, n-1)$$

である。これは

$$\frac{\partial f_m}{\partial x_m} + \frac{\partial \dot{x}_m}{\partial x_m}\frac{\partial f_m}{\partial \dot{x}_m} + \frac{\partial \dot{x}_{m-1}}{\partial x_m}\frac{\partial f_{m-1}}{\partial \dot{x}_{m-1}} = 0$$

ということであり、

$$\frac{\partial \dot{x}_m}{\partial x_m} = -\frac{1}{\Delta t} \qquad\qquad \frac{\partial \dot{x}_{m-1}}{\partial x_m} = \frac{1}{\Delta t}$$

なので

$$\frac{\partial f_m}{\partial x_m} - \frac{1}{\Delta t}\left(\frac{\partial f_m}{\partial \dot{x}_m} - \frac{\partial f_{m-1}}{\partial \dot{x}_{m-1}}\right) = 0$$

となる。これがすべての x_m でで成り立つことが停留点となるための必要十分条件である。ここで $\Delta t \to 0$ の極限とすれば

$$\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}}\right) = 0$$

というオイラーの方程式が得られる。このように時間の関数 $x(t)$ を離散的に捉えて、汎関数 $I[x(t)]$ をただの多変数関数として考えるのは、わかりやすいし、数値計算で停留関数を求めるのにも有用であろう。

7.5　停留関数の変数変換

汎関数の停留関数というのは変数変換しても、停留関数になる。これはどういうことかというと、例えば 1 変関数 $x(t)$ が汎関数

$$I[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} f(x(t), \dot{x}(t), t) dt \tag{7.7}$$

での停留関数ならば、$x'(t) = 2x(t)$ という関数も不変量としての $I[x]$ の停留関数になるだろう。すなわち $x = \frac{x'}{2}$ なので、これを式 (7.7) に代入して

$$I[x'/2] = \int_{t_a}^{t_b} f(x'(t)/2, \dot{x}(t)/2, t) dt$$

という汎関数を作り、x' がこの汎関数の停留関数になるということである。今のような線形な変換でなく、$x' = x^2$ というような変換でも x' は汎関数 (7.7) の停留関数になろう。さらには、変関数が 2 つ以上、例えば $x(t), y(t)$ とあって、$x(t), y(t)$ が汎関数

$$I[x(t), y(t)] = \int_{t_a}^{t_b} f(x(t), \dot{x}(t), y(t), \dot{y}(t), t) dt \tag{7.8}$$

の停留関数だとしたら

$$x' = x'(x, y, t), \qquad y' = y'(x, y, t) \tag{7.9}$$

という変換をすれば、$x'(t), y'(t)$ も汎関数 (7.8) の停留関数になろう。すなわち変換 (7.9) を逆に解いた $x = x(x', y', t),\ y = y(x', y', t)$ を式 (7.8) に代入した汎関数

$$I[x(x', y', t), y(x', y', t)] = \int_{t_a}^{t_b} f(x(x', y', t), \dot{x}(x', y', t), y(x', y', t), \dot{y}(x', y', t), t)dt$$

を考えた場合、x', y' はこの汎関数の停留関数になろう。一般に

定理 7.3 $x_i(t)$ が

$$I[x_i(t)] = \int_{t_a}^{t_b} f(x_i(t), \dot{x}_i(t), t)dt \tag{7.10}$$

の停留関数ならば x_i を変数変換した $x'_k = x'_k(x_i, t)$ もこの汎関数の停留関数となる。

と言える。これをオイラーの方程式の不変性から証明しよう。
【証明】$x_i(t)$ が汎関数 (7.10) の停留関数ならば、すべての $x_i(t)$ について、オイラーの方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\right) - \frac{\partial f}{\partial x_i} = 0$$

を満たす。ところで第 1 章定理 1.3 で述べたように $x_i(t)$ がオイラーの方程式を満たすなら、それを変数変換した $x'_k = x'_k(x_i, t)$ も不変量としての f に対してオイラーの方程式を満たす。オイラーの方程式を満たすことと停留関数であることは同値であった (定理 7.2)。よって $x'_k(t)$ は汎関数 (7.10) の停留関数となる。【証明終】
定理 7.3 は停留の意味を考えれば、当然予想される結果である。汎関数 $I[x]$ は x_i がわずかに変化しても変化しないわけである。ところで x と x' は $x' = x'(x, t)$ という連続関数で結ばれているわけだから δx は $\delta x'$ に比例し、$\delta\dot{x}$ は $\delta\dot{x}'$ に比例する。だから x' がわずかに動いても x もわずかしか動かない。よって汎関数は変化しないというわけである。

7.6 ラグランジアンの停留関数

7.6.1 ハミルトンの原理

ようやく準備もできたので、この節では変分法と解析力学の関わりについて述べる。力学の法則を満たす軌道 $q_i(t)$ というのはラグランジアン $L(q, \dot{q}, t)$ についてのオイラーの方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$$

を満たすのであった。ということは

定理 7.4 ハミルトンの原理 力学の法則を満たす軌道 $q_i(t)$ というのは汎関数

$$I[q(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L(q(t), \dot{q}(t), t)dt \tag{7.11}$$

の停留関数である

ということである。このことをハミルトンの原理という。力学の法則を満たす軌道が停留関数であるという事

実を知ったからと言って、何か力学についての知見が得られるわけではない。しかしながら、ファインマンの経路積分では、この事実を使って古典力学と量子力学のつながりを説明している。

7.6.2　もう一つの変分問題

今の程はポピュラーではないが、もう 1 つ似たようなものを述べよう。力学の法則を満たす軌道と運動量 $q(t), p(t)$ というのは

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, p, t) \equiv \sum_i p_i \dot{q}_i - H(q, p, t)$$

に対してオイラーの方程式を満たすのであった (定理 5.5)。左辺を $\mathcal{L}(q, \dot{q}, p, t)$ と書いたのはもし

$$p_i = \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_i}$$

を満たすならば右辺はラグランジアンと等しいからである。さて、オイラーの方程式を満たすということは力学の法則を満たす $q(t), p(t)$ は汎関数

$$I[q(t), p(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \sum_i p_i \dot{q}_i - H(q, p, t)\, dt \tag{7.12}$$

の停留関数であるということである。注意としては、この変分問題は、ラグランジアン L を $q, \dot{q}, t$ で表した変分問題とは全く異なるということである。汎関数 (7.11) の変分問題は q を自由に動かしての停留問題であった。今の汎関数 (7.12) は q も p も独立に自由に動かしての停留問題だということである。しかし実際の空間上の軌道ならば q を変化させれば、それに応じて p も変化するはずである。例えば直交座標なら $p_i = m\dot{q}_i$ という関係があり、q が変化すれば $\dot{q}$ が変化して、そして p も変化するはずである。それなのに q も p も独立の変関数として扱うということは、この変分問題は物理的な空間上の軌道の変分問題ではなく、数学上の q, p 空間での、無理やり作ったような変分問題なのである。

7.7　変分問題の最小性、極小性 1

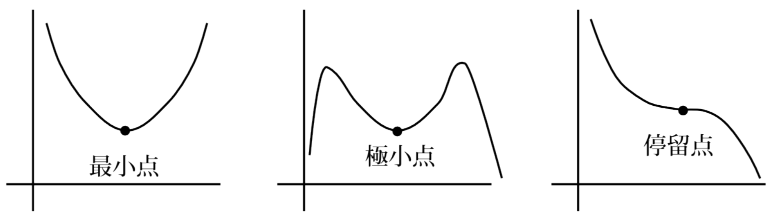

図 7.3　関数での最小点、極小点、停留点。汎関数での最小関数、極小関数、停留関数の意味もこれからの類推で想像できよう。

さて、力学の法則を満たす軌道というのは

$$I[q(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt \tag{7.13}$$

の停留関数であった。このことを最小作用の原理と呼んでいる文献もある。例えばファインマンの本がそうである。次の第 8 章で述べる変分問題を最小作用の原理と読んでいる本もある。どちらかというとそういう本の

方が多いような気がする。ところで力学の法則を満たす軌道というのは汎関数 (7.13) を最小にするのであろうか、又は極小にするのか、はたまた、最小でもなく、極小でもないのか、ということは興味あることである。それでそのことを調べようというわけである。微分法の「最小値」、「極小値」からの類推で想像はつくと思うが一応、最小関数と極小関数というものも定義しておこう (図 7.3)。ある関数 $x(t)$ を積分区間の両端を固定した上で変化させたとき、汎関数

$$I[x(t)] \equiv \int_{t_a}^{t_b} f(x(t), \dot{x}(t), t)dt$$

の値が必ず大きくなるなら、その関数 $x(t)$ を最小関数と呼ぼう。ある関数 $x(t)$ を積分区間の両端を固定した上で微小量 δx だけ変化させたとき、この汎関数が必ず大きくなるなら、その関数 $x(t)$ を極小関数と呼ぼう。

7.7.1 1 次元自由粒子

まず一番簡単な 1 次元自由粒子について調べよう。この場合の汎関数は

$$I[x] = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m\dot{x}^2 dt \tag{7.14}$$

である。$\delta x(t)$ を積分区間の両端で 0 となる t の関数とする。この章では以後その意味で使うとする。変関数として $x(t) + \delta x(t)$ を使うと

$$\begin{aligned} I[x + \delta x] &= \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m(\dot{x} + \delta\dot{x})^2 dt \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + m\dot{x}\delta\dot{x} + \frac{1}{2}m\delta\dot{x}^2\right) dt \end{aligned}$$

となる。$\int_{t_a}^{t_b} m\dot{x}\delta\dot{x}\ dt$ を部分積分すると

$$\int_{t_a}^{t_b} m\dot{x}\delta\dot{x}\ dt = [m\dot{x}\delta x]_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} m\ddot{x}\delta x\ dt$$

となる。δx は積分区間の両端で 0 なので第 1 項は 0 である。だから

$$\int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m(\dot{x} + \delta\dot{x})^2 dt = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - m\ddot{x}\delta x + \frac{1}{2}m\delta\dot{x}^2\right) dt \tag{7.15}$$

となる。この式は後でも使う。$x(t)$ を力学の法則を満たす軌道とすると $\ddot{x} = 0$ なので

$$I[x + \delta x] = I[x] + \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m\delta\dot{x}^2 dt$$

となる。第 2 項は任意の δx で 0 以上となる。だから $x(t)$ を力学の法則を満たす軌道とすると、任意の変分 δx に対して

$$I[x + \delta x] \geq I[x]$$

となる。すなわちポテンシャルのないときは力学の法則を満たす軌道は、汎関数 (7.14) の最小関数である。

7.7.2　1 次元自由落下

次に簡単な 1 次元自由落下の場合を考えよう。x 軸の正の向きを落下方向にとると、ポテンシャルは $-mgx$ なので汎関数は

$$I[x] = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + mgx\ dt \tag{7.16}$$

である。変関数を $x + \delta x$ とすると

$$I[x+\delta x] = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m(\dot{x}+\delta\dot{x})^2 + mg(x+\delta x)\ dt$$

である。式 (7.15) の結果を使うと

$$I[x+\delta x] = I[x] + \int_{t_a}^{t_b} (-m\ddot{x} + mg)\delta x\ dt + \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m\delta\dot{x}^2 dt$$

となる。ここまでは任意の $x(t)$ で成り立つ式なのだが、ここで $x(t)$ を力学の法則を満たす軌道とすると $\ddot{x} = g$ なので

$$I[x+\delta x] = I[x] + \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m\delta\dot{x}^2 dt$$

となる。ゆえに 1 次元自由粒子の場合と同じ理屈で、力学の法則を満たす軌道は汎関数 (7.16) の最小関数である。

7.7.3　1 次元調和振動子

次に 1 次元調和振動子の場合を考えよう。この場合汎関数は

$$I[x] = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\ dt$$

である。変関数を $x + \delta x$ とすると

$$I[x+\delta x] = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m(\dot{x}+\delta\dot{x})^2 - \frac{1}{2}m\omega^2(x+\delta x)^2\ dt$$

である。式 (7.15) の結果を使うと

$$I[x+\delta x] = I[x] + \int_{t_a}^{t_b} (-m\ddot{x} - m\omega^2 x)\delta x\ dt + \frac{1}{2}m\int_{t_a}^{t_b} (\delta\dot{x}^2 - \omega^2\delta x^2) dt$$

となる。ここで $x(t)$ を力学の法則を満たす軌道とすると $\ddot{x} = -\omega^2 x$ なので

$$I[x+\delta x] = I[x] + \frac{1}{2}m\left(\int_{t_a}^{t_b} \delta\dot{x}^2 dt - \omega^2\int_{t_a}^{t_b} \delta x^2\ dt\right)$$

となる。だから任意の δx に対して

$$\int_{t_a}^{t_b} \delta\dot{x}^2 dt - \omega^2\int_{t_a}^{t_b} \delta x^2\ dt > 0$$

となることが最小関数となるための必要十分条件である。$\int_{t_a}^{t_b}\delta\dot{x}^2dt$ も $\int_{t_a}^{t_b}\delta x^2\ dt$ も必ず正になるので、この不等式は

$$\frac{\int_{t_a}^{t_b}\delta\dot{x}^2dt}{\int_{t_a}^{t_b}\delta x^2\ dt} > \omega^2$$

と同値である。だから

δx をいろいろ変化させたときの

$$D[\delta x] \equiv \frac{\int_{t_a}^{t_b}\delta\dot{x}^2dt}{\int_{t_a}^{t_b}\delta x^2\ dt} \tag{7.17}$$

が最も小さくなるときでも

$$\frac{\int_{t_a}^{t_b}\delta\dot{x}^2dt}{\int_{t_a}^{t_b}\delta x^2\ dt} > \omega^2 \tag{7.18}$$

が成り立つことが最小関数になるための必要十分条件である

と言える。そしてこれが成り立たないことが、最小関数にならないための必要十分条件である。(7.17) には最小値が存在するということは想像つくと思う。すなわち、δx を変化させたときに、いくらでも 0 に近づくことはないということである。とりあえず最小値があるとして、それを $D_{\min}$ と書こう。だから $D_{\min} > \omega^2$ ならその軌道は最小関数になるし、これが成り立たないなら最小関数にならないのである。$D_{\min}$ の値は軌道の積分時間 $t_b - t_a$ にのみ依存している。だから与えられた $t_b - t_a$ に対して ω が十分大きければ $D_{\min} > \omega^2$ が成り立たない。そのような軌道は最小関数にならない。

もう少し詳しく述べよう。まず $D_{\min}$ を与える δx を求めよう。これは $\int_{t_a}^{t_b}\delta x^2\ dt$ が一定の条件、例えば $\int_{t_a}^{t_b}\delta x^2\ dt = 3$ という条件の中から $\int_{t_a}^{t_b}\delta\dot{x}^2dt$ が最小となる関数を求めるということと同じである。というのは、もしある関数 $\delta x_{\min}$ が D を最小にするなら、すなわち $D[\delta x_{\min}] = D_{\min}$ なら、この定数 k 倍の $k\delta x_{\min}$ も D を最小にする。すなわち $D[k\delta x_{\min}] = D_{\min}$ となる。k を適当にとれば $\int_{t_a}^{t_b}k^2(\delta x_{\min})^2\ dt$ は任意の正の値、例えば 3 という値をとることができる。だから $\int_{t_a}^{t_b}\delta x^2\ dt$ が 3 という値をとるものの中から $D[\delta x]$ が最小となるものを探せば十分なのである。そして D の分母が一定ならば、分子の $\int_{t_a}^{t_b}\delta\dot{x}^2dt$ が最小となる δx を探せばよいわけである。そういうわけでこの方法で最小とする δx を探そう。それにはラグランジュの未定乗数法を使おう。それは

$$\int_{t_a}^{t_b}\delta\dot{x}^2 - \lambda\delta x^2\ dt$$

という変分問題となる。ここで λ は未定定数。これに対するオイラーの方程式は

$$\frac{d}{dt}(2\delta\dot{x}) = -\lambda(2\delta x)$$

でありその解は

$$\delta x = A\cos\sqrt{\lambda}\ t + B\sin\sqrt{\lambda}\ t$$

である。ここで A, B は積分定数。境界条件を考慮すると $D[\delta x]$ を停留させるのは

$$\delta x = \sin\frac{\pi(t-t_a)}{t_b - t_a}$$

のときである。この δx が D を最小にするとは証明できないが、おそらく最小にしているのであろう。そして、これを式 (7.17) に入れると

$$D_{\min} = \frac{\pi^2}{(t_b - t_a)^2}$$

と求まる。これを式 (7.18) に入れると

$$\frac{\pi^2}{(t_b - t_a)^2} > \omega^2 \tag{7.19}$$

となる。この調和振動子ポテンシャルでの周期を T とすると $2\pi/T = \omega$ なので、式 (7.19) は

$$\frac{T}{2} > t_b - t_a$$

となる。だから最小関数となるための必要十分条件は積分区間がポテンシャルによって決まる周期の半分より小さい時である。だから十分時間が短ければ最小関数になるし十分長ければ最小関数にならない (図 7.4)。ポテンシャルだけでは最小関数になるかどうかは決まらず、積分時間との兼ね合いで決まるということである。

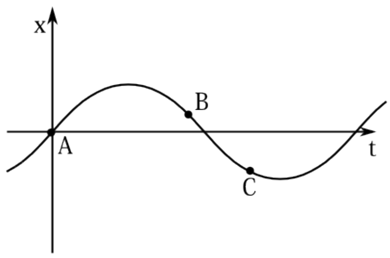

図 7.4　始点 A、終点 B の軌道は半周期より短いので最小関数になる。始点 A、終点 C の軌道は半周期より長いので最小関数にならない。

7.7.4　1 次元一般のポテンシャル

今まで 1 次元の自由粒子、自由落下、調和振動子での最小問題を論じてきた。自由粒子と自由落下では最小になる。調和振動子では最小になるかどうかは力の大きさと積分時間の兼ね合いである。次に、1 次元の場合の一般のポテンシャルのときの極小問題を考えたい。最小でなく、極小しか論じられないのは、汎関数を δx で展開する方法では最小かどうかについて何も結論を出せないからである。

ポテンシャル $V(x)$ のときの汎関数は

$$I[x] = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\, dt$$

である。変関数を $x + \delta x$ とすると

$$I[x+\delta x] = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m(\dot{x} + \delta\dot{x})^2 - V(x+\delta x)\, dt \tag{7.20}$$

である。$V(x+\delta x)$ は δx の 2 次まででは

$$V(x+\delta x) \cong V(x) + \frac{dV}{dx}\delta x + \frac{1}{2}\frac{d^2V}{dx^2}\delta x^2$$

であり、これを式 (7.20) に入れ、式 (7.15) の結果を使うと

$$I[x+\delta x] \cong I[x] + \int_{t_a}^{t_b} \left(-m\ddot{x} - \frac{dV}{dx}\right)\delta x\ dt + \frac{1}{2}m\int_{t_a}^{t_b} \delta\dot{x}^2\ dt - \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \frac{d^2V}{dx^2}\delta x^2\ dt$$

となる。$x(t)$ を力学の法則を満たす軌道とすると、$-m\ddot{x} - \frac{\partial V}{\partial x} = 0$ なので第 2 項は消える。よって

$$I[x+\delta x] \cong I[x] + \frac{1}{2}m\int_{t_a}^{t_b} \delta\dot{x}^2\ dt - \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \frac{d^2V}{dx^2}\delta x^2\ dt$$

となる。もし $x(t)$ の軌道上で常に $\frac{d^2V}{dx^2} \le 0$ ならば（上に凸ということ）、δx の 2 次までの範囲では $I[x+\delta x] \ge I[x]$ となる。δx が十分小さければ 3 次以上の項は 2 次までの項に比して限りなく小さくなる (近似を用いているのはポテンシャルの項のみであることに注意。運動エネルギーの部分は近似をしていない。)。よって

軌道上で常に $\frac{d^2V}{dx^2} \le 0$（上に凸）となる軌道は極小関数となる。

最小かどうかについては何も言えない。このように δx で展開する方法では何次まで展開しようと最小問題については何も結論をだせない。自由粒子の場合は $\frac{d^2V}{dx^2} = 0$ であり、自由落下の場合も $\frac{d^2V}{dx^2} = 0$ なので極小の条件を満たしていたのである。調和振動子の場合は $\frac{d^2V}{dx^2} = m\omega^2 > 0$ で、極小となるための十分条件を満たしていなかったのである。

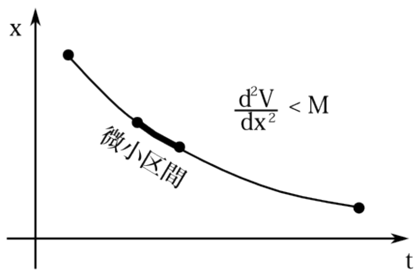

図 7.5　与えられた軌道の微小区間を選べば、その軌道は極小関数となる。

与えられた軌道中で $\frac{d^2V}{dx^2} > 0$ となる部分があるとする。その軌道中での $\frac{d^2V}{dx^2}$ の最大値を M としよう。そのとき

$$\frac{1}{2}m\int_{t_a}^{t_b} \delta\dot{x}^2\ dt - \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \frac{d^2V}{dx^2}\delta x^2\ dt \ge \frac{1}{2}m\int_{t_a}^{t_b} \delta\dot{x}^2\ dt - \frac{1}{2}M\int_{t_a}^{t_b} \delta x^2\ dt$$

である。だから任意の δx に対して

$$\frac{1}{2}m\int_{t_a}^{t_b} \delta\dot{x}^2\ dt - \frac{1}{2}M\int_{t_a}^{t_b} \delta x^2\ dt > 0$$

なら、その軌道は極小関数だと言える。このことは、調和振動子のときと全く同じように考えれば、

$$\frac{\pi^2}{(t_b - t_a)^2} > \frac{M}{m}$$

が成り立つこと同じことであることがわかる。これは $t_b - t_a$ が十分小さければ成り立つ。だから

与えられた軌道があり、その軌道の十分微小な部分をとれば、それは極小関数になる。

と言える (図 7.5)。

7.8　変分問題の最小性、極小性 2

最後に一般のラグランジアンでの汎関数

$$I[q] = \int_{t_a}^{t_b} L(q, \dot{q}, t)\, dt$$

の極小性について簡単に考察しよう。変換数を $q + \delta q$ とすると

$$I[q + \delta q] = \int_{t_a}^{t_b} L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t)\, dt$$

であるが、これを δq と $\delta \dot{q}$ の 2 次まで展開すると（$\delta \dot{q}$ に関しては運動エネルギーの項にしか含まれないので元々 2 次までしかない）0 次、1 次、2 次の項はそれぞれ

$$\begin{aligned}
&0\text{ 次：} \quad I[q] \\
&1\text{ 次：} \quad \int_{t_a}^{t_b} \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\right] \delta q_i\, dt \qquad (7.21) \\
&2\text{ 次：} \quad \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \sum_{i,j} \left[\frac{\partial^2 L}{\partial q_j \partial q_i}\delta q_i \delta q_j + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_j \partial \dot{q}_i}\delta \dot{q}_i \delta \dot{q}_j + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_j \partial q_i}\delta q_i \delta \dot{q}_j + \frac{\partial^2 L}{\partial q_j \partial \dot{q}_i}\delta \dot{q}_i \delta q_j\right] dt
\end{aligned}$$

となる。ここで 1 次の項に関しては変分法のときの式 (7.2) の結果を使った。$q(t)$ を力学の法則を満たす軌道とすると、それはラグランジュ方程式を満たすので 1 次の項は 0 となる。今までわざわざ 1 次の項を計算して、そのつどそれが 0 となるとしていたが、この式を使えばわざわざ計算するまでもなかったのである。2 次の項が任意の δq に対して常に正だと言えるなら、その軌道は極小関数だと言える。それはポテンシャル次第である。

直交座標では式 (7.21) の 2 次の項は、q を x と書き換えて、

$$-\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 V}{\partial x_j \partial x_i}\delta x_i \delta x_j\, dt + \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \sum_i m_i (\delta \dot{x}_i)^2\, dt \qquad (7.22)$$

となる。第 2 項は任意の δx に対して正となるので、第 1 項が任意の δx に対して 0 以上となる軌道は極小関数だといえる。$\frac{\partial V}{\partial x_j \partial x_i}$ は対称行列である。よく知られているように対称行列は直交行列で対角化できる。だからこの固有値が全て 0 以下ならば第 1 項は 0 以上となる。固有値がすべて 0 以下のときは、幾何学的には 1 次元、2 次元では、V が上に凸という意味である。3 次元以上のときは図で表せないので幾何学的なイメージはないが、$\frac{\partial^2 V}{\partial x_j \partial x_i}$ の固有値がすべて 0 以下のとき、それを上に凸であると呼ぶことにしよう。例えば

$$V = -x^2 - 2y^2 - 3z^2$$

は、固有値がすべて負なので上に凸である。今得られた結論は

定理 7.5　極小関数となるための十分条件
ポテンシャル V が軌道上で常に上に凸なら、その軌道は極小関数である。

ということである。極小かどうかは座標系によらないので、これは任意の座標系で成り立つことである。ポテンシャル V が軌道上で常には上に凸でない場合は、極小になるかどうかは式 (7.22) の第 2 項との兼ね合いであろう。この場合は、おそらく 1 次元の場合と同様、**積分時間が十分短ければ極小関数になる**と思うのだが調べていない。

7.8.1　中心力ポテンシャルの場合

例として、中心力ポテンシャルの場合を考えよう。中心力ポテンシャルのラグランジアンは 2 次元極座標表示で

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - V(r)$$

である。このラグランジアンで、2 階微分はそれぞれ

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{r}^2} = m, \qquad \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\theta}^2} = mr^2, \qquad \frac{\partial^2 L}{\partial r^2} = m\dot{\theta}^2 - \frac{\partial^2 V}{\partial r^2},$$
$$\frac{\partial^2 L}{\partial r \partial \dot{\theta}} = 2mr\dot{\theta}, \quad \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\theta} \partial r} = 2mr\dot{\theta}$$

なので、式 (7.21) の 2 次の項は

$$\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \left[m(\delta\dot{r})^2 + mr^2(\delta\dot{\theta})^2 + m\dot{\theta}^2(\delta r)^2 - \frac{\partial^2 V}{\partial r^2}(\delta r)^2 + 4mr\dot{\theta}(\delta r)(\delta\dot{\theta}) \right] dt \tag{7.23}$$

となる。これでは見通しがわるいので $mr^2(\delta\dot{\theta})^2 + 4mr\dot{\theta}(\delta r)(\delta\dot{\theta})$ を $\delta\dot{\theta}$ の完全平方にすると、これは

$$mr^2\left((\delta\dot{\theta})^2 + \frac{4\dot{\theta}(\delta r)(\delta\dot{\theta})}{r}\right) = mr^2\left[(\delta\dot{\theta}) + \frac{2}{r}\dot{\theta}(\delta r)\right]^2 - 4m\dot{\theta}^2(\delta r)^2$$

となる。これを式 (7.23) に代入すると

$$\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \left[m(\delta\dot{r})^2 + mr^2\left[(\delta\dot{\theta}) + \frac{2}{r}\dot{\theta}(\delta r)\right]^2 + \left(-3m\dot{\theta}^2 - \frac{\partial^2 V}{\partial r^2}\right)(\delta r)^2 \right] dt \tag{7.24}$$

となる。これが任意の $\delta r, \delta\theta$ で正なら、力学の法則を満たす軌道は極小になるわけである。この第 1 項と第 2 項は必ず正になる。もし第 3 項が常に正となるような軌道なら、その軌道は極小となる。正でないときは、第 1 項、第 2 項とのかねあい次第で極小にならない場合もあろう。

中心力ポテンシャルの場合角運動量である $mr^2\dot{\theta}$ は一定なので、$mr^2\dot{\theta} = h$ とおくと、$3m\dot{\theta}^2$ は

$$3m\frac{h^2}{m^2r^4} = 3\frac{h^2}{mr^4} = \frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(\frac{h^2}{2mr^2}\right)$$

となる。だから式 (7.24) は

$$\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \left[m(\delta\dot{r})^2 + mr^2\left[(\delta\dot{\theta}) + \frac{2h^2}{r^3}(\delta r)\right]^2 - \frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(\frac{h^2}{2mr^2} + V(r)\right)(\delta r)^2 \right] dt$$

と書きかえられる。中心力の場合

$$m\ddot{r} = -\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{h^2}{2mr^2} + V(r)\right) \tag{7.25}$$

が成り立つので[*1] $\frac{h^2}{2mr^2} + V(r)$ は r 方向の有効ポテンシャルと言える。$\frac{h^2}{2mr^2}$ は遠心力のポテンシャルである。そこで

$$V_e(r) \equiv \frac{h^2}{2mr^2} + V(r)$$

とおこう。軌道が $\frac{d^2V_e}{dr^2} < 0$ となる所のみを通るなら、その軌道は極小関数になるわけである。

万有引力のとき

今、ポテンシャルとして万有引力形の

$$V = -\frac{k}{r}$$

としよう。。ここで k は定数。この場合の V は上に凸ではないので、あらゆる軌道が極小関数になるとは断定できない（定理 7.5 参）。$V_e(r)$ は図 7.6 のようになる。$\frac{d^2V_e}{dr^2}$ は r の小さいところでは正である。ある大きさ

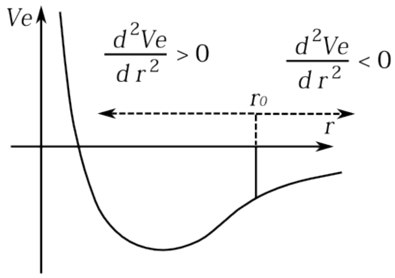

図 7.6　軌道が有効ポテンシャルの上に凸な部分のみを通るときは極小関数となる。

r_0 以上のところでは負になる。だから $r > r_0$ となるところのみ通る軌道は極小関数になる。又 $h = 0$ のときは、これは運動が r 方向の場合だが、有効ポテンシャル V_e は万有引力形のポテンシャルになり $\frac{d^2}{dr^2}\left(-\frac{k}{r}\right)$ は常に負なので (図 7.7)、そういう軌道は極小関数になる。

以上少し長くなってしまったが、力学の法則を満たす軌道 $q(t)$ が汎関数

$$I[q] = \int_{t_a}^{t_b} L(q, \dot{q}, t)\, dt$$

の停留関数になることを最小作用の原理と呼ぶ文献もあるが、決して最小になるわけではないということがわかったと思う。そして最小とならないのは、決して特殊な状況でなはく、通常の軌道で最小にならないのである。

---

*1　r 成分のラグランジュ方程式は（式 2.25 参照）

$$m\ddot{r} = mr\dot{\theta}^2 - \frac{\partial V}{\partial r}$$

である。$h = mr^2\dot{\theta}$ を使うと、

$$mr\dot{\theta}^2 = mr\frac{h^2}{m^2h^4} = \frac{h^2}{mr^3} = -\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{h^2}{2mr^2}\right)$$

となる。だから式 (7.25) になるのである。

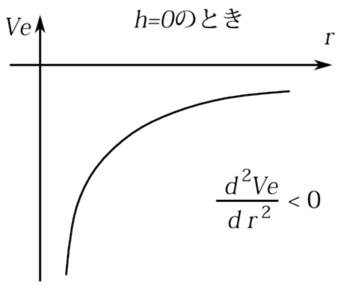

図 7.7　軌道の角運動量が 0 のときは有効ポテンシャルは全領域で上に凸になるので極小関数になる。

7.9　まとめ

汎関数

$$I[x] = \int_{t_a}^{t_b} f(x, \dot{x}, t)dt$$

で、$x(t)$ が停留関数であるための必要十分条件は、$x(t)$ がオイラーの方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\right) = \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

を満たすことである。力学の法則を見たす軌道 q_i はラグランジアン L に対してオイラーの方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

を満たす。ということは力学の法則を満たす軌道は汎関数

$$I[q] = \int_{t_a}^{t_b} L(q, \dot{q}, t)dt$$

の停留関数である。これとは別に力学の法則を満たす軌道は

$$I[q, p] = \int_{t_a}^{t_b} \sum_i p_i\dot{q} - H(q, p, t)dt$$

の停留関数でもある。

力学の法則を満たす軌道がこの汎関数の極小関数になるかどうかはポテンシャル、空間上どこを通るか、積分範囲である時間、による。軌道が、ポテンシャルが上に凸の部分のみを通るなら、その軌道は極小関数になる。また、時間が十分に短い軌道は極小関数になると思う。

第 8 章

最小作用の原理

この章でも 7 章に引き続き、変分問題を扱う。いわゆる最小作用の原理というものである。ここでは 1 粒子の系に限定した最小作用の原理を扱う。7 章での変分問題と異なり、今回の変分問題は空間の経路を色々変えて線積分 $\int_\alpha \sqrt{2m[E-V(\mathbf{r})]}\, ds$ の値を比較しようというのである。7 章では時間の関数としての空間座標を色々変えた変分問題であった。同じ空間経路を通っても時間の関数としては異なることもあった。1 次元なら空間経路は一つしか無いが時間の関数としてはいろいろある。この章で扱うのは空間経路を変えるので 2 次元以上でなければだめである。内容についてだが、まず作用積分というものを説明した。それから力学の法則を満たす軌道は、停留軌道であるということを証明した。これは非常にわかりづらい証明である。力学の法則を満たす軌道は最小軌道になると考えられる。その証明はできないのだが、そう考える根拠を記した。最小作用の原理を所要時間最小というものに結びつけた。これは少し無理矢理のようなところがある。これはフェルマの原理に似ているが、何か深い意味があるのかは不明である。まとめのところで多粒子系の最小作用の原理について簡単に言及した

8.1 問題の設定

8.1.1 作用積分

粒子は 1 つで、ポテンシャル V が与えられエネルギー E が保存する系を考える。空間軌道 α の線積分

$$\int_\alpha \sqrt{2m[E-V(\mathbf{r})]}\, ds$$

を**作用積分**と呼ぼう。$\int_\alpha$ は線積分の経路が軌道 α であるという意味。$E = \frac{p^2}{2m} + V$ なので、エネルギーと位置が与えられれば運動量の大きさが決まることになる。運動量の大きさが位置の関数という意味で $p(\mathbf{r})$ と書こう。$p(\mathbf{r})$ は

$$p(\mathbf{r}) = \sqrt{2m[E-V(\mathbf{r})]}$$

である。だから作用積分は

$$\int_\alpha p(\mathbf{r}) ds$$

とも書ける。作用積分で想定される経路は何でもよい。もちろん力学の法則を満たす軌道でなくてよい。要はエネルギー保存の法則だけ満たしていればよい。

例題 8.1　力が働いてない系で、エネルギー E の粒子が図 8.1(a) のように A から直線を l 進み B につき、次に直角に曲がって l 進んで C につくという軌道の作用積分を求めよ。また A から C へまっすぐ進んだときの作用積分も求めよ。

【解】$p = \sqrt{2mE}$ と一定で ABC 軌道の距離は $2l$ なので作用積分は $2l\sqrt{2mE}$ である。又 AC 軌道の作用積分は $\sqrt{2}\,l\sqrt{2mE}$ である。【解答終】

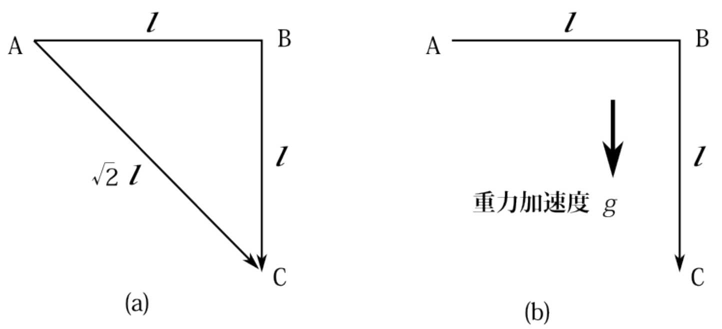

図 8.1

例題 8.2　図 8.1(b) のように重力 g があるときの ABC 軌道の作用積分を求めよ。点 A での運動量を p_0 とする。

【解】運動量を p_0 とすると AB 部分の作用積分は $p_0 l$ である。一方 B から C に向かって距離 x 進んだときの運動量 p は、エネルギー保存の法則より

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{p_0^2}{2m} + mgx$$

である。だから $p = \sqrt{p_0^2 + 2m^2gx}$ である。だから BC 部分の作用積分は $\int_0^l \sqrt{p_0^2 + 2m^2gx}\,dx$ である。だから ABC 軌道の作用積分は $p_0 l + \int_0^l \sqrt{p_0^2 + 2m^2gx}\,dx$ である。【解答終】

8.1.2　変分

今から考える変分問題とは、**軌道の始点と終点は同じで、エネルギーも同じである軌道での作用積分の値を比較すること**である (図 8.2)。作用積分 $\int_\alpha \sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))}\,ds$ は軌道によって値が異なるので、軌道の関数である。それで、軌道の関数という意味で作用積分を

$$I[\alpha] \equiv \int_\alpha \sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))}\,ds$$

と書こう。もしある軌道の作用積分が最小なら、その軌道を**最小軌道**と呼ぼう。もしある軌道をわずかに変化させたとき、作用積分の値が大きくなるなら、その軌道を**極小軌道**と呼ぼう。もしある軌道をわずかに変化させても、変化の 1 次の範囲では、作用積分の値が変わらないとき、その軌道を**停留軌道**と呼ぼう。「わずかに変化」と言うのは意味が明瞭ではないが、わずかに変化させた軌道とは位置的に近く、かつ向きがほぼ平行な軌道と考えてもらいたい。停留軌道のより詳細な定義は後で検討する。最小軌道は定義から当然、極小軌道であり、停留軌道である。極小軌道は停留軌道である。

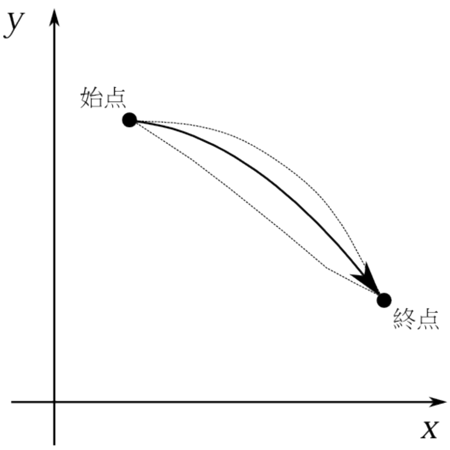

図 8.2　始点と終点を固定して軌道を変化させ、$\int_\alpha \sqrt{2m[E-V(\mathbf{r})]}\,ds$ の値を比べる。

例題 8.3　力の働いていない系では力学の法則を満たす軌道は最小軌道になることを示せ。

【解】$V=0$ なので作用積分は $\int_\alpha \sqrt{2mE}\,ds$ である。だから作用積分は $\sqrt{2mE}$ に軌道の長さを掛けたものになる。E はどの軌道でも同じなので距離が一番短い軌道が最小軌道となる。始点と終点はどの軌道でも同じなので直線が最も短い。だから直線が最小軌道である。力学の法則を満たす軌道は直線である。よって力学の法則を満たす軌道は最小軌道である。【解答終】

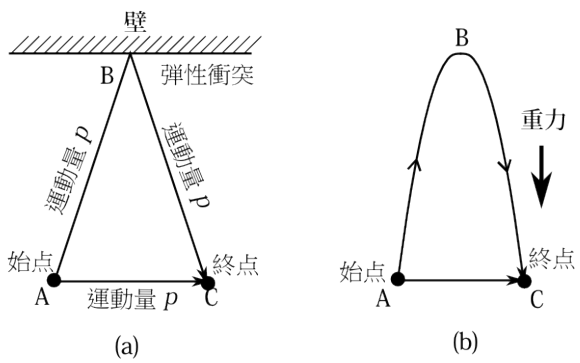

図 8.3

今の例題では力学の法則を満たす軌道は最小軌道になったが、力学の法則を満たす軌道すべてが最小軌道になるかというと、そうではない。図 8.3(a) のように壁の所でしか力の働いていない系を考えよう。壁で弾性衝突するとしよう。A から B まで運動量が p で直線上に進み、そこで強い力が働き、反射され運動量が p で C に戻ってくる軌道は力学の法則を満たす軌道である。一方直線 AC を運動量 p で通る軌道も力学の法則を満たす軌道である。そして AC の長さが AB より短ければ、作用積分は明らかに AC 軌道の方が小さい。

もう 1 つ例を見よう。図 8.3(b) のように地球上でボールを点 A から初期運動量 p で斜め上に投げ、最上点 B に達し、同じ高さの点 C に戻ってくるという軌道を考えよう。これは力学の法則を満たす軌道である。ま

た直線 AC を運動量 p で進む軌道を考えよう。これは力学の法則を満たさない軌道である。AB に比して AC の距離が十分短ければ作用積分は直線 AC 軌道の方が小さくなる。だから力学の法則を満たす軌道は最小軌道になっていない。今の 2 つの例は**一種の反射のある場合である。**反射のない場合は力学の法則を満たす軌道は最小軌道になると思う。その根拠は 8.5 節で説明する。

8.2 停留性

停留性については、反射のある場合も含めて以下のことが成り立つ。

定理 8.1 力学の法則を満たす軌道は停留軌道である。

通常この数学的事実のことを最小作用の原理という。証明は正直言って、煩雑でわかりづらいく、そして何と言ってもつまらない。飛ばしてもらっていい。

(証明の準備)

証明のための補題を証明する。粒子が始点を出発してから終点に到着するまでにかかる時間は軌道ごとに異なる。それでその時間が軌道 α の関数という意味で $t(\alpha)$ と書こう。又始点を出発してからの時間 t を決めれば位置が決まる。その時間依存性も軌道によって異なる。軌道 α と時間 t の関数という意味で、それを $\mathbf{r}^\alpha(t)$ と書こう。積分変数を距離の ds から時間 dt に変えよう。

$$ds = vdt$$

なので

$$\int_\alpha p(\mathbf{r})ds = \int_0^{t(\alpha)} p[\mathbf{r}^\alpha(t)] \cdot \frac{p[\mathbf{r}^\alpha(t)]}{m}\, dt$$

が成り立つ。p^2/m は運動エネルギー T の 2 倍である。だから

$$\int_\alpha p(\mathbf{r})ds = \int_0^{t(\alpha)} 2T[\mathbf{r}^\alpha(t)]\, dt$$

が成り立つ。$2T = (T-V) + (T+V) = L + E$ なので（L はラグランジアン)、作用積分は

$$\int_\alpha p(\mathbf{r})ds = \int_0^{t(\alpha)} \Big(L\left[\mathbf{r}^\alpha(t), \dot{\mathbf{r}}^\alpha(t)\right] + E \Big)\, dt$$

とも書ける[*1]。だから

補題 8.1 以下の 4 つの積分は等しい。

$$\int_\alpha \sqrt{2m[E - V(\mathbf{r})]}\, ds = \int_\alpha p(\mathbf{r})ds = \int_0^{t(\alpha)} 2T[\mathbf{r}^\alpha(t)]dt = \int_0^{t(\alpha)} \Big(L\left[\mathbf{r}^\alpha(t), \dot{\mathbf{r}}^\alpha(t)\right] + E \Big)\, dt$$

2 つの軌道 α と β の作用積分の差 $I[\alpha] - I[\beta]$ を考えよう。この 2 つの軌道は十分接近しているとする。始点を同時に出発し、β 軌道の方が先に終点に着くとしよう。すなわち

$$t(\beta) < t(\alpha)$$

[*1] 今は直交座標で、ポテンシャルも時間を含まないので、ラグランジアンも時間を含まない。

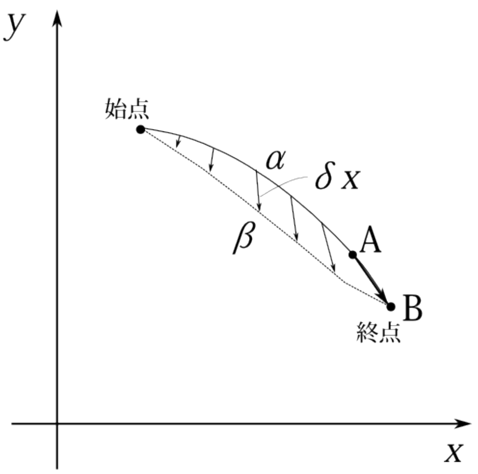

図 8.4　β 軌道が終点 B に着いたときの α 軌道の位置が A。δx は同一時刻での 2 つの軌道の差

とする。α 軌道の作用積分の時間を 0 から $t(\beta)$ と $t(\beta)$ から $t(\alpha)$ に分割しよう。すなわち

$$I[\alpha] = \int_0^{t(\beta)} \Big(L\left[\mathbf{r}^\alpha(t), \dot{\mathbf{r}}^\alpha(t)\right] + E \Big)\, dt + \int_{t(\beta)}^{t(\alpha)} \Big(L\left[\dot{\mathbf{r}}^\alpha(t), \mathbf{r}^\alpha(t)\right] + E \Big)\, dt$$

とする。α 軌道のうち、時間 $t(\beta)$ から $t(\alpha)$ の間に動く部分を $\Delta\alpha$ と書こう。すると

$$\int_{t(\beta)}^{t(\alpha)} \Big(L\left[\mathbf{r}^\alpha(t), \dot{\mathbf{r}}^\alpha(t)\right] + E \Big)\, dt = \int_{\Delta\alpha} p(\mathbf{r}) ds$$

である。だから

$$I[\alpha] = \int_0^{t(\beta)} \Big(L\left[\mathbf{r}^\alpha(t), \dot{\mathbf{r}}^\alpha(t)\right] + E \Big)\, dt + \int_{\Delta\alpha} p(\mathbf{r}) ds$$

となる。E は 2 つの軌道で等しいので

$$I[\beta] - I[\alpha] = \int_0^{t(\beta)} \Big(L\left[\mathbf{r}^\beta(t), \dot{\mathbf{r}}^\beta(t)\right] - L\left[\mathbf{r}^\alpha(t), \dot{\mathbf{r}}^\alpha(t)\right] \Big)\, dt - \int_{\Delta\alpha} p(\mathbf{r}) ds \tag{8.1}$$

となる。ベクトル $\mathbf{r}^\beta(t) - \mathbf{r}^\alpha(t)$ の i 成分を $\delta x_i(t)$ と書こう。$L\left[\mathbf{r}^\alpha(t), \dot{\mathbf{r}}^\alpha(t)\right]$ を短く $L^\alpha(t)$ と書こう。

(α 軌道で展開)

<u>$\delta x_i, \delta \dot{x}_i$ の 1 次の範囲で</u>

$$\int_0^{t(\beta)} L^\beta(t) - L^\alpha(t)\, dt \cong \int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3} \left[\frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial x_i} \delta x_i + \frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial \dot{x}_i} \delta \dot{x}_i \right] dt$$

である。$\dfrac{\partial L_\alpha}{\partial \dot{x}_i} \delta \dot{x}_i$ を部分積分すると、これは

$$\int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3} \left[\frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial \dot{x}_i} \right) \right] \delta x_i\, dt + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial L_\alpha[t(\beta)]}{\partial \dot{x}_i} \delta x_i[t(\beta)] - \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial L_\alpha(0)}{\partial \dot{x}_i} \delta x_i[0]$$

となる。時間が $t(\beta)$ のときの α 軌道、β 軌道の位置をそれぞれ A,B としよう (図 8.4)。点 B は軌道の終点である。第 2 項の $\delta x_i[t(\beta)]$ は、ベクトル $\overrightarrow{\mathrm{AB}}$ の i 成分である。点 A での α 軌道の運動量ベクトルを $\mathbf{p}^\alpha(\mathrm{A})$ と書くと、第 2 項は

$$\mathbf{p}^\alpha(\mathrm{A})\cdot\overrightarrow{\mathrm{AB}}$$

と書ける。第 3 項だが、2 つの軌道は同時に出発しているので $\delta x_i(0)=0$ である。だから第 3 項は 0 である。だから

$$I[\beta]-I[\alpha]\cong\int_0^{t(\beta)}\sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial x_i}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial \dot{x}_i}\right)\right]\delta x_i\,dt+\mathbf{p}^\alpha(\mathrm{A})\cdot\overrightarrow{\mathrm{AB}}-\int_{\Delta\alpha}p(\mathbf{r})ds \tag{8.2}$$

となる。点 A での運動量大きさを $p(\mathrm{A})$ と書こう。直線 AB の長さを $\overline{\mathrm{AB}}$ と書こう。もし 2 つの軌道が十分接近していて、その結果 B と A が十分接近しいるとしてよく、その結果

A1.　点 A での α 軌道の進む向きが、ベクトル $\overrightarrow{\mathrm{AB}}$ の向きに等しいとしてよいなら

$$\mathbf{p}^\alpha(\mathrm{A})\cdot\overrightarrow{\mathrm{AB}}\cong p(\mathrm{A})\,\overline{\mathrm{AB}} \tag{8.3}$$

と近似できる。

一方 $\int_{\Delta\alpha}p(\mathbf{r})ds$ は、もし 2 つの軌道が十分接近していて、その結果 B と A が十分接近しいるとしてよく、その結果

A2.　A から B への軌道上で運動量の大きさは常に A での運動量の大きさとしてよく、かつ A から B までの軌道を直線とみなしてよいなら

$$\int_{\Delta\alpha}p(\mathbf{r})ds\cong p(\mathrm{A})\overline{\mathrm{AB}} \tag{8.4}$$

と近似できる。式 (8.3)、式 (8.4) から、式 (8.2) の第 2 項と第 3 項はキャンセルする。よって

$$I[\beta]-I[\alpha]\cong\int_0^{t(\beta)}\sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial x_i}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial \dot{x}_i}\right)\right]\delta x_i\,dt \tag{8.5}$$

となる。もし α 軌道が力学の法則を満たす軌道なら $I[\beta]-I[\alpha]\cong 0$ である。

今示したことは力学の法則を満たす軌道の作用積分とその軌道より先に終点に着く軌道の作用積分との差は 2 つの軌道が十分接近していれば $\delta x_i(t),\delta\dot{x}_i$ の 1 次の範囲では 0 であるということである。だから力学の法則を満たす軌道より後に終点に着く軌道の作用積分との差が 0 となることも示さなければならない。

(β 軌道で展開)

その方法は 2 つあるのだが、まず今のと同じ方法のものから書こう。式 (8.1) をもう一度書くと

$$I[\beta]-I[\alpha]=\int_0^{t(\beta)}L\left[\mathbf{r}^\beta(t),\dot{\mathbf{r}}^\beta(t)\right]-L\left[\mathbf{r}^\alpha(t),\dot{\mathbf{r}}^\alpha(t)\right]\,dt-\int_{\Delta\alpha}p(\mathbf{r})ds$$

である。ここでの $L^\beta(t)-L^\alpha(t)$ を前回は α 軌道を基準に展開したが、今回は β 軌道を基準に展開しよう。

ベクトル $\mathbf{r}^\alpha(t)-\mathbf{r}^\beta(t)$ の各成分は $(-\delta x_i)$ なので、$L^\beta(t)-L^\alpha(t)$ は $\underline{\delta x_i, \delta\dot{x}_i \text{ の 1 次の範囲で}}$

$$\begin{aligned}\int_0^{t(\beta)} L^\beta(t)-L^\alpha(t)\,dt &= -\int_0^{t(\beta)} L^\alpha(t)-L^\beta(t)\,dt\\ &= -\int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial x_i}(-\delta x_i)+\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial \dot{x}_i}(-\delta\dot{x}_i)\right]dt\\ &= \int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial x_i}(\delta x_i)+\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial \dot{x}_i}(\delta\dot{x}_i)\right]dt\end{aligned}$$

となる。そして前回と同じように $\dfrac{\partial L_\beta}{\partial \dot{x}_i}\delta\dot{x}_i$ を部分積分すると

$$\int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial x_i}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial \dot{x}_i}\right)\right]\delta x_i\,dt+\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial L_\beta[t(\beta)]}{\partial \dot{x}_i}\delta x_i[t(\beta)]-\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial L_\beta(0)}{\partial \dot{x}_i}\delta x_i(0)$$

となる。前回と違うのは L_α が L_β になっているだけである。β 軌道の点 B での運動量ベクトルを $\mathbf{p}^\beta(\mathrm{B})$ と書こう。すると第 2 項は

$$\mathbf{p}^\beta(\mathrm{B})\cdot\overrightarrow{\mathrm{AB}}$$

となる。前回は $\mathbf{p}^\alpha(A)$ だったのが $\mathbf{p}^\beta(B)$ に変わった。第 3 項は $\delta x_i(0)=0$ なので 0 である。だから

$$I[\beta]-I[\alpha]\cong\int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial x_i}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial \dot{x}_i}\right)\right]\delta x_i\,dt+\mathbf{p}^\beta(\mathrm{B})\cdot\overrightarrow{\mathrm{AB}}-\int_{\Delta\alpha}p(\mathbf{r})ds \tag{8.6}$$

となる。もし 2 つの軌道が十分接近していて、その結果 B と A が十分接近しいるとしてよく、その結果

B1.　**点 B での β 軌道の進む向きが、$\overrightarrow{\mathrm{AB}}$ の向きに等しいとしてよいなら**

$$\mathbf{p}^\beta(\mathrm{B})\cdot\overrightarrow{\mathrm{AB}}\cong p(\mathrm{B})\overline{\mathrm{AB}} \tag{8.7}$$

と近似できる。$p(\mathrm{B})$ というのは点 B での運動量の大きさ。一方 $\int_{\Delta\alpha}p(\mathbf{r})ds$ は、もし 2 つの軌道が十分接近していて、その結果 B と A が十分接近しいるとしてよく、その結果

B2.　**A から B への軌道上で運動量の大きさは常に B での運動量の大きさとしてよく、かつ A から B までの軌道を直線とみなしてよいなら**

$$\int_{\Delta\alpha}p(\mathbf{r})ds\cong p(\mathrm{B})\overline{\mathrm{AB}} \tag{8.8}$$

と近似できる。式 (8.7)、式 (8.8) から、式 (8.6) の第 2 項と第 3 項はキャンセルする。よって

$$I[\beta]-I[\alpha]\cong\int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial x_i}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial \dot{x}_i}\right)\right]\delta x_i\,dt \tag{8.9}$$

となる。もし **β 軌道が力学の法則を満たす軌道なら $I[\beta]-I[\alpha]\cong 0$ である。**だからもし β 軌道、すなわち先に終点に着く軌道が力学の法則を満たしているならば、その軌道の作用積分と後に着く軌道の作用積分の差は $\delta x, \delta\dot{x}$ の 1 次の範囲では 0 となるわけである。以上から、力学の法則を満たす軌道は停留軌道になるというわけである。

今は軌道がラグランジュ方程式を満たしているなら、作用積分の停留軌道になるということを証明したのだが、その逆のすべての停留軌道はラグランジュ方程式を満たすかということについては何とも言えない。式 (8.5)、(8.9) の右辺

$$\int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3} \left[\frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial \dot{x}_i} \right) \right] \delta x_i \, dt$$

での δx_i は、第 7 章での変分のときと違い、$E =$ 一定という制限があるので任意ではない。だから、ラグランジュ方程式を満たさなくてもこの積分が 0 になるかもしれないからである。

（別証）

もう 1 つの証明法を書こう。今は汎軌道の変分は $\delta x, \delta\dot{x}$ の 1 次の範囲で

$$I[\beta] - I[\alpha] \cong \int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3} \left[\frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_\alpha(t)}{\partial \dot{x}_i} \right) \right] \delta x_i \, dt \tag{8.10}$$

と近似できかつ

$$I[\beta] - I[\alpha] \cong \int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3} \left[\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial \dot{x}_i} \right) \right] \delta x_i \, dt \tag{8.11}$$

とも近似できるということをわざわざ示したわけである。軌道が近ければ、同時刻での $\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\right)$ の値も近いであろう。だから式 (8.10) が成り立つなら式 (8.11) が成り立つと言えそうである。$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\right)$ というのは、それぞれ

$$\frac{\partial L_\alpha}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_\alpha}{\partial \dot{x}_i} \right) = F_i(\mathbf{r}^\alpha) - m\ddot{x}_i^\alpha \qquad \frac{\partial L_\beta(t)}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial \dot{x}_i} \right) = F_i(\mathbf{r}^\beta) - m\ddot{x}_i^\beta$$

である。ここで F_i は位置によって決まる力。前の記号で $x_i^\alpha - x_i^\beta = (-\delta x_i)$ である。$(-\delta x_i)$ の 1 次の範囲で

$$F_i(\mathbf{r}^\alpha) - m\ddot{x}_i^\alpha \cong F_i(\mathbf{r}^\beta) - m\ddot{x}_i^\beta + \Big[\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} F_i(\mathbf{r}^\beta)(-\delta x_j) - m(-\delta \ddot{x}_i) \Big]$$

である。これを式 (8.10) に代入すると、

$$I[\beta] - I[\alpha] \cong \int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3} \left[\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_\beta(t)}{\partial \dot{x}_i} \right) \right] \delta x_i \, dt + \int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3} \Big[-\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} F_i(\mathbf{r}^\beta) \delta x_j + m\delta\ddot{x}_i \Big] \delta x_i \, dt \tag{8.12}$$

となる。ところで部分積分法を使うと

$$\int_0^{t(\beta)} \delta\ddot{x}_i \delta x_i dt = [\delta\dot{x}\delta x_i]_0^{t(\beta)} - \int_0^{t(\beta)} \delta\dot{x}_i \delta\dot{x}_i \, dt$$

となる。だから式 (8.12) の第 2 項にある $\delta\ddot{x}$ の項は消せる。だから第 2 項は $\delta x_i^2, \delta\dot{x}_i^2, \delta\dot{x}\delta x_i$ のオーダーとなる。だから式 (8.10) が成り立つなら $\delta x_i, \delta\dot{x}_i$ の 1 次の範囲で式 (8.11) が成り立つと言える。別証の考え方はわかりやすいが、面倒でややこしいことには変わりがない。

8.3　数学的構造

今の証明は、いろいろと時間やら運動量やら、エネルギーやらでてきて実にややこしかったが、そういう物理量という概念を忘れて単に数学として考えた方がすっきりと本質が見えるかもしれない。定理 8.1 の主張していることは、数学的には以下のことである。与えられた数 E、与えられた位置の関数 V があるとき線積分

$$\int_\alpha \sqrt{2m[E-V(\mathbf{r})]}\, ds$$

が停留する軌道は何か。その答えというのは、まず

$$dt = \frac{m}{\sqrt{2m[E-V(\mathbf{r})]}}\, ds$$

という距離 ds と異なるパラメータ t を導入する。t を時間だとか考えず、上の式に定義したただの積分変数と考える。与えられた軌道の位置を $x_i(t)$ というように t の関数で表す。そしてその軌道がもし

$$m\frac{d^2x_i}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x_i}$$

を満たしているなら、その軌道は停留軌道になるということなのである。

8.4　停留の意味

最初に停留軌道というのは軌道をわずかに変化させても、その作用積分が変化しない軌道だと述べた。それでは意味が少しあいまいなので、より厳密な言葉に置き換えたい。力学の法則を満たす軌道を α、満たさない軌道を β 軌道とする。α 軌道と β 軌道との差ということだが、例えば、図 8.5(a) のように α 軌道から直角に β 軌道に線を引き、その長さと考えるのがよいだろう。その長さの最大値が 0 に近づくとき、作用積分の差は

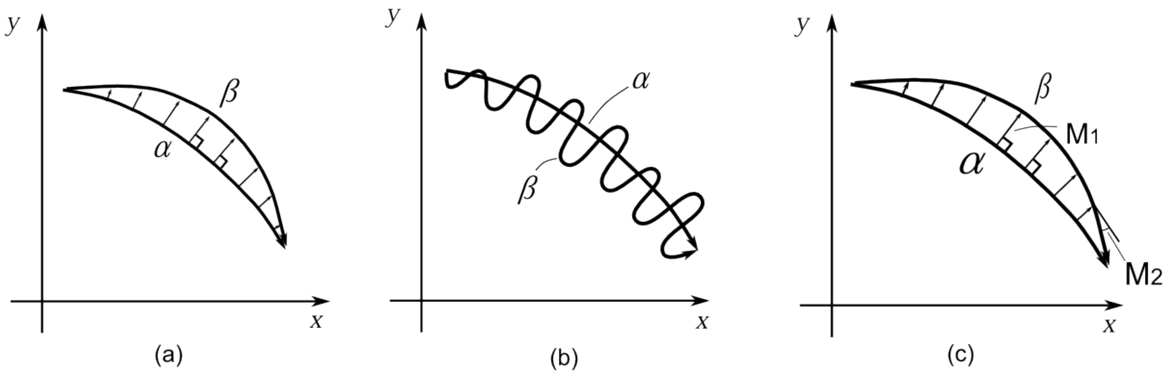

図 8.5　(a):わずかに変化させた軌道というためには幅が狭く無くてはならない。(b):向きが大きく異なっていてはわずかに変化させたとは言えない。(c):幅の最大値が M_1 角度差の最大値が M_2。

それより速く 0 に近づくというのが停留軌道であろう。しかし図 8.5(b) のように、いくら幅を狭くしても、軌道の向きが全く異なるようでは、軌道をわずかに変化させたとは言えないであろう。それに軌道が長くなると、作用積分も大きくなってしまう。以上の考察から停留軌道の定義を以下のようにすればよいと思う。α 軌道上の点から α 軌道に対して直角の線を引き、それが β 軌道に当たるまでの長さがある。α 軌道のいろいろ

な点からの長さを測り、その最大値を M_1 としよう (図 8.5(c) 参)。そして、その幅を測った線と β 軌道との角度がある。それの 90°との差の最大値を　M_2 としよう。M_1, M_2 の大きい方を M_3 としよう。今 α 軌道を固定して、β 軌道を変化させて、$M_3 \to 0$ となるようにしよう。そのとき任意の β 軌道に対して

$$\lim_{M_3 \to 0} \frac{I[\beta] - I[\alpha]}{M_3} = 0$$

となるなら、α 軌道は停留軌道であるというのが停留軌道の定義でよいだろう。少し長くなってしまったが意味はわかったと思う。

さて、このように停留軌道を定義して、力学の法則を満たす軌道は停留軌道になるのだろうか。それにはもう一度、先の証明を検証してみる必要がある。仮定として使ったのは A.1、A.2、B.1、B.2 である。だからそれが今の定義で成り立つかを検証すれば良い。ただそれは何か技術的で煩雑な作業に思えるので、そのことについては調べていない。私自身はこの定義でも停留軌道になると思っている。

8.5　最小性

力学の法則を満たす反射のない軌道は最小軌道になるであろうと述べたが、その根拠を書こう。力学の法則を満たす軌道があり、それはあるハミルトンヤコビの方程式の解から導かれたとする。すなわち

$$\frac{\partial S}{\partial x_i} = p_i \qquad\qquad \frac{\partial S}{\partial \alpha_i} = \beta_i$$

から x, p を α, β, t の関数として求めて α, β を適当に定めればその軌道になるということである。それで α は定められたので S は x, t のみの関数となる。1 つの力学軌道に対して、必ずそれに対応するハミルトンヤコビの方程式の解があるかどうかは証明していないが、あると思う。時間を含まないハミルトンヤコビの方程式は

$$\frac{|\nabla W|^2}{2m} + V = E$$

なので、

$$\sqrt{2m(E-V)} = |\nabla W|$$

である。だから作用積分 $I[\alpha]$ は

$$I[\alpha] = \int_\alpha |\nabla W| \, ds$$

と書ける。微小距離 ds に対応する微小変位ベクトルを $\mathbf{ds}$ と書こう。力学の法則を満たす軌道では $\mathbf{p} = \nabla W$ なので、$\mathbf{ds}$ はベクトル ∇W の向きに等しい。だから

$$|\nabla W| \, ds = \nabla W \cdot \mathbf{ds}$$

が成り立つ。だから

$$I[\alpha] = \int_\alpha |\nabla W| ds = \int_\alpha \frac{\partial W}{\partial x} dx + \frac{\partial W}{\partial y} dy + \frac{\partial W}{\partial z} dz$$

となる。だから

補題 8.2　力学の法則を満たす軌道の作用積分はその軌道に対応するハミルトンヤコビの方程式の時間を含まない解 W の始点から終点までの増加量である。

と言える。では力学の法則を満たさない軌道の作用積分はどうなるか。図 8.6(a) のように始点から終点まで

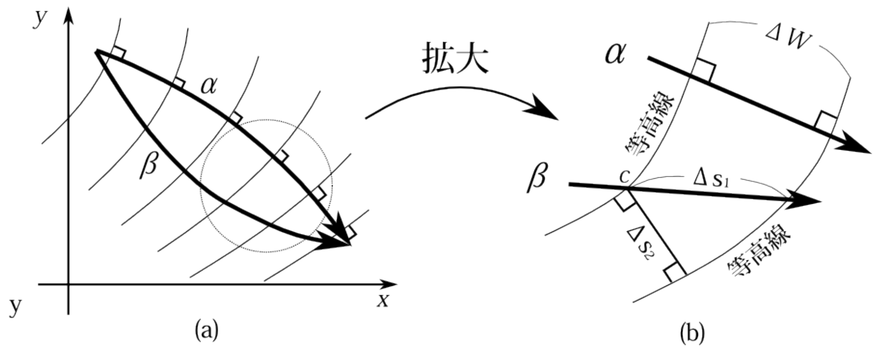

図 8.6　(a):力学の法則を満たす軌道 α は等高線に直交するが、そうでない軌道 β は直交しない部分がある。(b):その拡大図。$|\nabla W|\Delta s_1 \leq \Delta W$ となる。

W の等高線をその区間で軌道が直線とみなせるくらい十分細かく間隔でひこう。α を力学の法則を満たす軌道とする。β を力学の法則を満たさない軌道とする。α は常に等高線に直交するが、β には必ず等高線と直交しない箇所がある。というのは常に直交していたら、それは α と同じになってしまうからである。その直交しない区間をとりだして拡大すると図 8.6(b) のようになる。その区間での等高線間の作用積分の値を比較しよう。その等高線間の W の差を ΔW としよう。α 軌道ではその区間での作用積分の値は補題 8.2 より、ΔW となる。β 軌道が等高線と交わる点を c とし (図 8.6(b))、又、β 軌道のこの 2 つの等高線間の距離を Δs_1 とする。するとこの 2 つの等高線間の β 軌道の作用積分は

$$\sqrt{2m[E-V(c)]}\Delta s_1 = |\nabla W(c)|\Delta s_1$$

となる。同じ c を通って等高線に直交する線を考え、Δs_2 をその等高線間の距離とする。Δs_2 は Δs_1 より短いので

$$|\nabla W(c)|\Delta s_1 > |\nabla W(c)|\Delta s_2$$

が成り立つ。ところで Δs_2 の向きは等高線に直交しているので ∇W の向きに等しい。だから補題 8.2 を導いたのと同じ理由で、$|\nabla W(c)|\Delta s_2$ は ΔW に等しい。だから β 軌道のこの区間での作用積分は同じ等高線区間での α 軌道の作用積分より大きい。β 軌道は等高線と直交している区間では、その部分の α の作用積分と等しく、直交していない区間では、それよりも大きい。だから全体としては必ず大きくなる。**力学の法則を満たす軌道が横切る等高線の数と同じ数だけ横切っている力学の法則を満たさない軌道の作用積分は力学の法則を満たす軌道のそれより必ず大きくなる**ということを示したわけである。もっと簡単に言えば W の連続な領域内にある軌道の中では最小ということである。すなわち

定理 8.2　力学の法則を満たす軌道に対応する W が存在し、その W の定義域内に入っている軌道の中では、力学の法則を満たす軌道が最小である。

といえる。だから図 8.7 のように

1. 力学の法則を満たす軌道を包み込むような W が存在すればその軌道は極小軌道であり、

2. その W の定義域が作用積分で許される定義域をすべて包み込んでいるなら、その軌道は最小軌道である

と言えるわけである。この主張を具体例で見てみよう。

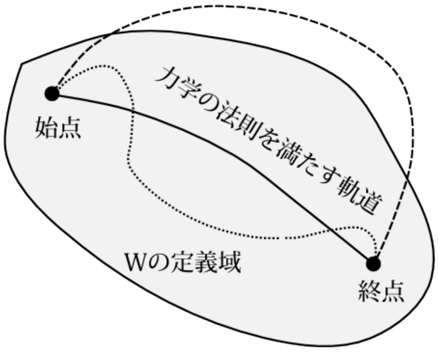

図 8.7　グレイの部分が力学の法則を満たす軌道に対応する W の定義域。その定義域に入っている軌道の作用積分は力学の法則を満たす軌道の作用積分より大きい。その領域外を通る軌道については何とも言えない。

2 次元自由粒子

2 次元自由粒子を考えよう。この場合ハミルトンヤコビの方程式の解は

$$S = -\frac{\alpha_x^2 + \alpha_y^2}{2m} t + \alpha_x x + \alpha_y y$$

である。この S から α, β を適当に選べばどんな力学の法則を満たす軌道も表せる。そして

$$W = \alpha_x x + \alpha_y y$$

は x, y の全領域を覆っている。だから自由粒子での力学の法則を満たす軌道は最小軌道になる。これはこの章の始めにも述べたことだが、新たに証明し直したわけである。

2 次元自由落下

2 次元自由粒子を考えよう。6.7 節で見たように y 軸の正の向きを重力の向きにとったときの、W は

$$W = p_x x + \int^y \sqrt{2m\left(E - \frac{p_x^2}{2m} + mgy'\right)}\, dy'$$

であった[*2]。この W の定義域は y が $E - \frac{p_x^2}{2m} + mgy \geq 0$、すなわち

$$y \geq \frac{1}{mg}\left(\frac{p_x^2}{2m} - E\right)$$

を満たす領域である。一方、作用積分で軌道の通ることができる領域というのは $E - V \geq 0$ が満たされる領域である。今の場合で言えば y が $E + mgy \geq 0$、すなわち

$$y \geq \frac{1}{mg}\left(-E\right)$$

[*2] これに

$$E = E_y + \frac{p_x^2}{2m} \qquad p_x = \alpha_x$$

を代入して積分すれば式 (6.20) になる。

を満たす領域である。だから作用積分で軌道が通ることが許される領域の方が、W の定義域より広いのである。だから W の定義域を超えた図 8.8 の β のような軌道も作用積分の経路として考えることができる。今の

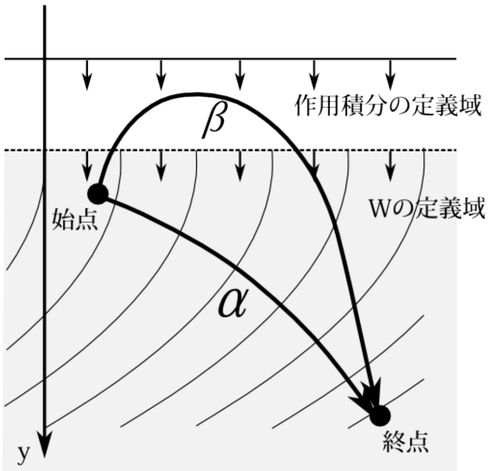

図 8.8　α 軌道が力学の法則を満たす軌道。β 軌道が満たさない軌道。W の定義域外を通る軌道に対しては、今の論法は使えない。実線より下が作用積分の定義域。破線より下が W の定義域。作用積分の定義域の方が広い。

論法では、そのような軌道の作用積分は、力学の法則を満たす軌道のそれより小さいとは断定できないのである。

しかしながら

$$\int_\alpha p(\mathbf{r})ds$$

という積分は運動量の大きさが小さく、距離が短い方が値は小さくなり、そのバランスで、それを最も小さくする軌道が定まるのである。図 8.8 の力学の法則を満たす α という軌道を徐々に上にずらしていき、図 8.8 の β 軌道に持っていく。その軌道がすべて W の定義域に入っているときは作用積分は α 軌道より大きいのである。それが W の定義域を超えたからと言って、急に作用積分が小さくなるというのは想像しにくいところである。だからおそらく一様重力場でも力学の法則を満たす軌道は最小軌道になっているのであろう。

反射がある場合

次に一様重力場で反射がある場合を考えよう。反射がある場合とは「力の向きの速度成分が反転する軌道」と定義しよう。今の場合上昇して最上点に達し下降する軌道が反射のある場合と言える。力は y 方向で、y 方向の速度成分が $- \to 0 \to +$ と変化しているからである。一様重力場の W は、上昇しているときは

$$W_- = p_x x - \int^y \sqrt{2m\left(E - \frac{p_x^2}{2m} + mgy'\right)}dy'$$

であり、下降しているときは

$$W_+ = p_x x + \int^y \sqrt{2m\left(E - \frac{p_x^2}{2m} + mgy'\right)}dy'$$

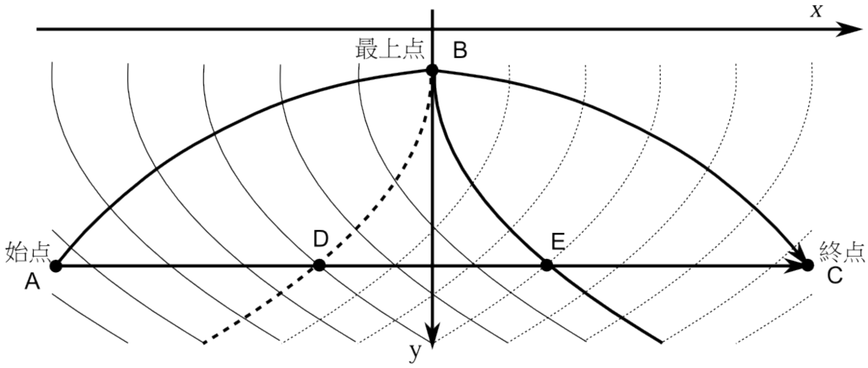

図 8.9　軌道の AB 部分に対応するのは直線 AE。軌道 BC に対応するのは直線 DC

である。

図 8.9 のように始点 A を出発して最上点 B に達し、始点と同じ高さの終点 C に戻ってくる軌道を考えよう。始点から最上点までは W_- を用い、最上点から終点までは W_+ を用いなければならない。2 つの W を用いなければならない。積分定数を適当に決めればこの軌道の始点から終点まで W を連続にすることができる。そして W の差が等しくなるように等高線を引く。直線 AC を通る軌道を考えよう。始点から最上点の等高線に対応するのは図 8.9 のように直線 AE である。又、最上点から終点までの等高線に対応するのは図 8.9 のように直線 DC である。直線 DE の区間では等高線が重なってしまい、ABC の軌道の作用積分の方が直線 AC の作用積分より小さいとはいえないのである。このようなことは**力の向きの**運動量が反転する場合は常に起こることなのではないかと思う。万有引力形のポテンシャルの場合も 1 つの連続な W では近日点から遠日点までしか表現できなかった。遠日点に達すれば ± を反転した W を使わなければならなかった。

仮説

一般にはどの力学の法則を満たす軌道に対してもそれに対応するハミルトンヤコビの方程式の解が存在すると思う。だから一様重力場の考察から推察すると、一般に

> **仮説 8.1**　力学の法則を満たす反射のない軌道は最小軌道である。

ということが成り立つのではないかと思う。

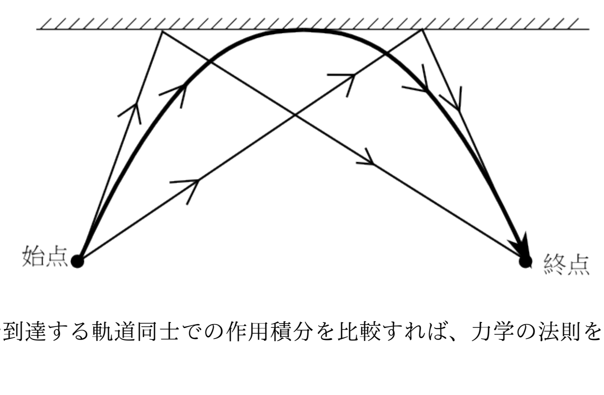

図 8.10　同じ高さまで到達する軌道同士での作用積分を比較すれば、力学の法則を満たす軌道が最も小さくなるのではないか。

また反射のある力学の法則を満たす軌道は最小軌道でないのだが、比較するのを反射のあるもの同士で比較したらどうだろうか。例えば一様重力場では図 8.10 のように最高点と同じ高さに到達する軌道同士で比べるわけである。そうすると力学の法則を満たす軌道の作用積分が一番小さくなるのではないかと思う。

仮説 8.2 反射のある者同士で比べれば力学の法則を満たす軌道の作用積分が一番小さい。

ということが成り立つのではないかと思う。

8.6 最小時間、フェルマの原理との類似

作用積分 $\int_\alpha pds$ というのは単なる運動量の線積分で、簡単な物理量に結びついたものではない。そこでこの量について、やや強引だが解釈を加えてみよう。ハミルトンヤコビの方程式の解 S を使って波動関数を

$$\psi \cong \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$$

と近似した場合、位相の速さ v' は $v' = E/p$ であると述べた (式 (6.24) 参照)。だから

$$v' = \frac{E}{\sqrt{2m[E - V(\mathbf{r})]}}$$

である。この v' を使うと作用積分は

$$\int_\alpha \sqrt{2m[E - V(\mathbf{r})]}\, ds = E\int_\alpha \frac{ds}{v'(\mathbf{r})}$$

と書ける。$ds/v'(\mathbf{r})$ というのは速さ v' で動くものが距離 ds 進むのに必要な時間である。だから作用積分は位相速さで動く何者かが（そんなものはないのだが)、軌道の始点から終点に着くまでにかかる時間に系のエネルギー E を掛けたものである。系のエネルギーは同一のものを比較するので、作用積分が最小の経路は所要時間が最小の経路である。だから

定理 8.3 仮説 8.1、8.2 が正しいなら、位相速さで動く何者かがある点からある点まで着くのにかかる時間は経路をいろいろ変えたとき、力学の法則を満たす軌道で最小になる

と言える。これは光学のフェルマの原理に似ている。フェルマの原理は光の軌道は最も所要時間が短い経路を通る。というものである。

8.7 まとめ

線積分 $\int_\alpha \sqrt{2m(E-V)}\, ds$ を作用積分という。始点と終点とエネルギーを固定して、経路を変えて作用積分の値を比較することがこの章の主題であった。作用積分は

$$\int_\alpha p(\mathbf{r})ds, \quad \int_\alpha |\nabla W|ds, \quad \int_0^{t(\alpha)} 2T[\mathbf{r}^\alpha(t)]dt, \quad \int_0^{t(\alpha)} L\left[\mathbf{r}^\alpha(t), \dot{\mathbf{r}}^\alpha(t)\right] + E\; dt$$

とも書ける。力学の法則を満たす軌道は停留軌道になることを証明した。その逆は証明できなかった。力学の法則を満たす軌道に対応する W が存在するときは、その W の定義域内に入っている軌道の中では、力学の法則を満たす軌道が最小である。だから W の定義域が作用積分の定義域を包み込んでいれば、力学の法則を

満たす軌道は最小軌道になるといえる。しかし一様重力場の例で見たように包み込んでいない。だから最小軌道になると証明はできていない。そして証明の前提となるべき、力学の法則を満たす軌道に対応する W が必ず存在するということを証明していない。ただこれは存在すると思う。又、力学の法則を満たす軌道は最小軌道になると思っている。反射のある場合は 2 つの W が必要となる。だから最小軌道にならないのである。ただこれも想像だが、反射のある者同士で比べれば最小になるのではと思っている。

力学の法則を満たす軌道が作用積分の最小値をとるということは次のように言い換えられる。シュレディンガーの波動方程式の解を

$$\psi \cong \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$$

と近似して、速度場としてこの波動関数の位相速度を使うと、この位相速度で動く何者かは、力学の法則を満たす軌道を通ると所要時間が最も短くなる。これは光学のフェルマの原理と同じものである。しかしあくまでも $\psi \cong \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$ という近似での位相速度である。これが何か深い意味があるのかは私には不明である。

多粒子系での最小作用の原理

このテキストでは、系を 1 粒子の場合に限定して話を進めてきたが、今まで述べてきた命題が多粒子系の場合どうなるかについて簡単に言及したい。

作用積分 $\int_\alpha \sqrt{2m(E-V)}\,ds$ での m というのは質量であり、多粒子系では各質量が等しいとは限らないので、この作用積分は意味をなさない。そこで

> 多粒子系の作用積分は
>
> $$\int_\alpha \sum_i p_i dx_i$$
>
> と定義される。

ここで dx_i は経路の微小変位ベクトルである。p_i は $m_i v_i$ のことであり、v_i は

$$\sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2 + V = E$$

を満たし、v_i は経路の向きと一致するとする。これで経路を決めれば各位置で v_i そして p_i が決まる。そして作用積分の値も決まる。1 粒子の場合は p_i と dx_i の向きが一致するので

$$\sum_i p_i dx_i = pds = \sqrt{2m(E-v)}\,ds$$

となる。すなわちこの定義と $\int_\alpha \sqrt{2m(E-v)}\,ds$ は一致する。多粒子の場合は各質量が同じとは限らないので

$$p_i dx_i \neq pds$$

である。ここで p は p_i の大きさ。だから

$$\int_\alpha \sum_i p_i dx_i \neq \int_\alpha pds$$

である。例えば 2 粒子系である位置で、速度成分はすべて同じで、質量は一方の粒子が 1，もう一方が 2 のとき、すなわち $v_i = (1,1,1,1,1,1), m_i = (1,1,1,2,2,2)$ のとき $p_i = (1,1,1,2,2,2)$ となり p_i の向きと v_i の

向きは異なる。すなわち p_i の向きは経路の向きと異なるわけである。もちろん 6 次元では幾何学的な意味での経路の向きなどはないので、経路上の微小変位ベクトル dx_i と p_i が比例していないという意味である。

尚、$\int_\alpha \sum_i p_i dx_i$ を一般座標 q' と、それに対応する一般化運動量は p' で表すと

$$p_i = \sum_\beta \frac{\partial\, q'_\beta}{\partial\, x_i} p'_\beta \qquad\qquad dx_i = \sum_\lambda \frac{\partial\, x_i}{\partial\, q'_\lambda} dq'_\lambda$$

である (定理 4.3)。だから

$$\int_\alpha \sum_i p_i dx_i = \int_\alpha \sum_i \left(\sum_\beta \frac{\partial\, q'_\beta}{\partial\, x_i} p'_\beta \right) \left(\sum_\lambda \frac{\partial\, x_i}{\partial\, q'_\lambda} dq'_\lambda \right) = \int_\alpha \sum_\beta p'_\beta dq'_\beta$$

となる。だから直交座標を用いずに、一般化座標・運動量 q, p を用いて作用積分を

$$\int_\alpha \sum_\beta p_\beta dq_\beta$$

と定義してもよい。

停留性

1 粒子での「力学の法則を満たす軌道は作用積分の停留軌道である」という命題は多粒子系ではどうなるか見てみよう。

$$\int_\alpha \sum_i p_i dx_i = \int_0^{t(\alpha)} \sum_i p_i \frac{dx_i}{dt} dt = \int_0^{t(\alpha)} 2T\ dt = \int_0^{t(\alpha)} L + E\ dt$$

と変形でき、1 粒子の場合と同様に作用積分は $\int_0^{t(\alpha)} L + E\ dt$ と表せる。そして 1 粒子の場合と同じように計算して、2 つの軌道 α, β の作用積分の差は

$$I[\beta] - I[\alpha] \cong \int_0^{t(\beta)} \sum_{i=1}^{3} \left[\frac{\partial\, L_\alpha(t)}{\partial\, x_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial\, L_\alpha(t)}{\partial\, \dot{x}_i} \right) \right] \delta x_i\ dt + \sum_i p_i(A) \Delta x_i - \int_{\Delta\alpha} \sum_i p_i dx_i$$

となる。ここで Δx_i は点 A から点 B への変位である。これは式 (8.2) に対応している。そして 1 粒子系のときと同じ理由でこの第 2 項と第 3 項はキャンセルする。だから力学の法則を満たす軌道では

$$I[\beta] - I[\alpha] \cong 0$$

となる。すなわち多粒子系でも力学の法則を満たす軌道は停留軌道となる。

最小性

1 粒子での定理 8.2「力学の法則を満たす軌道に対応する W の定義域内に入っている軌道の中では、力学の法則を満たす軌道が最小である」という命題は多粒子系ではどうなるか見てみよう。1 粒子での証明では力学の法則を満たす軌道は $\frac{\partial W}{\partial x_i}$ と向きが等しいということを使った。多粒子系では一般には p_i と dx_i の向きが一致しない。そして力学の法則を満たす軌道では $p_i = \frac{\partial W}{\partial x_i}$ である。だから多粒子径では力学の法則を満たす軌道と $\frac{\partial W}{\partial x_i}$ は向きが一致しない。そういうわけで多粒子系での定理 8.2 の主張は、少なくとも 1 粒子の場合に示した論法では、証明できないのである。ただ培風館の物理学辞典によると力学の法則を満たす軌道は極小軌道になると書いてある。

第 9 章

ファインマンの経路積分

この章ではファインマンの経路積分について簡単に紹介する。私自身、ファインマンの経路積分について詳しくないので、簡単に紹介するだけである。これは変分法の知識が物理の理解に役立つ数少ない例である。この章での経路というのはただの空間の経路ではなく、第 7 章と同様の時間の関数としての空間経路である。第 8 章で扱ったような空間経路という意味ではない。この章は量子力学のブラケットの取扱の知識を前提とした。ここでの説明は、JJ 桜井の現代の量子力学（吉岡書店）で得た知識を元に記述している。

9.1　シュレディンガー方程式のプロパゲーター

シュレディンガー方程式に従う量子状態というものは、初期状態 $|\phi_0\rangle$ が与えられれば、時間 t 経過後の状態は

$$\exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}t\right)|\phi_0\rangle$$

と決まる。そして $\mathbf{r}'$ での時間 t 経過後の波動関数 $\phi(\mathbf{r}',t)$ は

$$\phi(\mathbf{r}',t) = \langle\mathbf{r}'|\exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}t\right)|\phi_0\rangle$$

である。右辺に $|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\,d\mathbf{r}$ を挟んで積分すると

$$\phi(\mathbf{r}',t) = \int_{\mathbf{r}}\langle\mathbf{r}'|\exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}t\right)|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\phi_0\rangle\,d\mathbf{r}$$

となる。

$$K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t) \equiv \langle\mathbf{r}'|\exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}t\right)|\mathbf{r}\rangle$$

とおけば

$$\phi(\mathbf{r}',t) = \int_{\mathbf{r}} K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t)\phi_0(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

と書ける。ここで $\phi_0(\mathbf{r})$ は $\langle\mathbf{r}|\phi_0\rangle$ のことで初期状態の波動関数である。この $K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t)$ をプロパゲーターと呼ぶ。定義からわかるように、これは時間発展演算子の位置基底表現であり、最初 $\mathbf{r}$ に局在していた波動関数が時間 t 後に $\mathbf{r}'$ へ移る遷移振幅である。

さてこの $K(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t)$ を経路積分の形に書き換えよう。そのためにまず、簡単な例として時間を $t = \frac{t}{2} + \frac{t}{2}$ と分割しよう。するとプロパゲーターは次のように変形できる。

$$
\begin{aligned}
K(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) &= \langle \mathbf{r}' | \exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\left(\frac{t}{2} + \frac{t}{2}\right)\right) | \mathbf{r} \rangle \\
&= \langle \mathbf{r}' | \exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\frac{t}{2}\right) \cdot \exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\frac{t}{2}\right) | \mathbf{r} \rangle \\
&= \int_{\mathbf{r}''} \langle \mathbf{r}' | \exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\frac{t}{2}\right) | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | \exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\frac{t}{2}\right) | \mathbf{r} \rangle \, d\mathbf{r}'' \\
&= \int_{\mathbf{r}''} K(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', t/2) \cdot K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}, t/2) d\mathbf{r}'' \qquad (9.1)
\end{aligned}
$$

時間 t での $\mathbf{r}$ から $\mathbf{r}'$ への遷移振幅というものは、時間 $t/2$ での $\mathbf{r}$ から $\mathbf{r}''$ への遷移振幅に、時間 $t/2$ での $\mathbf{r}''$ から $\mathbf{r}'$ への遷移振幅を掛けたものを、すべての $\mathbf{r}''$ で足し合わせたものになっている (図 9.1 参)。式で書くと

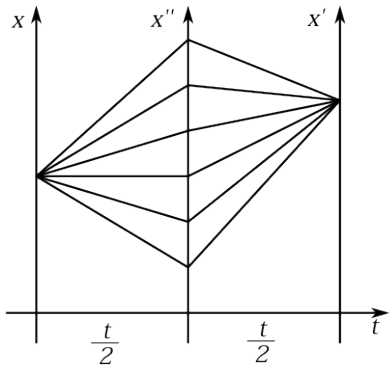

図 9.1

$K(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t)$ は

$$K(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', t/2) \cdot K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}, t/2) \Delta \mathbf{r}''$$

という数を、$\mathbf{r}''$ を動かして、すべての経路について足し合わせたものになっている。今は時間を 2 等分したが、これは何等分でもいいわけで、一般に n 等分としたら $K(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_0, t)$ というのは

$$K(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_0, t) = \int K(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_{n-1}, t/n) \cdot K(\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}_{n-2}, t/n) \cdots K(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_0, t/n) \cdot d\mathbf{r}_{n-1} d\mathbf{r}_{n-2} \cdots d\mathbf{r}_1 \qquad (9.2)$$

となる。これを経路積分と呼ぶ。位置基底でなく、運動量基底やエネルギー基底を使っても同様なことが言える。

9.2 自由粒子のプロパゲーター

さて、次に自由粒子のプロパゲーターを具体的な形にしてみよう。要するに既知関数で表そうというわけである。$|\phi_i\rangle$ を $\hat{H}$ のエネルギー固有状態、E_i をそのエネルギー固有値とすると、$K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t)$ は

$$\begin{aligned}
K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t) &= \langle\mathbf{r}'|\exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}t\right)|\mathbf{r}\rangle \\
&= \sum_{i,j}\langle\mathbf{r}'|\phi_i\rangle\langle\phi_i|\exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}t\right)|\phi_j\rangle\langle\phi_j|\mathbf{r}\rangle \\
&= \sum_{i,j}\phi_i(\mathbf{r}')\langle\phi_i|\phi_j\rangle\phi_j^*(\mathbf{r})\exp\left(\frac{E_j}{i\hbar}t\right) \\
&= \sum_i\phi_i(\mathbf{r}')\phi_i^*(\mathbf{r})\exp\left(\frac{E_i}{i\hbar}t\right) \qquad (9.3)
\end{aligned}$$

となる。自由粒子の場合、エネルギー固有値は

$$E_i = \frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}$$

であり、固有関数は条件を使い周期を L として

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_xx+p_yy+p_zz)\right]$$

である。p_x は周期境界条件のため、n を整数として

$$\frac{p_x}{\hbar} = \frac{2\pi}{L}n$$

でなければならない。p_y, p_z も同様である[*1]。さて、これを式 (9.3) に入れてプロパゲーターを計算しよう。これからは退屈な作業なので、特に計算を追う必要はないであろう。結果だけみればいいと思う。

$$\begin{aligned}
K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t) &= \sum_{\mathbf{p}}\exp\left[\frac{t}{i\hbar}\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}\right]\cdot\frac{1}{\sqrt{L^3}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_xx'+p_yy'+p_zz')\right]\cdot\frac{1}{\sqrt{L^3}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(-p_xx-p_yy-p_zz)\right] \\
&= \sum_{p_x}\frac{1}{L}\exp\frac{i}{\hbar}\left(p_x(x'-x)-\frac{p_x^2}{2m}t\right)\cdot\sum_{p_y}\frac{1}{L}\exp\frac{i}{\hbar}\left(p_y(y'-y)-\frac{p_y^2}{2m}t\right)\cdot\sum_{p_z}\frac{1}{L}\exp\frac{i}{\hbar}\left(p_x(z'-z)-\frac{p_z^2}{2m}t\right)
\end{aligned}$$

となる。

$$K_x \equiv \sum_{p_x}\frac{1}{L}\exp\frac{i}{\hbar}\left(p_x(x'-x)-\frac{p_x^2}{2m}t\right)$$

と置こう。K_y, K_z も同様に置く。すると

$$K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t) = K_x\cdot K_y\cdot K_z$$

[*1] 周期境界条件を使うというのは単に便宜上であって、要は $\phi_i(\mathbf{r})$ が、その着目している空間を張ることができる基底になれればよいのである。それは $L\to\infty$ すれば可能である。ここらへんは単に数学上の話なのであまり細かいことに拘らずに進んでもらいたい。

となる。x, y, z 成分とも同じなので、K_x だけ計算しよう。まず exp の中を p_x の完全平方にする。すなわち

$$p_x(x'-x) - \frac{p_x^2}{2m}t = -\frac{t}{2m}\left(p_x - \frac{m(x'-x)}{t}\right)^2 + \frac{m}{2}\frac{(x'-x)^2}{t} \tag{9.4}$$

とする。離散和 $\sum_{p_x}$ では計算できないので、$L \to \infty$ として積分に置き換える。周期境界条件より

$$\frac{p_x}{\hbar} = \frac{2\pi}{L}n \quad \Longleftrightarrow \quad n = \frac{Lp_x}{2\pi\hbar}$$

なので

$$\sum_{p_x} \quad \Longrightarrow \quad \frac{L}{2\pi\hbar}\int_{\infty}^{\infty} dp_x \tag{9.5}$$

と置き換えればよい。式 (9.4)(9.5) から

$$K_x = \frac{1}{2\pi\hbar}\exp\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\frac{(x'-x)^2}{t}\right]\int_{\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{it}{2m\hbar}\left(p_x - \frac{m(x'-x)}{t}\right)^2\right]dp_x$$

となる。ここで積分変数を p_x から

$$\sqrt{\frac{t}{2m\hbar}}\left(p_x - \frac{m(x'-x)}{t}\right) = s$$

と s に変換すると

$$K_x = \frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\exp\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\frac{(x'-x)^2}{t}\right]\int_{\infty}^{\infty}\exp(-is^2)ds$$

となる。

$$\int_{\infty}^{\infty}\exp(-is^2)ds = \sqrt{\frac{\pi}{i}}$$

という公式を使うと

$$K_x = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\exp\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\frac{(x'-x)^2}{t}\right]$$

となる。だから

3 次元自由粒子のプロパゲーターは

$$K(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}^{\,3}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\left[\frac{(x'-x)^2}{t} + \frac{(y'-y)^2}{t} + \frac{(z'-z)^2}{t}\right]\right)$$

となる。

9.3 ファインマンの経路積分の導出

$\mathbf{r}$ から $\mathbf{r}'$ へ時間 t で動く力学の法則を満たす軌道のラグランジアンを時間 t' の関数という意味で

$$L[\,\mathbf{r}', \mathbf{r}, t\,](t'\,)$$

と書こう。$\mathbf{r}=(x,y,z)$ から $\mathbf{r}'=(x',y',z')$ へ時間 t で動き、力学の法則を満たす軌道の、今の場合等速直線運動する軌道の、ラグランジアンの時間積分は

$$\int_0^t L[\,\mathbf{r}',\mathbf{r},t\,](t'\,)dt' = \frac{m}{2}\left[\frac{(x'-x)^2}{t}+\frac{(y'-y)^2}{t}+\frac{(y'-y)^2}{t}\right]$$

である。これを使うと

3 次元自由粒子のプロパゲーターは

$$K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}^{\,3}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L[\,\mathbf{r}',\mathbf{r},t\,](t'\,)dt'\right] \tag{9.6}$$

と書ける。

さて、プロパゲーターは時間を分割して経路の和で表すことが出来たのであった。例えば式 (9.1) のように時間を 2 等分した場合、$K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t)$ は

$$K(\mathbf{r}',\mathbf{r}'',t/2)\cdot K(\mathbf{r}'',\mathbf{r},t/2)\Delta\mathbf{r}''$$

という数を、$\mathbf{r}''$ を動かして、すべての経路について足し合わせれば良いのであった。式 (9.6) を使うと、これは

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t/2)}}^{\,3}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t/2}^t L[\,\mathbf{r}',\mathbf{r}'',t/2\,](t'\,)dt'\right]\cdot\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t/2)}}^{\,3}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^{t/2} L[\,\mathbf{r}'',\mathbf{r},t/2\,](t'\,)dt'\right]\Delta\mathbf{r}''$$

となり、これは

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t/2)}}^{\,3\cdot 2}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\int_{t/2}^t L[\,\mathbf{r}',\mathbf{r}'',t/2\,](t'\,)dt'+\int_0^{t/2} L[\,\mathbf{r}'',\mathbf{r},t/2\,](t'\,)dt'\right)\right]\Delta\mathbf{r}''$$

と変形できる。

$$\int_{t/2}^t L[\,\mathbf{r}',\mathbf{r}'',t/2\,](t'\,)dt'+\int_0^{t/2} L[\,\mathbf{r}'',\mathbf{r},t/2\,](t'\,)dt'$$

は $\mathbf{r}(0)\to\mathbf{r}''(t/2)\to\mathbf{r}'(t)$ を通る軌道のラグランジアンの時間積分であり、基本的には力学の法則を満たさない軌道である。$\mathbf{r}''$ が変われば軌道も変わるので、それぞれの軌道のラグランジアンを指標 λ で区別して、時間 t の関数としての $L_\lambda(t)$ と書こう。すると $K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t)$ は

$$K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t/2)}}^{\,3\cdot 2}\int\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\int_0^t L_\lambda(t')dt'\right)\right]d\mathbf{r}''$$

となる。式 (9.2) のように時間を n 等分して、今と同様に考えれば

自由粒子のプロパゲーター $K(\mathbf{r}_n,\mathbf{r}_0,t)$ は

$$K(\mathbf{r}_n,\mathbf{r}_0,t)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t/n)}}^{\,3n}\int\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_\lambda(t')dt'\right]\cdot d\mathbf{r}_{n-1}d\mathbf{r}_{n-2}\cdots\ d\mathbf{r}_1 \tag{9.7}$$

になる。

積分の部分は

$$(d\mathbf{r})^{n-1}\sum_\lambda\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_\lambda(t')dt'\right]$$

と書いたほうがいろんな経路の和というて意味がよくわかるかもしれない。

さて、今はポテンシャルのない場合に式 (9.7) の形の和でプロパゲーターを表せるということを示したのだが、ポテンシャルが存在するときは式 (9.7) の形に表せるのだろうか。実は私はここらへんについては詳しくないのだが、時間の分割数 $n \to \infty$ とすれば、表せるようである。すなわち、ポテンシャルのある系でもプロパゲーターは指数にラグランジアンの時間積分をのせた、すべての経路の和で表せるというわけである。

定理 9.1 (ファインマンの経路積分)
ポテンシャルのある系のプロパゲーター $K(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t)$ は

$$K(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) = \lim_{n\to\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t/n)}}^{3n} \int \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_\lambda(t')dt'\right] \cdot d\mathbf{r}_{n-1}d\mathbf{r}_{n-2}\cdots\ d\mathbf{r}_1$$

になる。別の記号で書けば

$$K(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) = \lim_{n\to\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t/n)}}^{3n} (d\mathbf{r})^{n-1} \sum_\lambda \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_\lambda(t')dt'\right]$$

である。

このことをファインマンの経路積分という。

9.4 変分法の停留との関係

プロパゲーターは

$$A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_1 dt'\right] + A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_2 dt'\right] + A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_3 dt'\right] + \cdots\cdots$$

のといろんな経路での $A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_\lambda dt\right]$ を足すのであった。ここで A は軌道と無関係な数であり

$$A = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t/n}}^{3n} \cdot \Delta\mathbf{r}_{n-1}\Delta\mathbf{r}_{n-2}\cdots\Delta\mathbf{r}_1$$

である。さてこの中で一体どういう経路がその和に寄与するのだろうか。力学の法則を満たす軌道というのは汎関数

$$I[x] = \int_0^t L(x, \dot{x}, t')dt'$$

の停留関数であった (定理 7.4)。ということは、その軌道をわずかにずらしても、この積分の値はほとんど変わらないということである。ということは

$$A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_{cl}dt'\right]$$

に近い値を多く足すということである。L_{cl} は力学の法則を満たす軌道のラグランジアンである。だから図 9.2 にあるように、位相の近いものの和は、プロパゲーターへの寄与が大きい。一方古典軌道からはずれると、$\int_0^t Ldt'$ は軌道をわずかにずらしても大きく変化する。ということは位相が大きく変化するのでプロパゲーターへの寄与は小さい。すなわち、力学の法則を満たす軌道とその周辺のみの軌道だけが寄与するということである。古典軌道から少しでもずれると $\int_0^t Ldt'$ が大きく変化するような系では古典軌道からの寄与が大き

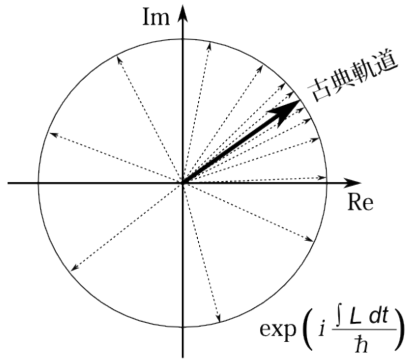

図 9.2　$\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t Ldt'\right]$ を複素平面で表した図。

い。古典軌道から大きくずれても $\int_0^t Ldt'$ があまり変化しない系なら、そういう軌道もプロパゲーターに寄与するので、古典軌道からの寄与は小さくなる。同じポテンシャルで同じ軌道では、質量がより大きい粒子の方が古典軌道からの寄与が大きくなる。これが変分法とファインマンの経路積分との関係である。思わぬところで古典力学と量子力学の関係があるものであり、おもしろいと思う次第である。しかしながら、このことが古典力学と量子力学の橋渡しになっているのかというと、少なくとも私には明瞭ではない。

9.5　まとめ

シュレディンガー方程式の時間発展は初期状態 $|\phi_0\rangle$ が決まれば一意的である。時間 t 経過後の状態は

$$\exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}t\right)|\phi_0\rangle$$

である。これを位置表示したものが

$$\int K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t)\phi_0(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

である。$K(\mathbf{r}',\mathbf{r},t)$ は演算子 $\exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}t\right)$ の位置基底表現による行列である。この K は時間の関数としての経路の和で表せる。経路の和で表せるので経路積分と言おう。

ここまではどうってことない話である。ところがこの経路和というのが

$$A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_1dt'\right]+A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_2dt'\right]+A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t L_3dt'\right]+\cdots\cdots$$

と表せるのである。このことはこのテキストでは自由粒子で証明しただけであるが、一般のポテンシャルでも成り立つようである。古典軌道は $\int_0^t Ldt'$ の停留関数である。すなわち多少軌道が変化しても $\int_0^t Ldt'$ の値はあまり変化しない。ということは経路和で効くのは古典軌道の近辺である。他の軌道は打ち消し合って和に寄与しない。だから**ある点からある点へある時間で移る遷移成分を計算するのに古典軌道のみを考慮すればいい近似になる**ということである。非常に面白い話なのだが、このことが量子力学のある極限が古典力学になるということを示しているわけでは全くない。

第 10 章

電磁場と荷電粒子の解析力学

この章の目的はローレンツ力の式とマクスウェル方程式を正準方程式の形で書くことである。それは量子電磁気学のためである。粒子の量子力学の構成法というものを振り返ってみれば、古典力学のハミルトニアンの正準変数 p, q から $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ という交換関係を設定することが始まりであった。同じことを量子電磁気学でもしたいわけである。電磁場でも p, q に対応するものをみつけ $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ としたいわけである。

さて、粒子の力学ではハミルトニアンはラグランジアンをルジャンドル変換して導いた。それで電磁場と荷電粒子の場合も、ラグランジアンとラグランジュ方程式を作り、それからハミルトニアンと正準方程式を作ることにする。ラグランジュ方程式はローレンツ力の式とマクスウェル方程式を表すようにする。そうすれば自動的に正準方程式もそれらを表すことになる。考え方はこれにつきている。後は式変形をするだけである。記号は非常にややこしく、計算は繁雑を極めているが、していることは単純作業である。

10.1　ラグランジアン

まず簡単に古典電磁気学を復習しよう。マクスウェル方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \tag{10.1}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \tag{10.2}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi k \rho \tag{10.3}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi k}{c}\mathbf{J} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \tag{10.4}$$

であり、ローレンツ力の式は

$$m\ddot{\mathbf{X}} = q\mathbf{E} + q\,\frac{\dot{\mathbf{X}}}{c} \times \mathbf{B} \tag{10.5}$$

であった。ポテンシャルとして $\phi, \mathbf{A}$ を導入して

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \qquad\qquad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

と表せばマクスウェル方程式 (10.1)(10.2) は自動的に満たされるのであった。単位系だが、cgs 単位系なら $k = 1$ とし、SI 単位系なら $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ とし、さらに $\mathbf{B} \to c\mathbf{B}$、$\mathbf{A} \to c\mathbf{A}$ と置き換えればよい。

さて、粒子の力学では、力学変数 q は個々の粒子の位置座標 X_i であった。一方、電磁場の場合、力学変数 q に対応するのはポテンシャルの $\phi(\mathbf{r}), \mathbf{A}(\mathbf{r})$ なのだが、それは次のような意味である。空間を立方体の微小体

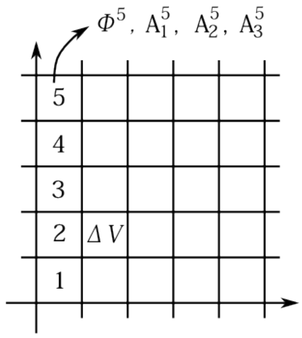

図 10.1　空間を細かい立方体に分割し、その各微小部分での ϕ,$\mathbf{A}$ を力学変数とする。

積 ΔV ごとに十分細かく分割し、その 1 つ 1 つの体積領域に番号をふる (図 10.1)。そして番号 β の領域の位置でのポテンシャルを $\phi^\beta, A_1^\beta, A_2^\beta, A_3^\beta$ と書き、これを力学変数とする。だから、今着目している系を 100 分割したとしたら、力学変数は 400 個できるわけである。粒子の力学変数 X_i の指標 i に対応するものが ϕ^β の β であり、A_i^β の i と β である。ここで A_i の i は x,y,z の $1,2,3$ である。粒子にも番号をふる。λ 番目の粒子の位置座標を $\mathbf{X}^\lambda = (X_1^\lambda, X_2^\lambda, X_3^\lambda)$、電荷を q^λ、質量を m^λ と書こう。この力学変数を使って天下り的にラグランジアンを書き下そう。

電荷と電磁場のラグランジアン

$$L = \sum_{\lambda,i} \frac{1}{2} m^\lambda (\dot{X}_i^\lambda)^2 - \sum_\lambda q^\lambda \phi(\mathbf{X}^\lambda) + \sum_{\lambda,i} \frac{q^\lambda}{c} \dot{X}_i^\lambda A_i(\mathbf{X}^\lambda) + \frac{\Delta V}{8\pi k} \sum_\beta \left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2 - \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2 \right)$$

ここで $\phi(\mathbf{X}^\lambda), A_i(\mathbf{X}^\lambda)$ の意味は λ 番目の粒子が β 番目の微小体積領域に入っていれば、それぞれ ϕ^β, A_i^β の意味とする。例えば図 10.2 のように系が微小領域 1,2,3,4 に分かれていて、電荷 q^1, q^2, q^3 がそれぞれ微小領域 $3, 2, 2$ に入っているとすると

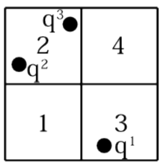

図 10.2

$$\sum_{\lambda=1}^{3} q^\lambda \phi(\mathbf{X}^\lambda) = q^1\phi^3 + q^2\phi^2 + q^3\phi^2$$

となる。尚、このラグランジアン L は粒子の力学と違い、$L = T - V$ ではない。ラグランジアンの最後の項は $\Delta V \to 0$ の極限で

$$\frac{\Delta V}{8\pi k} \sum_\beta \left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2 - \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2 \right) \quad \Longrightarrow \quad \frac{1}{8\pi k} \int |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 - |\mathbf{B}(\mathbf{r})|^2 \, dV$$

となる。偏微分 $\frac{\partial f}{\partial x}$ を短く $\partial_x f$、又は $\partial_1 f$ と書くことにする。$\mathbf{E}$ は

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

であり、その中の例えば $\partial_x \phi$ は離散的に書くと

$$\partial_x \phi = \frac{\phi(x+\Delta x, y, z) - \phi(x,y,z)}{\Delta x}$$

なので $\nabla\phi$ の中には力学変数 ϕ が入っている。$\partial \mathbf{A}/\partial t$ は力学変数 $\mathbf{A}$ の時間微分なので $\dot{\mathbf{A}}$ と書こう。又、$\mathbf{B}$ は

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

であり、$\nabla \times \mathbf{A}$ は力学変数 $\mathbf{A}$ の空間微分なので、ここにも力学変数 $\mathbf{A}$ が含まれている。このラグランジアンでは力学変数 q に対応するのは $X_i^\lambda, \phi^\beta, A_i^\beta$ であり、$\dot{q}$ に対応するのが、その時間微分 $\dot{X}_i^\lambda \dot{A}_i^\beta$ である。この力学変数についてのラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = \frac{\partial L}{\partial q}$$

を作る。その式は力学変数 X に関しては力学変数ローレンツ力の式 (10.5) に、ϕ に関しては、マクスウェル方程式 (10.3) に、$\mathbf{A}$ に関しては、マクスウェル方程式 (10.4) になる。そうなるようにラグランジアンを決めたのである。まとめると

定理 10.1　ラグランジアンを

$$L = \sum_{\lambda,i} \frac{1}{2} m^\lambda (\dot{X}_i^\lambda)^2 - \sum_\lambda q^\lambda \phi(\mathbf{X}^\lambda) + \sum_{\lambda,i} \frac{q^\lambda}{c} \dot{X}_i^\lambda A_i(\mathbf{X}^\lambda) + \frac{\Delta V}{8\pi k} \sum_\beta \left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2 - \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2 \right)$$

とすると、ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = \frac{\partial L}{\partial q}$$

の、力学変数 X 成分はローレンツ力の式

$$m\ddot{\mathbf{X}} = q\mathbf{E} + q\,\frac{\dot{\mathbf{X}}}{c} \times \mathbf{B}$$

になる。ϕ 成分は、マクスウェル方程式

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi k \rho$$

になる。$\mathbf{A}$ 成分は、マクスウェル方程式

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi k}{c}\mathbf{J} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

になる。

10.2　ラグランジュ方程式がローレンツ力の式、マクスウェル方程式になることの証明

さて、定理 10.1 を証明しよう。これは単純で煩雑な作業である。

(X 成分)

まず X 成分のラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{X}_i^\lambda}\right)=\frac{\partial L}{\partial X_i^\lambda}$$

から計算していく。ラグランジアンは

$$L=\sum_{\lambda,i}\frac{1}{2}m^\lambda(\dot{X}_i^\lambda)^2-\sum_\lambda q^\lambda\phi(\mathbf{X}^\lambda)+\sum_{\lambda,i}\frac{q^\lambda}{c}\dot{X}_i^\lambda A_i(\mathbf{X}^\lambda)+\frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_\beta\left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2-\left|\mathbf{B}^\beta\right|^2\right)$$

である。まず左辺だが、

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{X}_i^\lambda}=m^\lambda\dot{X}_i^\lambda+\frac{q^\lambda}{c}A_i(\mathbf{X}^\lambda) \tag{10.6}$$

となる。そして、

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{X}_i^\lambda}\right)=m^\lambda\ddot{X}_i^\lambda+\frac{q^\lambda}{c}\left(\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial A_i(\mathbf{X}^\lambda)}{\partial X_j^\lambda}\dot{X}_j^\lambda+\dot{A}_i(\mathbf{X}^\lambda)\right)$$

となる。時間の全微分 $\frac{d}{dt}$ では力学変数である A_i^β も変化して $\dot{A}_i$ も加えなければならないことに注意。一方右辺は

$$\frac{\partial L}{\partial X_i^\lambda}=-q^\lambda\frac{\partial\phi(\mathbf{X}^\lambda)}{\partial X_i^\lambda}+\frac{q^\lambda}{c}\sum_{j=1}^{3}\dot{X}_j^\lambda\frac{\partial A_j(\mathbf{X}^\lambda)}{\partial X_i^\lambda}$$

である。だからラグランジュ方程式は

$$m^\lambda\ddot{X}_i^\lambda+\frac{q^\lambda}{c}\left(\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial A_i(\mathbf{X}^\lambda)}{\partial X_j^\lambda}\dot{X}_j^\lambda+\dot{A}_i(\mathbf{X}^\lambda)\right)=-q^\lambda\frac{\partial\phi(\mathbf{X}^\lambda)}{\partial X_i^\lambda}+\frac{q^\lambda}{c}\sum_{j=1}^{3}\dot{X}_j^\lambda\frac{\partial A_j(\mathbf{X}^\lambda)}{\partial X_i^\lambda}$$

となる。整理すると

$$m^\lambda\ddot{X}_i^\lambda=q^\lambda\left(-\frac{\partial\phi(\mathbf{X}^\lambda)}{\partial X_i^\lambda}-\frac{1}{c}\dot{A}_i(\mathbf{X}^\lambda)\right)+\frac{q^\lambda}{c}\sum_{j=1}^{3}\dot{X}_j^\lambda\left(\frac{\partial A_j(\mathbf{X}^\lambda)}{\partial X_i^\lambda}-\frac{\partial A_i(\mathbf{X}^\lambda)}{\partial X_j^\lambda}\right)$$

となる。右辺の第 1 項は $q^\lambda E_i(\mathbf{X}^\lambda)$ である。又、これは後で証明するが、一般に

補題 10.1

$$\sum_{j=1}^{3}\dot{x}_j\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i}-\frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right)=(\mathbf{v}\times\mathbf{B})_i$$

成り立つ。ここで $\mathbf{v}$ は点電荷の速度

だから X_i 成分のラグランジュ方程式

$$m^\lambda\ddot{X}_i^\lambda=q^\lambda E_i(\mathbf{X}^\lambda)+\frac{q^\lambda}{c}(\mathbf{v}^\lambda\times\mathbf{B})_i$$

となり、ローレンツ力の式を表していることがわかる。

(ϕ 成分)

次に ϕ 成分のラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}^{\beta}}\right) = \frac{\partial L}{\partial \phi^{\beta}}$$

を計算しよう。ラグランジアンは

$$L = \sum_{\lambda,i}\frac{1}{2}m^{\lambda}(\dot{X}_i^{\lambda})^2 - \sum_{\lambda} q^{\lambda}\phi(\mathbf{X}^{\lambda}) + \sum_{\lambda,i}\frac{q^{\lambda}}{c}\dot{X}_i^{\lambda}A_i(\mathbf{X}^{\lambda}) + \frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_{\beta}\left(\left|\mathbf{E}^{\beta}\right|^2 - \left|\mathbf{B}^{\beta}\right|^2\right)$$

である。$\dot{\phi}$ はラグランジアンに含まれていないので左辺は 0 である。右辺を計算しよう。最初に述べたように、$\phi(\mathbf{X}^{\lambda})$ というのは、λ 番目の粒子が β 番目の微小領域に入っていれば、その値は ϕ^{β} であるということであった。だから $\sum_{\lambda} q^{\lambda}\phi(\mathbf{X}^{\lambda})$ を ϕ^{β} で微分した値は β 番目の領域に入っている電荷量となる。β 番目の領域の電荷密度を ρ^{β} と書けば、$\rho^{\beta}\Delta V$ がその領域の電荷量となるので

$$\frac{\partial}{\partial \phi^{\beta}}\sum_{\lambda} q^{\lambda}\phi(\mathbf{X}^{\lambda}) = \rho^{\beta}\Delta V \tag{10.7}$$

である。

最初に述べたように $\partial_i\phi$ の中に ϕ が含まれている。∂_x に着目する。

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(x,y,z) = \frac{\phi(x+\Delta x,y,z) - \phi(x,y,z)}{\Delta x}$$

であるが、β 番目の領域の (Δx) だけ隣の領域を $(\beta + \Delta x)$ 番と書くことにすると

$$\phi^{\beta} = \frac{\phi^{\beta+\Delta x} - \phi^{\beta}}{\Delta x} \qquad \phi^{\beta-\Delta x} = \frac{\phi^{\beta} - \phi^{\beta-\Delta x}}{\Delta x}$$

である。だから ϕ^{β} が含まれているのは $\frac{\partial \phi^{\beta}}{\partial x}$ と $\frac{\partial \phi^{(\beta-\Delta x)}}{\partial x}$ ということになる。そして

$$\frac{\partial\left(\partial_x\phi^{\beta}\right)}{\partial \phi^{\beta}} = -\frac{1}{\Delta x} \qquad \frac{\partial\left(\partial_x\phi^{(\beta-\Delta x)}\right)}{\partial \phi^{\beta}} = \frac{1}{\Delta x}$$

である。そして $E_x^{\beta} = -\partial_x\phi^{\beta} - \dot{A}_x^{\beta}/c$ で又 $E_x^{\beta-\Delta x} = -\partial_x\phi^{\beta-\Delta x} - \dot{A}_x^{\beta-\Delta x}/c$ ある。だから

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \phi^{\beta}}\left[\sum_{\gamma}(E_x^{\gamma})^2\right] &= \frac{\partial(\partial_x\phi^{\beta})}{\partial\phi^{\beta}}\frac{\partial}{\partial(\partial_x\phi^{\beta})}\left(E_x^{\beta}\right)^2 + \frac{\partial(\partial_x\phi^{\beta-\Delta x})}{\partial\phi^{\beta}}\frac{\partial}{\partial(\partial_x\phi^{\beta-\Delta x})}\left(E_x^{\beta}\right)^2 \\ &= \left(-\frac{1}{\Delta x}\right)2E_x^{\beta}(-1) + \left(\frac{1}{\Delta x}\right)2E_x^{(\beta-\Delta x)}(-1)\end{aligned} \tag{10.8}$$

となる。これは Δx が十分小さければ

$$2\frac{\partial E_x^{\beta}}{\partial x}$$

となる。同様に

$$\frac{\partial}{\partial \phi^{\beta}}\left[\sum_{\gamma}(E_y^{\gamma})^2\right] = 2\frac{\partial E_y^{\beta}}{\partial y} \qquad \frac{\partial}{\partial \phi^{\beta}}\left[\sum_{\gamma}(E_z^{\gamma})^2\right] = 2\frac{\partial E_z^{\beta}}{\partial y}$$

となる。だから

$$\frac{\partial}{\partial \phi^{\beta}}\left[\sum_{\gamma}(\mathbf{E}^{\gamma})^2\right] = 2\nabla\cdot\mathbf{E}^{\beta}$$

となる。だから

$$\frac{\partial}{\partial\,\phi^\beta}\left[\frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_\gamma(\mathbf{E}^\gamma)^2\right]=\frac{\Delta V}{4\pi k}\nabla\cdot\mathbf{E}^\beta \tag{10.9}$$

となる。式 (10.7)、(10.9) より、ラグランジュ方程式は

$$0=-\rho^\beta\Delta V+\frac{\Delta V}{4\pi k}\nabla\cdot\mathbf{E}^\beta$$

となる。すなわち

$$\nabla\cdot\mathbf{E}=4\pi k\rho$$

となる。

(A 成分)

最後に $\mathbf{A}$ 成分のラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{A}_i^\beta}\right)=\frac{\partial\,L}{\partial\,A_i^\beta}$$

を計算しよう。ラグランジアンは

$$L=\sum_{\lambda,i}\frac{1}{2}m^\lambda(\dot{X}_i^\lambda)^2-\sum_\lambda q^\lambda\phi(\mathbf{X}^\lambda)+\sum_{\lambda,i}\frac{q^\lambda}{c}\dot{X}_i^\lambda A_i(\mathbf{X}^\lambda)+\frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_\beta\left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2-\left|\mathbf{B}^\beta\right|^2\right)$$

である。まず左辺を計算しよう。$\dot{A}_i^\beta$ が含まれているのは E_i^β だけである。そして $E_i^\beta=-\partial_i\phi^\beta-\dot{A}_i^\beta/c$ である。だから

$$\frac{\partial\left(E_i^\beta\right)^2}{\partial\,\dot{A}_i^\beta}=-\frac{2E_i^\beta}{c}$$

である。だから

$$\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{A}_i^\beta}=\frac{\partial}{\partial\,\dot{A}_i^\beta}\left[\frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_\gamma(\mathbf{E}^\gamma)^2\right]=-\frac{\Delta V}{4\pi kc}E_i^\beta \tag{10.10}$$

である。だから

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{A}_i(\mathbf{r}_\beta)}\right)=-\frac{1}{4\pi kc}\dot{E_i}^\beta\Delta V \tag{10.11}$$

である。

次に右辺を計算しよう。最初に述べたように、$A_i(\mathbf{X}^\lambda)$ というのは、λ 番目の粒子が β 番目の微小領域に入っていれば、その値は A_i^β であるということであった。だから $\sum_\lambda q^\lambda\dot{X}_i^\lambda A_i(\mathbf{X}^\lambda)$ を A_i^β で微分した値は $\sum_{\beta内}q^\lambda\dot{X}_i^\lambda$ となる。$\sum_{\beta内}$ は β 番目の領域に入っている電荷について和を取ると言う意味である。β 番目の領域の電流密度の i 成分を J_i^β と書けば、$\sum_{\beta内}q^\lambda\dot{X}_i^\lambda=J_i^\beta\Delta V$ である[*1]。だから

$$\frac{\partial}{\partial\,A_i^\beta}\left[\sum_{\lambda,j}q^\lambda\dot{X}_j^\lambda A_j(\mathbf{X}^\lambda)\right]=J_i^\beta\Delta V \tag{10.12}$$

である。

[*1] $\sum_{\beta内}q^\lambda\dot{X}_i^\lambda=J_i^\beta\Delta V$ となることは電磁気学の本を参照して欲しい

最初に述べたように、$\partial_j A_i$ の中に A_i が含まれている。$\partial_x A_i$ に着目する。

$$\partial_x A_i(x,y,z) = \frac{A_i(x+\Delta x,y,z) - A_i(x,y,z)}{\Delta x}$$

であり、ϕ のときに導入した記号では

$$\partial_x A_i^\beta = \frac{A_i^{(\beta+\Delta x)} - A_i^\beta}{\Delta x} \qquad \partial_x A_i^{\beta-\Delta x} = \frac{A_i^\beta - A_i^{(\beta-\Delta x)}}{\Delta x}$$

である。だから $\partial_x A_i$ の中に A_i^β が含まれているのは $\partial_x A_i^\beta$ と $\partial_x A_i^{(\beta-\Delta x)}$ である。そして

$$\frac{\partial \left(\partial_x A_i^\beta\right)}{\partial A_i^\beta} = -\frac{1}{\Delta x} \qquad \frac{\partial \left(\partial_x A_i^{(\beta-\Delta x)}\right)}{\partial A_i^\beta} = \frac{1}{\Delta x}$$

である。$\partial_x A_i^\beta$ が含まれているのは $\mathbf{B}^\beta$ である。$\mathbf{B}$ の中には $\partial_y A_i, \partial_z A_i$ も含まれているが、これは x の部分が y,z に置き換わるだけなので今は $\partial_x A_i$ に含まれている A_i に関する微分のみを計算する。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial A_i^\beta}\left[\sum_\gamma |\mathbf{B}^\gamma|^2\right] &= \frac{\partial \left(\partial_x A_i^\beta\right)}{\partial A_i^\beta}\frac{\partial \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2}{\partial\left(\partial_x A_i^\beta\right)} + \frac{\partial \left(\partial_x A_i^{(\beta-\Delta x)}\right)}{\partial A_i^\beta}\frac{\partial \left|\mathbf{B}^{(\beta-\Delta x)}\right|^2}{\partial\left(\partial_x A_i^{(\beta-\Delta x)}\right)} + (y,z\text{ の項}) \\
&= -\frac{1}{\Delta x}\frac{\partial \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2}{\partial\left(\partial_x A_i^\beta\right)} + \frac{1}{\Delta x}\frac{\partial \left|\mathbf{B}^{(\beta-\Delta x)}\right|^2}{\partial\left(\partial_x A_i^{(\beta-\Delta x)}\right)} + (y,z\text{ の項})
\end{aligned}$$

となる。ここで（y,z の項）というのは x の部分がそれぞれ y,z に置き換わった項のことである。Δx が十分小さければ、第 1 項は

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2}{\partial\left(\partial_x A_i^\beta\right)}\right)$$

となる。だから

$$\frac{\partial}{\partial A_i^\beta}\left[\sum_\gamma |\mathbf{B}^\gamma|^2\right] = -\sum_{j=1}^{3}\partial_j\left(\frac{\partial \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2}{\partial\left(\partial_j A_i^\beta\right)}\right)$$

となる。後に示すように、一般に

補題 10.2

$$\sum_{j=1}^{3}\partial_j\left(\frac{\partial \left|\mathbf{B}\right|^2}{\partial\left(\partial_j A_i\right)}\right) = -2(\nabla\times\mathbf{B})_i$$

という式が成り立つ。だから

$$\frac{\partial}{\partial A_i^\beta}\left[\frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_\gamma |\mathbf{B}^\gamma|^2\right] = \frac{\Delta V}{4\pi k}\left(\nabla\times\mathbf{B}^\beta\right)_i \tag{10.13}$$

である。式 (10.12)、(10.13) より、

$$\frac{\partial L}{\partial A_i^\beta} = \frac{J_i^\beta}{c}\Delta V - \frac{1}{4\pi k}\left(\nabla\times\mathbf{B}^\beta\right)_i\Delta V \tag{10.14}$$

となる。式 (10.11)、(10.14) より、ラグランジュ方程式は

$$-\frac{1}{4\pi kc}\dot{E_i}^{\beta}\Delta V = \frac{J_i^{\beta}}{c}\Delta V - \frac{1}{4\pi k}\left(\nabla \times \mathbf{B}^{\beta}\right)_i \Delta V$$

となる。すなわち

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi k}{c}\mathbf{J} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

となる。後は補題 10.1 と 10.2 を示せば、定理 10.1 が示せたことになる。

(補題の証明)

補題 10.1 の

$$\sum_{j=1}^{3}\dot{x}_j\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right) = (\mathbf{v}\times\mathbf{B})_i$$

を証明しよう。記号簡略化のため

$$F_{ij} \equiv \partial_i A_j - \partial_j A_i$$

とおこう。F_{ij} は磁場テンソルと言われるものである。これの成分は、縦を i、横を j として

$$F_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & B_3 & -B_2 \\ -B_3 & 0 & B_1 \\ B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix} \tag{10.15}$$

となっていることはすぐわかろう。証明したいことは

$$\sum_{j=1}^{3} F_{ij}v_j = (\mathbf{v}\times\mathbf{B})_i$$

である。式 (10.15) より

$$\sum_{j=1}^{3} F_{ij}v_j = \begin{pmatrix} 0 & B_3 & -B_2 \\ -B_3 & 0 & B_1 \\ B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_2B_3 - v_3B_2 \\ v_3B_1 - v_1B_3 \\ v_1B_2 - v_2B_1 \end{pmatrix}$$

なので確かに $\sum_{j=1}^{3} F_{ij}v_j = (\mathbf{v}\times\mathbf{B})_i$ になっている。これで補題 10.1 が証明ができたわけである。

次に補題 10.2 の

$$\sum_{j=1}^{3}\partial_j\left(\frac{\partial\,|\mathbf{B}|^2}{\partial\,(\partial_j A_i)}\right) = -2(\nabla\times\mathbf{B})_i$$

が成り立つことを証明しよう。$|\mathbf{B}|^2$ と言うのは行列 (10.15) からわかるように

$$|\mathbf{B}|^2 = \frac{1}{2}\sum_{k,l}(F_{kl})^2$$

である。$\partial_j A_i$ が含まれているのは F_{ji} と F_{ij} であるから

$$\frac{\partial\,|\mathbf{B}|^2}{\partial\,(\partial_j A_i)} = F_{ji} - F_{ij} = 2F_{ji}$$

である。だから

$$\sum_{j=1}^{3}\partial_j\left(\frac{\partial\,|\mathbf{B}|^2}{\partial\left(\partial_j A_i\right)}\right)=2\sum_j\partial_j F_{ji}=-2\sum_j\partial_j F_{ij}$$

となる。又、式 (10.15) から

$$\sum_{j=1}^{3}\partial_j F_{ij}=(\nabla\times\mathbf{B})_i$$

であることはすぐ確かめられる。だから

$$\sum_{j=1}^{3}\partial_j\left(\frac{\partial\,|\mathbf{B}|^2}{\partial\left(\partial_j A_i\right)}\right)=-2(\nabla\times\mathbf{B})_i$$

である。よって補題 10.2 が証明されたことになる。

10.3 電磁場と荷電粒子のハミルトニアン

さて、いよいよ今のラグランジアン

$$L=\sum_{\lambda,i}\frac{1}{2}m^\lambda(\dot{X}_i^\lambda)^2-\sum_\lambda q^\lambda\phi(\mathbf{X}^\lambda)+\sum_{\lambda,i}\frac{q^\lambda}{c}\dot{X}_i^\lambda A_i(\mathbf{X}^\lambda)+\frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_\beta\left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2-\left|\mathbf{B}^\beta\right|^2\right) \tag{10.16}$$

をルジャンドル変換してハミルトニアンを作ろう。それは

$$H=\sum_\alpha\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{q}_\alpha}\dot{q}_\alpha-L$$

とするのであった。今の場合 $\dot{\phi}$ はラグランジアンに含まれていないので $\dot{X}_i^\lambda$ と $\dot{A}_i^\beta$ に関してルジャンドル変換する。すなわちハミルトニアン H は

$$H=\sum_{i,\lambda}\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{X}_i^\lambda}\dot{X}_i^\lambda+\sum_{i,\beta}\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{A}_i^\beta}\dot{A}_i^\beta-L \tag{10.17}$$

となる。$X_i^\lambda, A_i^\beta,$ に対応する一般化運動量を u_i^λ, a_i^β と書こう。すなわち

$$u_i^\lambda\equiv\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{X}_i^\lambda}\qquad\qquad a_i^\beta\equiv\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{A}_i^\beta}$$

である。これは式 (10.6),(10.10) で計算したように

$$u_i^\lambda=m^\lambda\dot{X}_i^\lambda+\frac{q^\lambda}{c}A_i(\mathbf{X}^\lambda) \tag{10.18}$$

$$a_i^\beta=-\frac{\Delta V}{4\pi ck}\,E_i^\beta \tag{10.19}$$

である。u_i^λ は通常の運動量である $m^\lambda\dot{X}_i^\lambda$ と異なることに注意。ハミルトニアンを計算しよう。

$$\sum_{i,\lambda}u_i^\lambda\dot{X}_i^\lambda=\sum_{i,\lambda}m^\lambda\left(\dot{X}_i^\lambda\right)^2+\sum_{i,\lambda}\frac{q^\lambda}{c}\dot{X}_i^\lambda A_i(\mathbf{X}^\lambda) \tag{10.20}$$

となる。又、

$$\begin{aligned}\sum_{i,\beta} a_i^\beta \dot{A}_i^\beta &= -\frac{\Delta V}{4\pi ck}\sum_{i,\beta} E_i^\beta \cdot \dot{A}_i^\beta \\ &= -\frac{\Delta V}{4\pi ck}\sum_{i,\beta} E_i^\beta \cdot \left[-c\left(E_i^\beta + \partial_i \phi^\beta\right)\right] \\ &= \frac{\Delta V}{4\pi k}\sum_\beta \left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2 + \mathbf{E}^\beta \cdot \nabla\phi^\beta\right) \end{aligned} \tag{10.21}$$

となる。式 (10.16),(10.20),(10.21) を式 (10.17) に入れると

電荷と電磁場のハミルトニアン ($q, \dot{q}$ 表示)

$$H = \sum_{\lambda,i}\frac{1}{2}m^\lambda(\dot{X}_i^\lambda)^2 + \sum_\lambda q^\lambda \phi(\mathbf{X}^\lambda) + \frac{\Delta V}{4\pi k}\sum_\beta \mathbf{E}^\beta \cdot \nabla\phi^\beta + \frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_\beta\left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2 + \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2\right) \tag{10.22}$$

となる。このハミルトニアンを p, q 表示にしよう。すなわち力学変数 $\dot{q}$ に対応する $\dot{X}$ と $\dot{A}$ を一般化運動量である u_i^λ, a_i^β で表してハミルトニアンから $\dot{X}$ と $\dot{A}$ を消そう。通常ハミルトニアンは p, q で表すものである。式 (10.18),(10.19) より

$$m^\lambda \dot{X}_i^\lambda = u_i^\lambda - \frac{q^\lambda}{c}A_i(\mathbf{X}^\lambda)$$

$$E_i^\beta = -\frac{4\pi ck}{\Delta V}a_i^\beta$$

である。又

$$\left|\mathbf{B}^\beta\right|^2 = \sum_{i,j}\frac{\left(\partial_i A_j^\beta - \partial_j A_i^\beta\right)^2}{2}$$

である。これらを使って、ハミルトニアンから $\dot{X}, \mathbf{E}, \mathbf{B}$ を消去すると

電荷と電磁場のハミルトニアン (p, q 表示)

$$\begin{aligned} H = \sum_{\lambda,i}\frac{1}{2m^\lambda}\left(u_i^\lambda - \frac{q^\lambda}{c}A_i(\mathbf{X}^\lambda)\right)^2 + \sum_\lambda q^\lambda\phi(\mathbf{X}^\lambda) - c\sum_{i,\beta}a_i^\beta \partial_i\phi^\beta + \frac{2\pi c^2 k}{\Delta V}\sum_{i,\beta}\left(a_i^\beta\right)^2 \\ + \frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_{i,j,\beta}\frac{\left(\partial_i A_j^\beta - \partial_j A_i^\beta\right)^2}{2} \end{aligned}$$

となる。さて第 4.2 節で述べたように

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}$$

は $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p$ を $\dot{q}$ について解いたもの、すなわち p の定義式であり、

$$\frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p}$$

がラグランジュ方程式に対応することになるのであった。このことはルジャンドル変換の必然的結果である。だから $\frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p}$ の $X, \phi, \mathbf{A}$ 成分はそれぞれ

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial H}{\partial X_i^\lambda} = -\dot{u}_i^\lambda \qquad \Longrightarrow \quad m\ddot{\mathbf{X}}^\lambda = q\mathbf{E} + q\,\frac{\dot{\mathbf{X}}^\lambda}{c} \times \mathbf{B} \\
&\frac{\partial H}{\partial \phi^\beta} = 0 \qquad\qquad \Longrightarrow \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho \\
&\frac{\partial H}{\partial A_i^\beta} = -\dot{a}_i^\beta \qquad \Longrightarrow \quad \nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi k}{c}\mathbf{J} + \frac{1}{c}\dot{\mathbf{E}}
\end{aligned}
$$

を表していることになる。

さて、量子電磁気学を構成するためには

$$
[\hat{X}_i^\lambda, \hat{u}_i^\lambda] = i\hbar \qquad\qquad [\hat{A}_i^\beta . \hat{a}_i^\beta] = i\hbar
$$

とするわけだが、ϕ **に対応する運動量がない**ところが残念なところである。

10.4 ハミルトニアンがエネルギーとなること

さて、粒子の力学ではハミルトニアンは例外的な場合を除いて系のエネルギーと一致していた (定理 4.5)。一方、式 (10.22) を見ると、これはエネルギーと一致していないように思える。というのは電磁場と荷電粒子のエネルギー E は

$$
E = \sum_{\lambda,i} \frac{1}{2} m_\lambda (\dot{X}_i^\lambda)^2 + \frac{1}{8\pi k} \int |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 + |\mathbf{B}(\mathbf{r})|^2 \, dV \tag{10.23}
$$

だからである。余分な項として

$$
\sum_\lambda q^\lambda \phi(\mathbf{X}^\lambda) + \frac{1}{4\pi k} \int \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \nabla\phi(\mathbf{r}) \, dV
$$

がある。ところがこれは系がマクスウェル方程式を満たしているなら 0 になる。それを示そう。部分積分により

$$
\frac{1}{4\pi k} \int \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \nabla\phi(\mathbf{r}) \, dV = \int \mathbf{E}\,\phi\, d\mathbf{s} - \int \nabla \cdot \mathbf{E}\,\phi\, dV
$$

となる。$\int \mathbf{E}\,\phi\, d\mathbf{s}$ というのは面積分である。これは $\mathbf{E}, \phi$ が有限領域に限られるなら 0 になる。$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi k\rho$ なので、結局

$$
\frac{1}{4\pi k} \int \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \nabla\phi(\mathbf{r}) \, dV = -\int \rho\,\phi\, dV
$$

となる。一方 $\sum_\lambda q^\lambda \phi(\mathbf{X}^\lambda)$ だが、ある ΔV の領域に入っている電荷量は $\rho\Delta V$ であり、すべての荷電粒子 λ について和をとるということは全空間で和とることだから

$$
\int \rho\,\phi\, dV
$$

に等しい。だから余分な項は消え、ハミルトニアンは古典電磁気学のエネルギーと等しくなる。すなわち

定理 10.2　ハミルトニアン

$$H = \sum_{\lambda,i} \frac{1}{2} m^\lambda (\dot{X}_i^\lambda)^2 + \sum_\lambda q^\lambda \phi(\mathbf{X}^\lambda) + \frac{\Delta V}{4\pi k} \sum_\beta \mathbf{E}^\beta \cdot \nabla \phi^\beta + \frac{\Delta V}{8\pi k} \sum_\beta \left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2 + \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2 \right)$$

は電磁場が有限領域に限られているなら、エネルギーに等しい。

だが注意すべきことは、ハミルトニアンが古典電磁気学のエネルギー (10.23) に等しいからといって、式 (10.23) をハミルトニアンにしてしまってはいけない。というのはハミルトンの正準方程式の一つである

$$\frac{\partial H}{\partial \phi^\beta} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$$

を式 (10.22) に代入すれば式 (10.23) に等しくなるのであり、もしこの結果を先に代入してしまっては、肝心のこの式が出てこないのである。今は系を有限領域に限ったが、有限領域に限らなければハミルトニアンはエネルギーに等しくならないことに注意。

10.5　相対論への修正

今までは非相対論的に扱ってきたが、それを相対論的なものに修正しよう。電磁気学において非相対論的扱いと相対論的扱いで異なるのはローレンツ力の式だけである。マクスウェル方程式は同じである。しかし、だからと言って、相対論によって電磁気学が修正を要しなかったとは思わないでもらいたい。というのはローレンツ力の式は電場と磁場の定義も含んでおり、ローレンツ力の式が修正を受けるということは、電場、磁場の定義も修正を受けるということだからである。

さて話を非相対論の場合と相対論の場合を対比しながら進めていこう。ローレンツ力の式はそれぞれ

$$\text{非相対論} \qquad m\ddot{\mathbf{X}} = q\mathbf{E} + q\,\frac{\dot{\mathbf{X}}}{c} \times \mathbf{B} \tag{10.24}$$

$$\text{相対論} \qquad \frac{d}{dt}\left(\frac{m\dot{\mathbf{X}}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \right) = q\mathbf{E} + q\,\frac{\dot{\mathbf{X}}}{c} \times \mathbf{B} \tag{10.25}$$

である。非相対論でのローレンツ力の式を表す式は

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{X}_i^\lambda} \right) = \frac{\partial L}{\partial X_i^\lambda}$$

であった。この式が相対論でのローレンツ力の式 (10.25) になるようにしたい。そこで非相対論的ラグランジアンでの $\frac{1}{2}m\dot{X}_i^2$ の部分を

$$\sum_i \frac{1}{2} m \dot{X}_i^2 \quad \Longrightarrow \quad -mc^2 \sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}$$

と置き換えよう。すなわちラグランジアンを

$$
\text{非相対論} \qquad L = \sum_{i,\lambda} \frac{1}{2} m (\dot{X}_i^\lambda)^2 + [\text{その他}]
$$

$$
\text{相対論} \qquad L = -\sum_{\lambda} m^\lambda c^2 \sqrt{1 - \frac{(v^\lambda)^2}{c^2}} + [\text{その他}]
$$

と修正しよう。ここで v は粒子の速度であり、$v^2 = \sum_i \dot{X}_i^2$ のことである。[その他] と書いた部分は非相対論と相対論で同じである項である。さてそうすると

$$
\begin{aligned}
&\text{非相対論} \qquad \frac{\partial L}{\partial \dot{X}_i^\lambda} = m^\lambda \dot{X}_i + \frac{q^\lambda}{c} A_i(\mathbf{X}^\lambda) \\
&\text{相対論} \qquad \frac{\partial L}{\partial \dot{X}_i^\lambda} = \frac{m^\lambda \dot{X}_i^\lambda}{\sqrt{1 - \frac{(v^\lambda)^2}{c^2}}} + \frac{q^\lambda}{c} A_i(\mathbf{X}^\lambda)
\end{aligned} \tag{10.26}
$$

となる。$\dfrac{\partial L}{\partial X_i^\lambda}$ は非相対論と相対論で同じである。だからラグランジュ方程式は非相対論での

$$
\frac{d}{dt}\left(m^\lambda \dot{X}_i\right)
$$

の部分が相対論では

$$
\frac{d}{dt}\left(\frac{m^\lambda \dot{X}_i^\lambda}{\sqrt{1 - \frac{(v^\lambda)^2}{c^2}}}\right)
$$

に置き換わるだけである。それゆえ非相対論でローレンツ力の式 (10.24) がラグランジュ方程式から導かれるなら、相対論的なラグランジアンでローレンツ力の式 (10.25) がラグランジュ方程式から導かれるのがわかろう。$\phi, \mathbf{A}$ に関わる項は全く修正されないので、相対論的ラグランジアンでもマクスウェル方程式が導かれる。ここで改めて相対論的ラグランジアンを書くと

相対論的ラグランジアン

$$
L = -\sum_{\lambda} m^\lambda c^2 \sqrt{1 - \frac{(v^\lambda)^2}{c^2}} - \sum_{\lambda} q^\lambda \phi(\mathbf{X}^\lambda) + \sum_{i,\lambda} \frac{q^\lambda}{c} \dot{X}_i^\lambda A_i(\mathbf{X}^\lambda) + \frac{\Delta V}{8\pi k} \sum_{\beta} \left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2 - \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2 \right) \tag{10.27}
$$

である。さてこれをルジャンドル変換してハミルトニアンを作ろう。すなわち

$$
H = \sum_{i,\lambda} u_i^\lambda \dot{X}_i^\lambda + \sum_{i,\beta} a_i^\beta \dot{A}_i^\beta - L
$$

とするわけである。ここで非相対論のときと変わったのは u_i^λ と L である。u_i^λ は

$$
\begin{aligned}
&\text{非相対論} \qquad u_i^\lambda = m^\lambda \dot{X}_i + \frac{q^\lambda}{c} A_i(\mathbf{X}^\lambda) \\
&\text{相対論} \qquad u_i^\lambda = \frac{m^\lambda \dot{X}_i^\lambda}{\sqrt{1 - \frac{(v^\lambda)^2}{c^2}}} + \frac{q^\lambda}{c} A_i(\mathbf{X}^\lambda)
\end{aligned} \tag{10.28}
$$

となり L は前述の式 (10.27) のとおりである。その点に注意して、非相対論のハミルトニアンと相対論のハミルトニアンを比較すると

$$\text{非相対論}\qquad H=\sum_{i,\lambda}\left[m^\lambda(\dot{X}_i^\lambda)^2-\frac{1}{2}m^\lambda(\dot{X}_i^\lambda)^2\right]\quad+[\text{その他}]$$

$$\text{相対論}\qquad H=\sum_{\lambda}\left[\frac{m^\lambda\left(v^\lambda\right)^2}{\sqrt{1-\frac{(v^\lambda)^2}{c^2}}}+m^\lambda c^2\sqrt{1-\frac{(v^\lambda)^2}{c^2}}\right]\quad+[\text{その他}]$$

[その他] とあるのは非相対論と相対論で同じ項ということ。これを計算すると

$$\text{非相対論}\qquad H=\sum_{i,\lambda}\left[\frac{1}{2}m^\lambda(\dot{X}_i^\lambda)^2\right]\quad+[\text{その他}]$$

$$\text{相対論}\qquad H=\sum_{\lambda}\left[\frac{m^\lambda c^2}{\sqrt{1-\frac{(v^\lambda)^2}{c^2}}}\right]\quad+[\text{その他}]$$

となる。よって相対論的ハミルトニアンは非相対論での $\frac{1}{2}m^\lambda(\dot{X}_i^\lambda)^2$ の部分を

$$\sum_{i,\lambda}\left[\frac{1}{2}m^\lambda(\dot{X}_i^\lambda)^2\right]\quad\Longrightarrow\quad\sum_{\lambda}\left[\frac{m^\lambda c^2}{\sqrt{1-\frac{(v^\lambda)^2}{c^2}}}\right]$$

と置き換えれば良い。だから式 (10.22) でこの置き換えをすると

相対論的ハミルトニアン ($q,\dot{q}$ 表示)

$$H=\sum_{\lambda}\frac{m^\lambda c^2}{\sqrt{1-\frac{(v^\lambda)^2}{c^2}}}+\sum_\lambda q^\lambda\phi(\mathbf{X}^\lambda)+\frac{\Delta V}{4\pi k}\sum_\beta\mathbf{E}^\beta\cdot\nabla\phi^\beta+\frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_\beta\left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2+\left|\mathbf{B}^\beta\right|^2\right)\qquad(10.29)$$

となる。

ハミルトニアンを p,q で表示しよう。非相対論でのハミルトニアンとは $\frac{m^\lambda c^2}{\sqrt{1-\frac{(v^\lambda)^2}{c^2}}}$ の部分が異なるだけである。一般化運動量は式 (10.28) より

$$u_i^\lambda=\frac{m^\lambda\dot{X}_i^\lambda}{\sqrt{1-\frac{(v^\lambda)^2}{c^2}}}+\frac{q^\lambda}{c}A_i(\mathbf{X}^\lambda)\qquad(10.30)$$

である。これを使って $\dot{X}_i^\lambda$ を u_i^λ で表せばよいのだが、これを愚直に $\dot{X}_i^\lambda$ について解くのはめんどうである。それで相対論でよく知られた恒等式

$$c\sqrt{m^2c^2+p^2}=\frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\qquad(10.31)$$

を使おう。ここでの p は通常の運動量であり

$$p=\frac{mv}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

である。通常の運動量とハミルトニアンでの一般化運動量が異なることに注意。式 (10.30) より

$$u_i - \frac{q}{c}A_i(\mathbf{X}) = \frac{m\dot{X}_i}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

である。ここでは粒子の番号の指標を省いた。だから

$$\sum_{i=1}^{3}\left(u_i - \frac{q}{c}A_i(\mathbf{X})\right)^2 = \left(\frac{mv}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2 = p^2$$

である。これを式 (10.31) に入れると

$$c\sqrt{m^2c^2 + \sum_i\left(u_i - \frac{q}{c}A_i(\mathbf{X})\right)^2} = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

となる。これをハミルトニアン (10.29) の第 1 項に代入する。第 1 項以外は非相対論と相対論で同じである。よってハミルトニアンの p, q 表示では

相対論的ハミルトニアン (p, q 表示)

$$H = \sum_\lambda c\sqrt{\left(m^\lambda\right)^2c^2 + \sum_i\left(u_i^\lambda - \frac{q^\lambda}{c}A_i(\mathbf{X}^\lambda)\right)^2} + \sum_\lambda q^\lambda\phi(\mathbf{X}^\lambda) - c\sum_{i,\beta}a_i^\beta\partial_i\phi^\beta$$
$$+\frac{2\pi c^2k}{\Delta V}\sum_{i,\beta}\left(a_i^\beta\right)^2 + \frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_{i,j,\beta}\frac{\left(\partial_iA_j^\beta - \partial_jA_i^\beta\right)^2}{2}$$

となるわけである。

10.6　まとめ

荷電粒子と電磁場のハミルトニアンを作るのは量子電磁気学のためである。そのハミルトニアンを作るためにラグランジアンを作るのである。力学変数 q は粒子の位置、電磁場のポテンシャル ϕ、ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ である。$\phi, \mathbf{A}$ は場所ごとに力学変数が存在することになる。ラグランジアンはラグランジュ方程式がローレンツ力の式とマクスウェル方程式を表すように作る。それが $q, \dot{q}$ 表示では

電荷と電磁場のラグランジアン

$$L = \sum_{\lambda,i}\frac{1}{2}m^\lambda(\dot{X}_i^\lambda)^2 - \sum_\lambda q^\lambda\phi(\mathbf{X}^\lambda) + \sum_{\lambda,i}\frac{q^\lambda}{c}\dot{X}_i^\lambda A_i(\mathbf{X}^\lambda) + \frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_\beta\left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2 - \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2\right)$$

である。このラグランジアンをルジャンドル変換してハミルトニアンを作る。それが

電荷と電磁場のハミルトニアン ($q, \dot{q}$ 表示)

$$H = \sum_{\lambda,i} \frac{1}{2} m^\lambda (\dot{X}_i^\lambda)^2 + \sum_\lambda q^\lambda \phi(\mathbf{X}^\lambda) + \frac{\Delta V}{4\pi k} \sum_\beta \mathbf{E}^\beta \cdot \nabla \phi^\beta + \frac{\Delta V}{8\pi k} \sum_\beta \left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2 + \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2 \right)$$

であり、p, q 表示では

電荷と電磁場のハミルトニアン (p, q 表示)

$$H = \sum_{\lambda,i} \frac{1}{2m^\lambda} \left(u_i^\lambda - \frac{q^\lambda}{c} A_i(\mathbf{X}^\lambda) \right)^2 + \sum_\lambda q^\lambda \phi(\mathbf{X}^\lambda) - c \sum_{i,\beta} a_i^\beta \partial_i \phi^\beta + \frac{2\pi c^2 k}{\Delta V} \sum_{i,\beta} \left(a_i^\beta \right)^2 + \frac{\Delta V}{8\pi k} \sum_{i,j,\beta} \frac{\left(\partial_i A_j^\beta - \partial_j A_i^\beta \right)^2}{2}$$

である。u_i^λ は粒子の位置座標 X_i^λ に対応する一般化運動量である。a_i^β はベクトルポテンシャル A_i^β に対応する一般化運動量である。ルジャンドル変換の必然的結果として正準方程式

$$\frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p}$$

はラグランジュ方程式 $\dot{p} = \dfrac{\partial L}{\partial q}$ を表すことになるので、ローレンツ力とマクスウェル方程式を表すことになる。このハミルトニアンは無限遠方で電磁場が 0 になるならエネルギーに等しい (定理 10.2)。量子電磁気学を構成するためには演算子の交換関係

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$$

を設定する。しかし ϕ に対応する一般化運動量がないので ϕ に関してはできない。

今までは非相対論での話である。正しいのは相対論なのだから、相対論へ修正する。非相対論と相対論で修正されるのはローレンツ力の式だけである。マクスウェル方程式は変わらない。形式的にはマクスウェル方程式は変わらないが、物理的意味は異なる。というのは、ローレンツ力の式が電磁場の定義式にもなっているからである。ラグランジュ方程式がローレンツ力とマクスウェル方程式を表すようにラグランジアンを作る。そうなるためには非相対論的ラグランジアンでの $\frac{1}{2} m \dot{X}_i^2$ の部分を

$$\sum_i \frac{1}{2} m \dot{X}_i^2 \quad \Longrightarrow \quad -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

と置き換えて

相対論的ラグランジアン

$$L = -\sum_\lambda m^\lambda c^2 \sqrt{1 - \frac{(v^\lambda)^2}{c^2}} - \sum_\lambda q^\lambda \phi(\mathbf{X}^\lambda) + \sum_{i,\lambda} \frac{q^\lambda}{c} \dot{X}_i^\lambda A_i(\mathbf{X}^\lambda) + \frac{\Delta V}{8\pi k} \sum_\beta \left(\left|\mathbf{E}^\beta\right|^2 - \left|\mathbf{B}^\beta\right|^2 \right)$$

とすればよい。あとはルジャンドル変換してハミルトニアンを作る。それは非相対論での $\frac{1}{2} m^\lambda (\dot{X}_i^\lambda)^2$ の部

分を

$$\left[\frac{1}{2}m^{\lambda}(\dot{X}_i^{\lambda})^2\right] \quad\Longrightarrow\quad \left[\frac{m^{\lambda}c^2}{\sqrt{1-\frac{(v^{\lambda})^2}{c^2}}}\right]$$

と置き換えた

相対論的ハミルトニアン $(q,\dot{q}$ 表示$)$

$$H=\sum_{\lambda}\frac{m^{\lambda}c^2}{\sqrt{1-\frac{(v^{\lambda})^2}{c^2}}}+\sum_{\lambda}q^{\lambda}\phi(\mathbf{X}^{\lambda})+\frac{\Delta V}{4\pi k}\sum_{\beta}\mathbf{E}^{\beta}\cdot\nabla\phi^{\beta}+\frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_{\beta}\left(\left|\mathbf{E}^{\beta}\right|^2+\left|\mathbf{B}^{\beta}\right|^2\right)$$

が相対論でのハミルトニアンとなる。p,q 表示では

相対論的ハミルトニアン $(p,q$ 表示$)$

$$H=\sum_{\lambda}c\sqrt{(m^{\lambda})^2c^2+\sum_i\left(u_i^{\lambda}-\frac{q^{\lambda}}{c}A_i(\mathbf{X}^{\lambda})\right)^2}+\sum_{\lambda}q^{\lambda}\phi(\mathbf{X}^{\lambda})-c\sum_{i,\beta}a_i^{\beta}\partial_i\phi^{\beta}$$
$$+\frac{2\pi c^2k}{\Delta V}\sum_{i,\beta}\left(a_i^{\beta}\right)^2+\frac{\Delta V}{8\pi k}\sum_{i,j,\beta}\frac{\left(\partial_iA_j^{\beta}-\partial_jA_i^{\beta}\right)^2}{2}$$

となる。正準方程式の

$$\frac{\partial H}{\partial q}=-\dot{p}$$

がローレンツ力とマクスウェル方程式を表すことは非相対論のときと変わらない。これはルジャンドル変換の必然的結果だからである。

付録 A

ラグランジュ方程式のテンソル形式

ラグランジュ方程式をテンソルの観点から考察しよう。ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = f_\alpha$$

と言うのはテンソルの言葉で言えば、共変ベクトルの式になっている。そのことは、この式よりも、この式の原型の

$$\sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} m_i \ddot{x}_i = \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} F_i$$

を見るとすぐわかろう。この式は左辺も右辺も明らかに共変ベクトルとして変換する。そしてラグランジュ方程式の左辺とこの左辺は恒等式であり、ラグランジュ方程式の右辺はこの式の右辺の省略記号だからである。

テンソルの記号を使えば、

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = \dot{p}_\alpha - \sum_{\gamma,\beta} \Gamma^\beta_{\alpha,\gamma} \dot{q}_\gamma p_\beta \tag{A.1}$$

という恒等式が成り立つ。これは、この座標系が、この運動エネルギーの基準となっている慣性系での直交座標系と時間を含まない変換で結ばれているとき成り立つ。いわゆる慣性系に固定された座標系で成り立つ。これを使うと

> ラグランジュ方程式は
>
> $$\dot{p}_\alpha - \sum_{\gamma,\beta} \Gamma^\beta_{\alpha,\gamma} \dot{q}_\gamma p_\beta = f_\alpha$$
>
> と書ける。

$\Gamma^\beta_{\alpha,\gamma}$ はいろいろな定義があるが、とりあえずここでは

$$\sum_i \Gamma^\beta_{\alpha,\gamma} \equiv \frac{\partial q_\beta}{\partial x_i} \frac{\partial^2 x_i}{\partial q_\alpha \partial q_\gamma}$$

としておこう。恒等式 (A.1) の証明を書こう。$\dot{p}_\alpha$ は定義により $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right)$ なので、

$$\sum_{\gamma,\beta} \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = \Gamma^\beta_{\alpha,\gamma} \dot{q}_\gamma p_\beta$$

であることを示せれば良い。

$$\frac{\partial\, T}{\partial\, q_\alpha} = \frac{\partial}{\partial\, q_\alpha}\left(\frac{1}{2}m_i \dot{x}_i^2\right) = m_i x_i \frac{\partial\, \dot{x}_i}{\partial\, q_\alpha} \tag{A.2}$$

である。x_i は設定により q_α 系で表したとき、時間を含まないので

$$\dot{x}_i = \sum_\gamma \frac{\partial\, x_i}{\partial\, q_\gamma}\dot{q}_\gamma$$

である。だから

$$\frac{\partial\, \dot{x}_i}{\partial\, q_\alpha} = \frac{\partial}{\partial\, q_\alpha}\left(\sum_\gamma \frac{\partial\, x_i}{\partial\, q_\gamma}\dot{q}_\gamma\right) = \sum_\gamma \frac{\partial^2 x_i}{\partial\, q_\alpha \partial\, q_\gamma}\dot{q}_\gamma \tag{A.3}$$

となる。一方

$$m_i \dot{x}_i = \frac{\partial\, T}{\partial\, \dot{x}_i} = \sum_\beta \frac{\partial\, \dot{q}_\beta}{\partial\, \dot{x}_i}\frac{\partial\, T}{\partial\, \dot{q}_\beta} = \sum_\beta \frac{\partial\, q_\beta}{\partial\, x_i} p_\beta \tag{A.4}$$

である。式 (A.3)(A.4) を式 (A.2) に入れると

$$\frac{\partial\, T}{\partial\, q_\alpha} = \left(\sum_\beta \frac{\partial\, q_\beta}{\partial\, x_i} p_\beta\right)\left(\sum_\gamma \frac{\partial^2 x_i}{\partial\, q_\alpha \partial\, q_\gamma}\dot{q}_\gamma\right) = \sum_{\beta,\gamma} \frac{\partial\, q_\beta}{\partial\, x_i}\frac{\partial^2 x_i}{\partial\, q_\alpha \partial\, q_\gamma}\dot{q}_\gamma p_\beta$$

になるというわけである。$\Gamma^\beta_{\alpha,\gamma}$ の定義を使うと

$$\frac{\partial\, T}{\partial\, q_\alpha} = \sum_{\gamma,\lambda} \Gamma^\beta_{\alpha,\gamma}\dot{q}_\gamma p_\beta$$

となる。よって恒等式 (A.1) が証明されたことになる。

付録 B

正準変換となるための必要条件ではないこと

定理 5.6 で正準変換となるための十分条件を述べたが、それは必要条件ではないと述べた。そのことを示そう。そのために、

$$Q = q + p - t \qquad P = q - p + t \tag{B.1}$$
$$H = -q \qquad K = 0$$

という変換は正準変換になっているが

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + \frac{dF}{dt} \tag{B.2}$$

を満たす $F(q,p,t)$ は存在しない事を示せればよい。
まずこれが正準変換になっているこを示そう。図 5.2 の手順で示す。変換式 (B.1) より

$$\dot{Q} = \dot{q} + \dot{p} - 1 \qquad \dot{P} = \dot{q} - \dot{p} + 1 \tag{B.3}$$

である (A-1)。この (A-1) は図 5.2 中の手順を示す。以下同じ。又、q, p についての正準方程式より

$$\dot{q} = 0 \qquad \dot{p} = 1$$

である。これを式 (B.3) に代入すると

$$\dot{Q} = 0 \qquad \dot{P} = 0$$

を得る (A-2)。一方 Q, P についての正準方程式より

$$\dot{Q} = 0 \qquad \dot{P} = 0$$

である (B-1)。よって K, Q, P は正準方程式を満たす。すなわち正準変換になっているということである。
次にこの変換では式 (B.2) を満たす $F(q,p,t)$ は存在しないことを示そう。$\mathcal{L}'$ を式 (B.1)、(B.3) を使って、$q, p, \dot{q}, \dot{p}, t$ で表すと

$$P\dot{Q} - K = (q - p + t)(\dot{q} + \dot{p} - 1) - 0 = \dot{q}(q - p + t) + \dot{p}(q - p + t) - q + p - t$$

となる。又 $\mathcal{L}$ を、$q, p, \dot{q}, \dot{p}, t$ で表すと

$$p\dot{q} - H = p\dot{q} + q$$

となる。だから $\mathcal{L}' - \mathcal{L}$ は

$$\Big(\dot{q}(q-p+t)+\dot{p}(q-p+t)-q+p-t\Big)-\Big(p\dot{q}+q\Big)=\dot{q}(q-2p+t)+\dot{p}(q-p+t)-2q+p-t$$

である[*1]。これが dF/dt と $q, p, \dot{q}, \dot{p}, t$ に関して恒等式となるためには

$$\frac{\partial F}{\partial q}=q-2p+t \qquad\qquad \frac{\partial F}{\partial p}=q-p+t$$

でなければならない。この式を満たす $F(q,p,t)$ が存在するためには

$$\frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{\partial F}{\partial q}\right)=\frac{\partial}{\partial q}\left(\frac{\partial F}{\partial p}\right)$$

を満たしていなければならないが、満たしていない。だから

$$\mathcal{L}'=\mathcal{L}+\frac{dF}{dt}$$

を満たすような $F(q,p,t)$ は存在しない。

[*1] 2022 年 10 月追記：正準変換のための必要十分条件は $\mathcal{L}' = \mathcal{L} + G$ で、G がオイラーの方程式を満たすことであった。今の場合このことが成り立っていることを示そう。今の場合

$$G=\dot{q}(q-2p+t)+\dot{p}(q-p+t)-2q+p-t$$

である。この G に関するオイラーの方程式は

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial G}{\partial \dot{q}}\right)=\frac{\partial G}{\partial q}\Longleftrightarrow\frac{d}{dt}(q-2p+t)=\dot{q}+\dot{p}-2\Longleftrightarrow\dot{p}=1$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial G}{\partial \dot{p}}\right)=\frac{\partial G}{\partial p}\Longleftrightarrow\frac{d}{dt}(q-p+1)=-2\dot{q}-\dot{p}+1\Longleftrightarrow\dot{q}=0$$

である。最初の設定より、$\dot{q}=0, \dot{p}=1$ なので、この G はオイラーの方程式を満たしている。故に正準変換になる。

付録 C

他の変数での母関数

本文では q, p が q, Q で表せる場合としたが、定理 5.6 の

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + \frac{dF}{dt} \tag{C.1}$$

が簡略化できるのは、あと 3 つの表し方がある。ここで $\mathcal{L}$ は $\sum_i p_i \dot{q}_i - H$ のこと。全て書くと

(I)q, Q、(II)$q.P$、(III)p, Q、(IV)p, P

である。変換 $q, p \to Q, P$ で、q, p 側から 1 つ、Q, P 側から 1 つとった組み合わせである。(I) の場合は本文で説明したので (II)、(III)、(IV) の場合について説明しよう。

(II)　q, p が q, P で表せるとき。これは $\det\left|\frac{\partial P_j(q,p,t)}{\partial p_i}\right| \neq 0$ のとき可能である (定理 1.5 陰関数定理の系参照)。

母関数 F を

$$F = F_2(q, P, t) + \sum_i P_i Q_i$$

とおこう[*1]。すると

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial F_2}{\partial P_i}\dot{P}_i + \sum_i \frac{\partial F_2}{\partial t} + \sum_i \dot{P}_i Q_i + \sum_i P_i \dot{Q}_i$$

となり、これを式 (C.1) に入れて $q, P, \dot{q}, \dot{P}, t$ の恒等式になるには、

$$\frac{\partial F_1}{\partial q_i} = -p_i \qquad \frac{\partial F_1}{\partial P_i} = -Q_i \tag{C.2}$$

$$K = H - \frac{\partial F_1}{\partial t} \tag{C.3}$$

であればよい。これが本文の定理 5.8 の式 (5.15)(5.16) に対応する式である。定理 5.8 以降の議論は全く同じように展開できる。ただ定理 5.10 の式 (5.24) は今の場合

$$K\left(-\frac{\partial F_2}{\partial P}, P, t\right) = H\left(q, -\frac{\partial F_2}{\partial q}, t\right) - \frac{\partial F_2(q, P, t)}{\partial t} \tag{C.4}$$

となる。

(III)　q, p が p, Q で表せるとき。これは $\det\left|\frac{\partial Q_j(q,p,t)}{\partial q_i}\right| \neq 0$ のとき可能である (定理 1.5 陰関数定理の系参

---

*1 F と F_2 はルジャンドル変換の関係になっている。これは第 4.1 節で述べたルジャンドル変換の符号が反対のルジャンドル変換である。

表 C.1　対応表。形式上、1 行目の F を F_1 と書いた。

変数	$F=$	変換式	偏微分方程式
q,Q	F_1	$\dfrac{\partial F_1}{\partial q_i}=-p_i \quad \dfrac{\partial F_1}{\partial Q_i}=P_i$	$K\left(Q,\dfrac{\partial F_1}{\partial Q},t\right)=H\left(q,-\dfrac{\partial F_1}{\partial q},t\right)-\dfrac{\partial F_1}{\partial t}$
q,P	$F_2+\sum_i P_iQ_i$	$\dfrac{\partial F_2}{\partial q_i}=-p_i \quad \dfrac{\partial F_2}{\partial P_i}=-Q_i$	$K\left(-\dfrac{\partial F_2}{\partial P},P,t\right)=H\left(q,-\dfrac{\partial F_2}{\partial q},t\right)-\dfrac{\partial F_2}{\partial t}$
p,Q	$F_3-\sum_i p_iq_i$	$\dfrac{\partial F_3}{\partial p_i}=q_i \quad \dfrac{\partial F_3}{\partial Q_i}=P_i$	$K\left(Q,\dfrac{\partial F_3}{\partial Q},t\right)=H\left(\dfrac{\partial F_3}{\partial p},p,t\right)-\dfrac{\partial F_3}{\partial t}$
p,P	$F_4-\sum_i p_iq_i+\sum_i P_iQ_i$	$\dfrac{\partial F_4}{\partial p_i}=q_i \quad \dfrac{\partial F_4}{\partial P_i}=-Q_i$	$K\left(-\dfrac{\partial F_4}{\partial P},P,t\right)=H\left(\dfrac{\partial F_4}{\partial p},p,t\right)-\dfrac{\partial F_4}{\partial t}$

照)。

$$F=F_3(p,Q,t)-\sum_i p_iq_i$$

とおく。あとの議論は上記 (II) の場合と同じである。式 (C.2)(C.3) に対応する式として

$$\frac{\partial F_3}{\partial p_i}=q_i \qquad \frac{\partial F_3}{\partial Q_i}=P_i \qquad K=H-\frac{\partial F_3}{\partial t}$$

をえる。また式 (C.4) に対応する式は

$$K\left(Q,\frac{\partial F_3}{\partial Q},t\right)=H\left(\frac{\partial F_3}{\partial p},p,t\right)-\frac{\partial F_3(p,Q,t)}{\partial t}$$

となる。

(IV)　q,p が p,P で表せるとき。これは $\det\left|\frac{\partial P_j}{\partial q_i}\right|\neq 0$ のとき可能である (定理 1.5 陰関数定理の系参照)。

$$F=F_4(p,P,t)-\sum_i p_iq_i+\sum_i P_iQ_i$$

とおく。あとの議論は上記 (II) の場合と同じである。式 (C.2)(C.3) に対応する式として

$$\frac{\partial F_4}{\partial p_i}=q_i \qquad \frac{\partial F_4}{\partial P_i}=-Q_i \qquad K=H-\frac{\partial F_4(p,P,t)}{\partial t}$$

をえる。また式 (C.4) に対応する式は

$$K\left(-\frac{\partial F_4}{\partial P},P,t\right)=H\left(\frac{\partial F_4}{\partial p},p,t\right)-\frac{\partial F_4(p,P,t)}{\partial t}$$

となる。

以上を表にすると表 C.1 となる。

付録 D

量子化

直交座標でのシュレディンガー方程式は

$$-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i}\frac{\partial^2}{\partial x_i}\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t}$$

である。極座標や重心相対座標のような他の一般座標でのシュレディンガー方程式はどうなるかというと、それは単に微分の変数変換をすればよいわけである。すなわち q_α を一般座標系 x_i を直交座標とすると

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_i \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial q_\alpha}$$

と変換すればよいわけである。一般座標でのシュレディンガー方程式とはただ単にそれだけの話しである。

このことを古典力学のハミルトニアンからの量子化という観点から扱ってみたい。直交座標での古典力学のハミルトニアンは

$$H = \sum_i \frac{1}{2m_i}p_i^2 + V$$

であるが、この系のシュレディンガー方程式を作るには

$$p_i \quad \Longrightarrow \quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_i}$$

と置き換えて、波動関数に作用させればよい。これは量子力学では、演算子 $\hat{p}_i$ の位置表示が $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_i}$ だということである。では

一般座標でのハミルトニアンの p_α を単純に $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_\alpha}$ に置き換えたものが正しいシュレディンガー方程式になるのだろうか。

このことがここでの主題である。結論を先に言えば、極座標では正しくなく、重心相対座標では正しい。正しいのは座標変換が線形の場合である。線形というのは例えば $(x, y) \to (x', y')$ への変換で

$$x' = 2x + 3y$$
$$y' = 5x - 4y$$

のような場合である。直交座標から 2 次元極座標への変換は

$$x = r\cos\theta \qquad\qquad y = r\sin\theta$$

なので、線形変換ではない。一方、直交座標から重心・相対座標への変換は

$$x_g = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} \qquad x_g = x_2 - x_1$$

であり、線形なので正しいのである。

ではこのことを示そう。座標変換に関係があるのは $\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ の部分だけなので、その部分だけに着目する。すると直交座標ではシュレディンガー方程式のハミルトニアン演算子は

$$\hat{H} = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial}{\partial x_i^2}$$

であるが、これを一般座標の q_α 系に変換すると

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \sum_\alpha \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \sum_\beta \left(\frac{\partial q_\beta}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial q_\beta} \right) \\
&= -\sum_{i,\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_i} \left[\frac{\partial q_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial q_\beta}{\partial x_i} \frac{\partial^2}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} + \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_i} \left(\frac{\partial}{\partial q_\alpha} \frac{\partial q_\beta}{\partial x_i} \right) \frac{\partial}{\partial q_\beta} \right] \qquad \text{(D.1)}
\end{aligned}$$

となる。これが一般座標でのシュレディンガー方程式のラプラシアンの部分である。一方古典力学のハミルトニアンはどうか。直交座標での運動量を P_i、一般座標のそれを p_α と書こう。さて定理 4.3 で述べたように

$$P_i = \sum_\alpha \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_i} p_\alpha \qquad \text{(D.2)}$$

である。H は不変量なので (定理 4.4)、一般座標で表したハミルトニアンは、直交座標の H に式 (D.2) を代入した式になる。すなわち直交座標では

$$H = \sum_i \frac{1}{2m_i} P_i^2$$

なので、一般座標では

$$H = \sum_{i,\alpha,\beta} \frac{1}{2m_i} \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial q_\beta}{\partial x_i} p_\alpha p_\beta \qquad \text{(D.3)}$$

となる。さて、式 (D.1) と式 (D.3) を比べてみると、式 (D.3) で $p_\alpha \to \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_\alpha}$ と置き換えてみよう。置き換えるとき p は右端におく。順序が異なれば異なる演算子になるからである。さて置き換えただけでは量子力学のハミルトニアンには一致しない。置き換えてさらに

$$-\sum_{i,\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_i} \left(\frac{\partial}{\partial q_\alpha} \frac{\partial q_\beta}{\partial x_i} \right) \frac{\partial}{\partial q_\beta}$$

を加えなければならない。ところで、変換が線形のときは、これは 0 となる。以上のことをまとめると次のように言える。

定理 D.1　一般座標でのハミルトニアンは

$$H = \sum_{i,\alpha,\beta} \frac{1}{2m_i} \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, x_i} \frac{\partial\, q_\beta}{\partial\, x_i} p_\alpha p_\beta$$

である。運動量 p_α を右端におき、運動量 p_α を $p_\alpha \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\, q_\alpha}$ と置き換えて演算子とする。その演算子にさらに

$$-\sum_{i,\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, x_i} \left(\frac{\partial}{\partial\, q_\alpha} \frac{\partial\, q_\beta}{\partial\, x_i} \right) \frac{\partial}{\partial\, q_\beta} \tag{D.4}$$

という項を加えれば正しいシュレディンガー方程式の演算子が得られる。直交座標からの座標変換が線形のときは加えなくて良い。

さて、事実としてはただこれだけの話なのだが、これをテンソルの記号を使ってすっきりさせよう。このいわゆる余分な項 (D.4) を変形しよう。

$$\begin{aligned}
\sum_{i,\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, x_i} \left(\frac{\partial}{\partial\, q_\alpha} \frac{\partial\, q_\beta}{\partial\, x_i} \right) \frac{\partial}{\partial\, q_\beta} &= \sum_{i,\alpha,\lambda} \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, x_i} \sum_j \delta_i^j \left(\frac{\partial}{\partial\, q_\alpha} \frac{\partial\, q_\lambda}{\partial\, x_j} \right) \frac{\partial}{\partial\, q_\lambda} \\
&= \sum_{i,j,\alpha,\lambda} \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, x_i} \left(\sum_\beta \frac{\partial\, q_\beta}{\partial\, x_i} \frac{\partial\, x_j}{\partial\, q_\beta} \right) \left(\frac{\partial}{\partial\, q_\alpha} \frac{\partial\, q_\lambda}{\partial\, x_j} \right) \frac{\partial}{\partial\, q_\lambda} \\
&= \sum_{i,\alpha,\beta,\lambda} \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, x_i} \frac{\partial\, q_\beta}{\partial\, x_i} \sum_j \left[\frac{\partial\, x_j}{\partial\, q_\beta} \left(\frac{\partial}{\partial\, q_\alpha} \frac{\partial\, q_\lambda}{\partial\, x_j} \right) \right] \frac{\partial}{\partial\, q_\lambda}
\end{aligned}$$

さて一般に

$$\Gamma^\lambda_{\alpha,\beta} \equiv -\sum_j \frac{\partial\, x_j}{\partial\, q_\beta} \left(\frac{\partial}{\partial\, q_\alpha} \frac{\partial\, q_\lambda}{\partial\, x_j} \right)$$

という記号がテンソルの世界では使われる。$\Gamma^\lambda_{\alpha,\beta}$ の定義はいろいろ可能だがとりあえず、これも 1 つの定義である。この記号を使うと

$$\sum_{i,\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, x_i} \left(\frac{\partial}{\partial\, q_\alpha} \frac{\partial\, q_\beta}{\partial\, x_i} \right) \frac{\partial}{\partial\, q_\beta} = -\sum_{i,\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, x_i} \frac{\partial\, q_\beta}{\partial\, x_i} \sum_\lambda \Gamma^\lambda_{\alpha,\beta} \frac{\partial}{\partial\, q_\lambda}$$

となる。これを式 (D.1) に代入すると

$$H = -\sum_{i,\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_i} \left[\frac{\partial\, q_\alpha}{\partial\, x_i} \frac{\partial\, q_\beta}{\partial\, x_i} \left(\frac{\partial^2}{\partial\, q_\alpha \partial\, q_\beta} - \sum_\lambda \Gamma^\lambda_{\alpha,\beta} \frac{\partial}{\partial\, q_\lambda} \right) \right]$$

となる。

さて共変微分というものを（本当に）簡単に説明しよう。共変微分演算子 ∇_α をスカラー ψ に作用させるというのは

$$\nabla_\alpha \psi \equiv \frac{\partial\, \psi}{\partial\, q_\alpha}$$

と定義される。すなわちただの微分である。また $\nabla_\beta \nabla_\alpha \psi$ は

$$\nabla_\beta \nabla_\alpha \psi \equiv \frac{\partial}{\partial\, q_\beta} \frac{\partial\, \psi}{\partial\, q_\alpha} - \Gamma^\lambda_{\beta,\alpha} \frac{\partial\, \psi}{\partial\, q_\lambda}$$

と定義される。さてこれを使うと

$$\hat{H} = -\sum_{i,\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial q_\beta}{\partial x_i} \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_i} \nabla_\beta \nabla_\alpha \tag{D.5}$$

となる。これは単に式 (D.1) をテンソルの共変微分の記号で書き換えただけである。ただ式 (D.5) のように書くことで、ずいぶん見通しがよくなったと感じる。さて、式 (D.5) を一般座標での古典力学のハミルトニアン

$$H = \sum_{i,\alpha,\beta} \frac{1}{2m_i} \frac{\partial q_\beta}{\partial x_i} \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_i} p_\beta p_\alpha$$

と比べると

$$p_\alpha \quad \Longrightarrow \quad \frac{\hbar}{i} \nabla_\alpha$$

と置き換えればよいことがわかる。これが、テンソルの言葉を使った、q_α がどんな座標であろうとも成り立つ量子化の手法である。すなわち

定理 D.2　古典力学のハミルトニアン

$$H = \sum_{i,\alpha,\beta} \frac{1}{2m_i} \frac{\partial q_\beta}{\partial x_i} \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_i} p_\beta p_\alpha$$

で、運動量 p_α を右端に置き、

$$p_\alpha \quad \Longrightarrow \quad \frac{\hbar}{i} \nabla_\alpha$$

と置き換えれば正しいシュレディンガー方程式の演算子が得られる。ここで ∇_α は共変微分。

おわりに

結局、解析力学でしていることというのは、力学の簡明なニュートンの運動方程式

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}$$

を、これと同等なより複雑な形に書き換えるということであった。1 つ目がラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = \frac{\partial L}{\partial q}$$

であり、2 つ目が正準方程式

$$-\frac{\partial H}{\partial q} = \dot{p} \qquad \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}$$

であった。$-\frac{\partial H}{\partial q} = \dot{p}$ はラグランジュ方程式に対応しており、$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}$ は p の定義式である $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p$ を $\dot{q}$ について解いたものである。3 つ目がハミルトンヤコビの方程式

$$H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

である。これから

$$\frac{\partial S}{\partial q} = p \qquad \frac{\partial S}{\partial \alpha} = \beta$$

を使って q, p を求めるわけである。ラグランジュ方程式や正準方程式というのは一種の手続きを表しているのであって、どんな系でもこの手続を踏めばニュートンの運動方程式と同等な方程式が得られるということである。例えば直交座標でのラグランジュ方程式は

$$F_i = m\ddot{x}_i$$

となるのだが、これはいわゆる直交座標でのニュートンの運動方程式である。

ラグランジュ方程式というのは系の状態を q と $\dot{q}$ で指定し、正準方程式というのは q と p で指定し、ハミルトンヤコビの方程式では q と α を指定していると言える。その変数の関係は

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p \qquad \frac{\partial S}{\partial q} = p$$

という式で結ばれている。

変分法を使ってニュートンの運動方程式と同等な表現ができる。それは「実際の運動 $q(t)$ は、汎関数

$$I[q(t)] = \int L(q, \dot{q}, t)dt$$

の停留関数である」というものである。また、「実際の運動 $q(t), p(t)$ は、汎関数

$$I[q(t), p(t)] = \int \sum p\dot{q} - H(q, p, t)dt$$

の停留関数である」という言い方もある。これなども単純な法則を複雑な言い方に変えたものと言える。

索引