

解析力学 (6) ・ Hamilton-Jacobi 方程式

幾何学的視点から

緒方秀教

電気通信大学大学院 情報・ネットワーク工学専攻

January 22, 2022

はじめに

Hamilton の原理

物理系は**作用**を停留にするような軌道を運動する.

$$\delta S = 0, \quad S := \int L dt \quad \text{作用}$$

($L := T - U$ Lagrangian).

抽象的存在であった**作用**の正体を明らかにする.

- Hamilton-Jacobi 方程式：作用が満たす偏微分方程式。
→ 運動方程式の解，作用の役割。
- 波動現象との類似 → 量子力学。

今回の予定

- ① はじめに
- ② 作用関数～Hamilton-Jacobi 方程式
- ③ Hamilton-Jacobi 方程式
- ④ 具体例
- ⑤ 量子力学への道
- ⑥ まとめ
- ⑦ 補遺

今回の予定

- ① はじめに
- ② 作用関数～Hamilton-Jacobi 方程式
- ③ Hamilton-Jacobi 方程式
- ④ 具体例
- ⑤ 量子力学への道
- ⑥ まとめ
- ⑦ 補遺

作用関数～Hamilton-Jacobi 方程式

$q = (q^1, \dots, q^N)$: 一般座標, $p = (p_1, \dots, p_N)$: 運動量, $H = H(q, p, t)$: Hamiltonian.

Hamilton の原理

始点 (t_I, q_I) , 終点 (t_F, q_F) を結ぶ実際の物理系の軌道は, 作用

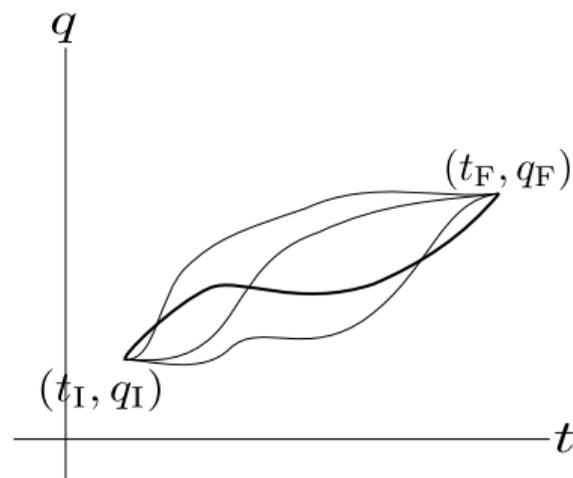
$$S[\text{path}] = \int_{t_I(\text{path})}^{t_F} [p_\alpha \dot{q}^\alpha - H(q, p, t)] dt$$

を停留にするものである.

$$\delta S = 0 \quad \text{s.t.} \quad q(t_I) = q_I, \quad q(t_F) = q_F.$$

↓

$$\text{正準方程式} \quad \frac{dq^\alpha}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \quad \frac{dp_\alpha}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q^\alpha}.$$



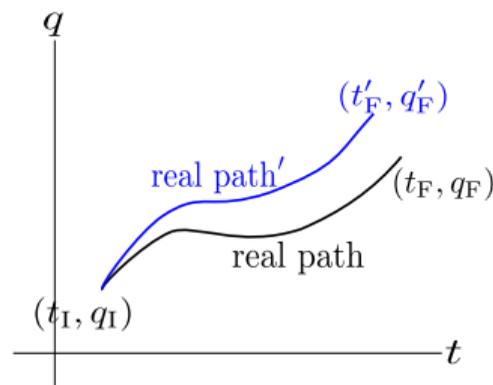
作用関数～Hamilton-Jacobi 方程式

作用関数 $S(t_F, q_F)$

- 始点 (t_I, q_I) : 任意にとって固定.
- 終点 (t_F, q_F) を与えて, $(t_I, q_I), (t_F, q_F)$ を結ぶ経路が物理系の実際の運動経路をとるときの作用 S の値を作用関数 $S(t_F, q_F)$ ((t_F, q_F) の関数) とする.

$$S(q_F, t_F) = S(q_F^1, \dots, q_F^N, t)$$

$$:= \int_{t_I(\text{real path})}^{t_F} [p_\alpha \dot{q}^\alpha - H(q, p, t)] dt.$$



作用関数～Hamilton-Jacobi 方程式

$$S(q_F, t_F) = S(q_F^1, \dots, q_F^N, t)$$

$$:= \int_{t_I}^{t_F} [p_\alpha \dot{q}^\alpha - H(q, p, t)] dt.$$

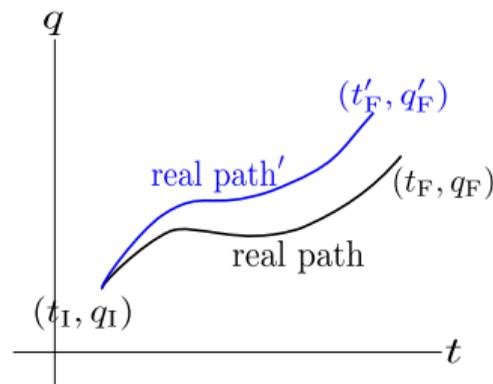
$(q_F, t_F) \rightarrow (q, t)$ とする。

運動量 p_α , Hamiltonian H は作用関数 $S(q, t)$ を用いて次で与えられる。

$$p_\alpha = \frac{\partial S(q, t)}{\partial q^\alpha}, \quad H = -\frac{\partial S(q, t)}{\partial t}.$$

$S = \int p_\alpha dq^\alpha - H dt$ から何となくわかる。

ちゃんとした証明は PC スライド末尾の「補遺」へ (概要欄の URL にアクセス)。



作用関数～Hamilton-Jacobi 方程式

$(q_F, t_F) \rightarrow (q, t) = (q^1, \dots, q^N, t)$ と書くことにする.

$$p_\alpha = \frac{\partial S(q, t)}{\partial q^\alpha}, \quad H = -\frac{\partial S(q, t)}{\partial t}.$$

$H = H(q, p, t)$ に $p_\alpha = \frac{\partial S}{\partial q^\alpha}$ を代入して,

作用関数～Hamilton-Jacobi 方程式

$(q_F, t_F) \rightarrow (q, t) = (q^1, \dots, q^N, t)$ と書くことにする.

$$p_\alpha = \frac{\partial S(q, t)}{\partial q^\alpha}, \quad H = -\frac{\partial S(q, t)}{\partial t}.$$

$H = H(q, p, t)$ に $p_\alpha = \frac{\partial S}{\partial q^\alpha}$ を代入して,

Hamilton-Jacobi 方程式

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) = \frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q^1, \dots, q^N, \frac{\partial S}{\partial q^1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q^N}, t\right) = 0.$$

解 $S = S(q^1, \dots, q^N, t)$: Hamilton の主関数.

今回の予定

- ① はじめに
- ② 作用関数～Hamilton-Jacobi 方程式
- ③ Hamilton-Jacobi 方程式**
- ④ 具体例
- ⑤ 量子力学への道
- ⑥ まとめ
- ⑦ 補遺

Hamilton-Jacobi 方程式

Hamilton-Jacobi 方程式

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) = \frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q^1, \dots, q^N, \frac{\partial S}{\partial q^1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q^N}, t\right) = 0.$$

- $(N + 1)$ 変数 (q^1, \dots, q^N, t) の 1 階偏微分方程式
→ $(N + 1)$ 個の任意定数を含む。
- そのうち 1 つは $S + c$ の形で現れる。→ 以後省略。
- 解 S は N 個の任意定数 a_1, \dots, a_N を含む。... 完全解

$$S = S(q, t, a) = S(q^1, \dots, q^N, t, a_1, \dots, a_N).$$

* $\det \left[\frac{\partial^2 S}{\partial q^\alpha \partial a_\beta} \right] \neq 0$ も要請する。

Hamilton-Jacobi 方程式

$$\frac{\partial S}{\partial a_\mu} \quad (\mu = 1, \dots, N) \text{ は保存量である.}$$

$\therefore \partial S / \partial a_\mu$ の時間微分を計算する.

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial S}{\partial a_\mu} \right) = \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial a_\mu} + \frac{dq^\kappa}{dt} \frac{\partial^2 S}{\partial q^\kappa \partial a_\mu}.$$

一方, Hamilton-Jacobi 方程式 $\frac{\partial S}{\partial t} + H \left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t \right) = 0$ の両辺を a_μ で微分して,

$$0 = \frac{\partial S}{\partial t \partial a_\mu} + \frac{\partial H}{\partial p_\kappa} \frac{\partial^2 S}{\partial q^\kappa \partial a_\mu}$$

を得る. 両者から赤字を消去して,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial S}{\partial a_\mu} \right) = \frac{\partial^2 S}{\partial q^\kappa \partial a_\mu} \left(\frac{dq^\kappa}{dt} - \frac{\partial H}{\partial p_\kappa} \right).$$

ゆえに, 正準方程式の解に沿って $\partial S / \partial a_\mu$ は保存する. ■

Hamilton-Jacobi 方程式

Hamilton-Jacobi 方程式の解から運動を求める

$$\frac{\partial S(q, t, a)}{\partial a_\mu} = b^\mu \text{ (const.)} \quad (\mu = 1, \dots, N) \quad \rightarrow \quad \text{時間発展,} \quad (1)$$

$$\frac{\partial S(q, t, a)}{\partial q^\mu} = p_\mu \quad (\mu = 1, \dots, N) \quad \rightarrow \quad \text{相空間内の解軌道.} \quad (2)$$

Jacobi の定理

(1), (2) から得られる $q^\alpha = q^\alpha(t, a, b)$, $p_\alpha = p_\alpha(t, a, b)$ は実際に Hamilton 正準方程式の解である.

Hamilton-Jacobi 方程式

Hamiltonian が時刻 t を陽に含まない場合.

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

変数分離: $S = T(t) + W(q) = T(t) + W(q^1, \dots, q^N)$.

$$\underbrace{\frac{dT}{dt}}_{(1)} + \underbrace{H\left(q, \frac{\partial W(q)}{\partial q}\right)}_{(2)} = 0.$$

(1) t のみの関数, (2) q^1, \dots, q^N のみの関数 $\rightarrow -(1) = (2) \equiv E$ (const.).

$$\begin{cases} \frac{dT}{dt} = -E & \rightarrow T(t) = -Et, \\ H\left(q, \frac{\partial W(q)}{\partial q}\right) = E. \end{cases}$$

Hamilton-Jacobi 方程式

$$H\left(q, \frac{\partial W(q)}{\partial q}\right) = H\left(q^1, \dots, q^N, \frac{\partial W}{\partial q^1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q^N}\right) = E.$$

N 変数 (q^1, \dots, q^N) の 1 階偏微分方程式. \rightarrow 解 W は N 個の任意定数 a_1, \dots, a_N を含む.

$$\begin{aligned} W &= W(q, a) = W(q^1, \dots, q^N, a_1, \dots, a_N), \\ S &= -Et + W(q^1, \dots, q^N, a_1, \dots, a_N). \end{aligned}$$

ところが, HJ 方程式の解 S に含まれる任意定数は N 個だけなので,

$(N+1)$ 個の定数 a_1, \dots, a_N, E は独立でない.

よって, E は a_1, \dots, a_N の関数となるはず.

$$\begin{aligned} E &= E(a_1, \dots, a_N), \\ S &= W(q, a) - E(a)t. \end{aligned}$$

Hamilton-Jacobi 方程式

Hamilton-Jacobi 方程式により運動を求める (H は t を含まない)

Hamilton-Jacobi 方程式

$$H\left(q, \frac{\partial W}{\partial q}\right) = H\left(q^1, \dots, q^N, \frac{\partial W}{\partial q^1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q^N}\right) = E \quad (\text{const.}),$$

完全解 $W(q, a) = W(q^1, \dots, q^N, a_1, \dots, a_N) \quad \left(a_1, \dots, a_N \text{ 任意定数, } \det \left[\frac{\partial^2 W}{\partial q^\alpha \partial a_\beta} \right] \neq 0 \right).$

- $E = E(a) = E(a_1, \dots, a_N).$
- $\frac{\partial W(q, a)}{\partial a_\alpha} = \frac{\partial E(a)}{\partial a_\alpha} t + b_\alpha \quad (b_\alpha : \text{const.}) \quad (\alpha = 1, \dots, N) \rightarrow$ 物理系の時間発展.
- $\frac{\partial W(q, a)}{\partial q^\alpha} = p_\alpha \quad (\alpha = 1, \dots, N) \rightarrow$ 相空間内の軌道.

今回の内容

- ① はじめに
- ② 作用関数～Hamilton-Jacobi 方程式
- ③ Hamilton-Jacobi 方程式
- ④ 具体例**
- ⑤ 量子力学への道
- ⑥ まとめ
- ⑦ 補遺

具体例

Hamilton-Jacobi 方程式は意外に「解ける」.

具体例：自由粒子

1 粒子の自由運動

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

Hamilton-Jacobi 方程式 $\frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z} \right)^2 \right\} = E \quad (\text{const.}).$

具体例：自由粒子

1 粒子の自由運動

$$\text{Hamiltonian } H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2).$$

$$\text{Hamilton-Jacobi 方程式 } \frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z} \right)^2 \right\} = E \quad (\text{const.}).$$

変数分離により解く： $W(x, y, z) = X(x) + Y(y) + Z(z)$.

$$\underbrace{\left(\frac{dX}{dx} \right)^2}_{(1)} + \underbrace{\left(\frac{dY}{dy} \right)^2}_{(2)} + \underbrace{\left(\frac{dZ}{dz} \right)^2}_{(3)} = 2mE \quad (\text{const.}).$$

(1) x のみの関数, (2) y のみの関数, (3) z のみの関数.

\therefore (1), (2), (3) は各々定数関数である.

具体例：自由粒子

(1 粒子の自由運動・続)

$$\frac{dX}{dx} = a_x, \quad \frac{dY}{dy} = a_y, \quad \frac{dZ}{dz} = a_z \quad (a_x, a_y, a_z : \text{const.}),$$

$$X(x) = a_x x, \quad Y(y) = a_y y, \quad Z(z) = a_z z, \quad E = E(a) = \frac{1}{2m}(a_x^2 + a_y^2 + a_z^2).$$

$$\begin{aligned} \therefore W(x, y, z, a_x, a_y, a_z) &= a_x x + a_y y + a_z z \\ (S(x, y, z, t, a_x, a_y, a_z) &= a_x x + a_y y + a_z z - E(a)t). \end{aligned}$$

具体例：自由粒子

(1 粒子の自由運動・続)

$$\frac{dX}{dx} = a_x, \quad \frac{dY}{dy} = a_y, \quad \frac{dZ}{dz} = a_z \quad (a_x, a_y, a_z : \text{const.}),$$

$$X(x) = a_x x, \quad Y(y) = a_y y, \quad Z(z) = a_z z, \quad E = E(a) = \frac{1}{2m}(a_x^2 + a_y^2 + a_z^2).$$

$$\begin{aligned} \therefore W(x, y, z, a_x, a_y, a_z) &= a_x x + a_y y + a_z z \\ (S(x, y, z, t, a_x, a_y, a_z) &= a_x x + a_y y + a_z z - E(a)t). \end{aligned}$$

物理系の時間発展.

$$\frac{\partial W}{\partial a_x} = \frac{\partial E(a)}{\partial a_x} t + b_x \quad (b_x \text{ const.}), \quad \rightarrow \quad x = \frac{a_x}{m} t + b_x.$$

同様に $y = \frac{a_y}{m} t + b_y, \quad z = \frac{a_z}{m} t + b_z \quad (b_y, b_z \text{ const.})$ 等速直線運動.

相空間内の軌道

$$\frac{\partial W}{\partial x} = p_x \quad \rightarrow \quad p_x = a_x. \quad \text{同様に,} \quad p_y = a_y, \quad p_z = a_z.$$

具体例：一次元調和振動子

一次元調和振動子

Hamiltonian $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2.$

Hamilton-Jacobi 方程式 $\frac{1}{2m} \left(\frac{dW}{dq} \right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = E \quad (\text{const.}).$

具体例：一次元調和振動子

一次元調和振動子

$$\text{Hamiltonian } H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2.$$

$$\text{Hamilton-Jacobi 方程式 } \frac{1}{2m} \left(\frac{dW}{dq} \right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = E \quad (\text{const.}).$$

これは不定積分により解 $W(q)$ が求まる.

$$W(q) = W(q, E) = \pm \int_{q_0}^q \sqrt{2mE - (m\omega)^2 q^2} dq \quad (q_0 : \text{const.})$$

$$\left(S(q, t) = \pm \int_{q_0}^q \sqrt{2mE - (m\omega)^2 q^2} dq - Et \right).$$

* 任意定数 $a_1 = E$ としている.

具体例：一次元調和振動子

時間発展： $\frac{\partial W}{\partial E} = t + \text{const.}$ より求める。

$$\frac{\partial W}{\partial E} = \pm \int_{q_0}^q \sqrt{\frac{m}{2E - m\omega^2 q^2}} dq = \pm \frac{1}{\omega} \arcsin \left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}} q \right),$$

$$\therefore q = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sin(\omega t + \theta_0) \quad (\theta_0 : \text{const.}).$$

具体例：一次元調和振動子

時間発展： $\frac{\partial W}{\partial E} = t + \text{const.}$ より求める。

$$\frac{\partial W}{\partial E} = \pm \int_{q_0}^q \sqrt{\frac{m}{2E - m\omega^2 q^2}} dq = \pm \frac{1}{\omega} \arcsin \left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}} q \right),$$

$$\therefore q = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sin(\omega t + \theta_0) \quad (\theta_0 : \text{const.}).$$

相空間内の解軌道： $\frac{\partial W}{\partial q} = p$ より求める。

$$\frac{\partial W}{\partial q} = \pm \sqrt{2mE - (m\omega)^2 q^2},$$

$$\therefore \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 = E \quad \text{エネルギー保存則.}$$

具体例：一次元運動

空間一次元問題の場合，Hamilton-Jacobi 方程式を解いて解を求めることは，エネルギー保存則の式から解を求めることと同じである。

Hamilton-Jacobi 方程式

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dW}{dq} \right)^2 + U(q) = E,$$

$$W(q, E) = \pm \int \sqrt{2m(E - U(q))} dx,$$

$$\frac{\partial W}{\partial E} = \pm \int \sqrt{\frac{m/2}{E - U(q)}} dq = t + t_0.$$

エネルギー保存則から解を求める。

$$\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 + U(q) = E,$$

$$\frac{dq}{dt} = \pm \sqrt{\frac{2}{m}(E - U(q))},$$

$$\int \sqrt{\frac{m/2}{E - U(q)}} dq = \pm(t + t_0).$$

Hamilton-Jacobi 方程式による解法は，一次元の場合にエネルギー保存則から解を求める方法を一般化したものか？

具体例：Kepler 問題

Kepler 問題：中心力を受ける一粒子二次元運動

$$\text{Hamiltonian } H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r).$$

$$\text{Hamilton-Jacobi 方程式 } \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{2mr^2} \left(\frac{\partial W}{\partial \theta} \right)^2 + V(r) = E \quad (\text{const.}).$$

具体例：Kepler 問題

Kepler 問題：中心力を受ける一粒子二次元運動

$$\text{Hamiltonian } H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r).$$

$$\text{Hamilton-Jacobi 方程式 } \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{2mr^2} \left(\frac{\partial W}{\partial \theta} \right)^2 + V(r) = E \quad (\text{const.}).$$

変数分離： $W(r, \theta) = R(r) + \Theta(\theta)$ を行う。

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dR}{dr} \right)^2 + \frac{1}{2mr^2} \left(\frac{d\Theta}{d\theta} \right)^2 + V(r) = E,$$

$$\underbrace{\left(\frac{d\Theta}{d\theta} \right)^2}_{(1)} = \underbrace{2mr^2(E - V(r)) - r^2 \left(\frac{dR}{dr} \right)^2}_{(2)}.$$

(1)： θ だけの関数，(2)： r だけの関数 \rightarrow 両辺 $\equiv \text{const.} (= a_\theta^2)$.

具体例：Kepler 問題

$$\begin{cases} \frac{d\Theta}{d\theta} = a_\theta & \rightarrow \Theta(\theta) = a_\theta\theta, \\ \frac{dR}{dr} = \pm \sqrt{2m(E - V(r)) - \frac{a_\theta^2}{r^2}}, \end{cases}$$

$$R(r) = \pm \int \sqrt{2m(E - V(r)) - \frac{a_\theta^2}{r^2}} dr,$$

$$\therefore W(r, \theta) = \pm \int \sqrt{2m(E - V(r)) - \frac{a_\theta^2}{r^2}} dr + a_\theta\theta.$$

時間発展& 相空間内の解軌道を求める式.

$$\frac{\partial W}{\partial E} = t + b_r, \quad \frac{\partial W}{\partial a_\theta} = b_\theta, \quad \frac{\partial W}{\partial q} = p_r, \quad \frac{\partial W}{\partial \theta} = p_\theta \quad (b_r, b_\theta : \text{const.}).$$

具体例：Kepler 問題

$$\frac{\partial W}{\partial a_\theta} = \text{const. より}$$

(r, θ) -平面内の軌道を与える式

$$\pm \int \frac{a_\theta}{\sqrt{2m(E - V(r)) - a_\theta^2/r^2}} \frac{dr}{r^2} = \theta + \theta_0 \quad (\theta_0 : \text{const.}).$$

具体例：Kepler 問題

$$\frac{\partial W}{\partial a_\theta} = \text{const. より}$$

(r, θ) -平面内の軌道を与える式

$$\pm \int \frac{a_\theta}{\sqrt{2m(E - V(r)) - a_\theta^2/r^2}} \frac{dr}{r^2} = \theta + \theta_0 \quad (\theta_0 : \text{const.}).$$

以降，具体的なポテンシャル $V(r)$ について解軌道を求める。

Kepler 問題（惑星の公転）

$$V(r) = -\frac{\gamma}{r} \quad (\gamma > 0 \text{ const.}).$$

$$\pm \int \frac{a_\theta}{\sqrt{2m(E + \gamma/r) - a_\theta^2/r^2}} \frac{dr}{r^2} = \theta + \theta_0.$$

具体例：Kepler 問題

$r = 1/u$ と変換すると,

$$-\int \frac{a_\theta}{\sqrt{2m(E + \gamma/r) - a_\theta^2/r^2}} \frac{dr}{r^2} = \int \frac{a_\theta du}{\sqrt{2mE + 2m\gamma u - a_\theta^2 u^2}}. \quad (3)$$

$E = -|E| < 0$ の場合 (楕円軌道を描く),

$$(3) = \arcsin \left[\frac{a_\theta^2 u - m\gamma}{\sqrt{(m\gamma)^2 - 2ma_\theta^2 |E|}} \right] = \theta + \theta_0.$$

具体例：Kepler 問題

$r = 1/u$ と変換すると,

$$-\int \frac{a_\theta}{\sqrt{2m(E + \gamma/r) - a_\theta^2/r^2}} \frac{dr}{r^2} = \int \frac{a_\theta du}{\sqrt{2mE + 2m\gamma u - a_\theta^2 u^2}}. \quad (3)$$

$E = -|E| < 0$ の場合 (楕円軌道を描く),

$$(3) = \arcsin \left[\frac{a_\theta^2 u - m\gamma}{\sqrt{(m\gamma)^2 - 2ma_\theta^2 |E|}} \right] = \theta + \theta_0.$$

Kepler 問題の解軌道 (楕円軌道)

$$r = \frac{r_0}{1 + \epsilon \sin(\theta + \theta_0)}, \quad r_0 = \frac{a_\theta^2}{m\gamma}, \quad \epsilon = \sqrt{1 - \frac{2a_\theta^2 |E|}{m\gamma^2}}. \quad \theta_0 : \text{const.}$$

上の式が楕円軌道を表すことについては「補遺」参照.

具体例：Kepler 問題

【時間発展】

$\frac{\partial W}{\partial a_\theta} = b_\theta$ (const.) より時間発展を得る．結果は次の通り（詳細は「補遺」参照）：

$$(\pm) \sqrt{\frac{m}{\gamma}} a^{3/2} (u - \epsilon \sin u) = t + b_\theta,$$

ここで，

$$r = a(1 - \epsilon \cos u), \quad a = \frac{\gamma}{2|E|}, \quad \epsilon = \sqrt{1 - \frac{2|E|a_\theta^2}{m\gamma^2}}, \quad b_\theta : \text{const.}$$

$$\text{公転周期 } T = 2\pi a^{3/2} \sqrt{\frac{m}{\gamma}}.$$

今回の内容

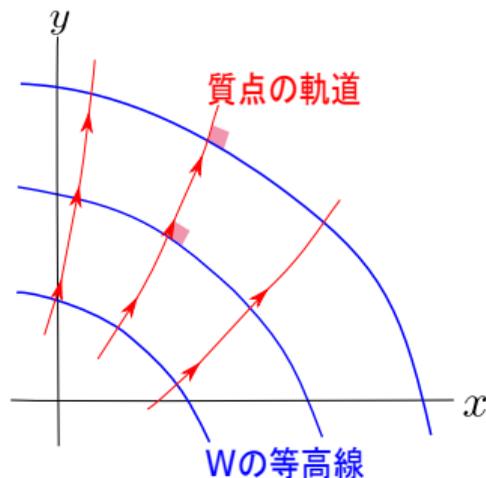
- ① はじめに
- ② 作用関数～Hamilton-Jacobi 方程式
- ③ Hamilton-Jacobi 方程式
- ④ 具体例
- ⑤ 量子力学への道**
- ⑥ まとめ
- ⑦ 補遺

量子力学への道

H-J 方程式の解 W の図形的意味

一粒子の三次元運動, $N = 3$, $(q^1, q^2, q^3) = (x, y, z)$ (直交座標)

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} = \nabla W = \left(\frac{\partial W}{\partial x}, \frac{\partial W}{\partial y}, \frac{\partial W}{\partial z} \right).$$



H-J 方程式の解 W :

- 様々な初期条件から出発する粒子の集まりを考えた時, その集団が時間の経過に伴いどのように変化するのを示したもの.
- W の等高線: **波動現象の波面** に似ている.

(参考) 幾何光学との類似 \rightarrow 量子力学.

山本義隆・中村孔一「解析力学 II」(朝倉書店, 1998 年).

量子力学への道

波動現象との類似 → 量子力学への道.

量子力学への道

量子力学：ミクロな世界（原子，分子，…）をつかさどる物理学．

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

量子力学への道

量子力学：ミクロな世界（原子，分子，…）をつかさどる物理学。

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

粒子性 \leftrightarrow 波動性（様々な現象から得られた結果）

$$\text{運動量 } p = \hbar k, \quad k \text{ 波数 } \left(k = \frac{2\pi}{\lambda}, \lambda \text{ 波長} \right),$$

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

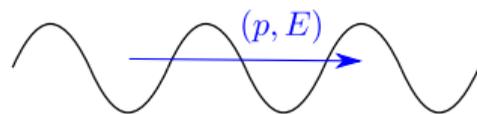
$$\hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad h = 6.62607015 \times 10^{-34} \text{m}^2\text{kg/s} \quad \text{Planck 定数.}$$

量子力学への道

一次元自由粒子の波動関数は平面波であるとする

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

$px - Et$: 自由粒子の作用関数.



量子力学への道

任意のポテンシャル $U(x, t)$ のもとにある粒子の波動関数は？

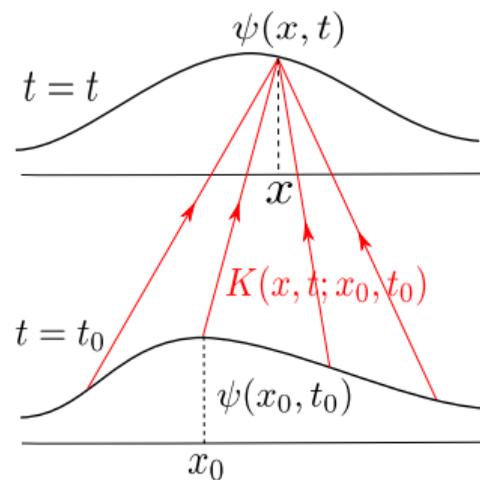
波動関数

- 時刻 t_0 で $\psi(x, t_0)$.
- 時刻 $t (> t_0)$ で $\psi(x, t)$.

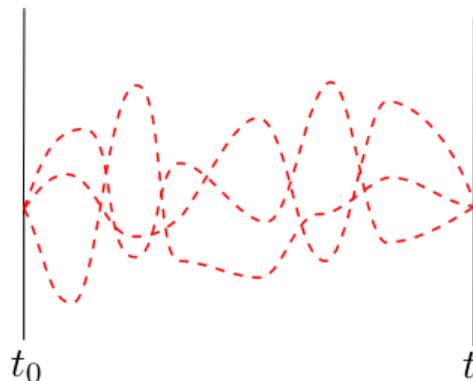
$\psi(x, t)$ は次のように表されると仮定してみる（波の重ね合わせ）.

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x, t; x_0, t_0) \psi(x_0, t_0) dx_0.$$

伝搬関数 $K(x, t; x_0, t_0)$ はどうなるか？



量子力学への道



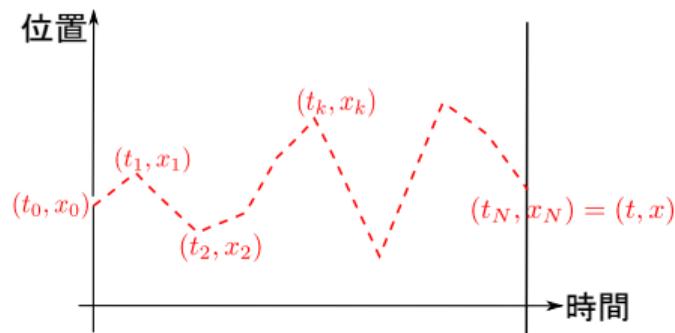
始点・終点を結ぶ**すべての経路**を粒子波は「**平等に**」通過するとしてみる.

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x, t; x_0, t_0) \psi(x_0, t_0) dx_0,$$

伝搬関数 $K(x, t; x_0, t_0) = \sum_{\text{path}} K[\text{path}]$ **すべての経路が寄与する.**

量子力学への道

一つの経路に沿う波動関数 $K[\text{path}]$ を求める。



- 経路を細分する。

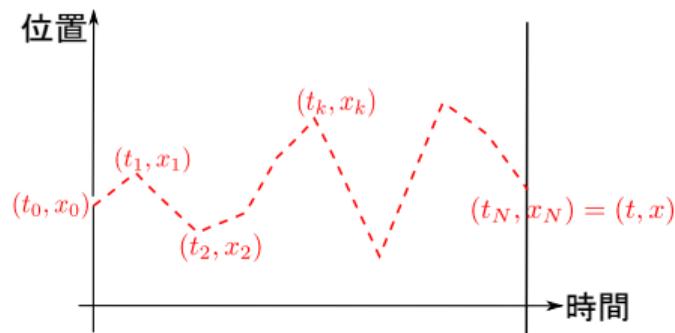
$$t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_k < \cdots < t_N = t, \quad x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_k < \cdots < x_N = x.$$

- 各微小経路 $(t_k, x_k) \sim (t_{k+1}, x_{k+1})$ 上では運動量・エネルギーは一定値 (p_k, E_k) と見なせるから、**平面波**で波動が伝搬すると考えられる。

$$C \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_k \Delta x_k - E_k \Delta t_k) \right] \quad (\Delta x_k = x_{k+1} - x_k, \Delta t_k = t_{k+1} - t_k).$$

量子力学への道

一つの経路に沿う波動関数 $K[\text{path}]$ を求める。



- 経路を細分する。

$$t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_k < \cdots < t_N = t, \quad x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_k < \cdots < x_N = x.$$

- 各微小経路 $(t_k, x_k) \sim (t_{k+1}, x_{k+1})$ 上では運動量・エネルギーは一定値 (p_k, E_k) と見なせるから、**平面波**で波動が伝搬すると考えられる。

$$C \exp \left[\frac{i}{\hbar} \Delta S_k \right], \quad \Delta S_k = p_k \Delta x_k - E_k \Delta t_k \quad \text{微小な作用.}$$

量子力学への道

一つの経路の寄与は

$$\begin{aligned} K[\text{path}] &= C \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Delta S_0\right) C \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Delta S_1\right) \cdots C \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Delta S_{N-1}\right) \\ &= C^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta S_k\right) \\ &= C^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\text{path}]\right). \end{aligned}$$

量子力学への道

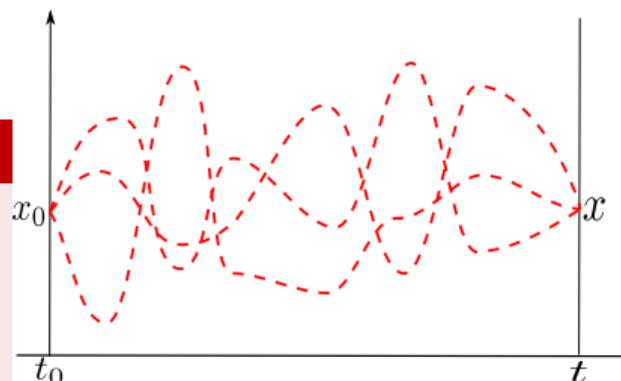
一つの経路の寄与は

$$\begin{aligned}
 K[\text{path}] &= C \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Delta S_0\right) C \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Delta S_1\right) \cdots C \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Delta S_{N-1}\right) \\
 &= C^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta S_k\right) \\
 &= C^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\text{path}]\right).
 \end{aligned}$$

すべての経路に沿う波動関数を足し合わせたものが伝搬関数になる。

Feynman 経路積分

$$K(x, t; x_0, t_0) = \sum_{\text{path}} C^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\text{path}]\right).$$

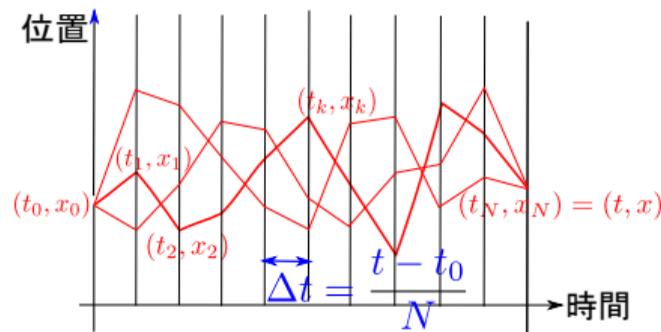


量子力学への道

Feynman 経路積分を具体的に数式で表す.

$$K(x, t; x_0, t_0) = \sum_{\text{path}} C^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\text{path}]\right)$$

$$= \sum_{\text{path}} C^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t_k \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t_k}\right)^2 - U(x_k, t_k) \right]\right).$$



すべての経路についての和 = すべての x_k ($k = 1, 2, \dots, N - 1$) についての和 (積分) .

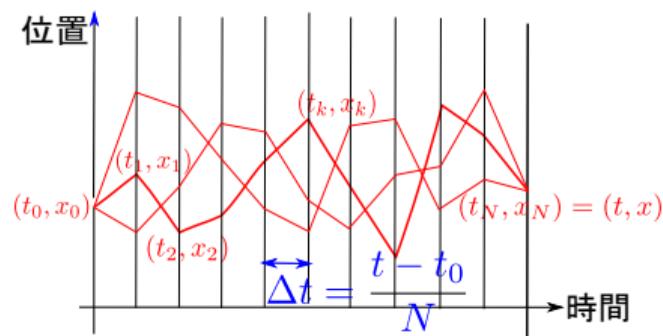
$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} C^N \prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t}\right)^2 - U(x_k, t_k) \right]\right).$$

量子力学への道

Feynman 経路積分を具体的に数式で表す。

$$K(x, t; x_0, t_0) = \sum_{\text{path}} C^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\text{path}]\right)$$

$$= \sum_{\text{path}} C^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t_k \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t_k}\right)^2 - U(x_k, t_k) \right]\right).$$



すべての経路についての和 = すべての x_k ($k = 1, 2, \dots, N-1$) についての和 (積分)。

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 K(x, t; x_0, t_0) \psi(x_0, t_0)$$

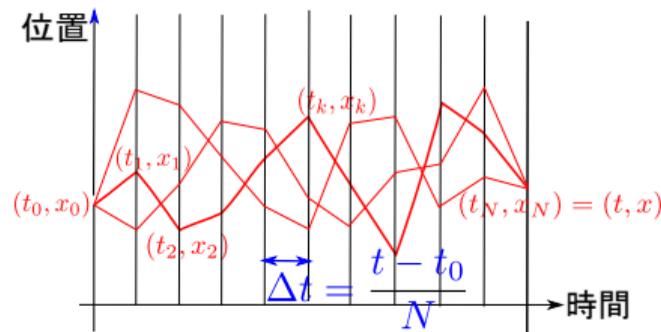
$$= \lim_{N \rightarrow \infty} C^N \prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t}\right)^2 - U(x_k, t_k) \right]\right) \psi(x_0, t_0).$$

量子力学への道

Feynman 経路積分を具体的に数式で表す.

$$K(x, t; x_0, t_0) = \sum_{\text{path}} C^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\text{path}]\right)$$

$$= \sum_{\text{path}} C^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t_k \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t_k}\right)^2 - U(x_k, t_k) \right]\right).$$



すべての経路についての和 = すべての x_k ($k = 1, 2, \dots, N - 1$) についての和 (積分).

$$\psi(x, t) = \int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 - U(x, \tau) \right]\right) \psi(x_0, t_0).$$

量子力学への道

波動関数の経路積分表示

$$\psi(x, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} C^N \prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t} \right)^2 - U(x_k, t_k) \right] \right) \psi(x_0, t_0).$$

この波動関数表示から Schrödinger 方程式を導出する（同時に、規格化因子 C を決定する）。

量子力学への道

波動関数の経路積分表示

$$\psi(x, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} C^N \prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t} \right)^2 - U(x_k, t_k) \right] \right) \psi(x_0, t_0).$$

この波動関数表示から Schrödinger 方程式を導出する（同時に、規格化因子 C を決定する）。

$(t_0, x_0) \sim (t_1, x_1)$ の差分に着目する。

$$\begin{aligned} \psi(x_1, t_1) &= \psi(x_0 + \Delta x_0, t_0 + \Delta t) \\ &= C \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \exp \left(\frac{i}{\hbar} \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta x_0}{\Delta t} \right)^2 - U(x_0, t_0) \right] \right) \psi(x_0, t_0) \end{aligned}$$

$\Delta x_0 / \Delta t =$ 有限値 としつつ極限 $\Delta t \rightarrow 0$ とするので、

$$\Delta x_0 = x_1 - x_0 = \Delta t \cdot \eta$$

と変数変換する。

量子力学への道

$$\begin{aligned}\psi(x_1, t_0 + \Delta t) &= C \Delta t \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left(i \left[\frac{m\Delta t}{2\hbar} \eta^2 - \frac{\Delta t}{\hbar} U(x_1 - \Delta t\eta, t_0) \right]\right) \psi(x_1 - \Delta t\eta, t_0) \\ &\simeq C \Delta t \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left(i \frac{m\Delta t}{2\hbar} \eta^2\right) \left[1 - i \frac{\Delta t}{\hbar} U(x_1 - \Delta t\eta, t_0) \right] \\ &\quad \times \left[\psi(x_1, t_0) - \Delta t\eta \frac{\partial}{\partial x_1} \psi(x_1, t_0) + \frac{(\Delta t\eta)^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \psi(x_1, t_0) + \dots \right]\end{aligned}$$

(青字の積分を実行して)

$$= C \left(\frac{2\pi i \hbar \Delta t}{m} \right)^{1/2} \{ \psi(x_1, t_0) + O(\Delta t) \}.$$

$\Delta t \rightarrow 0$ のとき 両辺 $\rightarrow \psi(x_1, t_0)$ となるから、規格化因子 C が次のように定まる。

$$C = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{1/2}.$$

量子力学への道

$$\begin{aligned}
\psi(x_1, t_0 + \Delta t) &= \underbrace{\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left(i\frac{m\Delta t}{2\hbar}\eta^2\right)}_1 \left[1 - i\frac{\Delta t}{\hbar}U(x_1 - \Delta t\eta, t_0)\right] \psi(x_1, t_0) \\
&\quad - \underbrace{\Delta t \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \eta \exp\left(i\frac{m\Delta t}{2\hbar}\eta^2\right)}_0 \cdot \frac{\partial}{\partial x_1} \psi(x_1, t_0) \\
&\quad + \underbrace{\frac{(\Delta t)^2}{2} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \eta^2 \exp\left(i\frac{m\Delta t}{2\hbar}\eta^2\right)}_{i\hbar\Delta t/(2m)} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \psi(x_1, t_0) + O(\Delta t^2) \\
&= \left[1 - i\frac{\Delta t}{\hbar}U(x_1, t_0)\right] \psi(x_1, t_0) + \frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \psi(x_1, t_0) + O(\Delta t^2), \\
\therefore \frac{i\hbar}{\Delta t} [\psi(x_1, t_0 + \Delta t) - \psi(x_1, t_0)] &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \psi(x_1, t_0) + U(x_1, t_0)\psi(x_1, t_0) + O(\Delta t).
\end{aligned}$$

量子力学への道：古典極限

波動関数 ψ に対する Schrödinger 方程式

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

量子力学への道：古典極限

波動関数 ψ に対する Schrödinger 方程式

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

古典極限 ($\hbar \rightarrow 0$) $\psi(x, t) = C \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x, t) \right]$ と置いて Schrödinger 方程式に代入してみると,

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + U + \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0.$$

古典極限 ($\hbar \rightarrow 0$) では, Hamilton-Jacobi 方程式を再現する.

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + U + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

量子力学への道：古典極限

伝搬関数の経路積分表示.

$$K(x, t; x_0, t_0) = \sum_{\text{path}} C \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\text{path}]\right).$$

古典極限 $\hbar \rightarrow 0$ では、古典力学的軌道 ($\delta S = 0$ なる軌道) の寄与のみ残る.

$$K(x, t; x_0, t_0) \simeq C \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{\text{classical}}\right).$$

$\therefore \delta S \neq 0$ なる軌道 q 付近の寄与は

$$\sum_{\delta q} C \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q + \delta q]\right) \simeq \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q]\right) \sum_{\delta q} C \exp\left(\frac{i}{\hbar} \delta S[q]\right).$$

$\hbar \approx 0$ のとき、赤字部分は激しく振動する波の重ね合わせになってゼロになる.

したがって、 $\delta S = 0$ なる古典軌道付近の寄与のみ残る. ■

今回の内容

- ① はじめに
- ② 作用関数～Hamilton-Jacobi 方程式
- ③ Hamilton-Jacobi 方程式
- ④ 具体例
- ⑤ 量子力学への道
- ⑥ まとめ**
- ⑦ 補遺

まとめ

作用関数 $S = \int L dt$ の役割.

- Hamilton-Jacobi 方程式.
 - ▶ 作用関数に対する偏微分方程式.
 - ▶ 様々な初期値から出発する物理系群の振る舞いを記述.
- 量子力学.
 - ▶ 伝搬関数：経路積分 $\sum_{\text{path}} C \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\text{path}]\right)$.
 - ▶ Schrödinger 方程式.
 - ▶ 古典極限 ($\hbar \rightarrow 0$): 古典軌道 ($\delta S = 0$) に近いものが波動関数 (伝搬関数) に寄与.

補遺： $\partial S/\partial q = p, \partial S/\partial t = -H$ の証明

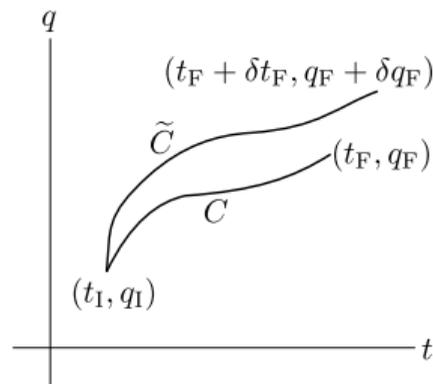
【証明】 経路を微小に動かした時の作用の変化を調べる。

- $C : (t_I, q_I), (t_F, q_F)$ を結ぶ実際の軌道.
- $\tilde{C} : (t_I, q_I), (t_F + \delta t_F, q_F + \delta q_F)$ を結ぶ実際の軌道.

$$\begin{aligned}
 S[\tilde{C}] - S[C] &= \int_{t_I(\tilde{C})}^{t_F + \Delta t_F} [(p_\alpha + \delta p_\alpha)(\dot{q}^\alpha + \delta \dot{q}^\alpha) - H(q + \delta q, p + \delta p, t)] dt \\
 &\quad - \int_{t_I(C)}^{t_F} [p_\alpha \dot{q}^\alpha - H(q, p, t)] dt \\
 &\simeq \int_{t_I(C)}^{t_F} \left[p_\alpha \delta \dot{q}^\alpha + \delta q^\alpha \dot{q}_\alpha - \frac{\partial H}{\partial q^\alpha} \delta q^\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \delta p_\alpha \right] dt
 \end{aligned}$$

(青字に部分積分を施す)

$$+ \int_{t_F}^{t_F + \delta t_F} [p_\alpha \dot{q}^\alpha - H(q, p, t)] dt$$



補遺： $\partial S/\partial q = p, \partial S/\partial t = -H$ の証明

$$\delta S = S[\tilde{C}] - S[C]$$

$$\simeq p_\alpha(t_F)\delta q^\alpha(t_F) - \int_{t_I(C)}^{t_F} \left[\underbrace{\left(\dot{p}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q^\alpha} \right)}_0 \delta q^\alpha - \underbrace{\left(\dot{q}^\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \right)}_0 \delta p_\alpha \right] dt$$

$$+ [p_\alpha \dot{q}^\alpha - H]_{t=t_F} \delta t_F$$

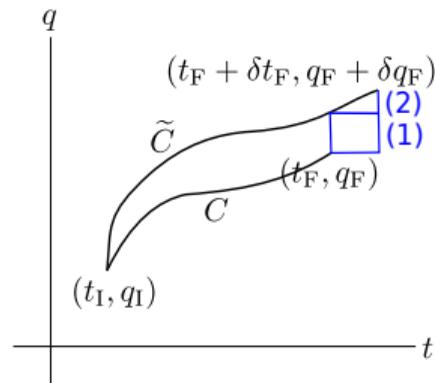
(C は実際の軌道だから正準方程式より赤字 = 0)

$$= p_\alpha(t_F) \left[\underbrace{\delta q^\alpha(t_F)}_{(1)} + \underbrace{\dot{q}^\alpha(t_F)\delta t_F}_{(2)} \right] - H(t_F)\delta t_F \quad (\text{右図参照})$$

$$= p_\alpha(t_F)\delta q_F^\alpha - H(t_F)\delta t_F.$$

$$\delta S = p_\alpha \delta q^\alpha - H \delta t_F,$$

$$\therefore p_\alpha = \frac{\partial S}{\partial q^\alpha}, \quad H_L = -\frac{\partial S}{\partial t}.$$



$$(1) = \delta q(t_F),$$

$$(2) \simeq \dot{q}(t_F)\delta t_F,$$

$$\delta q_F = (1) + (2).$$

補遺：Kepler 問題

* 次の式が楕円軌道を表すこと。

$$r = \frac{r_0}{1 + \epsilon \sin \theta} \quad (r_0 > 0, \epsilon (0 < \epsilon < 1) : \text{const.}).$$

∴

$$x = r \cos \theta = \frac{r_0 \cos \theta}{1 + \epsilon \sin \theta}, \quad y = r \sin \theta = \frac{r_0 \sin \theta}{1 + \epsilon \sin \theta}.$$

第 2 式より,

$$\sin \theta = \frac{y}{r_0 - \epsilon y}.$$

これを第 1 式右辺分母に代入して, 次を得る.

$$x = \cos \theta (r_0 - \epsilon y), \quad \cos \theta = \frac{x}{r_0 - \epsilon y}.$$

これらを $\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1$ に代入して θ を消去し, 整理すれば, 次の楕円の式を得る.

$$\frac{1 - \epsilon^2}{r_0^2} x^2 + \frac{(1 - \epsilon^2)^2}{r_0^2} \left(y + \frac{\epsilon r_0}{1 - \epsilon^2} \right)^2 = 1.$$

補遺：Kepler 問題

時間発展.

$$\frac{\partial W}{\partial a_\theta} = b_\theta \text{ より,}$$

$$\pm \int \frac{m dr}{\sqrt{-2m|E| + 2m\gamma r^{-1} - a_\theta^2 r^{-2}}} = t + b_\theta,$$

$$\pm \int \frac{\sqrt{m/2}}{\sqrt{|E|(r_1 - r)(r - r_0)}} dr = t + b_\theta, \quad r_1 = a(1 + \epsilon), \quad r_0 = a(1 - \epsilon), \quad a = \frac{\gamma}{2|E|}.$$

$$r = \frac{1}{2}(r_1 + r_0) - \frac{1}{2}(r_1 - r_0) \cos u = a(1 - \epsilon \cos u) \text{ と変数変換すると,}$$

$$\sqrt{\frac{m}{2|E|}} \int \frac{dr}{\sqrt{(r_1 - r)(r - r_0)}} = \sqrt{\frac{ma}{\gamma}} a(u - \epsilon \cos u),$$

補遺：Kepler 問題

時間発展.

時間発展

$$(\pm) \sqrt{\frac{m}{\gamma}} a^{3/2} (u - \epsilon \sin u) = t + b_\theta,$$

$$r = a(1 - \epsilon \cos u), \quad a = \frac{\gamma}{2|E|}, \quad \epsilon = \sqrt{1 - \frac{2|E|a_\theta^2}{m\gamma^2}}, \quad b_\theta : \text{const.}$$

補遺：Kepler 問題

時間発展.

時間発展

$$(\pm) \sqrt{\frac{m}{\gamma}} a^{3/2} (u - \epsilon \sin u) = t + b_\theta,$$

$$r = a(1 - \epsilon \cos u), \quad a = \frac{\gamma}{2|E|}, \quad \epsilon = \sqrt{1 - \frac{2|E|a_\theta^2}{m\gamma^2}}, \quad b_\theta : \text{const.}$$

公転周期 T : $u = 2\pi, t + b_\theta = T$ を代入して,

$$T = 2\pi a^{3/2} \sqrt{\frac{m}{\gamma}}.$$