

前回—非調和振動

非線形項 \Rightarrow 重ね合わせの原理が不成立、和と差の周波数(高調波)が出る

9 ハミルトニアン

9-1 オイラー・ラグランジュ方程式は確かに便利

オイラー・ラグランジュ方程式 = 座標系のとりかたによらず不変な形

\therefore —最小作用の原理だけから導いたから

例) デカルト座標: $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{y}}\right) - \frac{\partial L}{\partial y} = 0$

変数変換 $\begin{cases} x = r \cos \theta \\ y = r \sin \theta \end{cases} \longrightarrow r, \theta$ についても同じ形の方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\right) - \frac{\partial L}{\partial r} = 0, \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}}\right) - \frac{\partial L}{\partial \theta} = 0$$

\Leftrightarrow ニュートンの運動方程式ではそうは行かない。

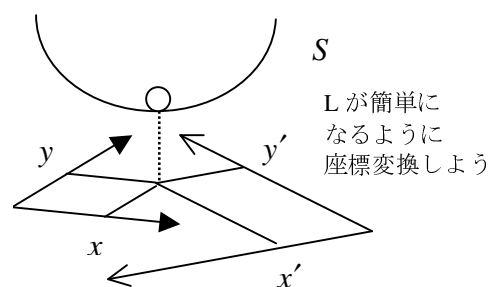
$\cdot \vec{f} = m\vec{a}$ はデカルト座標の時だけ。極座標にした途端に複雑化

9-2 なぜオイラー・ラグランジュ方程式が変数変換で不変か

もともとの原理—「作用積分が極値をとるような関数 L が存在するはず」

$\Rightarrow S$ の極値の値は座標の取り方によらない

異なる座標系では、極値を与える変数の値はもちろん異なる。
しかし極値そのものの値と、
図示したときの場所は同じ!



いかに「うまい」座標変換を行うか、が問題を解く鍵。

9-3 ラグランジアンの問題点

*二階微分方程式は解きにくい。← 一階は変数分離で解ける場合が多い

*二変数 q, \dot{q} について式の形が対称的でない $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$

*座標と運動量を混ぜる変換が許されない

座標変換を拡張して、 $x + p$ あるいは $q + \dot{q}$ なんかを新しい変数してみましょう。

実はこれをやってしまうと、さすがのオイラー・ラグランジュ方程式でもそのまま成り立つ、

というわけには行かなくなります。しかし、こういう変数変換 (Canonical 変換と言います)

を使ってはじめて解ける、という問題は山ほどあります。こちらは次回以降にやります。

実は、超伝導や強磁性も、この正準変換を駆使して理論的な解明が行われました。

9-4 Legendre 変換— L とは変数が違う新しい関数の導入

$L(q, \dot{q}) \dots q, \dot{q}$ が独立変数。

一般化運動量 $p \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ (L が q に対して一定なら、 p は保存)

Goal \dot{q} の代わりに p を独立変数に持つ関数 $H(q, p)$ を導入し、

この H が満たす運動方程式を探してみよう。

注) デカルト座標での運動量 $p = m\mathbf{v} \Rightarrow \mathbf{v}$ も p も同じことではないか?

答えはノー!! 二次元極座標では、すでに $L = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2)$ より、

$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}$ 及び $p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta}$ と自明ではない形。

9-5 座標から運動量への変数変換

$L \rightarrow H$ への変換では $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p$ を新しい変数にします。ただそれだけなら、単に代入すれば良いだけです。しかし、それだけではもったいないので、

$H \rightarrow L$ の逆変換もすぐに来るよう、 $\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}$ となるように H を定義するのです。

そんな上手い変換があるのでしょうか？

9-6 ルジャンドル変換の一般論〔数学です、ごめんなさい〕

$f(x, y)$ に対して、 $X = \frac{\partial f}{\partial x}(x, y)$ を新しい変数にしたものを $F(X, y)$ としますが、

その際、 $\frac{\partial F}{\partial X}(X, y) = x$ となるようにして置こうというわけです。

これには便法があって、

$$F(X, y) = Xx - f(x, y) \text{ と置けばよい}$$

のです。もちろん、 x は、 $X = \frac{\partial f}{\partial x}$ を使って消去して、全部 X にしてしまいます。

こんな F の定義で果たして $\frac{\partial F}{\partial X}(X, y) = x$ になっているのでしょうか？

〔証明〕 F の全微分は、 $dF = x dX + X dx - df$ です。

$$f \text{ の全微分は、} df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy = X dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy \text{ を代入すると、}$$

代入すると、 $dF = x dX - \frac{\partial f}{\partial y} dy$ ですから、確かに、独立変数は X, y になっていますし、

$$\text{偏微分も確かに } \frac{\partial F}{\partial X} = x$$

と元の変数になります。

ルジャンドル変換

$$\begin{array}{ccc} f(x, y) & \leftarrow & \frac{\partial F}{\partial X} = \pm x \text{ となる} \\ \downarrow & & \uparrow \\ X = \frac{\partial f}{\partial x} \text{ とする} & \rightarrow & F = \pm(Xx - f) \text{ と定義} \end{array}$$

9-7 ルジャンドル変換の符号

実は、 $F(X, y) = f(x, y) - Xx$ と置いても変換できます。

$dF = df - x dX - X dx$ に、 $df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy = X dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy$ を代入すれば、

$dF = X dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy - x dX - X dx = \frac{\partial f}{\partial y} dy - x dX$ となって、 X, y が独立変数なのは

同じですが偏微分が $\frac{\partial F}{\partial X} = -x$ と符号が逆になります。

9-8 ハミルトニアン

つまり、 $H = p\dot{q} - L(q, \dot{q})$ と置けば良いことになります。変数が多い場合は、

$$H = p_1 \dot{q}_1 + p_2 \dot{q}_2 + \dots - L(q_1, q_2, \dots, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots)$$

とすだけです。

すると、

$$dH = \dot{q} dp + p d\dot{q} - dL$$

に、 $dL(q, \dot{q}) = \frac{\partial L}{\partial q} dq + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} d\dot{q} = \frac{\partial L}{\partial q} dq + p d\dot{q}$ を代入すれば、

$$dH = \dot{q} dp + p d\dot{q} - \frac{\partial L}{\partial q} dq - p d\dot{q} = \dot{q} dp - \frac{\partial L}{\partial q} dq$$

となって、確かに p, q が独立変数になっていますし、

偏微分は $\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}$ と元の変数を与えます。

9-9 熱力学の例

これは今ちょうど別の講義で習っているはずです。

ある関数 $U(S, V)$ に対して、 $T \equiv \frac{\partial U}{\partial S}(S, V)$ 、 $-P \equiv \frac{\partial U}{\partial V}(S, V)$ とする。

$$U \text{ の全微分 } dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right) dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right) dV = TdS - PdV$$

この $U(S, V)$ について、ルジャンドル変換を行います。

まず、変数を S から $T \equiv \frac{\partial U}{\partial S}(S, V)$ にします。同時に、

$F = U - \frac{\partial U}{\partial S} \cdot S = U - TS$ という新しい量を定義すると、これは、

$$dF = (TdS - PdV) - SdT - TdS = -PdV - SdT$$

となって、変数は確かに V と T となっています。一方、 F の全微分は、

$$dF \equiv \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right) dV + \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right) dT$$

ですから、両者を比較して、 $\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right) = -S$ も成り立っています。

9-10 変数を変える

但し、念のために繰り返しておくと、単に $F = U - TS$ と置いただけではダメです。

∵ 右辺は「 $U(S, V)$ と T の三変数になってしまう」からです。どうすれば良いかというと、

$U - TS$ に対し、 $T = \frac{\partial U(S, V)}{\partial S}$ の逆変換 $S = S(T, V)$ を代入して S を消去し、

変数を V と T に直したものが正しき $F = F(V, T)$ であるということになります。

同様にハミルトニアンも、 $H = p\dot{q} - L(q, \dot{q})$ と置いただけではダメで、

一般化運動量の定義式 $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ を使って $\dot{q} \rightarrow p$ と書き換えなければいけません。

注意)

ここで、「なんだ、 v と p なんか $p = mv$ だから置き換えなんか簡単だ」と思うかも知れま

せんが、簡単なのはデカルト座標に限ります。極座標では既に、 $p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta}$ とな
 って、 q と \dot{q} が混じった式になってしまっています。

9-11 ラッキーセブンと Legendre 変換

以上のような変数の変換を Legendre 変換といいます

$$\begin{cases} F(V, T) = U - TS \\ H(S, P) = U + PV \\ G(P, T) = U - TS + PV \end{cases}$$

これを“*luckySEVen*”の公式と言いますが、全てルジャンドル変換です。

$$\begin{array}{ll} S & E & (V) \\ H & & F \\ P & G & (T) \end{array} \quad \cdot \text{括弧付の変数で微分すると符号反転、例: } \frac{\partial G}{\partial T} = -S$$

覚え方: ラッキーSEVen、順番 EFGH、 $S \leftrightarrow T$ 、 $V \leftrightarrow P$

9-12 ハミルトニアンを満たす運動方程式

次に L はオイラーラグランジュ方程式を満たしているのですから、それを変換した

$H = H(q, p)$ が満たす方程式を求めましょう。

それにはとりあえず、 H の全微分をとってみます。すると、

$$dH = \left(\frac{\partial H}{\partial q} \right) dq + \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right) dp \quad \text{となります。}$$

一方、 H を導入したときの定義からは、

$$dH = d(p\dot{q} - L(q, \dot{q})) = \dot{q}dp + p d\dot{q} - \left(\frac{\partial L}{\partial q} \right) dq - \underbrace{\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right)}_{\text{一般化運動量 } p} d\dot{q} \quad \text{ですが、}$$

2項目と4項目は打ち消し合って消えてしまいます。よって、

$$dH = -\left(\frac{\partial L}{\partial q}\right) dq + \dot{q} dp \quad \text{となります。}$$

注意) 厳密には右辺は q と p の関数ですから、

$$\text{消えてしまう 2 項目と 4 項目も } d\dot{q} = d\dot{q}(q, p) = \left(\frac{\partial \dot{q}}{\partial q}\right) dq + \left(\frac{\partial \dot{q}}{\partial p}\right) dp$$

としておかねばならないのですが、所詮消えるので気にしません。

さて、両者の変数 p と q の微分の係数を比較すると、重要な関係式、

$$dq \text{ の係数: } \frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial L}{\partial q} = -\frac{d}{dt} \underbrace{\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)}_{\text{E-L eq.}} = -\frac{dp}{dt}$$

$$dp \text{ の係数: } \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q} = \frac{dq}{dt} \quad \text{が得られ、}$$

結局、対称性が非常に良い方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial q}(p, q) &= -\frac{dp}{dt} \\ \frac{\partial H}{\partial p}(p, q) &= \frac{dq}{dt} \end{aligned}$$

が得られます。これを正準方程式(*canonical equation*)と言い、オイラーラグランジュの

方程式と等価な運動方程式です

* 一式目の負符号は、力 $f = -\nabla U$ を思い出せば暗記できます。

なお、*canonical* は「ものさし」とか「標準的な」という意味ですが、

統計物理の正準分布と直接は関係ないです。

注意) 二つ目の式の右辺は、堂々と $\frac{dq}{dt}$ です。

しかしこれは独立変数 \dot{q} ではなく q の時間微分です。変数はあくまで q です。

9-13 多変数の場合

$H(q_1, q_2, \dots, p_1, p_2, \dots)$ のように変数がたくさんあるときは、

$$dH = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \right) dq_i + \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \right) dp_i \quad \text{及び、}$$

$$\begin{aligned} dH &= d \left(\underbrace{\sum_i p_i \dot{q}_i - L(q_1, q_2, \dots, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots)}_{\mathcal{H}} \right) = \sum_i \dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i - \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \right) dq_i - \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) d\dot{q}_i \\ &= \sum_i - \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \right) dq_i + \dot{q}_i dp_i \quad \text{となって、それぞれの微分の係数を比較すると、} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = - \frac{\partial L}{\partial q_i} = - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = - \frac{dp_i}{dt} \quad \text{と、} \quad \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{dq_i}{dt} \quad \text{が求める式}(2N \text{ 個}) \text{ になります。}$$

9-14 ハミルトニアンの意味

ハミルトニアンの意味を明らかにするために、 H を時間微分してみますと、

$$\frac{dH}{dt} = \left(\frac{\partial H}{\partial q} \right) \frac{dq}{dt} + \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right) \frac{dp}{dt} = -\dot{p}q + \dot{q}p = 0 \text{ となり、確かにゼロになり、保存量であること}$$

がわかります。ただしこれはもちろん、 H があらわに時間を含んでいない場合の話です

(外力とか、質量が時間変化するとか、*etc.*)。

ラグランジアンの所(第二回)で時間の一様性から、 $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L$ がエネルギーという保存

量になることをやりました。ハミルトニアンの中身はこの表式と全く同じですから、確か

にエネルギーであることがわかります。

しかし、ハミルトニアンを書く場合には、あくまで変数を p と q にしておかねばなりませ

ん (v で書いた \mathcal{H} は試験では不正解になります)。

∴) 正準方程式で偏微分するとき違って来るからです。

それでは、具体例を示して慣れることにしましょう。

9-15 自由な質点

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} \text{ ですから、直ちに } H = p\dot{x} - L = m\dot{x}^2 - \frac{m\dot{x}^2}{2} = \frac{m\dot{x}^2}{2}$$

ですが、定義 $H(p, q) = p\dot{q} - L(q, \dot{q})$ 、 $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ に忠実に従って変数変換すると、

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \text{ ですから、 } H = m\dot{x}^2 - \frac{m\dot{x}^2}{2} = \frac{m\dot{x}^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \text{ となります。}$$

正準方程式は、 $\dot{q} = H_p = p/m$ と $\dot{p} = -H_q = 0$ です。

これは運動量の定義と、ニュートンの運動方程式そのものです。

(正準方程式は大抵、そういう形になります)

9-16 調和振動子

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \text{ より、 } H = p\dot{x} - L = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}$$

正準方程式は、 $\dot{q} = p/m$ と、 $\dot{p} = -H_x = -m\omega_0^2 x$ となります。

9-17 3次元の中心力

これは少し自明でないです。 $L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - V(r)$ より、

$$H = \vec{p}\dot{\mathbf{q}} - L = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \dot{\mathbf{x}} - L = m\dot{\mathbf{x}}^2 - L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + V(r)$$

球面座標では、

$x = r \sin \theta \cos \varphi$ 、 $\dot{x} = \dot{r} \sin \theta \cos \varphi + r \dot{\theta} \cos \theta \cos \varphi - r \dot{\varphi} \sin \theta \sin \varphi$ 及び y, \dot{y}, z, \dot{z} から、

$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\dot{\phi}^2 \sin^2 \theta) - V(r)$ ですから、

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}$$

$$p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta}$$

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mr^2\dot{\phi} \sin^2 \theta \quad \text{となります。よって、}$$

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

正準方程式は式が 6 個出てきて、

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m}, \quad \dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\theta^2 + p_\phi^2 / \sin^2 \theta}{mr^3} - V'(r)$$

$$\dot{\theta} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2}, \quad \dot{p}_\theta = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = \frac{p_\phi^2 \cos \theta}{mr^2 \sin^3 \theta}$$

$$\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial p_\phi} = \frac{p_\phi}{mr^2 \sin^2 \theta}, \quad \dot{p}_\phi = -\frac{\partial H}{\partial \phi} = 0$$

となり、最後の式には、 z 軸の周りの角運動量の保存則が自動的に出ています。

9-18 ハミルトニアンからラグランジアンへの逆変換

H の定義から明らかで、 $L = \sum p_i \dot{q}_i - H$ ですが、もちろん、ラグランジュ方程式

を使うのであれば、 $L = L(q, \dot{q})$ と、速度の関数にしておく必要があります。この場合、最

初に与えられたのがハミルトニアン $H = H(q, p)$ だったので、速度 \dot{q} が何である

かわからないはずですが。よって、正準方程式から、 $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$ を求めてやって変換するこ

とになります。

9-19 摩擦

【復習】外力—仮想ポテンシャル $U_f(\vec{x}, t) = -\vec{x} \cdot \vec{f}(t)$ を L に加える

すると、E-L 方程式で、外力 $\nabla U = -\vec{f}$ が現れる。

振動のところでやったように、外力や摩擦力を含んだ E-L 方程式は、

$$\frac{\partial L_0}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_0}{\partial \dot{x}} \right) + f_{\text{摩擦}} = 0$$

でした。ここで $f_{\text{摩擦}} = -\alpha \dot{x}$ とすれば摩擦を導入できたことになったのですが、それでは

摩擦は L に組み込めないのでしょうか。試しに、

$$L = g(t)L_0 = g(t) \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - U(x) \right)$$

とおいて代入してみると、 $-gU'(x) - (\dot{g} \cdot m\dot{x} + g \cdot m\ddot{x}) = 0$

$$\therefore -U'(x) - m\ddot{x} - \frac{\dot{g}}{g} m\dot{x} = 0$$

$$\therefore m\ddot{x} = \underbrace{-U'(x)}_{\text{ポテンシャルによる力}} - \underbrace{\frac{\dot{g}}{g} m\dot{x}}_{\text{摩擦力}}$$

よって、 $-\frac{g'(t)}{g(t)} m\dot{x}$ を $f_{\text{摩擦}} = -\alpha \dot{x}$ に一致させます。

$\therefore \frac{g'}{g} m = \alpha$ となって、解はあきらかに $g = Ce^{\alpha/m}$ です。

$$\text{以上より、} L = e^{\alpha/m} \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - U(x) \right)$$

これをハミルトニアンに変換してみよう。

$$H = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L = e^{\alpha/m} \left(m\dot{x} \cdot \dot{x} - \frac{m\dot{x}^2}{2} + U \right) = e^{\alpha/m} \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} + U \right)$$

ですが、ハミルトニアンはエネルギーであることを思い出すと、摩擦があるのにどんどん増えて行ってしまいそうです。なぜでしょうか。実は、ここまででは不完全な H で、変数を運動量に直さなければなりません

ここが肝心で、 $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = e^{\alpha/m} m\dot{x}$ が運動量なのです。これは自明でないですね。

これを代入すれば、 $H = e^{\alpha/m} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{e^{-\alpha/m} p}{m} \right)^2 + U \right) = e^{-\alpha/m} \frac{p^2}{2m} + e^{\alpha/m} U(x)$

正準方程式は、 $\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = e^{-\alpha/m} \frac{p}{m}$ 、及び、 $\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -e^{\alpha/m} U'(x)$

ですが、後者は、運動量の定義から、 $\frac{dp}{dt} = e^{\alpha/m} (\alpha\dot{x} + m\ddot{x})$ ですから、確かに摩擦がある

場合のニュートンの運動方程式に一致します。

9-20ハミルトニアンを求めるのが目的？

ハミルトニアンそのものを求めるだけで四苦八苦しているなんて、、、と思った人もいる

ことでしょうか、最先端の多くの研究では、ハミルトニアンの形を求めるのが目標です。

解くのはコンピュータや摂動法など、いろいろな方法が整備されているのです。

9-21[おまけ]正準方程式の数値積分

余談になりますが、正準方程式は1階の微分方程式ですから、ニュートンやラグランジ

ュの運動方程式に比べて数値計算もしやすそうです。実際、調和振動子について微

小時間経過後の変数の値を見てみると、

$$q(t + \delta t) = q(t) + \dot{q}(t)\delta t = q(t) + H_p(q(t), p(t))\delta t = q(t) + \frac{p}{m}\delta t$$

$$p(t + \delta t) = p(t) + \dot{p}(t)\delta t = p(t) - H_q(q(t), p(t))\delta t = p(t) - m\omega^2 q\delta t$$

となります。つまり、

$$q(0) \qquad p(0) \quad ; \text{初期値として数値を与える。}$$

$$q(\delta t) = q(0) + H_p \cdot \delta t \qquad p(\delta t) = p(0) - H_q \cdot \delta t ; \text{前の値を元に、次の値を計算。}$$

$$q(2\delta t) = q(\delta t) + H_p \cdot \delta t \qquad p(2\delta t) = p(\delta t) - H_q \cdot \delta t ; H_p \text{ や } H_q \text{ も前の値で計算。}$$

: \qquad :

エネルギーの増加: 一見よさそうですが、

$$H(t + \delta t) = \frac{p^2(t + \delta t)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2(t + \delta t) \text{ を計算してみると、}$$

$$= H(t) + \frac{1}{2m}(m\omega^2 q^2 \delta t)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(\frac{p}{m}\delta t\right)^2 = H(t) + \omega^2 \delta t^2 H(t) = (1 + (\omega\delta t)^2)H(t)$$

で、どんどんエネルギーが増えて行ってしまいます。 δt を小さくすれば、確かにずれ

小さくなりますが、二乗ですから、「確実に」増えていくことは避けられません。そこで、

$$q(t + \delta t) = q(t) + \dot{q}(t + \delta t/2)\delta t = q(t) + \frac{1}{2}(\dot{q}(t) + \dot{q}(t + \delta t))\delta t$$

と、微分の補間位置を少しずらしてやります(ファインマン)。すると、

$$q(t + \delta t) = q(t) + \frac{1}{2}\{H_p(q(t), p(t)) + H_p(q(t + \delta t), p(t + \delta t))\}\delta t$$

となり、これから求めようとする未来の値まで入って来てしまいますから、

$$H_p(q(t + \delta t), p(t + \delta t)) \text{ の方は悪い近似で我慢して貰うと、}$$

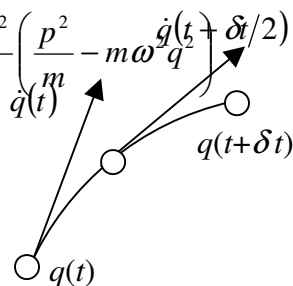
$$\approx H_p(q(t) + \dot{q}(t)\delta t, p(t) + \dot{p}(t)\delta t) \text{ と、現在の値だけで表せます。}$$

これを使うと δt^2 の精度で、ハミルトニアンは一定になってくれます。

$$\begin{aligned}
 \text{すなわち、} q(t + \delta t) &= q(t) + \frac{1}{2} (H_p(q, p) + H_p(q, p) + H_{pq}(q, p) \dot{q} \delta t + H_{pp}(q, p) \dot{p} \delta t) \delta t \\
 &= q(t) + H_p \delta t + \frac{1}{2} H_{pq}(q, p) H_p(q, p) \delta t^2 - \frac{1}{2} H_{pp}(q, p) H_q \delta t^2 \\
 \therefore q(t + \delta t)^2 &\approx q(t)^2 + 2q(t) H_p \delta t + (H_p^2 + H_{pq} H_p q - H_{pp} H_q q) \delta t^2 \\
 &= q^2 + 2q \frac{p}{m} \delta t + \left(\frac{p^2}{m^2} + 0 - \frac{1}{m} m \omega^2 q^2 \right) \delta t^2 = q^2 + \frac{2qp}{m} \delta t + \left(\frac{p^2}{m^2} - \omega^2 q^2 \right) \delta t^2
 \end{aligned}$$

一方、

$$\begin{aligned}
 p(t + \delta t) &= p(t) + \frac{1}{2} (\dot{p}(t) + \dot{p}(t + \delta t)) \delta t = p(t) - \frac{1}{2} (H_q(q, p) + H_q(q + \dot{q} \delta t, p + \dot{p} \delta t)) \delta t \\
 &= p(t) - H_q \delta t - \frac{1}{2} H_{qq} \dot{q} \delta t^2 - \frac{1}{2} H_{qp} \dot{p} \delta t^2 \\
 \therefore p(t + \delta t)^2 &\approx p(t)^2 - 2p H_q \delta t + (H_q^2 - H_{qq} H_p p + H_{qp} H_q p) \delta t^2 \\
 &= p^2 - 2pm \omega^2 q \delta t + \left(m^2 \omega^4 q^2 - m \omega^2 \frac{p}{m} p + 0 \right) \delta t^2 \\
 &= p^2 - 2m \omega^2 pq \delta t + (m^2 \omega^4 q^2 - \omega^2 p^2) \delta t^2 \\
 &= \frac{p^2}{2m} - \omega^2 pq \delta t + \frac{\omega^2}{2} \left(m \omega^2 q^2 - \frac{p^2}{m} \right) \delta t^2 + \frac{m \omega^2 q^2}{2} + \omega^2 qp \delta t + \frac{\omega^2}{2} \left(\frac{p^2}{m} - m \omega^2 q^2 \right) \frac{\delta t}{2} \\
 &= H(t) + 0 \cdot \delta t + 0 \cdot \delta t^2
 \end{aligned}$$



9-22[おまけ]循環座標

ハミルトニアンに「ある座標」が含まれていないと、「ある座標」に対応した一般化運動

量が保存します(ラグランジアンでもまったく同様です。2 回目の講義でやりました)。この、含まれていない座標のことを「循環座標」と云います。 H は循環座標をずらしても不変というところから何かが保存しそうだということは直観にも一致します。できるだけ循環座標が多くなるように座標系を選んだり変数変換するのが問題を解く道筋です。図式としては、系の対称性 \Rightarrow 循環座標 \Rightarrow 保存量 ということです。

9-23 全角運動量

$\dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\theta^2 + p_\phi^2 / \sin^2 \theta}{mr^3} - V'(r)$ の第一項の分子は保存して、実はこれは全角運動量 $= l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$ です。

$\frac{d}{dt}(p_\theta^2 + p_\phi^2 / \sin^2 \theta) = 0$ を示せば良いので簡単です。

$$p_\theta \dot{p}_\theta + p_\phi \dot{p}_\phi / \sin^2 \theta - p_\phi^2 \dot{\theta} \cos \theta / \sin^3 \theta = p_\theta \frac{p_\phi^2 \cos \theta}{mr^2 \sin^3 \theta} + 0 - p_\phi^2 \frac{\dot{\theta} \cos \theta}{\sin^3 \theta}$$

$$\propto \frac{p_\theta}{mr^2} - \dot{\theta}$$

は、 $p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2 \dot{\theta}$ より確かにゼロです。

これが保存すると、動径方向の運動の意味がわかります。

$\dot{p}_r = \frac{L^2}{mr^3} - V'(r) = -\frac{d}{dr} \left(\frac{L^2}{mr^2} + V(r) \right) = -\frac{d}{dr} U_{\text{eff}}(r)$ ですから、一次元運動(回転面を

横から見る)だと思つと、仮想ポテンシャル U_{eff} の極小点付近での振動です。

9-24 [おまけ]座標変換によるラグランジュ方程式の不変性

それでは座標変換をした場合にラグランジュ方程式は確かに不変になることを数学的

に証明しておきましょう。 $L = L(q_1 \cdots q_n, \dot{q}_1 \cdots \dot{q}_n)$ というラグランジアンとラグランジュ方程

$$\text{式 } \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \text{ に対し、}$$

$$\begin{cases} Q_1 = Q_1(q_1 \cdots q_n) \\ \vdots \\ Q_n = Q_n(q_1 \cdots q_n) \end{cases} \text{ という座標変換を行っても、運動方程式は全く同じ形で、}$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial Q_i} = 0 \text{ となる、ということを示すわけです。}$$

この証明は少し注意が必要で、微分変数の変換は、

$$\text{まず、} \frac{\partial}{\partial Q_i} = \frac{\partial q_j}{\partial Q_i} \frac{\partial}{\partial q_j} \text{ は明らかです。しかし、} \dot{Q}_i = \sum_j \frac{\partial Q_i}{\partial q_j} \dot{q}_j \text{ の右辺には、} Q_i \text{ に含まれ}$$

る q_i と、そのままの \dot{q}_i が存在することから、 $\dot{Q}_i = \dot{Q}_i(q_1 \sim q_n, \dot{q}_1 \sim \dot{q}_n)$ となっていることに

$$\text{注意して、} \frac{\partial}{\partial \dot{Q}_i} = \frac{\partial q_j}{\partial \dot{Q}_i} \frac{\partial}{\partial q_j} + \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_i} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_j}$$

となるので、これらをラグランジュ方程式に代入すれば、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial q_j}{\partial \dot{Q}_i} \frac{\partial L}{\partial q_j} + \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_i} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial q_j}{\partial Q_i} \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0 \text{ となります。時間微分を実行すれば、}$$

$$\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_i} \frac{\partial L}{\partial q_j} + \frac{\partial q_j}{\partial \dot{Q}_i} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial q_j} \right) + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_i} \right) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} + \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_i} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial q_j}{\partial Q_i} \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0 \text{ を得ます。}$$