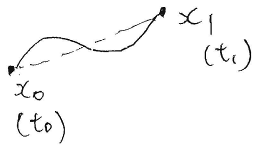
Lagrangean の導出.

$$I(x) = \int_{t_0}^{t_1} F(x, \dot{x})\, dt$$ を考える.　　$I(x)$: 作用 (action)

$x \longrightarrow x + \delta x$ としたとき.　$\delta I = I(x+\delta x) - I(x) = 0$ となるようにする.

($t = t_0,\ t = t_1$ では $\delta x = 0$)



$$\delta I = \int_{t_0}^{t_1} \left\{ F(x+\delta x,\ \dot{x}+\delta\dot{x}) - F(x, \dot{x}) \right\} dt$$

$$= \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial F}{\partial x}\delta x + \underbrace{\frac{\partial F}{\partial \dot{x}}\delta\dot{x}} \right) dt = 0$$

ここで.
$$\int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial F}{\partial \dot{x}}\delta\dot{x} \right) dt = \int_{t_0}^{t_1} \left\{ \frac{\partial F}{\partial \dot{x}} \left(\frac{d}{dt}\delta x \right) \right\} dt$$

$$= \underbrace{\left[\frac{\partial F}{\partial \dot{x}}\delta x \right]_{t_0}^{t_1}}_{0} - \int_{t_0}^{t_1} \left\{ \left(\frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{x}} \right) \delta x \right\} dt$$

よって
$$\int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial F}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{x}} \right) \delta x\, dt = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial F}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial F}{\partial x} = 0$$　Euler eq.

$L(q,\dot{q}) \equiv T - U$ とすると

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$$ をみたす。　Euler-Lagrange

—— なぜ $L = T - U$ と書けるか？

一般に、

$$p_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i} \quad \text{or} \quad p_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \quad (\text{共役}: p, q)$$

$$= \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_1}\frac{\partial \dot{x}_1}{\partial \dot{q}_i} + \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_2}\frac{\partial \dot{x}_2}{\partial \dot{q}_i} + \cdots + \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_{3N}}\frac{\partial \dot{x}_{3N}}{\partial \dot{q}_i}$$

$$= \sum_{j=1}^{3N} \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_j}\underbrace{\frac{\partial \dot{x}_j}{\partial \dot{q}_i}}_{=\frac{\partial x_j}{\partial q_i}}$$

$\leftarrow \dfrac{\partial \dot{x}_j}{\partial \dot{q}_i} = \dfrac{\partial x_j}{\partial q_i}$ (要証明)

ビブン

$$\rightarrow \dot{p}_i = \underbrace{\sum_{j=1}^{3N}\Bigg(\underbrace{\frac{d}{dt}\Big(\underbrace{\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_j}}_{m_j\dot{x}_j}\Big)}_{m_j\ddot{x}_j = F_j}\Bigg)\frac{\partial x_j}{\partial q_i}}_{\sum_{j=1}^{3N} F_j \frac{\partial x_j}{\partial q_i} \equiv Q_i} + \underbrace{\sum_{j=1}^{3N}\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_j}\left(\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial x_j}{\partial q_i}\right)\right)}_{\frac{\partial T}{\partial q_i}}$$

$\dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial x_j}{\partial q_i}\right) = \dfrac{\partial \dot{x}_j}{\partial q_i}$ (要証明)

Q_i：一般力

よって $\dot{p}_i = Q_i + \dfrac{\partial T}{\partial q_i}$

$\dot{p}_i = \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}\right)$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_i} = Q_i = -\frac{\partial U}{\partial q_i}$$

$\leftarrow Q_i \equiv -\dfrac{\partial U}{\partial q_i}$

$$\rightarrow \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial (T-U)}{\partial q_i} = 0$$

$L \equiv T - U$ として　$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$$

Legendre transform

$x, y, z, \cdots$ 独立変数 $\longrightarrow \Phi(x, y, z, \cdots)$

$$d\Phi = X\,dx + Y\,dy + Z\,dz + \cdots$$

$$\longrightarrow \frac{\partial\Phi}{\partial x} = X,\quad \frac{\partial\Phi}{\partial y} = Y,\quad \frac{\partial\Phi}{\partial z} = Z, \cdots$$

変数 $x \to X$ へ変換

$$\Phi(x, y, z, \cdots) \longrightarrow \Psi(X, y, z, \cdots) = \Phi(x, y, z, \cdots) - Xx.$$

このとき.

$$d\Psi = d(\Phi - Xx) = d\Phi - d(Xx)$$
$$= \cancel{d}(X\,dx + Y\,dy + Z\,dz + \cdots) - x\,dX - X\,dx$$
$$= -x\,dX + Y\,dy + Z\,dz + \cdots$$

よって. $x \to X$ へ変数が変わる. (Ledendre 変換)　　x と X は "共役"

例 $dU = dQ - \cancel{\text{仕事}}\, p\,dV$　また. $dQ = T\,dS$

$\to dU = T\,dS - p\,dV$　($U(S, V)$ と書ける)

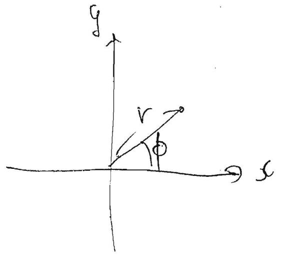
$$U(S, V) \to H(S, p) \equiv U + pV$$

$$dH = \underbrace{dU}_{T\,dS - p\,dV} + V\,dp + p\,dV = T\,dS + V\,dp \longrightarrow H(S, p)$$

$$\to F(T, V) \equiv U - TS \qquad \because)\ dF = \overbrace{dU}^{T\,dS - p\,dV} - T\,dS - S\,dT = -S\,dT - p\,dV$$

$$G(p, T) \equiv U - TS + pV \qquad \because)\ dG = dU - T\,dS - S\,dT + V\,dp + p\,dV = -S\,dT + V\,dp$$

例. 3次元円筒座標



$$x = r\cos\phi,\quad y = r\sin\phi,\quad z = z \longrightarrow \dot{x} = \dot{r}\cos\phi - r\dot{\phi}\sin\phi,\quad \dot{y} = \dot{r}\sin\phi + r\dot{\phi}\cos\phi,\quad \dot{z} = \dot{z}$$

$$T = \frac{1}{2}m\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2\right) = \frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2 + (r\dot{\phi})^2 + \dot{z}^2\right)$$

$r\dot{\phi}$

$$U(x, y, z) = U(r\cos\phi, r\sin\phi, z)$$

$$L = T - U$$

Lagrange eq.

$m\dot{r}$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\right) - \frac{\partial L}{\partial r} = 0 \qquad \frac{\partial L}{\partial r} = mr(\dot{\phi})^2 - \frac{\partial U}{\partial r}$$

$m r^2\dot{\phi}$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}}\right) - \frac{\partial L}{\partial \phi} = 0 \qquad \frac{\partial L}{\partial \phi} = -\frac{\partial U}{\partial \phi}$$

$m\dot{z}$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{z}}\right) - \frac{\partial L}{\partial z} = 0 \qquad \frac{\partial L}{\partial z} = -\frac{\partial U}{\partial z}$$

よって 運動 eqs.

$$m\ddot{r} = mr(\dot{\phi})^2 - \frac{\partial U}{\partial r}$$

$$m\frac{d(r^2\dot{\phi})}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial \phi}$$

$$m\ddot{z} = -\frac{\partial U}{\partial z}$$

φによらない $\longrightarrow \dfrac{d}{dt}\left(m r^2\dot{\phi}\right) = 0$

$r\dot{\phi}$: 一定

角運動量.

変分から正準方程式を導く

$$\delta I = \delta \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q})\, dt = 0$$

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

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

$$= \delta \int_{t_0}^{t_1} \left(\sum_i p_i \dot{q}_i - H \right) dt = 0$$

$$= \int_{t_0}^{t} \sum_i \left(\left(p_i \delta \dot{q}_i + \dot{q}_i \delta p_i \right) - \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i \right) \right) dt$$

$$\int_{t_0}^{t_1} p_i \delta \dot{q}_i \, dt = \underbrace{\left[p_i \delta q_i \right]_{t_0}^{t_1}}_{=0} - \int_{t_0}^{t_1} \dot{p}_i \delta q_i \, dt$$

$$\delta I = \int_{t_0}^{t_1} \sum_i \left(\left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i - \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i \right) dt = 0$$

そのための条件は、

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

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

ランダウの本（力学）

ネーターの定理.

一般座標 q について、パラメータ s として $q(s)$, $\dot{q}(s)$ とする. $L(q,\dot{q})$ が不変なためには…

$$\frac{d}{ds}L(q(s),\dot{q}(s)) = \frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial s} + \frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}}{\partial s} = 0$$

$s\to 0$ として.

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial s} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}}{\partial s} \\
&= \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\partial q}{\partial s} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{d}{dt}\frac{\partial q}{\partial s} \\
&= \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\partial q}{\partial s}\right)
\end{aligned}$$

$$\longrightarrow I = \sum_{k=1}^{K}\frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial \dot{q}_k}\frac{\partial q_k}{\partial s}$$ が保存する

ネーターカレント.

例. $L = \sum \frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)$ について.

1. $x_a(s) = x_a + s$ として $(a=1,\cdots,N)$

$$I_x = \sum_{a=1}^{N}\underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_a}}_{m\dot{x}}\underbrace{\frac{\partial x_a(s)}{\partial s}}_{1}\Bigg|_{s\to 0} = \sum_{a=1}^{N} m_a\dot{x}_a$$ 運動量保存則.

2. 円筒座標 $x(s)=r\cos(\theta+s)$, $y(s)=r\sin(\theta+s)$

$$I = \sum\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\frac{\partial x(s)}{\partial s} + \frac{\partial L}{\partial \dot{y}}\frac{\partial y(s)}{\partial s}\right) = \sum m(-\dot{x}y+\dot{y}x)$$

角運動量保存則

3. 時間発展

3. 時間発展

$t \longrightarrow \tau(t)$ と変換する

$$\delta S = \delta \int_{t_A}^{t_B} L\left(q, \frac{dq}{dt}, t\right) = \delta \int_{\tau_A}^{\tau_B} L\left(q, \frac{dq/d\tau}{dt/d\tau}, t(\tau)\right) \frac{dt}{d\tau} d\tau = 0$$

t と $\dfrac{dt}{d\tau}$ を独立変数とにて、

$$L'\left(q, \frac{dq}{d\tau}, t, \frac{dt}{d\tau}\right) \equiv L\left(q, \frac{dq/d\tau}{dt/d\tau}, t(\tau)\right) \frac{dt}{d\tau}$$

このとき、t に関する Lagrange eq は、

$$\frac{d}{d\tau}\left(\underbrace{\frac{\partial L'}{\partial\left(\frac{dt}{d\tau}\right)}}\right) - \frac{\partial L'}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial L'}{\partial\left(\frac{dt}{d\tau}\right)} = L - \frac{\frac{dq}{d\tau}}{\left(\frac{dt}{d\tau}\right)^2} \cdot \frac{\partial L}{\partial\left(\frac{dq}{dt}\right)} \frac{dt}{d\tau}$$

$$= L - \frac{\frac{dq}{d\tau}}{\frac{dq}{dt}} \cdot p = L - p\dot{q} = -H$$

一方、$\dfrac{\partial L'}{\partial t} = \dfrac{\partial L}{\partial t} \dfrac{dt}{\partial \tau} = \dfrac{\partial(p\dot{q} - H)}{\partial t} \dfrac{dt}{d\tau} = -\dfrac{\partial H}{\partial t} \cdot \dfrac{dt}{d\tau}$

よって、$\dfrac{d(-H)}{d\tau} + \dfrac{\partial H}{\partial t} \dfrac{dt}{d\tau} = 0 \longrightarrow \dfrac{dH}{dt} = \dfrac{\partial H}{\partial t}$

H が陽に t を含まなければ、$\dfrac{\partial H}{\partial t} = 0$ なので

$\dfrac{dH}{dt} = 0$ となる。

これは、時間発展に対するエネルギー保存則を意味している

Poisson 括弧

物理量 $A(q_i, p_i, t)$ とする.

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \underbrace{\frac{\partial q_i}{\partial t}}_{\dot{q}_i} + \frac{\partial A}{\partial p_i} \underbrace{\frac{\partial p_i}{\partial t}}_{\dot{p}_i} \right)$$

$$= \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right)$$

$$= \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}$$ と書く.

t によらない. $\longrightarrow$ $\dot{q}_i = \{q_i, H\}$

$\dot{p}_i = \{p_i, H\}$ ハミルトン正準 eqs.

$\{q_i, q_j\} = 0$

$\{p_i, p_j\} = 0$

$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$ $\qquad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$

正準変換

$P = P(p, q, t) \quad Q = Q(p, q, t)$ としたとき、

$\dot{Q} = \dfrac{\partial K}{\partial P}, \quad \dot{P} = -\dfrac{\partial K}{\partial Q}$ のとき (Q, P)は Kに対する正準変換である。

$$\delta \int \left(p\dot{q} - H(q, p, t) \right) dt = \delta \int \left(P\dot{Q} - K(Q, P, t) \right) dt = 0$$

$$\Rightarrow \dot{q}p - H(q, p, t) = \dot{Q}P - K(Q, P, t) + \frac{dW}{dt}$$

$$\Rightarrow dW = p\,dq - P\,dQ + [K(Q, P, t) - H(q, p, t)]\,dt \quad (※)$$

(※)は W が q と Q と t の関数。 $W_1(q, Q, t)$

$$dW_1 = p\,dq - P\,dQ + [K(Q, P, t) - H(q, p, t)]\,dt$$

$$= p\,dq - d(PQ) + Q\,dP + [K - H]\,dt \quad \leftarrow d(W_1 + PQ) = dW_2$$

$$= d(pq) - q\,dp - P\,dQ + [K - H]\,dt \quad \leftarrow d(W_1 - pq) = dW_3$$

$$= d(pq - PQ) - q\,dp + Q\,dP + [K - H]\,dt \quad \leftarrow d(W_1 - pq + PQ) = dW_4$$

4つの関係式を得る

1. $W_1(q, Q, t)$
$$p = \frac{\partial W_1}{\partial q}, \quad P = -\frac{\partial W_1}{\partial Q}, \quad K = H + \frac{\partial W_1}{\partial t}$$

2. $W_2(q, P, t) = W_1(q, Q, t) + PQ$
$$p = \frac{\partial W_2}{\partial q}, \quad Q = \frac{\partial W_2}{\partial P}, \quad K = H + \frac{\partial W_2}{\partial t}$$

3. $W_3(p, Q, t) = W_1(q, Q, t) - pq$
$$q = -\frac{\partial W_3}{\partial p}, \quad P = -\frac{\partial W_3}{\partial Q}, \quad K = H + \frac{\partial W_3}{\partial t}$$

4. $W_4(p, P, t) = W_1(q, Q, t) - pq + PQ$
$$q = -\frac{\partial W_4}{\partial p}, \quad Q = \frac{\partial F_4}{\partial P}, \quad K = H + \frac{\partial W_4}{\partial t}$$

$p = \dfrac{\partial W_1(q, Q, t)}{\partial q}$ をQについて解く。

W_1 given として、

- 1式より $Q(q, p)$ を求める
- 2式より $P(q, p)$ を求める

これにより

(q, p) 判っている

↓

(Q, P) 判る!

例. 一次元調和振動子 $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kq^2$ において

$(q,p)\to(Q,P)$ への変換.

1. $p=P,\ q=Q+aP$ について.

$$K(Q,P)=\frac{1}{2m}P^2+\frac{1}{2}k(Q+aP)^2$$

$\frac{\partial H}{\partial q}$

$$\dot{Q}=\dot{q}-a\dot{P}=\frac{p}{m}-a\dot{p}=\frac{p}{m}+akq \qquad \leftarrow \dot{p}=-kq$$

$$\frac{\partial K}{\partial P}=\frac{P}{m}+ak(Q+aP)=\frac{p}{m}+akq$$

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

また $\dot{P}=\dot{p}=-kq$, $-\frac{\partial K}{\partial Q}=-k(Q+aP)=-kq$

よって $\dot{P}=-\frac{\partial K}{\partial Q}$ 　正準変換になっている.

2. $p=\sqrt{m\omega}P$. $q=\frac{1}{\sqrt{m\omega}}Q$. $\omega^2=\frac{k}{m}$ について.

正準eqより

$$K(Q,P)=\frac{1}{2}\omega(P^2+Q^2) \qquad \dot{Q}=\sqrt{m\omega}\,\dot{q}=\sqrt{\frac{\omega}{m}}\,p \qquad \left(\dot{q}=\frac{p}{m}\right)$$

$$\frac{\partial K}{\partial P}=\omega P=\sqrt{\frac{\omega}{m}}\,p \qquad よって\ \dot{Q}=\frac{\partial K}{\partial P}$$

$$\dot{P}=\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\dot{p}=\frac{1}{\sqrt{m\omega}}(-kq) \qquad -\frac{\partial K}{\partial Q}=-\omega Q=\frac{1}{\sqrt{m\omega}}(-kq)$$

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

よって正準変換である.

位相空間では $\left(\sqrt{\frac{2K}{\omega}}\right)^2=P^2+Q^2$ の円となる.

・極座標にて $L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - U(r)$

r, θ に共役な運動量

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

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

よって $H = p_r\dot{r} + p_\theta\dot{\theta} - L = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2}\right) + U(r)$ //

・磁場中の粒子 $L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}}^2 + e\mathbf{A}\cdot\dot{\mathbf{r}} - e\phi$ と与えられる.

このとき, $\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}} + e\mathbf{A} \longrightarrow \dot{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{p} - e\mathbf{A}}{m}$

$$H = \mathbf{p}\cdot\dot{\mathbf{r}} - L = \mathbf{p}\cdot\frac{1}{m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) - \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 - e\mathbf{A}\cdot\frac{\mathbf{p} - e\mathbf{A}}{m} + e\phi$$

$$= \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\phi \quad //$$

正準方程式は,

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{1}{m}(p_x - eA_x)$$

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{e}{m}\left[(p_x - eA_x)\frac{\partial A_x}{\partial x} + (p_y - eA_y)\frac{\partial A_y}{\partial y} + (p_z - eA_z)\frac{\partial A}{\partial z}\right] - e\frac{\partial \phi}{\partial x}$$

$$\longrightarrow \begin{cases} \dot{p}_i = \frac{e}{m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})\cdot\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_i} - e\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \\ \dot{x}_i = \frac{1}{m}(p_i - eA_i) \end{cases} \qquad \longrightarrow p_x = m\dot{x} + eA_x$$

$$\longrightarrow p_x - eA_x = m\dot{x}$$

$$\frac{d}{dt}(m\dot{x} + eA_x) = \frac{e}{m}\left(m\dot{x}\cdot\frac{\partial A_x}{\partial x} + m\dot{y}\frac{\partial A_y}{\partial y} + m\dot{z}\frac{\partial A_z}{\partial z}\right) - e\frac{\partial \phi}{\partial x}$$

一方, $\frac{dA_x}{dt} = \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial A_y}{\partial y}\dot{y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}\dot{z}$ なので

$$m\ddot{x} = -e\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial A_x}{\partial t}\right) + e\dot{y}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) + e\dot{z}\left(\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z}\right)$$

y, z も同様

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -e\left(\nabla\phi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right) + e(\dot{\mathbf{r}} \times \mathrm{rot}\,\mathbf{A}) = e(\mathbf{E} + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B})$$

ローレンツ力の式となる.

例2. 一次元調和振動子.

・ $W(q, Q, t) = qQ$ のとき.

$$P = -\frac{\partial W}{\partial Q} = -q, \quad p = \frac{\partial W}{\partial q} = Q \quad \text{なので}$$

$$Q = p, \quad K = \frac{1}{2m}Q^2 + \frac{1}{2}kP^2$$

・ $W(q, Q, t) = \sqrt{mk}\, qQ$ のとき. $\rightarrow P = -\sqrt{mk}\,q$, $p = \sqrt{mk}\,Q$ より

$$Q = \frac{1}{\sqrt{mk}}p, \quad K = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{1}{2}kQ^2.$$

例3. 電磁場 $H = \frac{1}{2m}(\mathbb{p} - e\mathbb{A})^2 + e\phi$ である

$(q, p) \longrightarrow (Q, P)$ への母関数 $W(q, \mathbb{P}, t) = q \cdot \mathbb{P} + ef(q, t)$ とする (W_2)

このとき $\mathbb{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbb{A}}{\partial t}$, $\mathbb{B} = \nabla \times \mathbb{A}$ を不変に保つ

(証明) $\mathbb{p} = \nabla_q W = \mathbb{P} + e\nabla_q f(q, t)$ (a)

$$\mathbb{Q} = \nabla_{\mathbb{P}} W = \mathbb{q}$$

$$K(Q, P) = H(q, p) + \frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\mathbb{p} - e\mathbb{A})^2 + e\phi + e\frac{\partial f}{\partial t}$$

$$\overset{(a)}{=} \frac{1}{2m}\left(\mathbb{P} - e(\mathbb{A} - \nabla_q f)\right)^2 + e\left(\phi + \frac{\partial f}{\partial t}\right)$$

いま, $\mathbb{A} - \nabla_q f = \mathbb{A}'$, $\phi + \frac{\partial f}{\partial t} = \phi'$ とすると. (ゲージ変換)

$$K(Q, P) = \frac{1}{2m}(\mathbb{P} - e\mathbb{A}')^2 + e\phi'$$

ϕ', $\mathbb{A}'$ による $\mathbb{E}$, $\mathbb{B}$ を求めると

$$\mathbb{E}' = -\left(\nabla\phi' + \frac{\partial \mathbb{A}'}{\partial t}\right) = -\left(\nabla\phi + \frac{\partial \mathbb{A}}{\partial t}\right) = \mathbb{E}$$

$$\mathbb{B}' = \nabla \times \mathbb{A}' = \nabla \times (\mathbb{A} - \nabla f)$$

$$= \nabla \times \mathbb{A} - \nabla \times \nabla f = \nabla \times \mathbb{A} = \mathbb{B} \quad (\nabla \times \nabla f = 0)$$

よって, $\mathbb{E}$, $\mathbb{B}$ は不変に保たれる変換となっている.

ハミルトン－ヤコビ方程式

Hamilton － Jacobi

$(q,p) \longrightarrow (Q,P)$

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

$$K = H + \frac{\partial W_2}{\partial t}$$

もし、$K \equiv 0$ となる関数があれば Q と P は定数（運動の積分） $p = \frac{\partial W_2}{\partial q}$

$$\frac{\partial W_2}{\partial t} + H\left(q_1, \cdots q_N, \frac{\partial W_2}{\partial q_1}, \cdots, \frac{\partial W_2}{\partial q_N}, t\right) = 0$$ となる。

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

S は $q_1, \cdots, q_N, t$ の $N+1$ コの変数から成る。

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial q}\frac{dq}{dt} = \underbrace{-H}_{\text{HJより}} + \underbrace{p}_{p=\frac{\partial S}{\partial q}\text{（正準変換）}}\dot{q} = L \Rightarrow S = \int L\,dt$$

例、一次元 $H = \frac{p^2}{2m} + U(x)$ について、

HJ: $\frac{\partial S(x,t)}{\partial t} + H\left(x, \frac{\partial S}{\partial x}\right) = 0$ を解く。

エネルギー保存 ~~則~~ $H = E$ より $\frac{\partial S(x,t)}{\partial t} = -E$

また、$\frac{\partial S(x,t)}{\partial x} = p = \sqrt{2m(E-U(x))}$

これより、$S(x,t) = -Et + \int dx \sqrt{2m(E-U(x))}$

自由粒子 $(U=0)$、定数 4 シ

$$S(x,t) = -Et + x\sqrt{2mE} = -Et + px$$

Hamilton-Jacobi eq から Schrödinger eq を導く.

自由粒子の平面波 $\psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} = e^{i(px-Et)/\hbar} = e^{iS(x,t)/\hbar}$ Ⓐ

$p=\hbar k$, $E=\hbar\omega$　　　$S = -Et+px$

逆に. $S(x,t) = \frac{\hbar}{i}\ln\psi(x,t)$ となる.

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$H\left(x,\frac{\partial S}{\partial x}\right) = \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi^2}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 + U(x)$$

これを HJ eq $\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(x,\frac{\partial S}{\partial x}\right) = 0$ に代入して.

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2}_{\psi\text{に関して線型でない}} + U(x)\psi$$ となる.

Ⓐより.

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial S}{\partial x}e^{i\frac{S}{\hbar}}\right) = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}e^{i\frac{S}{\hbar}} - \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 e^{i\frac{S}{\hbar}}$$

$$= \left[\frac{i}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\right]\psi$$ となる.

$\left|\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right| \ll \frac{1}{\hbar}\left|\frac{\partial S}{\partial x}\right|^2$ であれば $\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \sim \frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2$ とできる

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

コメント
<u>remark</u>　$\frac{1}{\hbar}\frac{\Delta S}{(\Delta x)^2} \ll \frac{1}{\hbar^2}\frac{(\Delta S)^2}{(\Delta x)^2} \Rightarrow \hbar \ll \Delta S$

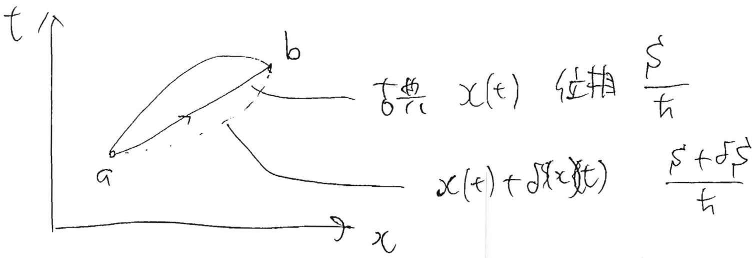
ΔS が $\hbar$ より大きい 古典論で成り立つ ??? (十分)

変

$\Delta S \sim \hbar$ であるべき (量子論)

量子論 $\xrightarrow{\hbar\to 0}$ 古典論　　　一方向にすぎない.

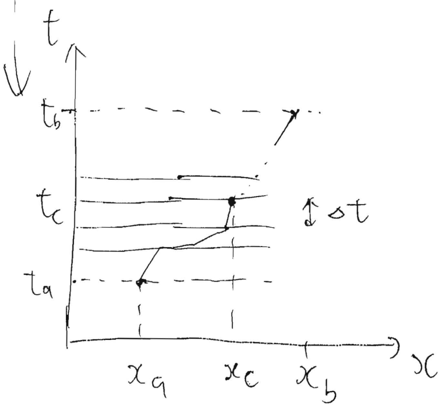
経路積分 (J.J. Sakurai 2.5章)



$$\varphi(x(t)) \propto e^{i\frac{S(x(t))}{\hbar}}$$

$$e^{i\frac{S}{\hbar}} = e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} = e^{i(kx-\omega t)}$$

確率振幅 $K(b,a)$ (2乗が確率)



$$K(b,a) \propto \sum_a^b \int\cdots\int \varphi(x(t))\,dx_1 dx_2\cdots dx_{N-1}$$

$$= \int_a^b \mathcal{D}x\, e^{i\frac{S[x(t)]}{\hbar}} \qquad (\text{path integral})$$

$x = x_c$ を通るとして

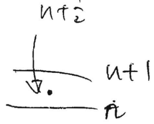
$$K(b,a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c\, K(b,c)\, K(c,a)$$

$\Delta t = \frac{t_N - t_0}{N}$ と分割して

$$K(b,a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \prod_{n=0}^{N-1} K(n+1,n)$$ となる。

$$K(n+1,n) = \frac{1}{A} e^{\frac{i}{\hbar} S(n+1,n)}$$

$$\sim \frac{1}{A} e^{i\frac{\Delta t}{\hbar} L(v_c,\, x_c,\, t_c)}$$ $c \to$ 中点



$$\sim \frac{1}{A} e^{i\frac{\Delta t}{\hbar} L\left(\frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t},\, \overbrace{\frac{x_{n+1}+x_n}{2}}^{x_c},\, t_c\right)}$$

$N\to\infty$ として

$$K(b,a) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{A^N} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1}\, e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{n=0}^{N-1} S(n+1,n)}$$

これより

$$\psi(x',t') = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \underbrace{K(x',t';x,t)}_{\text{propagator 伝播関数}}\, \psi(x,t)$$ と書ける

経路積分によりSchrödinger eqを導く。

$$\psi(x', t+\Delta t) \sim \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{A} e^{i\frac{\Delta t}{\hbar} L\left(\frac{x'-x}{\Delta t}, \frac{x'+x}{2}, t+\frac{\Delta t}{2}\right)} \cdot \psi(x, t)$$

一次元 $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - U(x, t)$ として。

$$\Delta t \cdot L\left(\frac{x'-x}{\Delta t}, \frac{x'+x}{2}, t+\frac{\Delta t}{2}\right) = \underbrace{\frac{m(x'-x)^2}{2\Delta t}}_{\Delta t \to 0\text{で}} - U\left(\frac{x'+x}{2}, t+\frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t$$

を代入する。

激しく振動する。

$$\frac{m(x'-x)^2}{\Delta t} < \hbar \Rightarrow |x'-x| < \sqrt{\frac{\hbar\Delta t}{m}}$$ が実質的に効く。

$\xi \equiv x' - x$（クザイ）とおく。

$$\psi(x, t+\Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{A} \exp\left[i\frac{m\xi^2}{2\hbar\Delta t} - i\frac{\Delta t}{\hbar} U\left(x+\frac{\xi}{2}, t+\frac{\Delta t}{2}\right)\right] \psi(x-\xi, t)$$

$$\Rightarrow \psi(x, t) + \Delta t \frac{\partial\psi}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{A} e^{\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}} \left[1 - i\frac{\Delta t}{\hbar} U(x, t)\right] \cdot \left(\psi(x, t) - \xi\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\xi^2}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)$$

$\Delta t \to 0$, $\xi \to 0$ で両辺とも $\psi(x, t)$ に一致するので

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, e^{\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}} = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\Delta t}{m}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{A} \xi e^{\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}} = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{A} \xi^2 e^{\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}} = \frac{i\hbar\Delta t}{m}$$

よって、$\psi + \Delta t \frac{\partial\psi}{\partial t} = \psi - \frac{i\Delta t}{\hbar} U(x, t)\psi + \frac{1}{2}\frac{i\hbar\Delta t}{m} \cdot \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t)\right]\psi = \hat{H}\psi$$

コメント L（もしくは S）が与えられれば求められる。

[解析] 2016/2/5用

$S = \int L(q, \dot{q})\, dt$, $L = T - U$

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

$H = p\dot{q} - L$ より $\begin{cases} \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q} \\ -\frac{\partial H}{\partial q} = \dot{p} \end{cases}$ 正準方程式.

$(q, p) \longrightarrow (Q, P)$ にて. 正準方程式が保たれる(正準変換)

$\begin{cases} Q = Q(\overbrace{\underbrace{q_1 \cdots q_N}_{3N}, \underbrace{p_1 \cdots p_N}_{3N}}^{6N}, t) \\ \text{or} \\ Q = Q(q, p, t) \\ P \text{も同様} \end{cases}$

$\delta \int (p\dot{q} - H)\, dt = \delta \int (P\dot{Q} - K)\, dt$ $\begin{cases} \dot{Q} = \frac{\partial K(Q, P, t)}{\partial P} \\ \dot{P} = -\frac{\partial K}{\partial Q} \end{cases}$

$\longrightarrow p\dot{q} - H = P\dot{Q} - K + \frac{\partial W}{\partial t}$

$W_1 \sim W_4$ W_2のとき $(W_2(q, P, t))$

小さな世界 大きな世界

$p = \frac{\partial W_2(q, P)}{\partial q}$ ①, $Q = \frac{\partial W_2}{\partial P}$ ②, $\underset{(Q, P, t)}{K} = \overset{(q, p, t)}{H} + \frac{\partial W_2}{\partial t}$

HJ eq の本質は?

(q, p) の運動について知りたい. (Q, P) が一定値になる変換を考える. このとき $K = 0$ となる.

$\frac{\partial W_2}{\partial t} + H(q, p, t) = 0$ ここで. $p = \frac{\partial W_2}{\partial q}$ である.

W_2 given ならば
① 式より P について解いて $P(q, p)$ 求まる.
② 式より $Q(q, p)$ 求まる
めでたし!

一次方程式であり. ニュートン力学と異なる!

解 $W_2 = S(q_1 \cdots q_N, t)$ の $N+1$ コの変数 $\frac{\partial S}{\partial t} + H(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t) = 0$

$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} = -H + \sum_i p_i \cdot \dot{q}_i = L \Rightarrow S = \int L\, dt.$

WKB 近似　Wentzel - Kramers - Brillouin

一次元　$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)-E\right]\psi(x)=0$

解　$\psi(x)=e^{\frac{i}{\hbar}S(x)}$　とする

このとき、$\left.\begin{array}{l}-i\hbar\psi'=S'\psi\\ -\hbar\psi''=(-i\hbar S''+S'^2)\psi\end{array}\right)$ となる。

$$\rightarrow\ \frac{1}{2m}\left[-i\hbar\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\left(\frac{dS}{dx}\right)^2\right]+V-E=0 \qquad ☆$$

$\hbar\to0$ において、ハミルトンヤコビ方程式となる。

$S(x)=S_0(x)+(-i\hbar)S_1(x)+(-i\hbar)^2S_2(x)+\cdots$　と摂動展開する。

$$\frac{-i\hbar}{2m}\left[\frac{d^2S_0}{dx^2}+(-i\hbar)\frac{d^2S_1}{dx^2}+\cdots\right]+\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{dS}{dx}\right)^2+2(-i\hbar)\frac{dS_1}{dx}\frac{dS_0}{dx}+\cdots\right]+V-E=0$$

$\hbar$ の次数ごとに成立する。

$\hbar^0$次：　$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS_0(x)}{dx}\right)^2+V(x)-E=0$　①　← HJ eq.

$\hbar^1$次：　$\frac{d^2S_0(x)}{dx^2}+2\frac{dS_0(x)}{dx}\frac{dS_1(x)}{dx}=0$　②

⋮

$E>V(x)$ において、$S_0(x)=\pm\int^x dx'\,p(x')$，　$p(x)=\sqrt{2m(E-V(x))}$

$S_0(x)$ が求まれば ② より

$$S_1(x)=\ln|p(x)|^{-\frac{1}{2}}+C$$

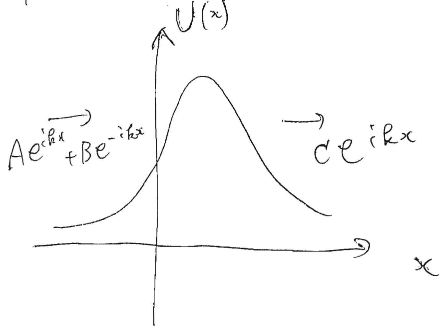
よって、$\hbar$ の1次までで、$\psi(x)\cong\frac{C_-}{\sqrt{p(x)}}e^{\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}p(x')dx'}+\frac{C_+}{\sqrt{p(x)}}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}p(x')dx'}$
（準古典近似）

この近似が成り立つ条件は、$\hbar|S''|\ll|S'|^2$ のときである ← ☆

$$\left|\hbar\frac{p'}{p^2}\right|=\left|\frac{d\lambda}{dx}\right|\ll1 \qquad \left(\lambda=\frac{\hbar}{p}\right)$$

つまり、考えている領域で、波長 λ の変化が、十分にゆるやかである必要がある。

トンネル効果



透過率 $T=\dfrac{|C|^2}{|A|^2}=\exp\left[-\dfrac{2}{\hbar}\int\sqrt{2m(U(x)-E)}\cdot dx\right]$

ハミルトンヤコビの解法

自由粒子

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2$$

$S = T(t) + W(q)$ として，$\dfrac{\partial T}{\partial t} = -\dfrac{1}{2m}\left(\dfrac{\partial W}{\partial q}\right)^2 \equiv -P$ とおく．

$$T(t) = -P \cdot t$$

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial q}\right)^2 = P \longrightarrow W = \sqrt{2mP}\cdot q$$

よって $S(q, P, t) = \sqrt{2mP}\cdot q - P \cdot t$

P, Q 正準座標

正準変換

$$p = \frac{\partial S}{\partial q} = \sqrt{2mP}, \qquad P = \frac{p^2}{2m}$$

$$Q = \frac{\partial S}{\partial P} = \sqrt{\frac{m}{2P}}\cdot q - t \longrightarrow q = \sqrt{\frac{2P}{m}}(t+Q).$$

Qは $t=0$のとき x_0 として $Q = \sqrt{\dfrac{m}{2P}}\, x_0$

調和振動子

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2 + m^2\omega^2 q^2\right) = 0$$

$S(q, t) = W(q) - Et$ とする．

$$\left(\frac{\partial W}{\partial q}\right)^2 + m^2\omega^2 q^2 - 2mE = 0 \longrightarrow W(q, E) = \int \sqrt{2mE - m^2\omega^2 q^2}\cdot dq$$

よって $S(q, E, t) = \displaystyle\int \sqrt{2mE - m^2\omega^2 q^2}\cdot dq - Et$

$Q = \dfrac{\partial S(q,E,t)}{\partial E} = \dfrac{\partial W(q,E)}{\partial E} - t$ である．

$$\frac{\partial W}{\partial E} = \int \frac{m}{\sqrt{2mE - m^2\omega^2 q^2}}\, dq$$

$$= \frac{1}{\omega}\sin^{-1}\left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}\cdot q\right) = t + Q$$

$$\left(\int \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\, dx = \sin^{-1} x\right)$$

よって $q(t) = \sqrt{\dfrac{2E}{m\omega^2}}\cdot \sin\omega(t+Q)$

ゲージ不変性

$(\mathbb{E}, \mathbb{B}) \to (\phi, \mathbb{A})$

$$\left.\begin{aligned} \mathbb{E} &= -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbb{A}}{\partial t} \\ \mathbb{B} &= \nabla \times \mathbb{A} \end{aligned}\right)$$ を定義すると、

$$\phi \to \phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}$$
$$\mathbb{A} \to \mathbb{A} + \nabla \Lambda$$

の下でLは不変となる。

$$L = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 - q\phi(t, r) + q\dot{r}\cdot A(t, r)$$ を考える

ゲージ変換の下で

$$L \longrightarrow L + q\left(\frac{\partial}{\partial t}\Lambda(t, r(t)) + \frac{dr(t)}{dt}\cdot\frac{\partial}{\partial r(t)}\Lambda(t, r(t))\right)$$ と変化する

$$\longrightarrow L + \frac{d}{dt}\left(q\Lambda(t, r(t))\right)$$ とまとめられる。

始点終点を固定した作用積分に表れない。

$$H = \sum_i p_i \dot{r} - L$$
$$= \frac{1}{m} p(p - eA) - \left(\frac{1}{2m}(p - eA)^2 + \frac{q}{m}(p - eA)A - q\phi\right)$$

また、$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} + qA$ より

$$H = p\cdot\dot{r} - L = \frac{1}{2m}(p - qA)^2 + q\phi$$ となる。

Lagrange eq. $$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} - \frac{\partial L}{\partial r} = \frac{d}{dt}(m\dot{r} + qA) + q\nabla\phi - q\nabla(\dot{r}\cdot A) = 0$$

$\dot{\mathbb{r}} \times \mathbb{B} = \nabla(\dot{\mathbb{r}}\cdot\mathbb{A}) - (\dot{\mathbb{r}}\cdot\nabla)\mathbb{A}$ を用いる。

$$m\ddot{r} = \underline{-q\nabla\phi} + \underline{q\nabla(\dot{r}\cdot A)} - q\frac{dA}{dt}$$

$$= \underbrace{q\left(\mathbb{E} + \frac{\partial \mathbb{A}}{\partial t}\right)} + q\left\{\underline{\dot{\mathbb{r}} \times \mathbb{B} + (\dot{r}\cdot\nabla)\mathbb{A}}\right\} - q\frac{dA}{dt}$$

$$= q(\mathbb{E} + \dot{\mathbb{r}} \times \mathbb{B})$$

電磁場中の運動方程式となる