A-7　古典的 Hamiltonian

7.1　Lagrangian

話を簡単にするため，質量 m の質点 1 つが，ポテンシャルエネルギー $V(x,y,z)$ の空間中にある場合を考える。粒子にかかる力 $\mathbf{F}$ はポテンシャルのみで決まる。

$$F_x = -\frac{\partial V(x,y,z)}{\partial x} \tag{A-7.1}$$

$$F_y = -\frac{\partial V(x,y,z)}{\partial y} \tag{A-7.2}$$

$$F_z = -\frac{\partial V(x,y,z)}{\partial z} \tag{A-7.3}$$

ここで，Lagrangian L を次のように定義する。

$$L = T - V = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V(x,y,z) \tag{A-7.4}$$

ドットは時間微分を表す。よって $\dot{x} = v_x$ である。この関数 L を使えば，Newton の運動方程式 $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ は次のように書き直すことができる。

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) = \frac{\partial L}{\partial x} \tag{A-7.5}$$

y, z についても同様に書ける。この方程式を Lagrange の方程式という。
この方程式の意味するところを，一次元で説明する。時刻 t_1 に x_1 にあった粒子が時刻 t_2 に x_2 にあるとする。では，途中の時間ではどのような道筋をたどるのか。それは，次の積分 I が極小になるような道筋である。

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L dt \tag{A-7.6}$$

これは Hamilton の原理と呼ばれる。Lagrange の方程式は，この Hamilton の原理と数学的に同等である。

7.2　正準方程式

さて，Lagrangian L は，一次元でいえば x と $\dot{x} = v_x$ とが独立変数であるような関数である。よって，L の全微分 dL は

$$dL = \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) d\dot{x} + \left(\frac{\partial L}{\partial x}\right) dx \tag{A-7.7}$$

であるが，$p_x = m\dot{x}$ とすれば

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \tag{A-7.8}$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{dp}{dt} \tag{A-7.9}$$

なので，書き直して

$$dL = p_x d\dot{x} + \dot{p}_x dx \tag{A-7.10}$$

L の代わりに， x と p_x とが独立変数であるような関数 H を考えよう。それは次のようにすれば作れる。

$$H = p_x \dot{x} - L = 2T - T + V = T + V \tag{A-7.11}$$

$$dH = p_x d\dot{x} + \dot{x} dp_x - dL = p_x d\dot{x} + \dot{x} dp_x - p_x d\dot{x} - \dot{p}_x dx = \dot{x} dp_x - \dot{p}_x dx \tag{A-7.12}$$

ところで，

(A-7.13) $$dH = \left(\frac{\partial H}{\partial p_x}\right) dp_x + \left(\frac{\partial H}{\partial x}\right) dx$$

だから，二つの式を比べると次の二つの方程式が導かれる。

(A-7.14) $$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_x}$$

(A-7.15) $$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

このような，形をした方程式の組を正準方程式といい，正準方程式を満たす変数の組（この場合 x と p_x）は，互いに正準共役であるという。また，H は Hamiltonian という。ここで考えているような例の場合，H は全エネルギーに他ならない。正準方程式を用いた Hamilton 形式の解析力学は，それ自体が便利だということは特にないが，量子力学が形成される上で，重要な役割を果たした。

7.3 極座標による Hamiltonian

座標変換を施しても，新しい変数 q_r と p_r とが正準方程式を満たすように変換することができる。このような変数変換を正準変換という。例えば，ポテンシャルエネルギーが原点からの距離 r のみで決まるような場合，極座標を使うのが便利だが，その場合の Hamiltonian は次のように書ける。

(A-7.16) $$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{1}{r^2}p_\theta^2 + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}p_\phi^2\right) + V(r)$$

ただし

(A-7.17) $$p_r = m\dot{r}$$

(A-7.18) $$p_\theta = mr^2\dot{\theta}$$

(A-7.19) $$p_\phi = mr^2\sin^2\theta\dot{\phi}$$

r と p_r，θ と p_θ，ϕ と p_ϕ がそれぞれ正準方程式を満たすことはすぐに示すことができる。
この Hamiltonian は ϕ に依存しない。このような場合 ϕ は循環座標であるという。

(A-7.20) $$\frac{dp_\phi}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \phi} = 0$$

だから p_ϕ が一定であることがすぐに解る。

7.4 エネルギーと時間

今までの議論では，時間 t は，他の変数（座標と運動量）とは別に，特別な扱いを受けている。それをやめるにはどうすればよいか。では，エネルギーも座標と運動量で決まる Hamiltonian ではなく，E というエネルギーが独立変数であるとする。そして，次のような新しい関数 F を定義する。

(A-7.21) $$F = H - E$$

この関数を使って正準方程式を作る。座標と運動量に関しては

(A-7.22) $$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial F}{\partial p_x} = \frac{\partial H}{\partial p_x}$$

(A-7.23) $$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial F}{\partial x} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

であり，今までと全く同じである。時間 t に注目すると

$$\text{(A-7.24)} \qquad \frac{d(-E)}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t}$$

$$\text{(A-7.25)} \qquad \frac{dt}{dt} = -\frac{\partial F}{\partial(-E)} = 1$$

であり，t と $-E$ とが共役変数であるような正準方程式ができる。このような意味で，エネルギーと時間は共役であると考えられる

演習問題

A-7-1. Hamilton の原理から Lagrange の方程式を導け。

A-7-2. y と p_x とが共役でないことを示せ。

A-7-3. ポテンシャルが原点からの距離 r だけで決まる場合，デカルト座標の表示から出発して，極座標による Hamiltonian の表示を導け。

A-7-4. r と p_r とが共役であることを示せ。θ と p_θ，ϕ と p_ϕ の場合も示せ。

A-7-5. 量子力学で，運動量の演算子は共役な変数での偏微分を用いて $\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ と書ける。これとの類推でいえば，エネルギーの演算子 $\hat{E}$ はどのように書けると考えられるか。