07/10/17~11/2.

ー量子論の為の正準形式の古典力学ー

作用関数(Lagrange関数)$\mathcal{L}$が一度定義されると,力学系情報は一定の算術形式で決まる。
それは**正準形式の古典力学**に由来し,量子力学、場の量子論に見事に継承される。
☞：読者は電気電子系等の学生,技術者,研究者の水準を想定します。

❶力学方程式と仮想仕事の原理：

①変分法と微分法：

⑴自然現象として実現する力学,熱力学,電磁場運動等では時空間変数(t,**x**)の関数である物理量F(t,**x**)には一つの**安定性要請**しての特徴を備える物がある。典型例はエネルギ等分配,entoropy最大,エネルギ最小状態等がある。中でも古典力学から量子力学まで一貫成立するのが**作用関数$\mathcal{L}$の停留値性**で、物理量関数x(t)が微小に変位：x(t)→x(t)＋δx(t)とδx(t)(＝微小任意関数)が加算されても$\mathcal{L}$値が不動であると言う内容.即ち以下の関係成立。$\mathcal{L}$(x(t);x'(t))はx(t)の合成関数＝**汎関数**。

$$\delta\mathcal{L}(x(t);x'(t))\equiv\delta x(\partial\mathcal{L}/\partial x)+\delta x'(\partial\mathcal{L}/\partial x')=0.$$

⑵**微分演算(d/dt)と変分作用δの可交換性**：<(d/dt)x(t)>≡x'(t)>
$\delta\langle(d/dt)x(t)\rangle\equiv(d/dt)\langle x(t)+\delta x(t)\rangle-(d/dt)x(t)\rangle=(d/dt)\delta x(t)$。

⑶**作用関数の変分とLagrange方程式。**

$$\delta\mathcal{L}(x(t);x'(t))=\delta x(\partial\mathcal{L}/\partial x)+\delta x'(\partial\mathcal{L}/\partial x')$$
$$=\delta x(\partial\mathcal{L}/\partial x)+(d/dt)[\delta x(\partial\mathcal{L}/\partial x')]-\delta x[(d/dt)(\partial\mathcal{L}/\partial x')].$$
$$\delta\mathcal{L}=\delta x\underline{\langle(\partial\mathcal{L}/\partial x)-[(d/dt)(\partial\mathcal{L}/\partial x')]\rangle}+(d/dt)[\delta x(\partial\mathcal{L}/\partial x')].$$

上記⑶式最終項は以下の④作用積分で消失。すると微小任意変位δxの下にδ$\mathcal{L}$＝0を要請すると$\underline{\langle...\rangle}=0$. ⇔ $(\partial\mathcal{L}/\partial x)-(d/dt)(\partial\mathcal{L}/\partial x')=0$.<Lagrange EQN>.

②Newton力学方程式： $m(d/dt)^2\mathbf{x}(t)\equiv\mathbf{F}(\mathbf{x}(t))$.

質量Ｘ加速度＝力(空間座標変数**x**の関数,**x**自身は運動に伴う時間の関数でもある)。

③仮想仕事の原理：**F**＝－gradφ(**x**).

力**f**がpotential関数φ(**x**)から導かれる場合を想定。この力の下に位置座標の微小仮想変位＝δ**x**があったと想定すれば次式成立。仮想変位δV,仮想仕事δTは**変分量**。

<力・仮想変位>≡仮想仕事≡

$$\delta V\equiv\langle\delta\mathbf{x}.\mathbf{F}\rangle=-\sum_{j=1}^{3}\partial_j\phi\,\delta x_j=-\langle\phi(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x})-\phi(\mathbf{x})\rangle\equiv-\delta\phi。$$
$$\delta T\equiv\delta[(m/2)\langle(d/dt)\mathbf{x}(t)\rangle^2]=m(d/dt)\mathbf{x}(t).\,\delta\langle(d/dt)\mathbf{x}(t)\rangle.\quad\cdots\cdots\langle運動ｴﾈﾙｷﾞ\rangle$$
$$=m(d/dt)\mathbf{x}(t).\langle(d/dt)\delta\mathbf{x}(t)\rangle$$
$$=(d/dt)[m(d/dt)\mathbf{x}(t).\,\delta\mathbf{x}(t)]-[m(d/dt)^2\mathbf{x}(t).\,\delta\mathbf{x}(t)]$$

$$\delta\mathcal{L}(x(t);dx/dt)\equiv\delta T+\delta V=\delta(T+V)=\delta[(m/2)\langle(d/dt)\mathbf{x}(t)\rangle^2-\phi]$$
(運動ｴﾈﾙｷﾞ)－(位置ｴﾈﾙｷﾞ)
$$=\delta\mathbf{x}\langle-m(d/dt)^2\mathbf{x}(t)+F\rangle+(d/dt)[m(d/dt)\mathbf{x}(t).\,\delta\mathbf{x}(t)]$$
$$=(d/dt)[m(d/dt)\mathbf{x}(t).\,\delta\mathbf{x}(t)]。$$

④作用関数$\mathcal{L}$の時間積分の停留性：<積分開始時刻t_0と終了時tの変分 $\delta \mathbf{x}=0$[1]とする>

$$\mathcal{L}\equiv (m/2)\langle \mathbf{x}'(t)\rangle^2-\phi(\mathbf{x}).$$

$$\int_{t_0}^{t}dt\,\delta\mathcal{L}=\delta\int_{t_0}^{t}dt\mathcal{L}=\int_{t_0}^{t}dt\langle (d/dt)[m(d/dt)\mathbf{x}(t).\,\delta\mathbf{x}(t)]\rangle$$
$$=[m(d/dt)\mathbf{x}(t).\,\delta\mathbf{x}(t)]_t-[m(d/dt)\mathbf{x}(t).\,\delta\mathbf{x}(t)]_{t_0}=0.$$

「作用積分の変分は０となり,作用関数が(極小)の**安定停留値点**になる事が判る」.
運動ｴﾈﾙｷﾞｰ位置ｴﾈﾙｷﾞ≡作用関数$\mathcal{L}$の変数となる軌道運動$\mathbf{x}(t)$は色々あるのだが、$\mathcal{L}$が極小値に成る運動のみを実現する事になる。幾何光学での光線経路最小が実現に類似する。作用原理成立は古典論から量子論全てに見られる。

[1]:積分開始時刻t_0と終了時刻tは積分区間で見れば０だから積分大局に影響なし。

❷変分原理と正準形式：

①変分原理：

上記④では運動方程式から作用積分の停留性を明かしたが,逆にこれを第一原理と見なす事で議論展開するのが物理主流にある。古典力学、古典電磁気学、量子力学、素粒子＝場の量子論の全てにこの原理は展開されて成功を収めてる現実がある。

②一般多変数力学系のLagrange形式：<$q_j{}'\equiv(d/dt)q_j$； $\partial_j\phi\equiv\partial\phi/\partial q_j$>.

$$\mathcal{L}\equiv\mathcal{L}(q_j;q_j{}')\equiv\mathcal{L}(q_1,q_2,\cdots q_{N-1},q_N,;q_1{}',q_2{}',\cdots q_{N-1}{}',q_N{}').$$

$$0=\delta\mathcal{L}=\sum_{j=1}^{N}\langle\delta q_j(\partial\mathcal{L}/\partial q_j)+\delta q_j{}'\,\partial\mathcal{L}/\partial q_j{}'\rangle$$
$$=\sum_{j=1}^{N}\langle\delta q_j(\partial\mathcal{L}/\partial q_j)+(d/dt)[\delta q_j\partial\mathcal{L}/\partial q_j{}']-\delta q_j(d/dt)[\partial\mathcal{L}/\partial q_j{}']\rangle$$
$$=\sum_{j=1}^{N}\delta q_j\langle\underline{(\partial\mathcal{L}/\partial q_j)-(d/dt)[\partial\mathcal{L}/\partial q_j{}']}\rangle+\sum_{j=1}^{N}(d/dt)[\delta q_j\partial\mathcal{L}/\partial q_j{}'].$$

例により最終第二項は作用積分で０だから,δq_jの任意性から次の連立方程式を得る。

$$(\partial\mathcal{L}/\partial q_j)-(d/dt)[\partial\mathcal{L}/\partial q_j{}']=0.\ \langle j=1,2,\cdots,N\rangle. \quad \cdots\cdots②$$

③正準形式：<アルゴリズム議論になるがこの形式が量子論に遺産継続される>.

上記②式は２階微分方程式系でこれを変数を倍増して一階形式にすると大ご利益あり。以下では**Hamilton関数**≡$H(q_j,p_j)$を定義するがこれが力学系のエネルギーに対応する。

(1)　$\partial\mathcal{L}/\partial q_j{}'\equiv p_j$.　　　　　　　　　　　　　　$\cdots\cdots$<**座標変数q_jの正準共役運動量p_j**>.
(2)　$H(q_j,p_j)\equiv\sum_{j=1}^{N}q_j{}'p_j-\mathcal{L}(q_j;q_j{}')$.　　　　$\cdots\cdots$<**Hamilton関数**>.

$$\delta H(q_j,p_j)=\sum_{j=1}^{N}\delta q_j[\partial H/\partial q_j]+\sum_{j=1}^{N}\delta p_j[\partial H/\partial p_j]$$
$$=\sum_{j=1}^{N}\delta q_j{}'p_j+\sum_{j=1}^{N}q_j{}'\,\delta p_j-\delta\mathcal{L}(q_j;q_j{}')$$
$$=\sum_{j=1}^{N}\langle(d/dt)(\delta q_jp_j)-\delta q_j(d/dt)p_j\rangle+\sum_{j=1}^{N}q_j{}'\,\delta p_j-\sum_{j=1}^{N}(d/dt)[\delta q_j\partial\mathcal{L}/\partial q_j{}']$$
$$=-\sum_{j=1}^{N}\delta q_j(d/dt)p_j+\sum_{j=1}^{N}\delta p_j(d/dt)q_j+(d/dt)\sum_{j=1}^{N}\delta q_j\langle p_j-\partial\mathcal{L}/\partial q_j{}'\rangle.$$

上記第２式と最終式の δq_j、δp_jに掛かる係数項を比較して次の正準方程式を得る。

$$(d/dt)p_j=-\partial H(q_j,p_j)/\partial q_j。$$
$$(d/dt)q_j=+\partial H(q_j,p_j)/\partial p_j。\quad\langle j=1,2,\cdots,N\rangle.\quad\cdots\cdots(3)$$

④正準変換とHamilton-Jacobiの偏微分方程式：

(1)正準変数 $\{q_j, p_j\} \to \{Q_k, P_k\}$ の変換で，正準方程式(3)が不変になるのを**正準変換**と言う．

$$\{q_j, p_j\} \quad \to \quad \{Q_k, P_k\}$$
$$(d/dt)p_j = -\partial H(q_j, p_j)/\partial q_j。\to \quad (d/dt)P_j = -\partial K(Q_j, P_j)/\partial Q_j。$$
$$(d/dt)q_j = +\partial H(q_j, p_j)/\partial p_j。\to \quad (d/dt)Q_j = +\partial K(Q_j, P_j)/\partial P_j。$$

$Q_k = Q_k(q_j, p_j), P_k = P_k(q_j, p_j)$．正準式は〈$\mathcal{L}(q_j; q_j') = \Sigma_{j=1}^N q_j' p_j - H(q_j, p_j)$〉の変分０と等価だから次関係が成立せねばならない。以下の<u>任意関数Ｗを**変換母関数**</u>と言う。

$$\Sigma_{j=1}^N q_j' p_j - H(q_j, p_j) = \Sigma_{j=1}^N Q_j' P_j - K(Q_j, P_j) - (d/dt)W.$$
$$= -\Sigma_{j=1}^N Q_j P_j' - K(Q_j, P_j) - (d/dt)\langle W + \underline{\Sigma_{j=1}^N Q_j P_j}\rangle.$$

↗作用積分で０

$W = W(q_j, P_j, t)$ を仮定して $(d/dt)W = \Sigma_{j=1}^N\langle (dq_j/dt)\,\partial W/\partial q_j + (dP_j/dt)\,\partial W/\partial P_j + \partial W/\partial t$
上式から $\{p_j \equiv -\partial W/\partial q_j、Q_j \equiv \partial W/\partial P_j\} \Rightarrow \partial W/\partial t - H = -K$． 特別に $K=0$ に成る変換母関数があれば正準方程式解は $(d/dt)P_j = (d/dt)Q_j = 0$ で即座に定数解と判明。
〈$Q_j(q_j, p_j) = \alpha_j$、$P_j(q_j, p_j) = \beta_j$〉。上記関係〈･･〉は2N次元連立方程式系だから元の正準変数 (q_j, p_j) が解ける事にもなる。

$\partial W(q_j, P_j = \beta_j)/\partial t = H(q_j, p_j = -\partial W/\partial q_j)$．　**〈H-J偏微分方程式〉**　････④
$(i\hbar\,\partial/\partial t)W = H(q_j, p_j = -i\hbar\,\partial/\partial q_j)W$．　〈量子力学のSchroedinger線形方程式〉

☞： $p_j \equiv -\partial W/\partial q_j$ だと $-H$，$p_j \equiv +\partial W/\partial q_j$ だと $+H$，一般教科書は後者に書いてる。

Ｗが救解できると $\{p_j\} \equiv -\partial W/\partial q_j$ と $\alpha_j \equiv \partial W(q_j, \beta_j)/\partial \beta_j$。〈$j=1, 2, \cdots, N$〉でのＮ次元連立方程式から $\{q_j\}$ 運動が全決定、Ｗは**運動potential**と呼び，量子力学の**波動関数**に対応、因みに量子論の**運動量演算子**は $p_j = -i\hbar\,\partial/\partial q_j$ に対応している。

(2)正準方程式運動は正準変換に等価：〈$(q_j(t_0), p_j(t_0))$→正準変換→$(q_j(t), p_j(t))$〉．
初期時刻 (t_0) の $(q_j(t_0), p_j(t_0))$ の正準変数も時間経過後ｔの正準変数 $(q_j(t), p_j(t))$ も正準方程式の解だから時間発展は正準方程式を不変にしてる。

❸Poisson 括弧と量子力学の正準交換関係≡量子化：〈$\delta_{j=k} \equiv 1$；$\delta_{j\neq k} \equiv 0$〉

$u \equiv u(q_j, p_j), v \equiv v((q_j, p_j)$ の二つの物理量に関してして次式をPoisson 括弧と言う。
$[u、v] \equiv \Sigma_{j=1}^N[(\partial u/\partial q_j)(\partial v/\partial p_j) - (\partial v/\partial q_j)(\partial u/\partial p_j)]$．

$[q_j, q_k] = [p_j, p_k] = 0$；$[q_j, p_k] = \delta_{jk}$．　････❸

量子論でPoisson 括弧は形式的に**正準交換関係**に移行して**正準共役変数間**の非交換性と不確定関係や物理量の演算子代数〈場の量子論における素粒子反応を記述する生成演算子、消滅演算子等〉を規定する事になる〈〈**量子化**〉〉。なぜ生成消滅演算子かは簡単に判る。

即ち「<u>**時間発展**とは過去を消滅し，次期将来を生成する不断の過程連続</u>」だからだ。
時代不変とても過去消滅と同時に過去再生の意味になる。

❹**要約**：<正準形式が見事に量子力学にも対応するのだが,なぜ正準形式かには過去議論がある>

⑴初めに$\mathcal{L}\equiv\mathcal{L}(q_j;q_j')$ありき。$0=\delta\int_{t0}^{t}dt\mathcal{L}$.での**変分原理で力学運動全決定。**
場の量子論では**一般ゲージ原理と量子化原理の２個**のみから唯一に$\mathcal{L}$決定。$\mathcal{L}$決定こそが物理創始。

⑵$\partial\mathcal{L}/\partial q_j'\equiv p_j$. ・・・・<**座標変数**$q_j$**の正準共役運動量**$p_j$>.
⑶$H(q_j,p_j)\equiv\Sigma_{j=1}^{N}q_j'p_j-\mathcal{L}(q_j;q_j')$. ・・・・**<Hamilton 関数>.**
⑷正準方程式、 H-J 偏微分方程式の解法。
⑸Poisson 括弧の形式と{正準共役変数、正準量子化}の量子力学への対応。

❺—参考文献ー

⑴田辺行人,新楽和夫,権平健一郎編,共立物理学公式集,共立出版,1970.
⑵山内、　　一般力学,岩波書店,1959.
⑶伏見康治、古典力学,岩波書店,1964.