

解析力学・量子論

辻 勇吹樹

2025 年 3 月 9 日

本文書は「解析力学・量子論」[13] の 11 章までの本文で気になった箇所をつまむことを目的としたものです。

目次

1	ニュートンの法則からラグランジュ形式へ	3
1.1	pp.7-8: 第 1 法則	3
1.2	p.14: ダランベールの原理について	3
1.3	pp.18-20: 斜面上の粒子を具体例に拘束条件下でのラグランジアンを考える	4
1.4	Appendix: ラグランジアンが存在しない系	5
2	最小作用の原理からニュートンの法則へ	5
2.1	p.22: 最小作用の原理とマクスウェル方程式	5
2.2	p.26: 非相対論的自由粒子のラグランジアン	6
2.3	Appendix: 最小作用の原理の意味	6
3	対称性と保存則	6
3.1	p.36: 電磁場を具体例に一般のラグランジアンを考える	6
3.2	pp.40-41: ネーターの定理とエネルギー保存	8
4	ハミルトン形式と正準変換	9
4.1	pp.46-47 ラグランジアンの凸性	9
4.2	p.51: 力学系の運動と正準変換	9
4.3	p.57: 位相空間と運動の積分の数	10
4.4	pp.61-64: 無限小正準変換の意義	10

4.5	Appendix: リウヴィルの定理と断熱定理	10
5	ハミルトン-ヤコビ方程式と天体力学	11
5.1	p.69: ハミルトン-ヤコビ方程式の意義	11
6	黒体輻射とエネルギー量子	12
6.1	p.101: プランク定数と作用	12
6.2	p.104: プランク分布のピークのずれ	13
7	原子の構造と前期量子論	13
7.1	p.109: 吸収線の幅	13
7.2	p.118: ラザフォード散乱の導出	14
7.3	p.122: ボーアの仮定と古典極限	14
8	粒子性と波動性	14
8.1	p.129: 粒子と波動の両方が存在している理由 (未完)	15
8.2	p.129: コンプトン散乱を波動性から説明する	15
9	波動関数とシュレーディンガー方程式	16
9.1	p.145: 位相速度と群速度	16
9.2	p.147: シュレーディンガー方程式のラグランジュ形式	16
9.3	p.159: ボーア半径を不確定性原理から導出する	16
10	経路積分による定式化: 古典力学から量子論へ	17
10.1	p.161: 位相	17

1 ニュートンの法則からラグランジュ形式へ

1.1 pp.7-8: 第 1 法則

第 1 法則は慣性系という力学の記述にとって本質的な座標系の存在を主張したものであり、次の第 2 法則に含まれるものではなく、より基本的な原理と解釈すべきである。

第 1 法則の存在意義が述べられている。「物理学序論としての力学」[10] では、

着目する物体が他の物体から充分離れている場合にはその物体には力が働いていないと考えられるから、そのとき、その物体には静止または等速直線運動を続ける

として、同様に慣性が認められる座標系の存在を主張していると述べられている。また同書で第 2 法則は力の概念の定量的な定義、既知の力のもとでの質点の運動を予測する方程式を表すとともに、慣性の大きさを表す質量を導入して運動量と力の間の定量的な関係を表している。これらの関係、および第 3 法則は運動を記述する方程式があってはじめて成り立つものであるから、第 1 法則は必要不可欠なものである。

1.2 p.14: ダランベールの原理について

$$\sum_{i=1}^{3N} \left(F^{(a)i} - m_i \frac{d^2 x^i}{dt^2} \right) \delta x^i + \sum_{i=1}^{3N} F^{(c)i} \delta x^i = 0 \quad (1)$$

上式の第 2 項は拘束力による仮想的な仕事を表すが、以下ではそれが 0 となる場合

$$\sum_{i=1}^{3N} \left(F^{(a)i} - m_i \frac{d^2 x^i}{dt^2} \right) \delta x^i = 0 \quad (2)$$

を考える (滑らかな拘束)。この式をダランベールの原理 (D'Alembert's principle) と呼ぶ。

「物理学序論としての力学」[10] では、拘束力 $F^{(c)}$ を用いると、束縛系では

$$F^{(c)i} \cdot \delta x^i = 0, \quad \sum_i F^{(c)i} = 0 \quad (3)$$

のどちらかが成り立つ。前者は質点の可能な変位に対して垂直に働く束縛力（張力、抗力など）、後者は2物体間の相互作用など、大きさが等しく方向が反対であるものにあたる。すなわち、ニュートンの力学と比較すると束縛力を考える必要がなくなる。

ただ、摩擦力は滑らかな拘束ではない。摩擦のような仕事をする束縛力は、ラグランジアンとは別に考える必要がある。この場合は「独学する解析力学」[12]で示されている通り、非保存力による一般力を Q'_i とすると

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i} + Q'_i \quad (4)$$

としてラグランジュ方程式の右辺に付け加えればよい。

1.3 pp.18-20: 斜面上の粒子を具体例に拘束条件下でのラグランジアンを考える

$$L'(q, \dot{q}, \lambda, t) = L(q, \dot{q}, t) + \sum_{r=1}^R \lambda_r h_r(q, t) \quad (5)$$

のように修正し q, \dot{q} および λ を独立変数とみなせば、拘束条件下でのラグランジアン L' が得られる。

「解析力学講義」[11]をもとに、具体的な場合（斜面上の粒子）で考える。まず拘束条件は

$$y = \tan \theta x \rightarrow \sin \theta x - \cos \theta y = 0 \quad (6)$$

で与えられる。修正されたラグランジアンを用いると

$$L' = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - mgy + \lambda(\sin \theta x - \cos \theta y) \quad (7)$$

となる。ここで斜面方向に平衡な軸 (X) と垂直な軸 (Y) に座標系を取り直すと、

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \quad (8)$$

と変換されるので

$$L' = \frac{m}{2}(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2) - mg(\sin \theta X + \cos \theta Y) - \lambda Y \quad (9)$$

となる。この $2 + 1$ 個の変数を持つラグランジアンについて、方程式を解けば良い。すると

$$\begin{cases} Y = 0 & (10) \\ m\ddot{X} = -mg \sin \theta & (11) \\ \lambda = -mg \cos \theta & (12) \end{cases}$$

が得られる。すなわち未定乗数 λ は抗力を表していた。

摩擦力のような非ホロノームの場合でもこの方法で拘束条件を取り入れることができる。

1.4 Appendix: ラグランジアンが存在しない系

「解析力学講義」[11] ではラグランジアンが存在するための必要十分条件 (Helmholtz 条件) を紹介している。内容は省略するが、例えば

$$\ddot{x} = -\alpha x \quad (\alpha \neq 0) \quad (13)$$

という摩擦力が働く床で 1 次元運動をする粒子の運動方程式にはラグランジアンが存在しない。しかし積分因子 M_k^j を用いることでラグランジアンが存在する等価な運動方程式を導出することができる。これは微分方程式を完全系にして解けるようにする方法と同じである。

2 最小作用の原理からニュートンの法則へ

2.1 p.22: 最小作用の原理とマクスウェル方程式

実際、粒子の運動方程式のみならず、電磁気学のマクスウェル方程式、一般相対論のアインシュタイン方程式など、電磁場や重力場がしたがう方程式を導くこともできる。

式は「解析力学・量子論」[13] の A.4, A.5 を参照してほしい。作用 S は

$$S = S_{matter} + S_{field} + S_{int} \quad (14)$$

として物質、場、物質と場の相互作用それぞれから決まる。 S_{matter} は電磁場に依存しないため、残りの作用を用いて変分をとるとマクスウェル方程式を導出できる。

2.2 p.26: 非相対論的自由粒子のラグランジアン

ラグランジアンは $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ だけの関数でなくてはならない。

自由粒子では、時間は一様であり空間は一様等方である。もしラグランジアンが時間や位置の関数であればそれらが変化することでラグランジアンも変化してしまうためそれらの関数ではない。しかし速度にはそのような対称性が存在しない。少し不思議である。

2.3 Appendix: 最小作用の原理の意味

「独学する解析力学」[12]によると、最小作用の原理は古典力学の範囲で導出することはできない。すなわち実現される運動の作用が停留値をとる理由は古典力学からはわからない。しかし量子力学における経路積分の考えでは解釈することができる。実際にはすべての経路を通っているが、 $\delta S \neq 0$ の経路では各経路の位相が相殺するために古典的な運動が実現している、と解釈される。

3 対称性と保存則

3.1 p.36: 電磁場を具体例に一般のラグランジアンを考える

U が \dot{q} に依存するより一般の場合においても、(4.2.3) 式は運動の積分なのであるが、単純に運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和という形にはならない。

「解析力学」[6] も参考に、具体的に電磁場の場合で考える。電磁場内に N 個の荷電粒子があるとき、 i 番目の粒子が受けるローレンツ力は

$$\mathbf{F}_{(i)EM}(t) = e_i \mathbf{E}(\mathbf{r}_{(i)}(t), t) + e_i \frac{1}{c} \mathbf{v}_{(i)}(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_{(i)}(t), t) \quad (15)$$

と表される。ローレンツ力は非保存力であり、力が速度に依存している。電場と磁場にそれぞれ電磁ポテンシャルの表式

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \\ \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \end{array} \right. \quad (16)$$

$$(17)$$

を代入する。ここでいくつかのベクトル公式を用いて

$$\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) = (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A} + \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \quad (18)$$

$$= (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A} + \mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (19)$$

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A} \quad (20)$$

$$\frac{\partial(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v})}{\partial \mathbf{v}} = \mathbf{A} \quad (21)$$

となることも使う。そうすると

$$\mathbf{F}_{(i)EM}(t) = -\nabla_{(i)}(e_i\phi - \frac{e_i}{c}\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - \frac{e_i}{c} \frac{d\mathbf{A}}{dt} \quad (22)$$

$$= -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} + \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{v}} \quad (23)$$

$$U = \sum_{i=1}^N \left(e_i\phi - \frac{e_i}{c}\mathbf{v}_{(i)} \cdot \mathbf{A} \right) \quad (24)$$

と表すことができる。このように一般化されたポテンシャル U を用いることでラグランジアンを

$$L = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2}m_i\dot{\mathbf{r}}_{(i)}^2 - e_i\phi(\mathbf{r}_{(i)}, t) + \frac{e_i}{c}\mathbf{v}_{(i)} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{(i)}, t) \right\} - V(\mathbf{r}_{(1)}, \dots, \mathbf{r}_{(N)}) \quad (25)$$

として電磁場以外の保存力のポテンシャル V に加えて $L = T - U - V$ とすればよい。このラグランジアンを用いることで運動方程式を再現できる。またこのラグランジアンはゲージ変換に対して不変であることも確認できる。一方、ハミルトニアンは

$$\mathbf{p}_{(i)} = m_i\dot{\mathbf{r}}_i + \frac{e_i}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_{(i)}, t) \quad (26)$$

として第 2 項が付け加わることに注意すると

$$H = \sum_{k=1}^{3N} p_k \dot{x}_k - L \quad (27)$$

$$= \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m} \left(p_{(i)} - \frac{e_i}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_{(i)}, t) \right)^2 + e_i\phi(\mathbf{r}_{(i)}, t) \right\} + V(\mathbf{r}_{(1)}, \dots, \mathbf{r}_{(N)}) \quad (28)$$

と表される。

3.2 pp.40-41: ネーターの定理とエネルギー保存

ネーターの定理から、時間の並進対称性に対応するエネルギー保存則も導くこともできる。

ネーターの定理からエネルギー保存則を示すのはやや複雑である。教科書のように考えてもいいが、「解析力学講義」[11]にしたがって考えてみる。

まず時間の変化しない無限小変換

$$q'^j(t) = q^j(t) + \epsilon \delta q^j(t) \quad (j = 1, \dots, n) \quad (29)$$

を考える。ラグランジアンが変化しないときは

$$I = p_j(t) \frac{\delta q^j(t)}{\epsilon}, \quad p_j(t) \equiv \frac{\partial L(q(t), \dot{q}(t), t)}{\partial \dot{q}^j(t)} \quad (30)$$

が保存量となり、ネーター不変量や保存量、荷電と呼ばれる。これは変換前後のラグランジアンの差 δL を計算することで得られる。

一方、時間も変化する無限小変換

$$\begin{cases} t' \equiv t + \delta t \\ q'^j(t') = q^j(t) + \epsilon \delta q^j(t) \end{cases} \quad (j = 1, \dots, n) \quad (31)$$

$$(32)$$

で作用 S が不変であるときは

$$I = -p_j(t) \delta^L q^j(t) - L\left(q(t), \frac{dq(t)}{dt}, t\right) \delta t \quad \delta^L q^j(t) \equiv q'^j(t) - q^j(t) \quad (33)$$

が保存量となり、 $\delta^L q^j(t)$ を Lie 差分と呼び、同時刻で定義される。このとき

$$\delta^L q^j(t) = \delta q^j(t) - \delta t \dot{q}^j(t) \quad (34)$$

という関係が成り立つ。 $\delta q^j(t) = 0$ の時間のみの変化を考えると、 $\delta^L q^j(t) = -\delta t \dot{q}^j(t)$ となるので

$$I = \delta t [p_j(t) \dot{q}^j(t) - L] \quad (35)$$

となり、これはハミルトニアンが不変であることを表す、すなわちエネルギー保存である。

4 ハミルトン形式と正準変換

4.1 pp.46-47 ラグランジアン of 凸性

教科書では一般の関数 f についてのルジャンドル変換を考えているが、これを対応するラグランジアンなどに変えて引用する。

同じ傾き p をもつ点が複数存在すると p だけから \dot{q} を決めることはできなくなる。したがって、 p がわかっただけでは H の値が一意的には決まらなくなってしまう。 $H(p)$ だけから $L(\dot{q})$ を完全に復元することはできなくなる。この事態を防ぐためには、 p が \dot{q} の単調関数、すなわち、任意の \dot{q} について

$$\frac{\partial p}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^2} > 0 \quad \text{あるいは} \quad \frac{\partial p}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^2} < 0 \quad (36)$$

のいずれかがつねに成り立っている必要がある。

多変数の場合は「解析力学講義」[11]によるとヘッセ行列 (Hesse matrix) の行列式がゼロでない、すなわち

$$\det \left(\frac{\partial p_j}{\partial \dot{q}^k} \right) \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j \dot{q}^k} \neq 0 \quad (37)$$

と拡張することができる。このようなラグランジアンは非特異 (non-singular) であるという。特異な場合はすべての一般座標とそれらの共役運動量は相互に独立しておらず、拘束ハミルトニアン系とも呼ばれる。例えば

$$L = \frac{1}{2}(\dot{x} + xy)^2 \quad (38)$$

は特異である。このような場合は新たに全ハミルトニアン H_T を導入すること、変数を独立に扱うことができる。

4.2 p.51: 力学系の運動と正準変換

任意の時刻 t_A から t_B までの力学系の運動はそれ自体が正準変換と解釈でき、作用がその母関数である。

「独学する解析力学」[12]によれば、位相空間内の位相点の運動は作用積分によって生成されているということを言っている。また「解析力学」[6]では、ラグランジアンの物理的

意味はその時間積分が力学的変数の時間変化を正準変換として与える母関数だと述べられている。力学の運動は最小作用 (ラグランジアン の時間積分が最小) の原理に従うが、さらに正準変換となっているわけである。教科書の p.44 にもあるように、ハミルトン形式では最小作用の原理から正準方程式も導かれる。したがって最小作用の原理に従う力学系の運動が正準変換であることは当然のように思われる。

4.3 p.57: 位相空間と運動の積分の数

$2K$ 個の「定数パラメータ」(初期座標と初期運動量) を指定して運動を記述するという言い方がまちがっているわけではない。ただしこの意味での「パラメータ」は、位相空間内の運動の軌跡を定めるという意味において「独立な運動の積分」にはなっていないのである。

時間の並進対称性から位相点を指定するには $2K$ 個のパラメータを指定する必要があるが、運動の軌跡だけを求めるには $2K - 1$ 個で充分である。これが運動の積分の数と等しくなると述べられている。運動の積分は各軌跡ごとの時間に依らない量であるから自由度が 1 つ減っていることは理解できる。

4.4 pp.61-64: 無限小正準変換の意義

「独学する解析力学」[12] では無限小正準変換はネーターの定理の逆の主張をしていると述べている。ネーターの定理はラグランジアン の持つ保存量から対称性を導くものだった。一方で保存量を母関数とする無限小正準変換で対称性に由来する変換をもたらす。例えばハミルトニアンを母関数とすることで無限小時間並進を引き起こす。このように保存量と対称性の関係を改めて無限小正準変換で見ることができる。

4.5 Appendix: リウヴィルの定理と断熱定理

リウヴィルの定理は、力学系の運動によって、すなわち正準変換で位相空間内の体積は変化しないというものだった。一方断熱定理は周期運動している系において、パラメータを断熱変化 (1 周期内で同じ変化割合) させるとき同じ体積が不変であるとするものである。ここで Tong の講義ノート [5] による説明を見てみる。あるパラメータ $\lambda(t)$ を持ち、エネルギーが同じで位相だけ異なる状態を用意する。すなわち位相空間の閉じた軌道の上に複数の点がある。この状態から時間進化させると、パラメータ $\lambda(t)$ の変化によって閉じ

た軌道にあった点群はそれぞれ位置を変えていく。リウヴィルの定理はあくまで局所的な密度の保存を言っているので、特定の粒子群の囲む面積は必ずしも保存しない。しかし、 $\lambda(t)$ の変化がゆっくりであれば、断熱定理が成り立ち、この軌道の囲む面積は変化しない。すなわち 2 つの定理を組み合わせると、パラメータがゆっくりなときはこの面積 (断熱不変量) が時間的に一定であるといえる。

5 ハミルトン-ヤコビ方程式と天体力学

5.1 p.69: ハミルトン-ヤコビ方程式の意義

実際にはこの方法で解くほうが難しいことも多いのだが、一般論としては有用な場合もある。

ハミルトン-ヤコビ方程式

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) = 0 \quad (39)$$

は 1 階の偏微分方程式であるが、教科書にあるように連立方程式に直して解く必要があり、ラグランジュ方程式や正準方程式と比べて必ずしも容易になっているわけではない。その意義はどこにあるだろうか。「解析力学」[6] では、ハミルトンの主関数 S を通して、座標についてのすべての初期条件に対応する運動全体をひとまとめにして眺めるという大局的な記述方法が可能になる。と述べられている。 $S = C(\text{一定})$ の超曲面を考え、 C を変えると、等高面群が配位空間を覆う。このとき運動量は

$$p^k = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial q^k} \quad (40)$$

より、この面群を垂直に貫く勾配となる。この描像は「独学する解析力学」[12] でも述べられているように、幾何光学と対応している。等高面は光線の波面に対応する。実際に C の進む速さを計算すると、 $dS/dt = 0$ より $H = E$ 、すなわち H が時間に陽に依存しない場合のとき

$$-H + p\dot{q} = 0 \rightarrow v = E/q \quad (41)$$

となる。ここから変分を計算すると

$$\delta S = \delta \int_{q_1}^{q_2} \frac{E}{v} dq = 0 \quad (42)$$

となり、フェルマーの原理

$$\delta T = \delta \int_P^Q \frac{n}{c} ds = 0 \quad (43)$$

と一致する。このように力学の方程式が波動の式と対応が見られることは、力学から量子力学への飛躍につながっていくことになる。こうした量子力学とのつながりにおいてハミルトン-ヤコビ方程式の大きな意義がある。

また教科書のように天体力学への応用も考えることができ、正準変換によって軌道要素を成分にすることができる。

6 黒体輻射とエネルギー量子

6.1 p.101: プランク定数と作用

プランク定数 h は、別名作用量子と呼ばれることからわかるように作用の次元をもち、微視的世界の量子性を特徴づける重要な基礎物理定数である。

これまでプランク定数が教科書に現れなかったが、作用量子として導入されたことに違和感を覚えた。作用の次元は教科書にもあるようにエネルギーと時間の積、あるいは運動量と長さ(位置)の積などになる。これらはそれぞれ共役変数の積であり、量子力学では交換関係としてよくプランク定数と共に用いられる。プランク定数と作用の関わりは11章の経路積分で現れる。

「ファインマン経路積分の発見」[3]によれば、正準変換と量子力学での変換関数は対応している。変換関数 $(q_t|q_T)$ とは、時刻 t から T までの変数 q の変換である。この変換は

$$A(tT) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_T^t L dt \right] \quad (44)$$

と対応し、微小時間では定数倍の差で一致する。この変換を微小時間ごとに分け、

$$(q_t|q_T) = \int \cdots \int (q_t|q_m) dq_m (q_m|q_{m-1}) dq_{m-1} \cdots (q_2|q_1) dq_1 (q_1|q_T) \quad (45)$$

とするとき、 $\hbar \rightarrow 0$ の古典極限ではこの位相が激しく振動するため、 $\delta S = 0$ の最小作用となる経路だけが寄与する。変換関数を波動関数に適用すると、微小時間の一次でシュレディンガー方程式が導かれる。特にハミルトニアンが時間に陽に依存しない場合

$$\psi(x, t) = \psi(x) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} H t \right) \quad (46)$$

となるが、 Ht は作用と同じ次元であり、ここで Ht/\hbar は位相を表している。このような形で見るとはあったが、それらは経路積分や変換の対応による考えから現れたものである。

以上より、作用とプランク定数は経路積分においてそれらの比を位相として用いられることで関係している。この2つが結びつく明確な理由が明らかになってはいないが、結び付けられてきたことは分かった。

6.2 p.104: プランク分布のピークのずれ

プランク分布のピークは、単位波長あたりなのか単位周波数あたりなのかによって係数が2倍程度違ってしまふ。

不思議に思えるが、これは区切り幅、単位の違いによる。すなわち

$$\nu_{peak} \lambda_{peak} \neq c \quad (47)$$

となることに注意が必要である。周波数と波長は線形変換ではなく、

$$I(\nu)d\nu = I(\lambda)d\lambda \left(\frac{d\nu}{d\lambda} \right) \quad (48)$$

$$= I(\lambda)d\lambda \left(-\frac{c}{\lambda^2} \right) \quad (49)$$

という関係にある。教科書の表記で

$$\tilde{I}(\lambda) = I(\lambda) \left(-\frac{c}{\lambda^2} \right) \quad (50)$$

であるため、 λ^2 の分最大値がシフトしている。今回の周波数と波長の関係のように一般の変換では必ずしも極値の位置は一致しない。

7 原子の構造と前期量子論

7.1 p.109: 吸収線の幅

吸収線の波長... の幅は分子の2乗平均速度、あるいは温度に比例する。

この説明は粒子が熱運動している時の関係であり、ドップラー幅と呼ばれる。「輻射輸送と輻射流体力学」[8]を参考にすると、ドップラー幅 $\Delta\nu_D$ はマクスウェル分布から

$$\Delta\nu_D = \frac{v_{th}}{c} \nu_0 = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (51)$$

(ν_0 : 静止系での振動数) となり、確かに速度に比例していることが分かる (温度の $1/2$ 乗に比例?)。このときのスペクトル強度は

$$\phi(\nu) = \frac{1}{\Delta\nu_D\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(\nu - \nu_0)^2}{(\Delta\nu_D)^2}\right] \quad (52)$$

と表され、ドップラー profile と呼ばれる。また実際には量子効果による広がりもあり、重ね合わさった Voigt profile というスペクトルになる。

7.2 p.118: ラザフォード散乱の導出

点電荷による散乱の微分断面積を表す (8.3.22) 式はラザフォードの散乱公式 (Rutherford's formula) として知られている。

教科書では解析力学的に散乱公式を導出している。量子力学の散乱理論でも同様に導出することができて、摂動の 1 次で一致する。しかし高次で補正されるようである。

7.3 p.122: ボーアの仮定と古典極限

「古典的」とは E_n の離散性の効果があまり強くない、すなわち n および n' が大きい場合だけに対応するものと考えてみる。

ややわかりにくい表現に感じたので、逆に読んでみる。 $n, n' \gg |n - n'|$ となるとき、直感的には $n \approx n'$ となるときであるが、数式を変形すると

$$0 \ll n' < n \ll 2n' \quad \text{または} \quad 0 \ll n < n' \ll 2n \quad (53)$$

となる。やや複雑であるが少なくとも n, n' が大きいことが必要である。(もう一つの条件である $n \ll 2n'$ などは n, n' が同程度の値であれば成り立つ。)

そして $n, n' \gg |n - n'|$ となるときは準位が詰まっていて幅が見えなくなっているため連続的に扱うことができる。すなわち離散性の効果が強くない、とすることができる。これらの古典的仮定を当てはめたものと、p.121 でボーアの仮定を基に計算した、量子化された振動数の n 依存性が同じであったため、ボーアの仮定と古典極限の接続をすることができた、という内容であった。

8 粒子性と波動性

8.1 p.129: 粒子と波動の両方が存在している理由 (未完)

我々の目は光を粒子として数えることができるほどの高性能量子デバイスであるということもできよう。

光の波動性よりも粒子性がより小さいスケールで見えるのはどうしてであろうか。pp.138-139 では短波長のウィーン領域では粒子として、長波長のレイリー-ジーンズ領域では波動として扱うことが適切であると述べられている。しかし電子を考えると、逆の対応をしているように思われる。すなわちここでの疑問は、あらゆる物質が粒子性と波動性を併せ持つのであれば、どうしてこの世界にはその両方が様々なスケールで存在しているように見えるのか、ということだ。

8.2 p.129: コンプトン散乱を波動性から説明する

高校物理でも教科書のように粒子性からコンプトン散乱による波長を計算した。しかし、光は粒子性と波動性の両方を併せ持つのであれば波動性からも計算することができて、それらは一致するはずである。「シルヴィアの量子力学」[1] では、ドップラー効果によって波動性からも説明できると述べられている。電子は吸収した光と同じ波長の電磁波を出す、電子も電磁波で加速されている。静止系から見るとドップラー効果でより長い波長の電磁波を出す。

浅賀・佐藤 (2009)[9] では詳細な式が述べられている。入射光子には 0、散乱した光子には θ 、電子には d の添字を用いる。また入射光子の進行方向に対して光子は θ 、電子は $-\phi$ だけ角度を持って進んだとする。運動量保存則と同等である位相整合条件とドップラー効果の式

$$\begin{cases} \mathbf{k}_0 = \mathbf{k}_\theta + \mathbf{k}_d \\ \nu_\theta = \nu_0 \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{1-\beta \cos(\theta+\phi)} \end{cases} \quad (54)$$

$$(55)$$

を組み合わせると粒子性から計算したものと一致する。

9 波動関数とシュレーディンガー方程式

9.1 p.145: 位相速度と群速度

非相対論的粒子の場合、位相速度は

$$v_p = E/p = p/2m = v/2 \quad (56)$$

となり粒子の速度とは対応しない。

位相速度では非相対論、相対論によらず

$$v = \frac{dE}{dp} \quad (57)$$

であることは p.144 で述べられている。一方相対論的粒子の場合、

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad p = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (58)$$

より

$$v_p = c^2/v = c\sqrt{1 + \left(\frac{mc}{\hbar k}\right)^2} \quad (59)$$

となり、光速を超える。ただ位相速度は群速度とは異なり情報を伝えず、見かけの波の速度であるため光速を超えることができる。同様に粒子の速度とも対応しない。

9.2 p.147: シュレーディンガー方程式のラグランジュ形式

そもそもシュレーディンガー方程式がハミルトニアンから出発していることから明らかなように、シュレーディンガー方程式はハミルトン形式と対応させるほうがより直感的である。

このように述べられると、ラグランジュ形式での量子力学の方程式を調べたくなってくる。場の量子論ではシュレディンガー方程式に従う量子場が与えられ、そのラグランジアンも存在する。理解するにはもう少し知識が必要そうだ。

9.3 p.159: ボーア半径を不確定性原理から導出する

むしろ逆に、水素原子の典型的サイズであるボーア半径は不確定性原理によって決まっているといってもよい。

ボーア半径は

$$r_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.53 \text{\AA} \quad (60)$$

である。教科書ではボーアの仮定から導いたが、引用した文章のとおりには不確定性原理から導くこともできる。Libre Text[4] を参考にした。水素原子の最小半径 r を考えると、不確定性原理より運動量は $p = \hbar/r$ となる。このとき水素原子のエネルギーは

$$E(r) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \quad (61)$$

となる。エネルギーが最小になる、すなわち

$$\frac{dE}{dr} = -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0 \quad (62)$$

となる半径 r はボーア半径と一致する。このときのエネルギーは -13.6eV で基底状態のエネルギーとなる。

10 経路積分による定式化: 古典力学から量子論へ

10.1 p.161: 位相

それぞれの経路に位相 $2\pi S/\hbar = S/\hbar$ を割り当てて

$$\varphi[x(t)] = \exp\left(i \frac{S[x(t)]}{\hbar}\right) \quad (63)$$

を重みとする。

6.1 節でも考えたように、作用 S を \hbar で割ったものが位相を表している。「経路積分 例題と演習」[7] を参考に、位相が現れるところまでを導出し、その結びつきを考えてみる。

状態 $|\Psi\rangle(t, \mathbf{x})$ は時間推進演算子 $\hat{U}(t, t_0)$ を用いて

$$|\Psi\rangle(t) = \hat{U}(t, t_0) |\Psi\rangle(t_0) \quad (64)$$

となる。左から $\langle \mathbf{x}|$ を作用し、 \mathbf{x}_0 の完全系を用いる。

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}| \hat{U}(t, t_0) |\Psi\rangle(t_0) \quad (65)$$

$$= \int d^3\mathbf{x}_0 \langle \mathbf{x}| \hat{U}(t, t_0) |\mathbf{x}_0\rangle \langle \mathbf{x}_0|\Psi\rangle(t_0) \quad (66)$$

$$= \int d^3\mathbf{x}_0 K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0; t, t_0) \Psi(t_0, \mathbf{x}_0) \quad (67)$$

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0; t, t_0) \equiv \langle \mathbf{x}| \hat{U}(t, t_0) |\mathbf{x}_0\rangle \quad (68)$$

となり、 K をファインマン核 (Feynman kernel) と呼ぶ。ファインマン核はシュレーディンガー方程式に従う。

ファインマン核を書き下すために、まずは時間推進演算子を求める。時刻 $t_0 \rightarrow t$ を N 等分すると

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_{N-1}) \cdots \hat{U}(t_j, t_{j-1}) \cdots \hat{U}(t_1, t_0) \quad (69)$$

として N 個の時間推進演算子の積で表すことができる。すなわちそれぞれの無限小の時間推進演算子は $\exp(if(t)) \approx 1 + if(t)$ のように書くことができるはずである。時間推進演算子の母関数は教科書の 4 章で学んだようにハミルトニアンであった。したがって無限小の時間推進演算子は

$$\hat{U}(t_j, t_{j-1}) = \hat{\mathbf{I}} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(t_j) \quad (70)$$

となる。以上より時間推進演算子およびファインマン核は以下ようになる。

$$\hat{U}(t, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\hat{\mathbf{I}} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(t_N) \right) \cdots \left(\hat{\mathbf{I}} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(t_j) \right) \cdots \left(\hat{\mathbf{I}} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(t_1) \right) \quad (71)$$

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0; t, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{x} | \left(\hat{\mathbf{I}} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(t_N) \right) \cdots \left(\hat{\mathbf{I}} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(t_1) \right) | \mathbf{x}_0 \rangle \quad (72)$$

ここで空間 1 次元での無限小時間ファインマン核を考える。運動量 p_j の完全性を使うと

$$K(x_j, x_{j-1}; t_j, t_{j-1}) \equiv \langle x_j | \hat{\mathbf{I}} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(t_j) | x_{j-1} \rangle \quad (73)$$

$$= \int dp_j \langle x_j | \hat{\mathbf{I}} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(t_j) | p_j \rangle \langle p_j | x_{j-1} \rangle \quad (74)$$

$(\Delta t = t_j - t_{j-1})$ となる。これを解くと

$$K(x_j, x_{j-1}; t_j, t_{j-1}) = \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{ip_j \Delta x_j / \hbar} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(p_j, x_j; t_j) \right) \quad (75)$$

$$= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \{ p_j \Delta x_j - \Delta t H(p_j, x_j; t_j) \} \right] + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (76)$$

となる。この無限小時間ファインマン核を用いることでファインマン核 $K(x', x_0; t', t_0)$ が導出できる。最終的には \exp のカッコの中が iS/\hbar となる。

以上から作用とプランク定数の比の形が現れたが、これは時間推進演算子と $\langle x | p \rangle$ から出てきたものであることが分かった。プランク定数は量子化の手続きで単位合わせによるものである。一方作用はこの導出を見る限りたまたま現れたように見える。しかし式 (67) に遡ると、ファインマン核を経路積分して古典極限では S が停留値になる値しか残らな

いため非常に古典力学との繋がりが良いことだけは分かる。実際に「ディラック 量子力学」[2]では $e^{iS/\hbar}$ に比例する波動関数を考えてシュレーディンガー方程式に代入して、ハミルトン-ヤコビの方程式を導出している。したがって教科書で述べられているように「経路積分の方法は古典力学から量子論への自然な拡張となっている」のである。

参考文献

- [1] Silvia Arroyo Camejo and 正博 小谷. シルヴィアの量子力学. 岩波書店, 2009.
- [2] Paul Adrien Maurice Dirac, 振一郎 朝永, 英彦 玉木, 二郎 木庭, 益比古 大塚, 大介 伊藤, and 洋 江沢. ディラック量子力学. 岩波書店, 2017.
- [3] Richard Phillips Feynman, Laurie M. Brown, 和夫 北原, and 篤司 田中. ファインマン経路積分の発見. 岩波書店, 2016.
- [4] Libretexts. 12.1: The uncertainty principle - physics libretexts, 11 2016. [Online; accessed 2025-03-09].
- [5] Dr David Tong. Classical dynamics, 2005. [Online; accessed 2025-02-21].
- [6] 美喜雄 並木. 解析力学. パリティ物理学コース. 丸善出版, 新装復刊 edition, 2015.
- [7] 太郎 柏. 経路積分 : 例題と演習. 量子力学選書. 裳華房, 2015.
- [8] 雅之 梅村, 純 福江, and 英子 野村. 輻射輸送と輻射流体力学. シリーズ 宇宙物理学の基礎 . 日本評論社, 改訂版 edition, 2024.
- [9] 朋子 浅賀 and 正知 佐藤. コンプトン効果における粒子性と波動性 (講義室). 大学の物理教育, 15(3):120–124, 11 2009.
- [10] 邦男 藤原. 物理学序論としての力学. 基礎物理学. 東京大学出版会, 1984.
- [11] 慶一 近藤. 解析力学講義 : 古典力学を超えて. 共立出版, 2022.
- [12] 龍一 近藤. 独学する「解析力学」 = *Analytical Mechanics*. ベレ出版, 2021.
- [13] 靖 須藤. 解析力学・量子論. 東京大学出版会, 第 2 版 edition, 2019.