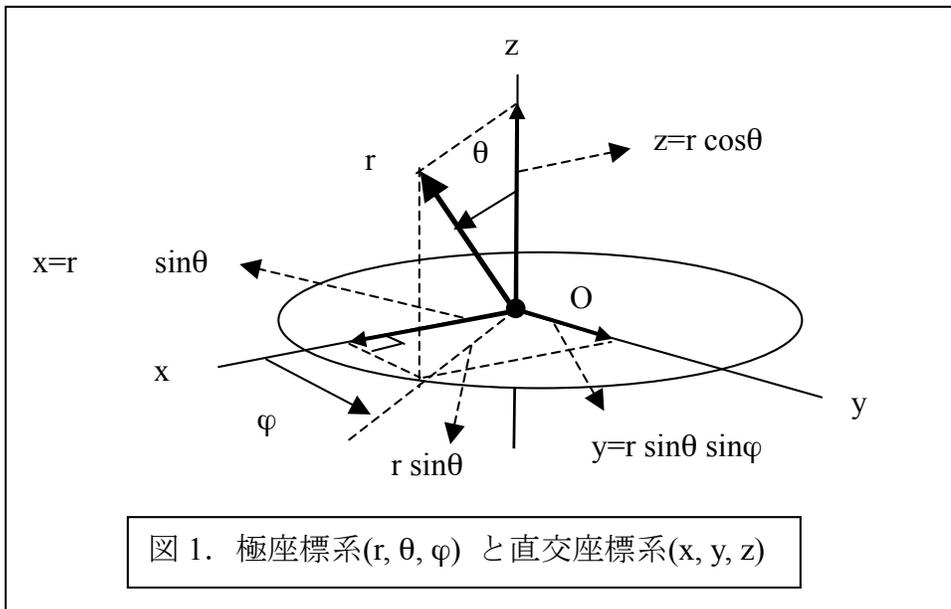


§1 Lagrange 関数と Lagrange の運動方程式

Newton 力学の基礎は質点系の運動に関する内容として付録にまとめたので、適宜参照して頂きたい。ところで、Newton の運動方程式は、直交座標を用いて単純な形で与えられるが、質点に作用する力が原点からの距離 r だけで表現できる中心力場の問題では、直交座標系ではなく、極座標系を用いた方が問題は簡単になる。しかし、Newton の運動方程式を極座標系で表現しようとする、これは**実に面倒な手続き**を経由せねばならない。その原因は Newton の運動方程式が時間に関する二階の微分方程式であることによる。この面倒さをまず実際に経験してみる。その後で、Lagrange 関数を用いた Lagrange の運動方程式を使うと、極座標系で表現した Newton の運動方程式が比較的簡単に得られることを確認する。そして、次に、Lagrange の運動方程式は、どのような座標変数にも直接応用できること、即ち、一般化座標に対応した運動方程式であることを示す。

1) 極座標系で表現した Newton の運動方程式

Newton の運動方程式は、直交座標系での位置座標の時間の二階微分で記述され



るので、極座標を用いた場合は、この変数に変換しなければならない。

保存力場の質点 m に対する Newton の運動方程式は、

$$m(d^2x/dt^2)=-\partial V(x,y,z)/\partial x, \quad (1-1)$$

$$m(d^2y/dt^2)=-\partial V(x,y,z)/\partial y, \quad (1-2)$$

$$m(d^2z/dt^2)=-\partial V(x,y,z)/\partial z. \quad (1-3)$$

これを極座標系 (r, θ, φ) との変換式は、図 1 に示すように、

$$x=r \sin\theta \cos\varphi, \quad y=r \sin\theta \sin\varphi, \quad z=r \cos\theta \quad (2-1)$$

であるから、(1) を (r, θ, φ) に関する微分方程式に書き直すには、左辺側では変数と変数の関数の 3 つの積を 2 回にわたって時間で微分しなければならないので沢山の項が生じる。一回目の時間微分は以下の通りである。

$$\dot{x} = \dot{r} \sin\theta \cos\varphi + r \dot{\theta} \cos\theta \cos\varphi - r \dot{\varphi} \sin\theta \sin\varphi \quad (2-2-1)$$

$$\dot{y} = \dot{r} \sin\theta \sin\varphi + r \dot{\theta} \cos\theta \sin\varphi + r \dot{\varphi} \sin\theta \cos\varphi \quad (2-2-2)$$

$$\dot{z} = \dot{r} \cos\theta - r \dot{\theta} \sin\theta \quad (2-2-3)$$

これらを再度時間微分して

$$\begin{aligned} \ddot{x} = & \ddot{r} \sin\theta \cos\varphi + r \ddot{\theta} \cos\theta \cos\varphi - r \ddot{\varphi} \sin\theta \sin\varphi \\ & - r \dot{\theta}^2 \sin\theta \cos\varphi - r \dot{\varphi}^2 \sin\theta \cos\varphi \\ & + 2\dot{r} \dot{\theta} \cos\theta \cos\varphi - 2\dot{r} \dot{\varphi} \sin\theta \sin\varphi - 2r \dot{\theta} \dot{\varphi} \cos\theta \sin\varphi \end{aligned} \quad (2-3-1)$$

$$\begin{aligned} \ddot{y} = & \ddot{r} \sin\theta \sin\varphi + r \ddot{\theta} \cos\theta \sin\varphi + r \ddot{\varphi} \sin\theta \cos\varphi \\ & - r \dot{\theta}^2 \sin\theta \sin\varphi - r \dot{\varphi}^2 \sin\theta \sin\varphi \\ & + 2\dot{r} \dot{\theta} \cos\theta \sin\varphi + 2\dot{r} \dot{\varphi} \sin\theta \cos\varphi + 2r \dot{\theta} \dot{\varphi} \cos\theta \cos\varphi \end{aligned} \quad (2-3-2)$$

$$\ddot{z} = \ddot{r} \cos\theta - 2\dot{r} \dot{\theta} \sin\theta - r \ddot{\theta} \sin\theta - r \dot{\theta}^2 \cos\theta \quad (2-3-3)$$

となる。一方、(1)の右辺側も偏微分の連鎖則を用いて、 V を (r, θ, φ) に関する偏微分に直さねばならない。 V は、 (r, θ, φ) でも (x, y, z) でも書けるはずであるが、その表現式自体は同じではないので $f(r, \theta, \varphi)$ と $g(x, y, z)$ を使う。さらに、(2)の逆変換を考えて、 (r, θ, φ) の各変数は (x, y, z) で与えられる関数と考えてみると、次の自明の等式が成立する。

$$g(x,y,z) = f(r(x,y,z), \theta(x,y,z), \varphi(x,y,z)) \quad (3-1)$$

$f(r, \theta, \varphi)$ は合成関数と言うことになるが、右辺と左辺のそれぞれに(x, y, z)の一組の値を入れた結果は同じであることを意味する。この両辺を x で偏微分すると、

$$\left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_{y,z} = \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_{\theta,\varphi} \cdot \left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_{y,z} + \left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right)_{r,\varphi} \cdot \left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)_{y,z} + \left(\frac{\partial f}{\partial \varphi}\right)_{r,\theta} \cdot \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_{y,z} \quad (3-2)$$

となる（これが納得できない場合は、偏微分と合成関数の偏微分について、数学の本を参照されたい）。(3-2)右辺の各積は積の順序を入れ替えても良いから、

$$\left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_{y,z} = \left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_{y,z} \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_{\theta,\varphi} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)_{y,z} \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right)_{r,\varphi} + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_{y,z} \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \varphi}\right)_{r,\theta}$$

である。 $f(r, \theta, \varphi)$ と $g(x, y, z)$ は同じもの (V) であるから、通常は f, g を省略して、

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)_{y,z} = \left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_{y,z} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)_{\theta,\varphi} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)_{y,z} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \theta}\right)_{r,\varphi} + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_{y,z} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)_{r,\theta} \quad (3-3)$$

と書く。y, z に関する偏微分も(3-3)と同様なものが得られる。従って、

$$\frac{\partial V}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \cdot \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \cdot \frac{\partial V}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial V}{\partial \varphi}, \quad (3-4-1)$$

$$\frac{\partial V}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \cdot \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \cdot \frac{\partial V}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \cdot \frac{\partial V}{\partial \varphi}, \quad (3-4-2)$$

$$\frac{\partial V}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z} \cdot \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \cdot \frac{\partial V}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \cdot \frac{\partial V}{\partial \varphi}, \quad (3-4-3)$$

(1) の右辺は、(3-4) を用いて(r, θ, φ)系に書き改めることになるが、(3-4)右辺に現れる $(\partial r / \partial x)$, $(\partial \theta / \partial y)$ etc.を求めるには、

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \quad \tan^2 \theta = (x^2 + y^2) / z^2, \quad \tan \varphi = y / x \quad (3-5-1)$$

を用いる。(3-5-1)の第一式を x, y, z でそれぞれ偏微分すれば、

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin \theta \sin \varphi, \quad \frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos \theta, \quad (3-5-2)$$

が得られる。さらに(3-5-1)の第二, 第三の式を x, y, z でそれぞれ偏微分して、次のような結果を得る：

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{\tan \theta \sec^2 \theta} \frac{x}{z^2} = \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \quad (3-6-1)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{\tan \theta \sec^2 \theta} \frac{y}{z^2} = \frac{1}{r} \cos \theta \sin \varphi \quad (3-6-2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{1}{\tan \theta \sec^2 \theta} \frac{x^2 + y^2}{z^3} = -\frac{1}{r} \sin \theta \quad (3-6-3)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{1}{\sec^2 \varphi} \frac{y}{x^2} = -\frac{1}{r \sin \theta} \sin \varphi \quad (3-6-4)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{1}{\sec^2 \varphi} \frac{1}{x} = \frac{1}{r \sin \theta} \cos \varphi \quad (3-6-5)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0 \quad (3-6-6)$$

(3-6) の各式を (3-4)の各式に代入して、次の結果を得る.

$$m\ddot{x} = -\sin \theta \cos \varphi \frac{\partial V}{\partial r} - \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial V}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial V}{\partial \varphi} \quad (3-7-1)$$

$$m\ddot{y} = -\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial V}{\partial r} - \frac{1}{r} \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial V}{\partial \theta} - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial V}{\partial \varphi} \quad (3-7-2)$$

$$m\ddot{z} = -\cos \theta \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial V}{\partial \theta} \quad (3-7-3)$$

(3-7-1), (3-7-2), (3-7-3)の両辺にそれぞれ, $\sin \theta \cos \varphi$, $\sin \theta \sin \varphi$, $\cos \theta$ を掛けて、加えると、

$$m(\ddot{x} \sin \theta \cos \varphi + \ddot{y} \sin \theta \sin \varphi + \ddot{z} \cos \theta) = -\frac{\partial V}{\partial r} \quad (3-8)$$

が得られる. (3-8)と(2-3)の諸式を用いて、やっとな次の結果を得る.

$$m\ddot{r} - mr(\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2 \theta) = -\frac{\partial V(r, \theta, \varphi)}{\partial r} \quad (3-9-1)$$

$$\frac{d}{dt}(mr^2 \dot{\theta}) - mr^2 \dot{\varphi}^2 \sin \theta \cos \theta = -\frac{\partial V(r, \theta, \varphi)}{\partial \theta} \quad (3-9-2)$$

$$\frac{d}{dt}(mr^2 \dot{\varphi} \sin^2 \theta) = -\frac{\partial V(r, \theta, \varphi)}{\partial \varphi} \quad (3-9-3)$$

極座標系で表した Newton 方程式は確かに得られた. しかし、この導出過程は極めて面倒であることが判る. 高橋 康 著「量子力学を学ぶ為の解析力学」(講談社サイエンティフィク) では、やらなくても良い計算とされている. もっと簡単に、

(3-9)を得る方法があるからである。それは2階の時間微分を持つNewton方程式を、少し変形して、形式的に1階の時間微分の式にして、これを扱う方法である。

Lagrangeの運動方程式である。

その前に、もう一つ極座標系への変換を考えておこう。それは直交座標系での角運動量を極座標系で表現する問題である。質量 m の質点を考えると、直交座標系での角運動量は、位置ベクトルと運動量ベクトルの外積で与えられる（付録参照）。

x, y, z 軸方向の単位ベクトルを $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ として、

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times (m\vec{v}) = m(y\dot{z} - z\dot{y})\vec{i} + m(z\dot{x} - x\dot{z})\vec{j} + m(xy - yx)\vec{k} \quad (3-10-1)$$

である。座標変数間の関係は、

$$x=r \sin\theta \cos\varphi, \quad y=r \sin\theta \sin\varphi, \quad z=r \cos\theta \quad (2-1)$$

(2-1)であり、これらの一階の時間微分は、(2-2-1)~(2-2-3)で既に得ている：

$$\dot{x} = \dot{r} \sin\theta \cos\varphi + r\dot{\theta} \cos\theta \cos\varphi - r\dot{\varphi} \sin\theta \sin\varphi \quad (2-2-1)$$

$$\dot{y} = \dot{r} \sin\theta \sin\varphi + r\dot{\theta} \cos\theta \sin\varphi + r\dot{\varphi} \sin\theta \cos\varphi \quad (2-2-2)$$

$$\dot{z} = \dot{r} \cos\theta - r\dot{\theta} \sin\theta \quad (2-2-3)$$

これらを(3-10-1)の各成分に代入すれば、次の結果を得る。

$$l_x = -mr^2(\dot{\theta} \cdot \sin\varphi + \dot{\varphi} \cdot \sin\theta \cos\theta \cos\varphi) \quad (3-11-1)$$

$$l_y = mr^2(\dot{\theta} \cdot \cos\varphi - \dot{\varphi} \cdot \sin\theta \cos\theta \sin\varphi) \quad (3-11-2)$$

$$l_z = mr^2 \cdot \dot{\varphi} \cdot \sin^2\theta \quad (3-11-3)$$

$$l^2 = m^2 r^4 \{(\dot{\theta})^2 + \sin^2\theta \cdot (\dot{\varphi})^2\} \quad (3-11-4)$$

角運動量の各成分には、 \dot{r} が含まれていない。角運動量の二乗についても同様である。これらは後に使われる。

解析力学 (Lagrange や Hamilton の運動方程式) のことを考えないで、水素原子電子に対する Schrödinger 方程式に取り組む時、最初に経験するのがこの種の極座標系への変換である。学生は真面目にこれをやろうとするが、私の場合もそうであったように、多くは面倒なことに閉口して途中で投げ出してしまう。ただし、要領の

良い学生は、「答えは判っているのだから，結果を受け入れれば良い，必要なら暗記してしまえば良い」と考え，先に進むのかも知れない．

化学系での量子化学では，通常は解析力学をやらずに Schrödinger 方程式を取り上げるので，化学系の学生には「極座標系への変換はやらなくても良い計算」ではない．偏微分の練習と思ってやってみることは良い経験になるが，私の場合，学生の時にはとてもこの気持ちにはなれなかった．最近では，物理系学生向けの量子力学テキストでも，Schrödinger 方程式から始まるものが多い．物理系の学生も事情は似通って来ているであろう．高橋 康先生も，「やらなくても良い計算」を経験することが，解析力学の単純明快さを認識する道であること，量子力学への道であること，を説いておられる．「やらなくても良い計算」を経験して，解析力学のことも学んでみる大切である．

しかしながら，多くの学生には，解析力学の勉強も実際は容易ではない．Hamilton の正準方程式までは良いが，正準変換とその辺りで茫漠となってくる．一方，古典電磁気学の勉強の方も，Maxwell 方程式にはたどり着くが，正準変換と同様につかみどころがない．少なくとも私の場合，大学2年を終える頃はこのような状況であった．この種の勉強にも，偏微分の練習だけにとどまらない面白い何かを感じるようにしたい．これが講義ノートの目的である．

2) Lagrange 関数と Lagrange の運動方程式

既に見たように、保存力場、即ち、 $V(x, y, z)$ が座標の関数として与えられる場合、質点 m に対する Newton の運動方程式を再度書くと、

$$m(d^2x/dt^2)=-\partial V(x,y,z)/\partial x, \quad (1-1)$$

$$m(d^2y/dt^2)=-\partial V(x,y,z)/\partial y, \quad (1-2)$$

$$m(d^2z/dt^2)=-\partial V(x,y,z)/\partial z. \quad (1-3)$$

である。一方、運動エネルギー T は、

$$T = (1/2)mv^2 = (1/2)m\{(\dot{x})^2 + (\dot{y})^2 + (\dot{z})^2\} \quad (1)$$

である。運動エネルギー T は速度のみ、 $V(x, y, z)$ は座標のみで与えられていることに注意して、 T と V から **Lagrange 関数 (Lagrangian)** を次のように定義する：

$$L(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) \equiv T - V \quad (2)$$

Lagrange 関数は、座標と速度の関数である。

そこで、(2)の L の速度成分 \dot{x} を独立変数のように考えて、これで L を偏微分してみると、 V は (x, y, z) のみに依るから無関係となり、(2)の T だけが関係して、

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial}{\partial \dot{x}}(T - V) = \frac{\partial T}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \quad (3)$$

となる。この両辺を時間で微分すると、

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) = m\ddot{x} \quad (4)$$

であり、この右辺は Newton の運動方程式(1-1)の左辺に他ならない。

一方、(2)の L を x で偏微分すると、 T は速度のみの関数であるから無関係となり、

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}(T - V) = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (5)$$

これは、Newton の運動方程式(1-1)の右辺に等しい。故に、(4)=(5)であり、

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) = \frac{\partial L}{\partial x} \quad (6-1)$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{y}}\right) = \frac{\partial L}{\partial y} \quad (6-2)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{z}} \right) = \frac{\partial L}{\partial z} \quad (6-3)$$

これが Lagrange の運動方程式 (Euler-Lagrange 方程式とも呼ばれる)である。

Newton の運動方程式(1)と同じ内容を表しているが、次に見るように、Lagrange の運動方程式はより一般化された便利な性質を有している。それは、(x, y, z)座標系に限らず、(r, θ , φ) などの座標系でも、(6-1,-2,-3)は同じように成立することである。

(r, θ , φ)座標系の各変数について、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) = \frac{\partial L}{\partial r} \quad (7-1)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \theta} \quad (7-2)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \varphi} \quad (7-3)$$

が成立する。

本当にそうかどうか？ $L \equiv T - V$ を (r, θ , $\varphi, \dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\varphi}$) で書き、(2-7-1,-2,-3)を実行し、前節の(3-9-1,-2,-3)と一致するかどうか調べてみよう。x, y, z の時間微分は既に前節で求めている：

$$\dot{x} = \dot{r} \sin \theta \cos \varphi + r \dot{\theta} \cos \theta \cos \varphi - r \dot{\varphi} \sin \theta \sin \varphi \quad (2-2-1)$$

$$\dot{y} = \dot{r} \sin \theta \sin \varphi + r \dot{\theta} \cos \theta \sin \varphi + r \dot{\varphi} \sin \theta \cos \varphi \quad (2-2-2)$$

$$\dot{z} = \dot{r} \cos \theta - r \dot{\theta} \sin \theta \quad (2-2-3)$$

運動エネルギーTは、(2)であるから、上記の三式をそれぞれ2乗して、

$$T = (1/2)mv^2 = (1/2)m\{(\dot{x})^2 + (\dot{y})^2 + (\dot{z})^2\} = (1/2)m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 \sin^2 \varphi)$$

となる。従って、保存力場における質点 m に対する具体的な Lagrange 関数 L は、

$$L = (1/2)m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 \sin^2 \varphi) - V(r, \theta, \varphi) \quad (9)$$

となる。これから、(7-1,-2,-3)を作り、右辺の各項を移行して0と置くことが出来るから、次の関係が得られる。

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) - \frac{\partial L}{\partial r} = m\ddot{r} - mr\dot{\theta}^2 - mr\dot{\varphi}^2 \sin^2 \theta + \frac{\partial V}{\partial r} = 0 \quad (10-1)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{d}{dt} (mr^2 \dot{\theta}) - mr^2 \dot{\varphi}^2 \sin \theta \cos \theta + \frac{\partial V}{\partial \theta} = 0 \quad (10-2)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = \frac{d}{dt} (mr^2 \dot{\varphi} \sin^2 \theta) + \frac{\partial V}{\partial \varphi} = 0 \quad (10-3)$$

各式の第二等式は、前節の(3-9-1,-2,-3)と一致することが判る。前節では、面倒な手続きの後に、(x, y, z)座標系での Newton の運動方程式を(r, θ, φ) 座標系に直した。

しかし、Lagrange 関数を用いて Lagrange の運動方程式を求めれば極めて簡単に同じ結果が得られる。Lagrange の運動方程式が、形式的には時間についての一階微分であることが、この簡単さの理由である。(x, y, z), (r, θ, φ)の座標系のみならず、他の任意の座標系でも、(6-1,-2,-3)や (7-1, -2, -3) の Lagrange の運動方程式が成立することは、次節で更に述べる。その前に、Lagrange の運動方程式の応用例を一つ考える。

3) 正電荷を持つ核の廻りの電子の運動 : Lagrange の方程式の応用

核は座標原点ある正の点電荷で Ze, 電子の質量と電荷はそれぞれ m と -e とすると、電子に作用するのはクーロン力で、 $F_c = -(Ze^2)/r^2$ の引力であり、変数 r のみに依る。ここでは CGS 静電単位系で考えている。

$$F_c = -(\partial V / \partial r) = -(dV / dr) = -(Ze^2 / r^2) \quad (1)$$

から、 $(dV / dr) = (Ze^2 / r^2)$ であり、これを積分し、無限遠(r=∞)の基準点で V=0 であることを使うと、

$$V = -(Ze^2 / r) \quad (2)$$

である。

問題を簡単にするために、(x, y) 平面内の 2 次元運動として考える。(r, θ, φ)座標系では、 $\theta = \pi/2$ で一定の場合に当たる。(10-1,-2,-3)で、 θ の時間微分=0, $\sin \theta = 1$, $\cos \theta = 0$ で、V の θ, φ についての時間微分も 0 である。故に、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) - \frac{\partial L}{\partial r} = m\ddot{r} - mr\dot{\varphi}^2 + Ze^2 / r^2 = 0$$

即ち,
$$m\ddot{r} = m r \dot{\varphi}^2 - Ze^2 / r^2 \quad (3)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = \frac{d}{dt} (m r^2 \dot{\varphi}) = 0 \quad (4)$$

となる. (3)の右辺第一項は遠心力, 第二項は向心力に相当する. (4)は角運動量が保存されることを意味しており, $m r^2 \dot{\varphi} = C$ (定数) と出来る. これを使うと(3)の右辺第一項は, $m r \dot{\varphi}^2 = m r \cdot \{C / (m r^2)\}^2 = C^2 / (m r^3)$ となる. (3)は,

$$\ddot{r} = -(Ze^2 / m) / r^2 + (C / m)^2 / r^3 \quad (3')$$

となり, r (動径座標) だけに関する微分方程式となり, 変数 φ から分離される.

(3')の両辺に $2\dot{r}$ を掛けてみると,

$$2\dot{r} \cdot \ddot{r} = \frac{d}{dt} (\dot{r})^2 = 2\dot{r} \cdot [-(Ze^2 / m) / r^2 + (C / m)^2 / r^3] = \frac{d}{dt} \left(\frac{2Ze^2}{mr} - \frac{C^2}{m^2 r^2} \right)$$

従って, B を積分定数として,

$$(\dot{r})^2 = \frac{2Ze^2}{mr} - \frac{C^2}{m^2 r^2} + B \quad (5)$$

$$m r^2 \dot{\varphi} = C \quad (\text{定数}) \quad (6)$$

そこで,

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = \left(\frac{dr}{d\varphi} \right) \dot{\varphi} = \frac{C}{m r^2} \left(\frac{dr}{d\varphi} \right)$$

であるから, これを(5)左辺に代入し, 定数を $A = B m^2 / C^2$ とすると,

$$\frac{1}{r^4} \cdot \left(\frac{dr}{d\varphi} \right)^2 = \frac{2mZe^2}{C^2} \cdot \frac{1}{r} - \frac{1}{r^2} + A \quad (7)$$

新しい変数を $\rho \equiv 1/r$ とすると, $\frac{dr}{d\varphi} = \frac{dr}{d\rho} \frac{d\rho}{d\varphi} = \left(-\frac{1}{\rho^2} \right) \frac{d\rho}{d\varphi}$ であるから, (7)は,

$$\left(\frac{d\rho}{d\varphi} \right)^2 = \frac{2mZe^2}{C^2} \cdot \rho - \rho^2 + A \quad (8)$$

となる. この積分は, 一旦(8)を微分してから考える. 微分すると,

$$2 \left(\frac{d\rho}{d\varphi} \right) \left(\frac{d^2 \rho}{d\varphi^2} \right) = \frac{2mZe^2}{C^2} \cdot \left(\frac{d\rho}{d\varphi} \right) - 2\rho \cdot \left(\frac{d\rho}{d\varphi} \right)$$

であるから、移行して整理すると、

$$\frac{d\rho}{d\varphi} \cdot \left(\frac{d^2\rho}{d\varphi^2} + \rho - \frac{mZe^2}{C^2} \right) = 0 \quad (9)$$

である。従って、

$$\frac{d\rho}{d\varphi} = 0 \quad (9-1)$$

$$\frac{d^2\rho}{d\varphi^2} + \rho - \frac{mZe^2}{C^2} = 0 \quad (9-2)$$

を積分すれば良い。(9-2)は、2階の線型非斉次微分方程式である。もし、三番目の項が0であるなら、これは2階の線型斉次微分方程式と呼ばれる。

線形常微分方程式に対する結論からすると、(9-2)の一般解は、(9-2)の非斉次微分方程式の特解と(9-2)に対応する斉次微分方程式の一般解の和である。この場合、(9-2)第三項を右辺へ移項した結果、

$$\rho_{(1)} = \frac{mZe^2}{C^2} \quad (9-2-1)$$

は、明らかに(9-2)を満足しているので、(9-2-1)は(9-2)の特解である。一方、斉次微分方程式は、

$$\frac{d^2\rho}{d\varphi^2} + \rho = 0 \quad (9-2-2)$$

であり、これは単振動の場合と同じ方程式であるから、この一般解は、

$$\rho_{(2)} = \alpha \cos\varphi + \beta \sin\varphi$$

である。従って、(9-2)の一般解は、(9-2-1)の特解と斉次微分方程式の一般解との和から、

$$\rho = \frac{mZe^2}{C^2} + \alpha \cos\varphi + \beta \sin\varphi \quad (9-3)$$

となる。

ここで、角度 φ は、 r が極小の値である $r=r_{\min}$ 、即ち、 $\rho=1/r=\rho_{\max}$ であるような動径ベクトルの位置から測ることにこととすると、この約束は次の条件と同一である。

$$\varphi=0 \quad \text{に対して} \quad \frac{d\rho}{d\varphi}=0 \quad (10)$$

この条件は(9-3)に対して,

$$\frac{d\rho}{d\varphi} = -\alpha \sin\varphi + \beta \cos\varphi = 0$$

であることを意味する. これは $\beta=0$ との条件をあたえるから, (9-3)は

$$\rho = \frac{mZe^2}{C^2} + \alpha \cos\varphi \quad (11)$$

である.

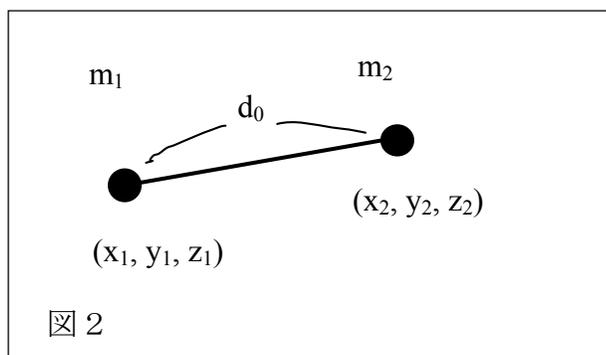
4) 一般化座標, 運動の自由度, Lagrange の運動方程式

力学系一般の問題に対応することを考えて, 直交座標, 極座標, 円筒座標などを一般的に記述する座標として, 一般化座標 (generalized coordinates) の考えを導入する. 問題とする力学系の運動を記述するだけの一般化座標が必要となる. 一粒子系では, 3つの座標変数が, 二粒子系ではその2倍の6個の座標変数が必要である. 一般に n 粒子系では $3n$ 個の座標変数となる. しかし, これら n 粒子系は n 個の自由粒子の単なる集合である為に $3n$ 個の座標変数が必要となるのであって, もし, 粒子間に何らかの拘束条件が付随していれば, その拘束条件の数だけ, 独立な座標変数の数は減少する. このような, 力学系の運動を記述するに必要な独立な座標変数の数は自由度 (degree of freedom) と呼ばれる. n 粒子系に r 個の拘束条件がある時, 自由度 f は,

$$f=3n-r \quad (1)$$

となる. 例えば, 2原子分子の原子間距離が一定との条件が付随している場合 (図2), この条件がなければ6個の座標変数となるが, 原子間距離が一定との剛体的拘束条件,

$$(d_0)^2=(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2+(z_2-z_1)^2 \quad (2)$$



があれば, 自由度は $6-1=5$ で, 5個の変数が独立な一般化座標となる.

そこで, 自由度 f の力学系の Lagrange 関数は, 一般化座標 (q_1, q_2, \dots, q_f) と一般化座標の一階の時間微分 $(\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_f)$ の $2f$ 個の変数で与えられ,

$$L = L(q_1, q_2, \dots, q_f; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_f) \quad (3)$$

であり,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_1} = 0, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_2} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_2} = 0, \quad \dots, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_f} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_f} = 0, \quad (4)$$

が成立する. これが, 一般的な **Lagrange の運動方程式** (Euler-Lagrange の運動方程式)である. (2)のような拘束条件がある場合については, (4)とは少し異なる形で一般的な取り扱いが可能となるが, これは **Lagrange の未定乗数法**として § 7 で議論する.

以下では, 一般化座標 (q_1, q_2, \dots, q_f) を用いた時 (4) が成立すれば, もう一つの別の一般化座標 (Q_1, Q_2, \dots, Q_f) を用いても, やはり (4) と同一の

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_1} \right) - \frac{\partial L}{\partial Q_1} = 0, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_2} \right) - \frac{\partial L}{\partial Q_2} = 0, \quad \dots, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_f} \right) - \frac{\partial L}{\partial Q_f} = 0, \quad (5)$$

が成立することを示し, どのような一般化座標を用いても Lagrange の運動方程式が成立することを確認する.

5) 座標変換に不変な Lagrange の運動方程式

座標系 (q_1, q_2, \dots, q_f) を考えた時,

$$L = L(q_1, q_2, \dots, q_f; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_f) \quad (3)$$

であり,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_1} = 0, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_2} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_2} = 0, \quad \dots, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_f} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_f} = 0, \quad (4)$$

が成立するとする. この時, (q_1, q_2, \dots, q_f) を旧座標系とし, もう一つの新しい座標系を (Q_1, Q_2, \dots, Q_f) と考え,

$$q_1 = q_1(Q_1, Q_2, \dots, Q_f), \quad q_2 = q_2(Q_1, Q_2, \dots, Q_f), \quad \dots, \quad q_f = q_f(Q_1, Q_2, \dots, Q_f), \quad (5)$$

であるとする. このような例として, 既に見た (x, y, z) 系と (r, θ, φ) 系の関係を思えば良い. 座標変数の変換に対し, Lagrange の運動方程式が不変であることを以下で確

認しよう.

(3)と(5)より, (3)のLは $L(Q_1, Q_2, \dots, Q_f; \dot{Q}_1, \dot{Q}_2, \dots, \dot{Q}_f)$ であることに注意. ここで, $q_i = q_i(Q_1, Q_2, \dots, Q_f)$ を考え, これを時間で微分することを考える.

まず, $q_i = q_i(Q_1, Q_2, \dots, Q_f)$ の全微分 (微小変化) は,

$$\Delta q_i = \frac{\partial q_i}{\partial Q_1} \Delta Q_1 + \frac{\partial q_i}{\partial Q_2} \Delta Q_2 + \dots + \frac{\partial q_i}{\partial Q_f} \Delta Q_f = \sum_{i=1}^f \frac{\partial q_i}{\partial Q_i} \Delta Q_i$$

この両辺を Δt で割れば,

$$\frac{\Delta q_i}{\Delta t} = \frac{\partial q_i}{\partial Q_1} \frac{\Delta Q_1}{\Delta t} + \frac{\partial q_i}{\partial Q_2} \frac{\Delta Q_2}{\Delta t} + \dots + \frac{\partial q_i}{\partial Q_f} \frac{\Delta Q_f}{\Delta t} = \sum_{i=1}^f \frac{\partial q_i}{\partial Q_i} \frac{\Delta Q_i}{\Delta t}$$

であるから, $\Delta t \rightarrow 0$ を考えれば次の結果となる.

$$\frac{dq_i}{dt} \equiv \dot{q}_i = \frac{\partial q_i}{\partial Q_1} \dot{Q}_1 + \frac{\partial q_i}{\partial Q_2} \dot{Q}_2 + \dots + \frac{\partial q_i}{\partial Q_f} \dot{Q}_f = \sum_{j=1}^f \frac{\partial q_i}{\partial Q_j} \dot{Q}_j \quad (6)$$

である. この両辺を \dot{Q}_k で微分すると,

$$\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{Q}_k} = \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \quad (7)$$

この右辺は, (5)から, (Q_1, Q_2, \dots, Q_f) の関数であることが判る. 従って, (7)の両辺を時間で微分すると,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{Q}_k} \right) = \sum_{j=1}^f \frac{\partial}{\partial Q_j} \left(\frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \right) \frac{dQ_j}{dt} = \sum_{j=1}^f \frac{\partial^2 q_i}{\partial Q_j \partial Q_k} \dot{Q}_j \quad (8)$$

一方, (6)の右辺の $\frac{\partial q_i}{\partial Q_j} \cdot \dot{Q}_j$ で, $\frac{\partial q_i}{\partial Q_j}$ は (Q_1, Q_2, \dots, Q_f) の関数で, $(\dot{Q}_1, \dot{Q}_2, \dots, \dot{Q}_f)$ は

独立な別の変数と考えるから, (6)の両辺を Q_k で微分すると,

$$\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial Q_k} = \sum_{j=1}^f \frac{\partial^2 q_i}{\partial Q_k \partial Q_j} \dot{Q}_j \quad (9)$$

である. (7), (8), (9)から

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{Q}_k} \right) = \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial Q_k} \quad (10)$$

であることが判る.

一方, $L = L(q_1, q_2, \dots, q_f; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_f)$ であり, (5)から $q_i = q_i(Q_1, Q_2, \dots, Q_f)$ であることに注意して, L を Q_k で微分すると,

$$\frac{\partial L}{\partial Q_k} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial Q_k} \right) \quad (11)$$

となる. さらに L を \dot{Q}_k で微分したものを考えるが, (6)から判るように, \dot{Q}_k は \dot{q}_i を通じて L に寄与しているのだから, L を \dot{q}_i で微分したものに \dot{q}_i を \dot{Q}_k で微分したものを掛ける形で表現できる. 即ち,

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{Q}_k} \right) = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \cdot \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \right) \quad (12)$$

二番目の等式は, (7)を用いて書き直した結果である.

(12)の両辺を t で微分すると, 積の微分であるから,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k} \right) &= \sum_{i=1}^f \left\{ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \cdot \left(\frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \right) + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \right) \right\} \\ &= \sum_{i=1}^f \left\{ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \cdot \left(\frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \right) + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \cdot \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial Q_k} \right) \right\} \end{aligned} \quad (13)$$

二番目の等式では(10)の結果を用いている. (13)-(11)を作ると, 各右辺の第二項が同じであるから, これらは消えてしまい, 次のようになる.

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial Q_k} = \sum_{i=1}^f \left\{ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \right) \right\} \cdot \left(\frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \right) \quad (14)$$

これは, 右辺の $\{ \}$ の中が,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \right) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, f)$$

であるなら, 必ず, 左辺側も

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial Q_i} \right) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, f)$$

であることを意味している. 即ち, (3)ならば必ず(4)が成立する.

Lagrange の運動方程式 (Euler-Lagrange の運動方程式)は, 座標変換に対して不変であり, 直交座標, 極座標などどのような座標系でも成立する. その結果は Newton の運動方程式と同じである. ここでの議論では, $L = L(q_1, q_2, \dots, q_f; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_f)$ であるとの条件の一般的力学系を考えており, 以前に述べた $L = T - V$ のように L の具体的な内容は前提とされていないことに注意しよう.