§11　Hamilton-Jacobi の偏微分方程式

母関数 W による正準変換が $H'=0$ とする場合, $W(q_i,t)$ に関する Hamilton-Jacobi の偏微分方程式が得られ, これは, さらに正準量子化の手続きを経て, Schrödinger の波動方程式になる.これは前節最後で述べた． Hamilton-Jacobi の偏微分方程式に至る過程で，正準変換が極めて重要な役割を演じている．その正準変換の役割をもう少し丁寧に見てみる．そして， Hamilton-Jacobi の偏微分方程式の解を求めることは，運動方程式一般を解くことであると理解しよう．

１）力学系運動の記述を単純化する正準変換

正準方程式が，力学変数を変えても成立すると言うのが正準変換である．力学系運動の本質は正準方程式の Hamiltonian にあり，その記述に使われる座標変数が何であるかには依らないはずである．これは，時間を陽に含まない任意の物理量 F の時間微分が H と F とのポアソン括弧式に等しいこと，

$$\frac{dF}{dt}=[H,F]_C \tag{1-1}$$

からも示唆される．ポアソン括弧式は正準変換で不変であり，同時に，ポアソン括弧式を不変にする座標変換が正準変換である（これは後の章で議論する）．従って，力学的運動を記述するには正準変数であれば何でも良い．逆に，力学変数が最も単純になる正準変数を使うと，力学系運動の記述自体が簡単になる．**最も単純な力学変数とは，全てが定数の力学変数である**．従って，**力学変数を全て定数にする正準変換があれば，力学系運動の記述が極端に単純化される**． $(q_i,p_i)\to(Q_k,P_k)$ が力学変数を全て定数にする正準変換であるとは，

$$\dot{P}_k=-\frac{\partial H'}{\partial Q_k}=0,\qquad \dot{Q}_k=\frac{\partial H'}{\partial P_k}=0 \tag{1-2-1}$$

$$P_k=\alpha_k,\quad Q_k=\beta_k\qquad (k=1,2,.....,f) \tag{1-2-2}$$

のことである． α_k,β_k が全て定数であるから，これは新 Hamiltonian が 0，H'=0 を与える正準変換である．力学変数が一定であるから，静止系への正準変換と呼ぶことも出来る．

$W_2(q_i,P_k,t)$ なる母関数を考えると，

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i},\quad Q_k = \frac{\partial W}{\partial P_k},\quad H' = H + \frac{\partial W}{\partial t} \tag{1-3}$$

の三点セットが得られることは既に述べた．ここでは，*H'=0* である正準変換を考えているので，(1-2-2)から，P_k は定数α_kとなり，

$$W_2(q_i, P_k, t) = W(q_i, \alpha_k, t) = W(q_i, t) \tag{1-4}$$

と書くことが出来きる，また，*H'=0* であるから，三点セットの第三式から H’が消える．第二式はしばらく保留にして，第一，第三式,

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i},\qquad \frac{\partial W}{\partial t} = -H(q_i, p_i, t) \tag{1-5}$$

を一つにすると，

$$\frac{\partial W}{\partial t} + H(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}, t) = 0 \tag{1-6}$$

が得られる． **Hamilton-Jacobi の偏微分方程式**と呼ばれる．この W に関する偏微分方程式は，正準方程式の本質を確実に表現しているはずである．

一般に, *(f+1)*個の(q_i, t)を独立変数とする関数 W に対する一階偏微分方程式で, 変数と同じ数*(f+1)*）個の定数α_kを含む解,

$$W = W(q_1, q_2, ..., q_f, t, \alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_f) + \alpha_{f+1} = W(q_i, \alpha_k, t) + \alpha_{f+1} \tag{1-7}$$

は**完全解（あるいは完全積分）**と呼ばれる．(1-6)の方程式で，W は微分係数の形で入っているので，W が解なら W に任意の定数を加えたものも解となる．一つの定数α_{f+1}はこのような単なる付加定数である．**この付加定数を除いた *f* 個の定数α_k を含む $W(q_i, \alpha_k, t)$が力学問題の解としては重要**であり，これは **Hamilton の主関数(Hamilton's principal function)**と呼ばれる．一階の偏微分方程式の**一般解**は任意関数を含むものであり，数学的には重要でも力学的には重要ではない.

ここで, 保留にした三点セット第二式について考える. この方程式の解$W(q_i, t)$に基づいて，q_i, p_i を時間 t の関数としてどのように決めるかの問題に繋がる. 解$W(q_i, t)$は f 個の定数α_kを含むので, $W(q_i, \alpha_k, t)$と書く．(1-3)の第二式$Q_k = \dfrac{\partial W}{\partial P_k}$は，(1-2-1)と(1-2-2)で$P_k = \alpha_k$，$Q_k = \beta_k$ であったから，

$$\beta_k = \frac{\partial W(q_i,\alpha_k,t)}{\partial \alpha_k} \qquad (1\text{-}8)$$

である．この等式は定数α_k ，β_kと t，q_i で表現されているから，これを $q_i = q_i(\alpha_k,\beta_k,t)$ の形に解けば，q_i が決ったことになる．一方，p_iの方は，(1-5)の

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i} = \frac{\partial W(q_i,\alpha_k,t)}{\partial q_i} \qquad (1\text{-}9)$$

を使う．この右辺に (1-8)からの$q_i = q_i(\alpha_k,\beta_k,t)$を代入すれば，$p_i = p_i(\alpha_k,\beta_k,t)$が決まる．このようにして，

$$q_i = q_i(\alpha_k,\beta_k,t), \qquad p_i = p_i(\alpha_k,\beta_k,t) \qquad (k = 1,2,.....,f) \qquad (1\text{-}10)$$

が得られ，力学問題は解けたことになる．

(1-6)で，もし，H が時間 t を陽に含まなければ，座標と時間の変数は分離できて，この解は単純になることが判る．この問題に進む前に，Hamilton-Jacobi の偏微分方程式(1-4)～(1-6)の意味を，少し別の角度から考える．

２） **Hamilton-Jacobi の偏微分方程式の意味すること**

(1-6)の Hamilton-Jacobi の偏微分方程式,

$$\frac{\partial W}{\partial t} + H(q_i,\frac{\partial W}{\partial q_i},t) = 0$$

はこれ自体単純であると言えば，確かにそうである．しかし，その意味はもっと明確にできる． $W(q_i,t)$の時間についての導関数は，変数が(q_i,t)であるから，

$$\frac{dW(q_i,t)}{dt} = \sum_i \frac{\partial W}{\partial q_i}\frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial t} = \sum_i \frac{\partial W}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial W}{\partial t} \qquad (2\text{-}1)$$

と表現できる．(1-3)の第一式$p_i = \partial W/\partial q_i$，第三式 $\partial W/\partial t = -H$を使うと，

$$\frac{dW(q_i,t)}{dt} = \sum_i p_i\dot{q}_i - H = L \qquad (2\text{-}2)$$

となる．最後の等式は，L の Legendre 変換で H を定義する式で，L と H を入れ替えたものである． Hamilton-Jacobi の偏微分方程式の**母関数 W の時間微分が Lagrangian (L)**であると言える．変分原理の議論で，作用を Lagrangian (L) の経路積分で定義した．

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i) dt$$

これは時間に関する定積分であるが，　$t_2 \to t$　として考えてみれば，

$$I = \int_{t_1}^{t} L(q_i, \dot{q}_i) dt \qquad (2\text{-}3)$$

である．$t_2 \to t$ としたから，従来の**作用量** I の呼称より，**作用関数** I と呼ぶ方が良い．これを t で微分したものは L であるから，(2-2), (2-3)より，

$$W = \int_{t_1}^{t} L(q_i, \dot{q}_i) dt + const. \qquad (2\text{-}4)$$

であることが判る．

Hamilton-Jacobi の偏微分方程式の母関数 $W(q_i, t)$ の時間微分が Lagrangian (L)であること（2-2），その母関数 W は作用関数 I と任意定数の和であること（2-4），がわかる． W と L の判り難さを，Hamilton-Jacobi の偏微分方程式が解消してくれる．極端なことを言えば，母関数 W は Hamilton-Jacobi の偏微分方程式の解であるものだけを考え，その他諸々の母関数はもう忘れても良いくらいである．

ただし，(2-4)は，W を求めることに直接は利用できない，(2-4)右辺の時間積分の実行には経路を指定しなければならず，これは，W の解から $q_i = q_i(\alpha_k, \beta_k, t)$ が得られた後の話だからである．

３）**H が時間 t を陽に含まない場合の Hamilton-Jacobi の偏微分方程式**

Hamilton-Jacobi の偏微分方程式(1-6)に現れる Hamiltonian (H)が，時間 t を陽に含まない場合を考える．これは問題を限定してしまうことであるが，多くの保存系の問題解決に力を発揮する．

$$\frac{\partial W}{\partial t} + H(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}, t) = 0 \quad \to \quad \frac{\partial W}{\partial t} = -H(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}) \qquad (3\text{-}1)$$

H は保存され一定であるから，$\partial W / \partial t$ も一定である．故に，

$$\frac{\partial W}{\partial t} = const. = -H(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}) = -E$$

を意味する．E は保存される H の値，エネルギ−である．故に，

$$W(q_i,\alpha_k,t) = S(q_i,\alpha_k) - E\cdot t \qquad (3\text{-}2)$$

と時間変数と座標変数を分離した形に表現できる．

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -E, \quad \frac{\partial W}{\partial q_i} = \frac{\partial S(q_i,\alpha_k)}{\partial q_i} \qquad (3\text{-}3)$$

である．(3-1)から，Hamilton-Jacobi の偏微分方程式は,

$$H(q_i,\frac{\partial S}{\partial q_i}) = E \qquad (3\text{-}4)$$

となる．これは**時間を含まない Hamilton-Jacobi の偏微分方程式**と呼ばれる．(3-2)から，E・t は作用関数 W と同じ [エネルギー・時間]の次元を持つ． (3-3)の第一式は，$p_i \leftrightarrow (-E)$，$q_i \leftrightarrow t$ として，エネルギーと時間を正準変数対と考えることに対応する． $S(q_i,\alpha_k)$は作用関数で，W と同じく [エネルギー・時間]の次元を持つ．

(3-4)を解くことによって，$S(q_i,\alpha_k)$が求められるが，S は$\alpha_k(k=1,2,...,f)$の定数を含むので，E も$\alpha_k(k=1,2,...,f)$に依存することになる．だから，

$$E = E(\alpha_1,\alpha_2,.....,\alpha_f) \qquad (3\text{-}5)$$

の意味である．

$S(q_i,\alpha_k)$ からどのようにして，$q_i = q_i(t)$，$p_i = p_i(t)$が得られるかは, (1-8), (1-9)と同様である． Wを$S(q_i,\alpha_k)$で書く．(1-3)と(3-3)より，

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i} = \frac{\partial S(q_i,\alpha_k)}{\partial q_i} \qquad (3\text{-}6)$$

(1-8)の関係に留意して，(3-2)の両辺を$\alpha_k(k=1,2,...,f)$で偏微分すれば，

$$\beta_k = \frac{\partial W(q_i,\alpha_k,t)}{\partial \alpha_k} = \frac{\partial S(q_i,\alpha_k)}{\partial \alpha_k} - \frac{\partial E}{\partial \alpha_k}\cdot t$$

が成立する．

$$(\frac{\partial E}{\partial \alpha_k})t + \beta_k = \frac{\partial S(q_i,\alpha_k)}{\partial \alpha_k} \qquad (3\text{-}7)$$

である. (3-7)を$q_i = q_i(\alpha_k,\beta_k,t)$と解き, これを(3-6)右辺に代入して，$p_i = p_i(\alpha_k,\beta_k,t)$が決まる．以上の考え方から，Hamilton-Jacobi の偏微分方程式， $H(q_i,\frac{\partial S}{\partial q_i}) = E$，の解き方は，(3-6),(3-7)から，

$$\beta_k = \frac{\partial S}{\partial \alpha_k} - \frac{\partial E}{\partial \alpha_k}\cdot t \qquad (k = 1,2,...,f) \qquad (3\text{-}8\text{-}1)$$

$$p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k} \qquad (k = 1,2,...,f) \qquad (3\text{-}8\text{-}2)$$

あるいは，$\alpha_1 = E$ と選んでみると，(3-8-1)は，

$$t + \beta_1 = \frac{\partial S}{\partial \alpha_1}, \qquad \beta_k = \frac{\partial S}{\partial \alpha_k} \quad (k = 2,...,f) \qquad (3\text{-}8\text{-}3)$$

となる．

次に，$S(q_i,\alpha_k)$ の意味を考える． (1-2-2)の $P_k = \alpha_k$，$Q_k = \beta_k$ $(k = 1,2,.....,f)$ はH'=0 とする正準変換に基づいている．その正準変換の母関数 W を変数 t と座標変数に分離し，後者の部分が $S(q_i,\alpha_k)$ である． $S(q_i,\alpha_k)$ が母関数 W と同様の役割を果たしていることは間違いない． (3-6), (3-7)を参照して， $P_k = \alpha_k = P'_k$ はそのままとし， (3-7)を新たな一般座標 Q'_k とみなすと，(3-6)は

$$p_i = \frac{\partial S(q_i,P_k)}{\partial q_i} = \frac{\partial S(q_i,P'_k)}{\partial q_i} \qquad (3\text{-}9\text{-}1)$$

で．(3-7)は，

$$Q'_k = (\frac{\partial E}{\partial \alpha_k})t + \beta_k = (\frac{\partial E}{\partial \alpha_k})t + Q_k = \frac{\partial S(q_i,P_k)}{\partial P_k} = \frac{\partial S(q_i,P'_k)}{\partial P_k} \qquad (3\text{-}9\text{-}2)$$

である． さらに，$S(q_i,\alpha_k) = S(q_i,P_k)$ は t を陽に含まないから，

$$\frac{\partial S(q_i,P_k)}{\partial t} = 0 = \frac{\partial S(q_i,P'_k)}{\partial t} \qquad (3\text{-}9\text{-}3)$$

$W_2(q_i,P_k,t)$ なる母関数を考え，W に対して，(1-3)の

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i}, \quad Q_k = \frac{\partial W}{\partial P_k}, \quad H' = H + \frac{\partial W}{\partial t} \qquad (1\text{-}3)$$

の三点セットが成立することを使った. 今の場合，$(q_i,p_i) \to (Q_k,P_k) = (\beta_i,\alpha_i)$ では，(1-3)の第三式は，

$$H' = H + \frac{\partial W}{\partial t} = 0$$

である．(3-9-1)～(3-9-3)は，次の２段階の変数変換を表している．

$$(q_i,p_i) \to (Q_k,P_k) = (\beta_i,\alpha_i) \to (Q'_k,P'_k) = ((\frac{\partial E}{\partial \alpha_k})t + \beta_k,\alpha_k) \qquad (3\text{-}10\text{-}1)$$

ここで，中間段階を省略すると，

$$(q_i, p_i) \to (Q'_k, P'_k) = ((\frac{\partial E}{\partial \alpha_k})t + \beta_k, \alpha_k) \tag{3-10-2}$$

の変換である． (1-3)で， $Q_k \to Q'_k, P_k \to P'_k, H'(=0) \to H''(=0), W \to S$ と書き直したものを(3-9-1)～(3-9-3)は満足しており，

$$\dot{P}'_k = -\frac{\partial H''}{\partial Q'_k} = 0, \qquad \dot{Q}'_k = \frac{\partial H''}{\partial P'_k} = \frac{\partial E}{\partial \alpha_k} = \omega_k \tag{3-11}$$

が成立する． (3-9-2)の $(q_i, p_i) \to (Q'_k, P'_k) = (\omega_k t + \beta_k, \alpha_k)$ の $H''(=0)$ の変換は，正準変換であり，この場合 $H''=0$ であるから，Hamiltonian に全ての座標変数が含まれていない．だから全ての座標変数が循環座標であり，(3-10)の第一式のようにすべての運動量が保存量になる．従って， $S(q_i, \alpha_k)$ **は，全ての座標が循環座標になるような正準変換の母関数である．** $\alpha_1 = E$ と選んだ場合を考えると，(3-10-2)は， $(Q'_1, P'_1) = (t + \beta_1, \alpha_1 = E)$ である．時間が一般化座標になり，これに正準共役な一般化運動量が E となっている．このように(3-4)の「時間を含まない Hamilton-Jacobi の偏微分方程式の解」である $S(q_i, \alpha_k)$ は，力学の問題を単純化している．

$S(q_i, \alpha_k)$ に残っている各座標変数を単独に取り扱うことが出来れば，即ち，**座標変数の相互分離** が出来れば，問題はさらに単純化される．このことについて次に考える．

４）座標変数の相互分離

$S(q_i,\alpha_k)$の各座標変数q_iに対して，(3-6)の

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i} = \frac{\partial S(q_i,\alpha_k)}{\partial q_i}$$

が成立する．今，q_i　が循環座標であるとすると，これに共役な運動量$p_i = \alpha_i$は保存量となり定数である．故に，(3-6)は,

$$\alpha_i = \frac{\partial S(q,\alpha)}{\partial q_i} \tag{4-1}$$

である．ただし，S の変数の添字は省略した．以後も省略する．これをq_iで積分すれば,

$$S(q,\alpha) = \alpha_i \cdot q_i + S_0 \tag{4-2}$$

となる．S_0は積分定数であるからq_iとは無関係である．このことからすると，もし，q_j**以外の全て座標が循環座標**だとすると，**循環座標と共役な運動量は全て定数**となるので，$S(q,\alpha)$は次のように表現できるはずである．

$$S(q,\alpha) = \sum_{i \neq j} \alpha_i \cdot q_i + S_0(q_j;\alpha_1,\alpha_2,.....,\alpha_f) \tag{4-3}$$

この場合，q_j以外の全ての座標が循環座標だから，(3-4)の Hamilton-Jacobi の偏微分方程式は，以下の，q_jについての$\dfrac{dS}{dq_j}$だけの方程式一つになる．

$$H(q_j,\frac{dS}{dq_j},\alpha_1,\alpha_2,.....,\alpha_f) = E \tag{4-4}$$

ここで$\dfrac{dS}{dq_j}$が決まるので，その結果を(3-8)に持ち込むことで解が得られる．

次に**座標変数の相互分離**を考える．S の作用関数が以下のような和になっており,

$$S(q,\alpha) = \sum_k S_k(q_k;\alpha_1,\alpha_2,.....,\alpha_f) \qquad (k = 1,2,...,f) \tag{4-5}$$

かつ，H が次の形であれば,

$$H(q_k,\frac{dS}{dq_k},\alpha_1,\alpha_2,.....,\alpha_f) = \alpha_k \qquad (k = 1,2,....,f) \tag{4-6}$$

座標変数の相互分離が可能となる．即ち，

$$\frac{\partial S(q,\alpha)}{\partial q_k}=\frac{dS(q,\alpha)}{dq_k}=\frac{d}{dq_k}S_k(q_k;\alpha_1,\alpha_2,.....,\alpha_f)$$

であるから，各座標変数毎に

$$H(q_k,\frac{dS_k}{dq_k},\alpha_1,\alpha_2,.....,\alpha_f)=\alpha_k \qquad (k=1,2,....,f) \tag{4-7}$$

と，$\frac{dS_k}{dq_k}$に関する方程式が得られる．$\frac{dS_k}{dq_k}$が得られれば，それを積分して，(4-5)に従い，和を作り，(3-8)に持ち込めば良い．次節で具体例を示す.

５）**Hamilton-Jacobi** 方程式の解法例

5.1) 質量 m，バネ定数 k の調和振動子の運動を Hamilton-Jacobi の偏微分方程式を用いて解く.

この系の H は全エネルギ−E に等しく，$H=\frac{(p_x)^2}{2m}+\frac{1}{2}kx^2=E$ である．振動の角周波数ω，$\omega=\sqrt{k/m}$， を使うと，

$$H=\frac{(p_x)^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=E \tag{5-1}$$

である．(3-4) , (3-8-2)より，一般的には，$H(q_k,\frac{\partial S}{\partial q_k})=E$，$p_k=\frac{\partial S}{\partial q_k}$ であるが，一変数であるから，$q_k\to x$，$p_k=\partial S/\partial q_k\to p_x=dS/dx$ となる.

故に，

$$H=\frac{1}{2m}(\frac{dS}{dx})^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=E \tag{5-2}$$

である．これは，

$$(\frac{dS}{dx})^2=2mE-m^2\omega^2x^2 \tag{5-3}$$

となるから，S は次のような積分になる.

$$S=\pm\int\sqrt{2mE-m^2\omega^2x^2}dx=\pm m\omega\int\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}-x^2}dx \tag{5-4}$$

(3-8-3)のように$\alpha_1=E$ と選ぶと，

$$t+\beta_1=\frac{\partial S}{\partial \alpha_1} \;\rightarrow\; t+\beta=\frac{\partial S}{\partial E}=\pm\frac{1}{\omega}\int(\frac{2E}{m\omega^2}-x^2)^{-1/2}dx=\mp\frac{1}{\omega}\cos^{-1}(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}x) \quad (5\text{-}5)$$

となる． 最後の等号は，以下の結果に依る：

$y=\int\frac{dx}{\sqrt{a^2-x^2}}$ の積分は， $x=a\cos z$， $a>0$ とすれば，

$$y=\int\frac{dx}{\sqrt{a^2-x^2}}=\int\frac{-asinz}{asinz}dz=-z$$ である．

一方， $x=a\cos z \rightarrow (x/a)=\cos z \rightarrow z=\cos^{-1}(x/a)$ だから，

$$y=\int\frac{dx}{\sqrt{a^2-x^2}}=-\cos^{-1}(x/a)$$

$$(\mp y)=\cos^{-1}(x/a)\rightarrow(x/a)=\cos(\mp y)=\cos y \quad (5\text{-}6)$$

(5-5), (5-6)から，

$$x=\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\cos\omega(t+\beta)=\sqrt{\frac{2E}{k}}\cos(\omega t+\phi),\quad \phi=\omega\beta \quad (5\text{-}7)$$

$p_x=dS/dx$ であるから，(5-4)より，

$$p_x=\frac{dS}{dx}=\pm\sqrt{2mE-m^2\omega^2x^2}=\pm\sqrt{2mE-m^2\omega^2(\frac{2E}{m\omega^2})\cos^2(\omega t+\phi)}$$

$$=\pm\sqrt{2mE}\,sin(\omega t+\phi) \quad (5\text{-}8)$$

となる．

5.2) 中心力場の一粒子系の運動を Hamilton-Jacobi 方程式を用いて求める．

保存力場における質点 m に対する具体的な Lagrange 関数 L は，§ 1 で見たように， $L=(1/2)m(\dot{r}^2+r^2\dot{\theta}^2+r^2\dot{\varphi}^2sin^2\varphi)-V(r,\theta,\varphi)$ である．また，§ 4 での結果から，保存力場の一質点系の正準運動量は，

$$p_r=\frac{\partial L}{\partial\dot{r}}=m\dot{r},\qquad p_\theta=\frac{\partial L}{\partial\dot{\theta}}=mr^2\dot{\theta},\qquad p_\varphi=\frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}}=mr^2\dot{\varphi}\,sin^2\theta \quad (5\text{-}9)$$

であり，Hamiltonian は， $H=\sum_{i=1}^{f}p_i\dot{q}_i-L$ として，

$$H=\frac{1}{2m}\{(p_r)^2+\frac{1}{r^2}(p_\theta)^2+\frac{1}{r^2sin^2\theta}(p_\varphi)^2\}+V(r,\theta,\varphi)$$

である．中心力場の一粒子運動では，$V(r,\theta,\varphi)\rightarrow V(r)$ とすれば良い．だから，中

心力場の一粒子運動の Hamiltonian は,

$$H = \frac{1}{2m}\{(p_r)^2 + \frac{1}{r^2}(p_\theta)^2 + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}(p_\varphi)^2\} + V(r) \tag{5-10}$$

となる．また，一粒子運動の角運動量の二乗は保存量であり，§１で述べたように,

$$l^2 \equiv l_x{}^2 + l_y{}^2 + l_z{}^2 = m^2 r^4\{(\dot{\theta})^2 + sin\theta\cdot(\dot{\varphi})^2\}$$

となる．時間微分は角度変数のみで，動径 r の時間微分は含まれていないことを注意した．(5-9)を使うと,

$$l^2 \equiv l_x{}^2 + l_y{}^2 + l_z{}^2 = (p_\theta)^2 + \frac{(p_\varphi)^2}{sin^2\theta} \tag{5-11}$$

である．これを使うと，(5-10)の Hamiltonian は,

$$H = \frac{1}{2m}\{(p_r)^2 + \frac{(l)^2}{r^2}\} + V(r)$$

これは，§１-３）で考えた正電荷を持つ核の廻りの電子の運動に当たる．運動平面内に(r,θ')を設定すれば，$p_{\theta'} = l$（一定）である．

(5-10)の Hamiltonian から，Hamilton-Jacobi の運動方程式は，次のようになる．

$$\frac{1}{2m}\{(\frac{\partial S}{\partial r})^2 + \frac{1}{r^2}(\frac{\partial S}{\partial\theta})^2 + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}(\frac{\partial S}{\partial\varphi})^2\} + V(r) = E \tag{5-12}$$

ここで，(4-5),(4-6)の場合のような変数分離を考える．(4-5)のように,

$$S(r,\theta,\varphi) = S_r(r) + S_\theta(\theta) + S_\varphi(\varphi) \tag{5-13}$$

と置いてみる．各変数での偏微分は単なる微分になる．即ち,

$$\frac{\partial S(r,\theta,\varphi)}{\partial r} = \frac{dS_r(r)}{dr},\quad \frac{\partial S(r,\theta,\varphi)}{\partial\theta} = \frac{dS_\theta(\theta)}{d\theta}.\quad \frac{\partial S(r,\theta,\varphi)}{\partial\theta} = \frac{dS_\varphi(\varphi)}{d\varphi} \tag{5-14}$$

これを(5-12)に代入して,

$$\frac{1}{2m}\{(\frac{dS_r}{dr})^2 + \frac{1}{r^2}(\frac{dS_\theta}{d\theta})^2 + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}(\frac{dS_\varphi}{d\varphi})^2\} + V(r) = E \tag{5-15}$$

である．Lagarangian にも Hamiltonian にも変数φは存在しないので，変数φは循環座標であり，これに共役な運動量は保存量である．この運動量をa_φと記すことにすると，$p_k = \dfrac{\partial S}{\partial q_k}$だから，$a_\varphi = \dfrac{\partial S}{\partial\varphi} = \dfrac{dS_\varphi}{d\varphi}$であり，積分して,

$$S_\varphi = a_\varphi \cdot \varphi \tag{5-16}$$

とすることができる．これを(5-15)に代入して，

$$\frac{1}{2m}\{(\frac{dS_r}{dr})^2 + \frac{1}{r^2}(\frac{dS_\theta}{d\theta})^2 + \frac{(a_\varphi)^2}{r^2 sin^2\theta}\} + V(r) = E \tag{5-17}$$

となるが，左辺の第二，第三項については，

$$(\frac{dS_\theta}{d\theta})^2 + \frac{(a_\varphi)^2}{sin^2\theta} = (a_\theta)^2 \tag{5-18}$$

と置くことができる．$p_\theta = \frac{\partial S}{\partial\theta} = \frac{dS_\theta}{d\theta}$， $p_\varphi = a_\varphi$ であるから，(5-18)は(5-11)にそのまま対応しており，$(a_\theta)^2$は保存量としての全角運動量の二乗である．(5-18)を使うと，(5-17)は，

$$\frac{1}{2m}\{(\frac{dS_r}{dr})^2 + \frac{(a_\theta)^2}{r^2}\} + V(r) = E \tag{5-19}$$

となり，変数は r のみとなる．

以上のようにして，Hamilton-Jacobi の運動方程式は，

$$S_\varphi = a_\varphi \cdot \varphi \tag{5-16}$$

$$(\frac{dS_\theta}{d\theta})^2 + \frac{(a_\varphi)^2}{sin^2\theta} = (a_\theta)^2 \tag{5-18}$$

$$\frac{1}{2m}\{(\frac{dS_r}{dr})^2 + \frac{(a_\theta)^2}{r^2}\} + V(r) = E \tag{5-19}$$

の各変数に関する三つの方程式に分離できる．

(5-19)は，

$$p_r = \frac{dS_r}{dr} = \pm\sqrt{2m(E - V - \frac{{a_\theta}^2}{2mr^2})}$$

となるから，これを r で積分して，

$$S_r = \pm\int^r \sqrt{2m(E - V - \frac{{a_\theta}^2}{2mr^2})}dr \tag{5-20}$$

となる．

(5-18)は，§１-３）で考えた正電荷を持つ核の廻りの電子の運動に相当し．二次元の運動平面内に(r,θ')を設定すれば，

$$\frac{\partial S}{\partial \theta'} = p_{\theta'} = l = a_\theta \qquad (5\text{-}21)$$

である．この場合，(r,θ')のうちの変数θ'に共役な運動量は(5-21)にあるように保存されるので，θ'は循環座標である．変数r以外は全て循環座標である(4-3)のケースに当たる．q_j 以外は全て循環座標であるときは，

$$S(q,\alpha) = \sum_{i\neq j} \alpha_i \cdot q_i + S_0(q_j;\alpha_1,\alpha_2,.....,\alpha_f) \qquad (4\text{-}3)$$

であった．従って，(5-21) は，

$$S(r,\theta';a_\theta,E) = a_\theta \cdot \theta' + S_0(r;a_\theta,E)$$

となり，ここでの$S_0(r;a_\theta,E)$は(5-19)のS_rであり，(5-20)がこれを与えている．従って，

$$S(r,\theta';a_\theta,E) = a_\theta \cdot \theta' + S_r \qquad (5\text{-}22)$$

である．これより，(3-8-3)のように$\alpha_1 = E$，$\alpha_2 = a_\theta$ とすれば，

$$t + \beta_1 = \frac{\partial S}{\partial \alpha_1} \quad \rightarrow \quad t + \beta_1 = \frac{\partial S_r}{\partial E} = \pm\int^r \frac{2mdr}{\sqrt{2m\{E - V - (a_\theta{}^2/2mr^2)\}}} \qquad (5\text{-}23)$$

t_0の時に$(r,\theta') = (r_0,\theta_0)$とすると，

$$t_0 + \beta_1 = \pm\int^{r_0} \frac{2mdr}{\sqrt{2m\{E - V - (a_\theta{}^2/2mr^2)\}}} \quad \rightarrow \quad \beta_1 = -t_0 \pm \int^{r_0} \frac{2mdr}{\sqrt{2m\{E - V - (a_\theta{}^2/2mr^2)\}}}$$

これを(5-23)に代入すれば，

$$t - t_0 = \pm\int_{r_0}^{r} \frac{2mdr}{\sqrt{2m\{E - V - (a_\theta{}^2/2mr^2)\}}} \qquad (5\text{-}24)$$

となる．これが動径 r の時間依存性を与える．

また，(3-8-3)から

$$\beta_2 = \frac{\partial S}{\partial \alpha_2} \quad \rightarrow \quad \beta_2 = \frac{\partial S}{\partial a_\theta} = \theta' + \frac{\partial S_r}{\partial a_\theta} \quad \rightarrow \quad \theta' = \beta_2 - \frac{\partial S_r}{\partial a_\theta} \qquad (5\text{-}25)$$

である． t_0の時に$(r,\theta') = (r_0,\theta_0)$とすると，$\theta_0 = \beta_2 - (\frac{\partial S_r}{\partial a_\theta})_{(r_0,\theta_0)}$ であるから，(5-25)でβ_2を消去すると，

$$\theta' - \theta_0 = -(\frac{\partial S_r}{\partial a_\theta}) + (\frac{\partial S_r}{\partial a_\theta})_{(r_0,\theta_0)} = -\{(\frac{\partial S_r}{\partial a_\theta}) - (\frac{\partial S_r}{\partial a_\theta})_{(r_0,\theta_0)}\}$$

となり，これは，

$$\theta' - \theta_0 = \mp \int_{r_0}^{r} \frac{2a_\theta dr}{r^2 \sqrt{2m\{E - V - (a_\theta{}^2 / 2mr^2)\}}} \tag{5-26}$$

である．これは軌道(r, θ')を与える．(5-24)とあわせて軌道の時間変化が記述できる．