数理解析研究所講究録
788巻 1992年 45-58

Lagrange 解析について

宮城教育大・教育　山田春樹 (Haruki YAMADA)

1° はじめに.

多変数の実WKB法における大域的「近似解」の構成に際して現れる困難はMaslovの方法により除かれた. しかし, Maslovの意味の「近似解」が本当に, 真の解の漸近近似解になっているか否かは不明である. また量子力学の固有値問題を扱う際に用いられる論法「$\hbar$を0に近づくparameterとみて漸近的な計算を行い, 然るのちに$\hbar$として有限な値を代入して量子化条件を導く」ことは数学的に問題がある.

Lerayは Maslov の考えを整理, 発展させ,「漸近近似」とは異なるわく組みの中で「新しい問題」を取り扱うことを提案した. このわく組みがLagrange解析である. この立場に立つと, Planck定数が, 理論の中で, 無限小parameterとしてでなく, ある有限定数(data)として導入できる.

一様な磁場の中での水素原子の電子の運動を記述するSchrödinger方程式の固有値問題については, 変数分離法と

特殊関数の性質を用いて量子数が導入され，離散的なenergyの値が具体的に計算できている．一方，この問題に対応する「Lagrange解析における問題」を考えると，全く同じ量子化条件が得られる．

以下では，Lagrange解析の簡単な説明ののちに，具体的な計算を通して Lagrange解析の立場からの量子化条件の導出の過程を説明する．

2° 多変数実WKB法．

これは普通

$$a\left(x, \frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial x}\right)u = 0 \qquad \nu \in i[0,\infty) \quad , \quad x \in \mathbb{R}^{l}$$

の $\nu \to i\infty$ での「近似解」

$$u(x,\nu) = \left(\sum_{0}^{\infty} \frac{\alpha_r(x)}{\nu^r}\right) e^{\nu\phi(x)}$$

を次のような仕方で求める手続きのことを云う．

(1) $\phi(x)$は，作用素 a を与える Hamiltonian $H(x,p)$ に対して，$H(x, \nabla\phi(x)) = 0$ をみたすように選ぶ．

(2) $\alpha_r(x)$ $(r=0,1,2,\cdots)$ は相空間において $H(x,p)$ の定める Hamilton 流にそって，ある種の線型一階常微分方程式を解く（即ち積分する）ことにより逐次求める．

(1)は局所的には相空間内の l 次元多様体 V で，その上で

$$d\langle p, dx\rangle = dp\wedge dx \ \left(= \sum dp_j \wedge dx_j\right) = 0$$

となるものをみつけるという問題と同値であり，このように云い換えた問題は相空間内で大域的に設定できる．一般に相空間（$2l$次元）内でl次元多様体Vが，

$$dp \wedge dx = 0 \quad \text{on } V$$

をみたすとき，Vを Lagrange 多様体とよぶ．したがって，WKB「近似解」を構成するにはまず，超曲面 $H(x,p)=0$ 内の Lagrange 多様体Vを見つけなくてはならない．ところが大域的に定まるVは必ずしもx-変数の関数の graph として

$$V : p = p(x)$$

の形に表せるわけではない．このようにV上の点で，x変数の関数の graph として表せないような点をVの caustic とよびΣ_Vで表すことにする．すると，$\phi(x)$，$\alpha_r(x)$はΣ_V上特異性をもち，したがって上述の WKB 法はΣ_V上では破綻してしまう．（なお，量子力学の固有値問題を扱う際には，作用素aの中に energy parameter Eを含めて扱う．したがって問題は $au=Eu$ ではなく $au=0$ とかける）．

3°. Maslov の方法

Maslov [2] は，$\phi(x)$，$\alpha_r(x)$の特異性が，それらを Lagrange 多様体V（の普遍被覆空間$\check{V}$）上の関数として扱う限りは解消されることに着目し，parameter を含む Fourier 変換を用

いることにより大域的に（即ち Σ_ν を越えて）「近似解」を構成する方法を見出した．その手続きの概略は次の通りである（cf. [3]）なお，作用素の自己共役性，関数の C^∞ 一依存性など細かい状況設定は省略する．

(1) parameter $\alpha=(\alpha_1,\cdots,\alpha_\ell)$ に依存する compact で境界のない Lagrange 多様体の族 $\{V(\alpha)\}$ を考える．（各 $V(\alpha)$ は torus になることが知られている）．各 $V(\alpha)$ は $H(x,p)=0$ に含まれ，かつ α が変わることにより $V(\alpha)$ は全体としてこの超曲面をうめつくすとする．

このとき $V(\alpha)$ の普遍被覆空間 $\check{V}(\alpha)$ 上の関数から，$\mathbb{R}^\ell$ 上の関数への正準作用素とよばれる作用素 $K_{\check{V}(\alpha)}$ が定義できるが，これが $V(\alpha)$ 上の関数に作用する作用素とみることができるための条件は，

(2)（Maslov の量子化条件）

$$\frac{\nu}{2\pi i}\int_{\gamma(\alpha)}\langle p, dx\rangle-\frac{1}{4}m(\gamma(\alpha))\in\mathbb{Z}\qquad\text{for }\forall\gamma(\alpha)\in\pi_1[V(\alpha)]$$

但し $m(\gamma(\alpha))\equiv$（$\gamma(\alpha)$ と $\Sigma_{V(\alpha)}$ の交叉数）（$\Sigma_{V(\alpha)}$ は然るべき仕方で向きづけられている）．

この条件は（$V(\alpha)$ が ℓ 次元 torus になることから）ℓ 個の量が整数になるという条件であり，parameter α に関する離散的な条件になっている．α を (2) をみたすようにとると，

正準作用素 $K_{V(\alpha)} : C^\infty(V(\alpha)) \longrightarrow C^\infty(\mathbb{R}^l)$ が定義でき, これを用いて,

$$u(x) \equiv K_{V(\alpha)} \cdot 1 \qquad (1 \text{ は } V(\alpha) \text{ 上の定数関数})$$

とおくと

$$a\left(x, \frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial x}\right) u = 0 \quad \left(\bmod \frac{1}{\nu^2}\right)$$

がなりたつ. この意味で u は $au = 0$ の「近似解」である. しかしこの u が, 実際に真の解の近似解であるか否かは, 証明されていない (cf. [3]). また量子化条件を出す際には, 有限値 $\nu = \nu_0 = \frac{1}{\hbar}$ を入れて離散的な α を決めるという手続きを行っている.

4° Leray の方法.

Leray [1] は Maslov の方法を「漸近理論」から独立させて新しい構造の中でとらえ直した. これが彼が Lagrange 解析と呼ぶものであり, それは次の様な構成要素よりなっている:

(1) symplectic vector 空間 Z (相空間に相当する).

(2) Lagrange 多様体 $V \subset Z$ の普遍被覆空間 $\check{V}$ 上の Lagrange 関数 $\check{U}$.

これは次のように定義する: Z に symplectic な (x, p) 座標系 (位置-運動量座標系) R を指定すると, そのもとでの V の見かけの特異点 (caustics) の集合 Σ_R がきまる. 各

frame Rを指定する毎に,そのもとで次の形の「形式的関数」が与えられているとする:

$$\check{U}_R(\nu,\check{x}) = \left(\sum_0^\infty \frac{a_r(\check{x})}{\nu^r}\right) e^{\nu\phi_R(\check{x})} \qquad \text{on } \check{V}\setminus\check{\Sigma}_R$$

ここで $\phi_R(\check{x})$ は $\nabla\phi_R$ の graph が V を与えるような関数である。さらに任意の2つの frame R, R' に対する $\check{U}_R, \check{U}_{R'}$ が $\check{V}\setminus\check{\Sigma}_R\cup\check{\Sigma}_{R'}$ 上で $S = RR'^{-1}\in Sp_2(l)$ に対応するある積分変換による変換則

$$S\check{U}_{R'} = \check{U}_R$$

をみたしているとする. このとき $\check{U}\equiv\{\check{U}_R\}$ を $\check{V}$ 上の Lagrange 関数とよぶ(「関数」といっても ν を parameter にもつ形式的関数である).

(3) Lagrange 作用素 a.

これは次のように定義する: Z 上の形式的関数

$$H(\nu,z) = \sum_0^\infty \frac{a_r^\circ(z)}{\nu^r}$$

が与えられたとき, frame R をきめると H は (x,p)-表示で

$$H(\nu,z) = H_R^\circ(\nu,x,p)$$

と書ける。このとき

$$a_R^+(\nu,x,p) \equiv e^{\frac{1}{2\nu}\langle\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial p}\rangle} H_R^\circ(\nu,x,p)$$

として

$$a_R^+(\nu, \overset{②}{x}, \overset{①}{\frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial x}})$$

という形の作用素を与える. すると

$$\check{U}_R \longmapsto a_R^+\check{U}_R$$

によって $\check{V}$ 上の Lagrange 関数 $\check{\mathfrak{U}}=\{\check{\mathfrak{U}}_R\}$ を $\check{V}$ 上の Lagrange 関数 $a\check{\mathfrak{U}}=\{a_R^+\check{\mathfrak{U}}_R\}$ にうつす作用素がきまる。これを Lagrange 作用素とよぶ。

(4) Lagrange 多様体 V 上の Lagrange 関数 $\mathfrak{U}$.

$\check{V}$ 上の Lagrange 関数 $\check{\mathfrak{U}}$ の $\gamma\in\pi_1[V]$ のもとでの作用 $\check{\mathfrak{U}}\mapsto\gamma\check{\mathfrak{U}}$ を定義する際に，任意定数 ν_0 が導入される。このとき，

$$\gamma\check{\mathfrak{U}}=\check{\mathfrak{U}} \quad \text{for} \quad \forall\gamma\in\pi_1[V]$$

をみたすことで V 上の Lagrange 関数 $\mathfrak{U}$ が定義される。(したがって，ある $\check{\mathfrak{U}}$ が V 上の Lagrange 関数 $\mathfrak{U}$ であるか否かは，ν_0 の指定の仕方に依る。量子力学の問題では $\nu_0=\frac{i}{\hbar}$ ととることになる)。

Lagrange 解析においては，普通の解析学で「関数」と「(擬)微分作用素」の果す役割を「Lagrange 関数」と「Lagrange 作用素」が果し，そのもとでいろいろな問題が設定される。

このわく組みの中で，たとえば次のような定理が成り立つ。

<u>定理</u> (Leray). Z : $2l$ 次元 symplectic vector 空間

$a^{(1)},\cdots,a^{(l)}$: $H^{(1)},\cdots,H^{(l)}$ に対応してきまる Lagrange 作用素

とし，$\{H^{(i)},H^{(j)}\}=0$ for $\forall i,j$ (Poisson bracket が 0) とする。

このとき

$$a^{(j)}\mathcal{U}=0 \pmod{\tfrac{1}{\nu^2}};\ j=1,2,\cdots,l$$

をみたす V 上の Lagrange 関数 $\mathcal{U} \pmod{\frac{1}{\nu}}$ が唯一つ存在するために V のみたすべき必要充分条件は,

(i) V は $H^{(1)}=0,\cdots,H^{(l)}=0$ の連結成分であり,

(ii) V は Maslov の量子化条件

$$\frac{\nu_0}{2\pi i}\int_\gamma \langle p, dx\rangle - \frac{1}{4}m(\gamma) \in \mathbb{Z} \qquad \text{for } \forall\gamma \in \pi_1[V]$$

をみたす.

($m(\gamma)$ の計算には frame R のもとでの Σ_R を必要とするが, これは R のとり方に依らない)

次にこの定理を具体的問題に適用した計算例を示す.

5° 具体例への適用.

電場 ϕ (scalar potential), 磁場 $A=(\mathcal{A}_1,\mathcal{A}_2,\mathcal{A}_3)$ (vector potential) のもとでの電子の運動を記述する Hamiltonian は,

$$H=\frac{1}{2\mu}\sum_1^3\left(p_j-\frac{e}{c}\mathcal{A}_j(x)\right)^2-E-e\phi(x),$$

対応する Schrödinger 作用素は

$$a=\frac{1}{2\mu}\left\{\frac{1}{\nu^2}\Delta+\frac{2e}{c}\sum_1^3\mathcal{A}_j(x)\frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial x_j}+\frac{e^2}{c^2}\sum\mathcal{A}_j(x)^2\right\}-E-e\phi(x)$$

である. とくに電場として原点に集中した電荷 e よりなるもの

$$\phi(x) = \frac{e}{R} \qquad (\ R = |x| \ )$$

磁場として x_3-軸方向の一様な磁場

$$A = \left(-\tfrac{1}{2}\mathcal{H} x_2 ,\ \tfrac{1}{2}\mathcal{H} x_1 ,\ 0\right)$$

を考え，$\mathcal{H}$を小として$\mathcal{H}^2$の項を無視すると，

$$H = \frac{1}{2\mu}\left[P^2 + \frac{e}{c}\mathcal{H}M - 2\mu E - \frac{2\mu e^2}{R}\right]$$

$$\mathfrak{a} = \frac{1}{2\mu}\left\{\frac{1}{\gamma^2}\Delta + \frac{e\mathcal{H}}{c\gamma}\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1}\right) - 2\mu E - \frac{2\mu e^2}{R}\right\}$$

となる．但し，

$$R = |x| ,\quad P = |p| ,\quad L = |x\wedge p| ,\quad Q = \langle x, p\rangle$$

$$M = x_1 p_2 - x_2 p_1$$

とした．Mは$x\wedge p$の第3成分だから$|M| \leqslant L$．また

$$P^2R^2 = L^2 + Q^2$$

である．そこで上の形のH，$\mathfrak{a}$を含む次のようなHと，対応する$\mathfrak{a}$について考える：

$$H(x,p) = H[L, M, Q, R]$$

$$\equiv \frac{1}{2}\left[P^2 + A(M) - \frac{2B(M)}{R} + \frac{C(M)}{R^2}\right]$$

(*)

$$= \frac{1}{2R^2}\left[L^2 + Q^2 + A(M)R^2 - 2B(M)R + C(M)\right]$$

($A(M)$, $B(M)$, $C(M)$ は Mの1次関数)．

このとき簡単な計算で

$$\{H, L^2\} = \{L^2, M\} = \{M, H\} = 0$$

であることがわかる．したがって H, L^2, M に対応する作用素 a, a_{L^2}, a_M に対して次のような Lagrange 解析の問題を設定し，それに先の定理を適用することができる．

問題： $a\mathfrak{U} = (a_{L^2} - L_0^2)\mathfrak{U} = (a_M - M_0)\mathfrak{U} = 0 \ \left(\mathrm{mod}\ \frac{1}{\nu^2}\right)$
が唯一つの解 $\mathfrak{U}\ \left(\mathrm{mod}\ \frac{1}{\nu}\right)$ をもつような，compact Lagrange 多様体が存在するための条件を求めよ．
（a は Energy parameter E を含んでいる）．

定理によれば，そのための条件は，

(i) V は $H=0$, $L^2=L_0^2$, $M=M_0$ の compact な連結成分．

(ii) V は Maslov の量子化条件をみたす．

(*) に対して (i), (ii) を具体的に計算することを考える．

$L=|x\wedge p|\neq 0$ であるところで

$$j_1 = \frac{x}{|x|}, \quad j_3 = \frac{x\wedge p}{|x\wedge p|}, \quad j_2 = j_3\wedge j_1$$

によって動く直交座標系をとり，これからきまる Euler 角を

$$(\Theta, \Phi, \Psi) \quad (\mathrm{mod}\ \pi,\ \mathrm{mod}\ 2\pi,\ \mathrm{mod}\ 2\pi)$$

とする．このとき微分形式の計算によって，

$$\begin{cases} \langle p, dx\rangle = \dfrac{Q}{R}dR + M\,d\Phi + L\,d\Psi \\ d^3x\wedge d^3p = dL\wedge dM\wedge dQ\wedge \dfrac{dR}{R}\wedge d\Phi\wedge d\Psi \end{cases}$$

が得られる．とくにこれから，$|M|\leqq L$ なるところでは，$Z\cong \mathbb{R}^6$ における座標として，L, M, Q, R, Φ, Ψ を採用する

ことができる.(上の第1式は $\langle p, dx\rangle$ の作用-角変数による表示になっている). このとき,

$$V[L_0, M_0] : \quad H=0, \quad L=L_0, \quad M=M_0$$

は,

$$(\Phi \bmod 2\pi) \times (\Theta \bmod 2\pi) \times \Gamma[L_0, M_0]$$

($\Gamma[L_0, M_0]$ は $H[L_0, M_0, Q, R]=0$ の $R>0$ での連結成分)

で表される. $\Gamma[L_0, M_0]$ が $R>0$ での閉曲線になるとき, $V[L_0, M_0]$ は3次元 torus になる.(以下これを要請する). これで(i)の手続きは終った. そこで(ii)について考える. $\pi_1[V[L_0, M_0]]$ の生成元は

$$\gamma_1 : 0 \leq \Phi \leq 2\pi, \quad \Theta, R, Q : \text{fixed}.$$

$$\gamma_2 : 0 \leq \Theta \leq 2\pi, \quad \Phi, R, Q : \text{fixed}.$$

$$\gamma_3 : (Q, R) \in \Gamma[L_0, M_0], \quad \Phi, \Theta : \text{fixed}.$$

他方, 再び微分形式の計算により.(d^3x の表現式を考えて)

$V[L_0, M_0]$ の frame $R(x, p)$ のもとでの見かけの特異点の集合 $\Sigma_{V[L_0, M_0]}$ は,

$$\Sigma_1 \cup \Sigma_2 \quad : \Sigma_1 : \quad \Phi = 0 \mod \pi$$

$$\Sigma_2 : \quad H_Q[L_0, M_0, Q, R] = 0$$

で与えられる

ということがわかる.

$$\varphi_R = \int \langle p, dx\rangle = \int \frac{Q}{R}dR + M d\Phi + L d\Psi$$

に注意すれば，Maslov の量子化条件は，$\nu_0 = \frac{i}{\hbar}$ として，次のようにかける.（$m(\gamma_j)$ の符号を決めるとき，γ_j の向きと，$\Sigma_{V[L_0, M_0]}$ の向きに注意する必要があるが）.

$$\frac{\nu_0}{2\pi i}\int_{\gamma_1}\langle p, dx\rangle - \frac{1}{4}m(\gamma_1) = \frac{\nu_0}{2\pi i}2\pi L_0 - \frac{1}{4}\cdot 2 = \frac{L_0}{\hbar} - \frac{1}{2}$$

$$\frac{\nu_0}{2\pi i}\int_{\gamma_2}\langle p, dx\rangle - \frac{1}{4}m(\gamma_2) = \frac{\nu_0}{2\pi i}2\pi M_0 - \frac{1}{4}\cdot 0 = \frac{M_0}{\hbar}$$

$$\frac{\nu_0}{2\pi i}\int_{\gamma_3}\langle p, dx\rangle - \frac{1}{4}m(\gamma_3) = \frac{\nu_0}{2\pi i}\oint_{\Gamma[L_0, M_0]}\frac{Q}{R}dR - \frac{1}{4}\cdot(-2) = \frac{N_0}{\hbar} + \frac{1}{2}$$

が全て整数であること。（但し $N_0 \equiv \frac{1}{2\pi}\oint_{\Gamma[L_0 M_0]}\frac{Q}{R}dR$ とかいた）

これを，

$$\left[\begin{array}{l} \frac{L_0}{\hbar} - \frac{1}{2} = l, \quad \frac{M_0}{\hbar} = m, \quad \frac{N_0}{\hbar} + \frac{1}{2} = n - l \\ \qquad\qquad \text{for } \exists\, l, m, n \in \mathbb{Z} \end{array}\right.$$

と表現しておこう.（これが Maslov の量子化条件である）.

なお，$|M_0| < L_0$ より $|m| \leqq l + \frac{1}{2}$. $N_0 > 0$ より，$l + \frac{1}{2} < n$ であり，したがって

$$|m| \leqq l < n$$

である. 次に N_0 を具体的に計算する. compact な $V[L_0, M_0]$ が得られるのは，(*) より，

$$L_0^2 + Q^2 + A(M_0)R^2 - 2B(M_0)R + C(M_0) = 0$$

が RQ-平面上，$R > 0$ における楕円になるときであり，そ

のための条件は，（$A_0 = A(M_0)$ などとかくことにして），

$$A_0 > 0, \quad C_0 + L_0^2 > 0, \quad B_0 > \sqrt{A_0}\sqrt{L_0^2 + C_0} \ .$$

このときには具体的に積分計算ができて

$$N_0 = \frac{1}{2\pi}\oint_{\Gamma[L_0, M_0]} \frac{Q}{R}\, dR = \frac{B_0}{\sqrt{A_0}} - \sqrt{L_0^2 + C_0} \quad > 0 .$$

したがって最終的にMaslovの量子化条件は，

$$\exists\ l, m, n \in \mathbb{Z}$$

$$\text{s.t.} \quad |m| \leq l < n$$

$$L_0 = \hbar(l + \tfrac{1}{2}) \ , \quad M_0 = \hbar m$$

$$L_0 + \frac{B_0}{\sqrt{A_0}} - \sqrt{L_0^2 + C_0} = \hbar n$$

とくに，はじめにのべた作用素

$$a = \frac{1}{2\mu}\left\{\frac{1}{\gamma^2}\Delta + \frac{e\mathcal{H}}{c\gamma}\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1}\right) - 2\mu E - \frac{2\mu e^2}{R}\right\}$$

にたいしては，

$$L_0 = \hbar(l + \tfrac{1}{2}) \ , \quad M_0 = \hbar m$$

$$E = -\mu c^2 \frac{\alpha}{2n^2} + \beta\mathcal{H} m$$

$$\text{但し} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \ , \quad \beta = \frac{e\hbar}{2\mu c}$$

となり，古典的な量子化条件と同じ結果が得られたことになる．

なお，Leray[1] ではさらに，定磁場内の一電子原子に対するDirac方程式に対応する Lagrange 解析の問題につい

ても論じられており, Bethe-Salpeter の結果との比較などがなされている.

6° おわりに.

いくつかの基本的問題を示しておく.

(1) 古典力学の種々の積分可能系について, Lagrange 問題と, L^2-固有値問題から導かれる量子化条件はどこまで一致するだろうか. またその理由は何か.

(2) Lagrange 解析的立場で tunnel 効果のある場合(二重井戸 potential など)を扱えるだろうか.

(3) Maslov-Leray の解は本当に真の解の近似解になっているのだろうか.

文献

[1] J. Leray : Lagrangian Analysis and Quantum Mechanics, MIT Press (1981)

[2] V.P. Maslov : 摂動論と漸近的方法, 岩波書店 (1976)

[3] V.P. Maslov and M.V. Fedoriuk : Semiclassical Approximation in Quantum Mechanics, Reidel Publ. (1981)

(Original ed. は [1] 1976/77, [2] 1965, [3] 1976)