

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「 ϵ を 0 に近づく parameter とみて漸近的な計算を行い、然るのちに ϵ 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うちに、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も説明する。

2° 多変数実 WKB 法.

これは普通

$$A(x, \frac{1}{\nu} \frac{\partial}{\partial x}) u = 0 \quad \nu \in i(0, \infty), \quad x \in \mathbb{R}^d$$

の $\nu \rightarrow i\infty$ での「近似解」

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

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) $\alpha_r(x)$ ($r=0, 1, 2, \dots$) 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 d 次元の多様体 V で、その上で

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

となるものを見つけるという問題と同値であり, このように
言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 次元の多様体 V が,

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

を満たすとき, V を Lagrange の多様体とよぶ. 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. あると, $\phi(x), \alpha_{\pm}(x)$ は Σ_V 上特異
性を持ち, 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, $\phi(x), \alpha_{\pm}(x)$ の特異性が, それらを Lagrange
多様体 V (の普遍被覆空間 $\tilde{V}$) 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_V を越えて)「近似解」を構成する方法を見出した. その手続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^∞ -依存性など細かい状況設定は省略する.

(1) parameter $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_k)$ に依存する compact で境界のない Lagrange 的様体の族 $\{V(\alpha)\}$ 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, $\mathbb{R}^l$ 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で済むための条件は,

(2) (Maslov の量子化条件)

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

但し $m(\gamma(\alpha)) \equiv (\gamma(\alpha) \text{ と } \Sigma_{V(\alpha)} \text{ の交点数})$ ($\Sigma_{V(\alpha)}$ 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 $K_{V(\alpha)} : C^\infty(V(\alpha)) \rightarrow C^\infty(\mathbb{R}^d)$ が定義でき、
これを用いて、

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

とあくと

$$A(x, \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial x}) u = 0 \pmod{\frac{1}{v^2}}$$

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 $v = v_0 = \frac{1}{\hbar}$ 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 $\check{L}$ 。

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 がまわる。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ある:

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

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

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

を満たしているとする。このとき $\check{U} \equiv \{\check{U}_R\}$ を $\check{V}$ 上の Lagrange 関数とよぶ（「関数」というても v を parameter にも形式的関数である）。

(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

$$H(v, z) = \sum_0^\infty \frac{a_r^0(z)}{v^r}$$

が与えられたとき, frame R を与えると H は (x, p) -関数で

$$H(v, z) = H_R^0(v, x, p)$$

と書ける。このとき

$$A_R^+(v, x, p) \equiv e^{\frac{1}{2v} \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial p} \right)} H_R^0(v, x, p)$$

として

$$A_R^+(v, x, \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial x})$$

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 $\check{U} = \{\check{U}_R\}$ を $\check{V}$ 上の Lagrange 座標 $\alpha\check{U} = \{\alpha_R^+ \check{U}_R\}$ に関する作用素がまゐる。これを Lagrange 作用素とよぶ。

(4) Lagrange 多様体 V 上の Lagrange 関数 U .

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

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

をみたすことで V 上の Lagrange 関数 U が定義される。

(したがって、ある $\check{U}$ が V 上の Lagrange 関数 U であるかは、 ν_0 の指定の仕方による。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の問題が設定される。

このゆく組みの中で、たとえば次のような定理が成り立つ。

定理 (Leray). Z : $2l$ -次元 symplectic vector 空間

$a^{(1)}, \dots, a^{(l)} : H^{(1)}, \dots, H^{(l)}$ に対応してまゐる

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

$$A^{(j)} V = 0 \pmod{\frac{1}{v_2}}; j=1, 2, \dots, l$$

をみたす V 上の Lagrange 関数 $V \pmod{\frac{1}{v}}$ が唯一つ存在するためには V のみたさばき必要充分条件は,

- (i) V は $H^{(1)}=0, \dots, H^{(l)}=0$ の連結成分であり,
- (ii) V は Maslov の量子化条件

$$\frac{v_0}{2\pi i} \int_{\gamma} \langle p, dx \rangle - \frac{1}{4} m(\gamma) \in \mathbb{Z} \quad \text{for } \forall \gamma \in \pi_1(V)$$

をみたす.

($m(\gamma)$ の計算には frame R 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 $A=(A_1, A_2, A_3)$

(vector potential) のもとでの電子の運動を記述する Hamiltonian は,

$$H = \frac{1}{2\mu} \sum_{j=1}^3 (p_j - \frac{e}{c} A_j(x))^2 - E - e\phi(x),$$

対応する Schrödinger 作用素は

$$A = \frac{1}{2\mu} \left\{ \frac{1}{v_2} \Delta + \frac{2e}{c} \sum_{j=1}^3 A_j(x) \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{e^2}{c^2} \sum_{j=1}^3 A_j(x)^2 \right\} - E - e\phi(x)$$

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

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

磁場として x_3 -軸方向の一様な磁場

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

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

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

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

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 $|M| \leq L$ 。 また

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

である。そこで上の形の H, A を含む次のような H と、対応する A について考へる：

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

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

(*)

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

($A(M), B(M), C(M)$ 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： $A\psi = (A_{L^2} - L_0^2)\psi = (A_M - M_0)\psi = 0 \pmod{\frac{1}{V^2}}$
 が唯一つの解 $\psi \pmod{\frac{1}{V}}$ をもつような, compact
 Lagrange の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 の量子化条件を満たす。

(*) に対して (i), (ii) も具体的に計算することも考える。

$L = |x \wedge p| \neq 0$ であるところで

$$\dot{j}_1 = \frac{x}{|x|}, \quad \dot{j}_2 = \frac{x \wedge p}{|x \wedge p|}, \quad \dot{j}_3 = \dot{j}_1 \wedge \dot{j}_2$$

によって動く直交座標系をとり、これから定まる Euler 角を

$$(\Theta, \Phi, \Psi) \pmod{\pi, \pmod{2\pi}, \pmod{2\pi}}$$

とする。このとき微分形式の計算によって、

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

が得られる。とくにこれから、 $|M| \ll L$ 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

ことが出来る。(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,

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

は,

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

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

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)。

ここで (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

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

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

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

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

$$\Sigma_1 \cup \Sigma_2 : \Sigma_1 : \Psi = 0 \bmod \pi$$

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

で与えられる

ということがわかる。

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

に注意すれば, Maslov の量子化条件は, $\nu_0 = \frac{1}{h}$ 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).

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

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

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

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

こゝで,

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

と表現してある. (こゝが Maslov の量子化条件である).

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

$$|m| \leq l < n$$

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),

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

こゝとまには具体的に積分計算ができて

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

したがって最終的に Maslov の量子化条件は,

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

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

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

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

とくに, はじめに Δ の作用素

$$A = \frac{1}{2\mu} \left\{ \frac{1}{y^2} \Delta + \frac{e\hbar}{c y} (x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1}) - 2\mu E - \frac{2\mu e^2}{R} \right\}$$

にたいしては,

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

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

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

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

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

6° あかりに.

いくつかの基本的問題を示しておく.

(1) 古典力学の種々の緩分可能系について, 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)