幾何光学との関係

ハミルトン・ヤコビ方程式と幾何光学のアイコナール方程式との対応を見ます。
幾何光学の話は大雑把にしかしていません。
波に関係する単語は説明なしで使っています。

ハミルトン・ヤコビ方程式とアイコナール方程式の関係は「ハミルトン・ヤコビ方程式」の最後に簡単に触れましたが、ここではもう少し詳しく見ていきます。

アイコナール方程式を波動方程式から導出します。電磁場の話を省いて、光は波動方程式に従う波とし、その関数を $\phi(\boldsymbol{x},t)$ とします。そうすると、真空における光の波の波動方程式は

$$\nabla^2\phi(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\phi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t^2}$$

c は光速です。これの解は平面波として

$$\phi(\boldsymbol{x},t)=\exp[i(\boldsymbol{k}_c\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)]$$

$\boldsymbol{k}_c$ は波数ベクトル、$\omega=ck_c$ ($k_c=|\boldsymbol{k}_c|$) は角振動数です。一方で、物質中での光の速度は c でなく

$$u=\frac{c}{n(\boldsymbol{x})}$$

と与えられます (全ての物質で有効ではない)。n は物質に依存する量で、屈折率 (refraction index) と呼ばれます。
物質中でも波動方程式に従っているとして

$$\nabla^2\phi=\frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\tag{1}$$

さらに、物質中でも同じ ω での平面波になっているなら、$\boldsymbol{e}$ を $\boldsymbol{k}$ の単位ベクトルとして

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t=k\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t=k_cn\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t\quad\ (k=|\boldsymbol{k}|=\frac{\omega}{u}=n\frac{\omega}{c}=nk_c)$$

これを一般化して、(1) の解として

$$\phi(\boldsymbol{x},t)=A(\boldsymbol{x})\exp[i(k_cF(\boldsymbol{x})-\omega t)]=A(\boldsymbol{x})\exp[i(F'(\boldsymbol{x})-\omega t)]\tag{2}$$

という形を仮定します。$A(\boldsymbol{x})$ は波の振幅を与えます。F' を F としていきます。∇^2 を作用させると

$$
\begin{aligned}
\nabla^2(A(\boldsymbol{x})e^{iF(\boldsymbol{x})-i\omega t}) &= \nabla\cdot(\nabla A + iA\nabla F)e^{iF(\boldsymbol{x})-i\omega t} \\
&= (\nabla^2 A + i\nabla A\cdot\nabla F + iA\nabla^2 F + i\nabla A\cdot\nabla F - A(\nabla F)^2)e^{iF(\boldsymbol{x})-i\omega t} \\
&= (\nabla^2 A - A(\nabla F)^2 + 2i\nabla A\cdot\nabla F + iA\nabla^2 F)e^{iF(\boldsymbol{x})-i\omega t}
\end{aligned}
$$

時間微分では

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}A(\boldsymbol{x})e^{iF(\boldsymbol{x})-i\omega t} = -\omega^2 A e^{iF(\boldsymbol{x})-i\omega t}$$

波動方程式にこれらを入れれば

$$(\nabla^2 A - A(\nabla F)^2 + 2i\nabla A\cdot\nabla F + iA\nabla^2 F) = -k^2 A$$

実部と虚部に分けると

$$\nabla^2 A - A(\nabla F)^2 = -k^2 A\ ,\ 2\nabla A\cdot\nabla F + A\nabla^2 F = 0$$

実部を変形すると

$$
\begin{aligned}
\nabla^2 A - A(\nabla F)^2 &= -n^2 k_c^2 A \\
(\nabla F)^2 &= n^2 k_c^2 + \frac{1}{A}\nabla^2 A \\
(\frac{1}{k_c}\nabla F)^2 &= n^2 + \frac{1}{k_c^2}\frac{1}{A}\nabla^2 A
\end{aligned}
$$

F は $k_c F$ なので

$$(\nabla F)^2 = n^2 + \frac{1}{k_c^2}\frac{1}{A}\nabla^2 A$$

真空での光の波長 $\lambda_c = 2\pi/k_c$ から、右辺第 2 項は

$$\frac{1}{k_c^2}\frac{1}{A}\nabla^2 A = (\frac{\lambda_c}{2\pi})^2\frac{1}{A}\nabla^2 A$$

波長が無視できるほど短ければこの項を無視できて

$$(\nabla F(\boldsymbol{x}))^2 = n^2(\boldsymbol{x}) \tag{3}$$

これをアイコナール方程式 (eikonal equation) と言います (eikonal はギリシャ語の像が由来)。このように波長が無視できる状況を扱うのが幾何光学です。幾何とついているように、光の性質を幾何学的に記述できます。幾何学的に記述できることは粒子的に扱えるとも言えるので、解析力学の方法と関係します。

今度は光を粒子のように扱うことにして、光の軌道を点の位置と速度で与えます。2 つの点 P_1, P_2 があるとして、それらを結ぶ適当な曲線 γ を選び、その曲線に沿った時間積分を

$$l(\gamma) = c\int_\gamma dt$$

と作ります。時間の範囲は γ に沿って光が P_1 から P_2 へ進むのにかかる時間です。これは光学的距離 (optical path) と呼ばれます。物質中での屈折率 n を使うと、曲線の微小な長さ Δs は

$$\Delta s = v\Delta t = \frac{c}{n(\boldsymbol{x})}\Delta t$$

と書けるので

$$l(\gamma) = \int_\gamma ds\ n(\boldsymbol{x})$$

ここで、現実の光の軌道は光学的距離の極値によって与えられるとします。これはフェルマー (Fermat) の原理と呼ばれます。

l を作用と見れば、最小作用の原理と同じ状況なので、オイラー・ラグランジュ方程式を使います。「オイラー・ラグランジュ方程式」では時間 t の積分として求めているので、s を任意のパラメータ λ に変えます。曲線の微小な長さ Δs は $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)$ の微小変化の長さなので

$$\Delta s = \sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \Delta x_3^2} = \sqrt{(\frac{\Delta x_1}{\Delta\lambda})^2 + (\frac{\Delta x_2}{\Delta\lambda})^2 + (\frac{\Delta x_3}{\Delta\lambda})^2}\Delta\lambda$$

として、λ に変えれば

$$l(\gamma) = \int_{\gamma(\lambda)} d\lambda\ n(\boldsymbol{x}(\lambda))\sqrt{(\frac{dx_1}{d\lambda})^2 + (\frac{dx_2}{d\lambda})^2 + (\frac{dx_3}{d\lambda})^2}$$

$\gamma(\lambda)$ は曲線のパラメータが λ であることを表しています。積分部分をラグランジアン

$$L(\boldsymbol{x}, \frac{d\boldsymbol{x}}{d\lambda}) = n(\boldsymbol{x})\sqrt{(\frac{dx_1}{d\lambda})^2 + (\frac{dx_2}{d\lambda})^2 + (\frac{dx_3}{d\lambda})^2} = n(\boldsymbol{x})\frac{ds}{d\lambda}$$

と見れば

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = \frac{\partial n}{\partial x_i}\frac{ds}{d\lambda} \qquad (i = 1, 2, 3)$$

と

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial (dx_i/d\lambda)} = n\frac{\partial}{(dx_i/d\lambda)}\sqrt{\sum_{j=1}^{3}(\frac{dx_j}{d\lambda})^2} &= n\frac{dx_i}{d\lambda}\Big(\sum_{j=1}^{3}(\frac{dx_j}{d\lambda})^2\Big)^{-1/2} \\ &= n(\boldsymbol{x})\frac{dx_i}{d\lambda}\frac{d\lambda}{ds} \\ &= n(\boldsymbol{x})\frac{dx_i}{ds}\end{aligned}$$

から、オイラー・ラグランジュ方程式は

$$\begin{aligned}0 &= \frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{d\lambda}\frac{\partial L}{\partial (dx_i/d\lambda)} \\ &= \frac{ds}{d\lambda}\frac{\partial n}{\partial x_i} - \frac{d}{d\lambda}(n\frac{dx_i}{ds}) \\ &= \frac{ds}{d\lambda}\frac{\partial n}{\partial x_i} - \frac{ds}{d\lambda}\frac{d}{ds}(n\frac{dx_i}{ds}) \\ \frac{d}{ds}(n\frac{dx_i}{ds}) &= \frac{\partial n}{\partial x_i} \qquad (4)\end{aligned}$$

これが光の軌道を与える式です。
　式を分かりやすくするために

$$\Delta\sigma = n^{-1}(\boldsymbol{x})\sqrt{\sum_{j=1}^{3}(\frac{dx_j}{d\lambda})^2}\Delta\lambda$$

となるパラメータ σ に置き換えると

$$\frac{d\lambda}{d\sigma} = n(\boldsymbol{x})(\sum_{j=1}^{3}(\frac{dx_j}{d\lambda})^2)^{-1/2} = n\frac{d\lambda}{ds}$$

から

$$\frac{dx_i(\sigma)}{d\sigma} = \frac{dx_i(\lambda)}{d\lambda}\frac{d\lambda}{d\sigma} = \frac{dx_i(\lambda)}{d\lambda}\frac{d\lambda}{ds}n$$

もう 1 回微分すると

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2x_i(\sigma)}{d\sigma^2} &= \frac{d}{d\sigma}(\frac{dx_i(\lambda)}{d\lambda}\frac{d\lambda}{ds}n) \\
&= \frac{d\lambda}{d\sigma}\frac{d}{d\lambda}(\frac{dx_i(\lambda)}{ds}n) \\
&= n\frac{d\lambda}{ds}\frac{ds}{d\lambda}\frac{d}{ds}(\frac{dx_i(\lambda)}{ds}n) \\
&= n\frac{\partial n}{\partial x_i} \\
&= \frac{1}{2}\frac{\partial n^2}{\partial x_i}
\end{aligned}
$$

σ による 2 階微分方程式になるので、これは運動方程式の形です。というわけで、光の軌道の式は、ポテンシャル $-n^2/2$ での質量が 1 の粒子の運動方程式の形で書けます。

ハミルトン・ヤコビ方程式を求めます。運動エネルギーの形にすると

$$
\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}(\frac{dx_i(\sigma)}{d\sigma})^2 = \frac{1}{2}n^2(\sum_{j=1}^{3}(\frac{dx_j}{d\lambda})^2)^{-1}\sum_{i=1}^{3}(\frac{dx_i(\lambda)}{d\lambda})^2 = \frac{1}{2}n^2
$$

なので、粒子としての力学的エネルギーは 0 で、粒子としてのハミルトニアンは

$$
H_{ray} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2} - \frac{1}{2}n^2(\boldsymbol{x})
$$

$\boldsymbol{p}$ は $d\boldsymbol{x}/d\sigma$ で与えています。ハミルトニアンに時間依存がないので (ポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ での粒子と同じハミルトニアン)、母関数 S_{ray} は

$$
\begin{aligned}
&S_{ray}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\alpha},t) = G_{ray}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\alpha}) - Et \quad (E = H) \\
&p_i = \frac{\partial S_{ray}}{\partial x_i} = \frac{\partial G_{ray}}{\partial x_i}
\end{aligned}
$$

$\boldsymbol{\alpha}$ は定数です。これから、ハミルトン・ヤコビ方程式は

$$
(\nabla G_{ray})^2 = n^2(\boldsymbol{x})
$$

として、アイコナール方程式の形になります。このように、粒子的な扱いをした光のハミルトン・ヤコビ方程式は幾何光学の式と対応します。そして、この対応から、波と粒子の量に関係を与えられると予想できます。

ここから、波と粒子の関係を与え、それが量子力学に対応させられることを見ます。そのために、曲面の話を持ち込みます。

粒子では質量を m、時間に依存しないポテンシャルを $V(\boldsymbol{x})$ として、ハミルトニアンを

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{x})$$

$\boldsymbol{p}$ は運動量です。ハミルトニアンに時間依存がないので母関数 S とハミルトン・ヤコビ方程式は

$$S(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha}, t) = G(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha}) - Et \quad (E = H) \tag{5a}$$

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial x_i} = \frac{\partial G}{\partial x_i} \tag{5b}$$

$$(\nabla G)^2 = |\boldsymbol{p}|^2 = 2m(E - V) \quad ((\nabla G)^2 = (\frac{\partial G}{\partial x_1})^2 + (\frac{\partial G}{\partial x_2})^2 + (\frac{\partial G}{\partial x_3})^2) \tag{5c}$$

ここで、ある固定された $\boldsymbol{\alpha}$ に対して $G(\boldsymbol{R}) =$ 定数となる曲面を作ります。曲面では 2 つのパラメータが必要ですが、1 つのパラメータは固定されているとし、残りのパラメータを τ とします。このとき、曲面のベクトルを $\boldsymbol{R}(\tau) = (X(\tau), Y(\tau), Z(\tau))$ とすれば

$$\frac{dG}{d\tau} = \frac{dX}{d\tau}\frac{\partial G}{\partial x} + \frac{dY}{d\tau}\frac{\partial G}{\partial y} + \frac{dZ}{d\tau}\frac{\partial G}{\partial z} = \frac{d\boldsymbol{R}}{d\tau} \cdot \nabla G = \frac{d\boldsymbol{R}}{d\tau} \cdot \boldsymbol{p}$$

$d\boldsymbol{R}/d\tau$ は曲面上でのベクトルの変化なので、曲面の接ベクトルです。そして、$G =$ 定数から微分すれば 0 なので、$\boldsymbol{p}$ は曲面の接ベクトルと直交します。このため、粒子の軌道はこの曲面と直交し、運動方程式に従います (下の補足参照)。

G が定数になる曲面としましたが、時間 $t = 0$ のときは

$$S(t = 0) = G(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{\alpha}_0(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{p}_0)) \quad (\boldsymbol{\alpha}_0 = \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{p}_0)) \tag{6}$$

$t = 0$ での位置と運動量を $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{p}_0$ とし、$\boldsymbol{\alpha}$ は $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}$ を変換したものなので $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{p}_0$ を変数として書いています。このように $S = G$ になるので、S を定数と見ることにします。そうすると、$t = 0$ で (6) と一致する時間 t での G は

$$G(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{\alpha}) = S_0 + Et \tag{7}$$

S_0 は (6) です。$\boldsymbol{p} = \nabla G = \nabla S$ なので、この曲面とも運動量は直交します。

波で作れる曲面として、波面があります。波面は位相をある定数として作る曲面なので、(1) では定数 C によって

$$k_c F(\boldsymbol{x}) - \omega t = C \tag{8}$$

と与えられ、(7) の曲面と同じ形です。

ちなみに、この対応から (4) の光は波面と直交して進みます。波面に直交して進む軌道の光は光線 (ray, light ray) と呼ばれ、幾何光学での光は光線です。また、光線を集めたものは光束 (pencil) と呼ばれます

G, F の対応から、エネルギーと角振動数の関係が作れます。(7) と (8) には定数倍の任意性があるために、$\hbar$ を定数として

$$E = \hbar\omega$$

とすれば、G と F は

$$G = \hbar k_c F$$

そして、アイコナール方程式 (3) とハミルトン・ヤコビ方程式 (5c) の対応から

$$n = \frac{1}{\hbar k_c}\sqrt{2m(E-V)}$$

$n = c/u$ なので

$$u = \frac{c}{n} = \frac{\hbar c k_c}{\sqrt{2m(E-V)}} = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2m(E-V)}} = \frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}} = \frac{E}{|\boldsymbol{p}|}$$

このように、波と粒子の量が関係づけられます。また、(7) の時間微分は

$$0 = \frac{dS_0}{dt} = \frac{dG}{dt} - E = \frac{d\boldsymbol{R}}{dt} \cdot \nabla W - E$$

$d\boldsymbol{R}/dt$ は曲面上のある点の時間変化なので、曲面の速度 $\boldsymbol{V}$ と言えて

$$\boldsymbol{V} = \frac{E}{|\boldsymbol{p}|} = u$$

このように粒子の速度 $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{p}/m$ ではなく、波の速度（位相速度）が出てくることからも、波面と対応するのが分かります。

エネルギー E と角振動数 ω の関係は、$\hbar$ をプランク定数 $h = 2\pi\hbar$ とすれば量子力学での関係そのものです。平面波を

$$\phi(\boldsymbol{x}, t) = \chi(\boldsymbol{x})e^{-i\omega t} = \chi(\boldsymbol{x})e^{-iEt/\hbar}$$

として、波動方程式に入れてみると

$$
\begin{aligned}
\nabla^2\phi(\boldsymbol{x},t) &= \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\phi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t^2} \\
\nabla^2\chi(\boldsymbol{x}) &= -\frac{E^2}{\hbar^2}\frac{1}{u^2}\chi(\boldsymbol{x}) \\
&= -\frac{E^2}{\hbar^2}\frac{2m(E-V)}{E^2}\chi(\boldsymbol{x}) \\
&= -\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\chi(\boldsymbol{x}) \\
(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V)\chi(\boldsymbol{x}) &= E\chi(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
$$

これは時間に依存しないシュレーディンガー方程式です。

・補足

G を定数とする曲面から運動方程式が出てくることを示します。曲面に直交する曲線があり、そのパラメータを曲線の長さ s で与えたとします。その曲線上の位置ベクトルを $\boldsymbol{r}$ とすれば、曲線の単位接ベクトルは $d\boldsymbol{r}(s)/ds$ です。そうすると、運動量は

$$
\boldsymbol{p} = |\boldsymbol{p}|\frac{d\boldsymbol{r}}{ds}
$$

G は曲線のパラメータの微小な変化 Δs に対して

$$
G(s+\Delta s) \simeq G(\boldsymbol{r}) + \frac{dG}{ds}\Delta s
$$

これは曲線の位置ベクトルの微小な変化 $\Delta\boldsymbol{r}$ としても同じなので

$$
G(\boldsymbol{r}+\Delta\boldsymbol{r}) \simeq G(\boldsymbol{r}) + \nabla G\cdot\Delta\boldsymbol{r} = G(\boldsymbol{r}) + \nabla G\cdot\frac{d\boldsymbol{r}}{ds}\Delta s = G(\boldsymbol{r}) + \frac{dG}{ds}\Delta s
$$

よって、(5b) から

$$
\begin{aligned}
\frac{dG}{ds} &= \nabla G\cdot\frac{d\boldsymbol{r}}{ds} \\
&= |\boldsymbol{p}| \\
\nabla\frac{dG}{ds} &= \nabla|\boldsymbol{p}|
\end{aligned}
$$

となり

$$
\frac{d\boldsymbol{p}}{ds} = \nabla|\boldsymbol{p}|
$$

s を時間 t にするために

$$\Delta s=\sqrt{\Delta x^2+\Delta y^2+\Delta z^2}=\sqrt{(\frac{\Delta x}{\Delta t})^2+(\frac{\Delta y}{\Delta t})^2+(\frac{\Delta z}{\Delta t})^2}\Delta t=\sqrt{\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}\cdot\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}}\Delta t=|\boldsymbol{v}|\Delta t$$

これによって、s 微分は

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{ds}=\frac{d}{ds}|\boldsymbol{p}|\frac{d\boldsymbol{r}}{ds}=\frac{dt}{ds}\frac{d}{dt}(|\boldsymbol{p}|\frac{dt}{ds}\frac{d\boldsymbol{r}}{dt})=\frac{1}{|\boldsymbol{v}|}\frac{d}{dt}\frac{|\boldsymbol{p}|\boldsymbol{v}}{|\boldsymbol{v}|}=\frac{m}{|\boldsymbol{v}|}\frac{d\boldsymbol{v}}{dt}$$

となり

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{ds}=\nabla|\boldsymbol{p}|$$

$$m\frac{d\boldsymbol{v}}{dt}=|\boldsymbol{v}|\nabla|\boldsymbol{p}|$$

右辺は (5c) から

$$|\boldsymbol{v}|\nabla|\boldsymbol{p}|=\frac{|\boldsymbol{p}|}{m}\nabla\sqrt{2m(E-V)}=-\frac{|\boldsymbol{p}|}{\sqrt{2m(E-V)}}\nabla V=-\nabla V$$

なので

$$m\frac{d\boldsymbol{v}}{dt}=-\nabla V$$

として、運動方程式が出てきます。

曲面のことを気にしなければ、運動方程式はもっと単純に求められます。(5b) を時間 t で微分すると、$\boldsymbol{\alpha}$ は定数なので

$$
\begin{aligned}
\frac{dp_i}{dt} &= \frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial x_i}G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\alpha}) \\
m\frac{d^2x_i}{dt^2} &= \frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial x_i}G \\
&= \sum_{j=1}^{3}\frac{dx_j}{dt}\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial G}{\partial x_i} \\
&= \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial G}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial G}{\partial x_j} \\
&= \frac{1}{2m}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}(\frac{\partial G}{\partial x_j})^2 \\
&= \frac{1}{2m}\frac{\partial}{\partial x_i}((\frac{\partial G}{\partial x_1})^2+(\frac{\partial G}{\partial x_2})^2+(\frac{\partial G}{\partial x_3})^2) \\
&= \frac{1}{2m}\frac{\partial}{\partial x_i}(2m(E-V)) \\
&= -\frac{\partial V}{\partial x_i}
\end{aligned}
$$

なので

$$
m\frac{d^2\boldsymbol{x}}{dt^2} = -\nabla V
$$

として、運動方程式になります。