

## 有機物性論宿題解答

ハミルトンの運動方程式とニュートンの運動方程式が等価であることの簡単な説明（厳密な証明は別紙の補足資料1 hamilton.pdfを参照）

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + U(x) \quad \text{①}$$

の時、ハミルトンの運動方程式は

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H(x, p)}{\partial p} \\ \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(x, p)}{\partial x} \end{cases} \quad \text{②}$$

で与えられる。この例の場合では、

$$\frac{\partial H(x, p)}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad \text{③}$$

$$\frac{\partial H(x, p)}{\partial x} = \frac{\partial U(x)}{\partial x} \quad \text{④}$$

で与えられるので、 $\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}$ の両辺を時間で微分すると

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{m} \frac{dp}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{\partial H(x, p)}{\partial x} = -\frac{1}{m} \frac{\partial U(x)}{\partial x} \quad \text{⑤}$$

したがって

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} \quad \text{⑥}$$

⑥式はこの例におけるニュートンの運動方程式である。これは、厳密な証明ではないので、正しくは別紙の補足資料1を参照ください。そこでは、ランジュバンの運動方程式も含めて解説しています。いずれにしても統計力学ではこのように時間発展の方程式 $\frac{dx}{dt}$ などを解くことはしませんが、ハミルトニアンが決まるといことがこのように運動方程式が決まることと等価であることを理解してください。