第９回　無限小正準変換

理学部　齊藤国靖 *

2023 年 6 月 2 日

正準変換の特別な場合として無限小正準変換がある．無限小正準変換は一般座標と一般運動量の微小な変化を表す正準変換であり，恒等変換に対する微小なズレとして定式化される．特に，無限小正準変換の母関数が保存量であれば，変換後のハミルトニアンは不変である．具体的に母関数が運動量，角運動量，エネルギーといった保存量で与えらえれる場合について詳しく説明する．

1　恒等変換

「第 11 回 最小作用の原理と正準変換」で挙げた正準変換の母関数 $F_2(q_i, P_i, t)$ に対して，

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \ , \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \ , \quad K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \tag{1}$$

が成り立つ．ここで，$F_2(q_i, P_i, t) = q_i P_i$ とすると

$$p_i = P_i \ , \quad Q_i = q_i \ , \quad K = H \tag{2}$$

となり，一般座標，一般運動量，およびハミルトニアンは不変である．この様に，

$$\boldsymbol{\eta} = (q_i, p_i) \quad \longrightarrow \quad (Q_i, P_i) = (q_i, p_i) = \boldsymbol{\eta}$$

であるような正準変換を**恒等変換**という．

2　無限小正準変換

正準変換のうち，一般座標と一般運動量の微小な変化

$$\boldsymbol{\eta} = (q_i, p_i) \quad \longrightarrow \quad \boldsymbol{\eta} + \delta\boldsymbol{\eta} = (q_i + \delta q_i, p_i + \delta p_i)$$

を表すものを**無限小正準変換**という．これは一般座標と一般運動量の微小な変化を表すため，

無限小正準変換　＝　恒等変換からの微小なズレ

* k.saitoh@cc.kyoto-su.ac.jp

と考えることができる．恒等変換の母関数は $F_2(q_i, P_i, t) = q_i P_i$ であるから，無限小正準変換の母関数は

$$F_2(q_i, P_i, t) = q_i P_i + \epsilon G(q_i, P_i, t) \tag{3}$$

であると考えてよい．但し，$\epsilon \ll 1$ は微小パラメータである．

式 (1) の最初の式に式 (3) を代入すると，

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i + \epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}$$

であるから，一般運動量の微小な変化は

$$\delta p_i = P_i - p_i = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \tag{4}$$

となることが解る．同様に，式 (1) の 2 番目の式は

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i + \epsilon \frac{\partial G}{\partial P_i}$$

となる．ここで，関数 $G(q_i, P_i, t)$ を $P_i = p_i + \delta p_i$ についてテイラー展開すると

$$\begin{aligned} G(q_i, P_i, t) &= G(q_i, p_i + \delta p_i, t) \\ &\approx G(q_i, p_i, t) + \frac{\partial G}{\partial p_i}\delta p_i \end{aligned}$$

であるから，微小量 ϵ, δp_i の 1 次までの近似で

$$\begin{aligned} \epsilon \frac{\partial G}{\partial P_i} &\approx \epsilon \frac{\partial p_i}{\partial P_i} \frac{\partial}{\partial p_i} \left\{ G(q_i, p_i, t) + \frac{\partial G}{\partial p_i}\delta p_i \right\} \\ &= \epsilon \left(1 - \frac{\partial \delta p_i}{\partial P_i} \right) \left(\frac{\partial G}{\partial p_i} + \frac{\partial^2 G}{\partial p_i^2}\delta p_i \right) \\ &\approx \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} \end{aligned}$$

となる．よって，

$$Q_i \approx q_i + \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}$$

であり，一般座標の微小な変化は

$$\delta q_i = Q_i - q_i \approx \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} \tag{5}$$

となることが解る．

2.1　行列を用いた表式

式 (4) と (5) をまとめると

$$\delta q_i = \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}\ , \qquad \delta p_i = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}$$

であるから，次の $2n$ 次元ベクトル

$$\delta\boldsymbol{\eta} = \begin{pmatrix} \delta q_1 \\ \vdots \\ \delta q_n \\ \delta p_1 \\ \vdots \\ \delta p_n \end{pmatrix} \quad , \qquad \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial G}{\partial q_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial G}{\partial q_n} \\ \frac{\partial G}{\partial p_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial G}{\partial p_n} \end{pmatrix} \tag{6}$$

を導入すると，「第 12 回 ポアソン括弧式」の $2n \times 2n$ 行列

$$\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} & & & 1 & & 0 \\ & \mathbf{0} & & & \ddots & \\ & & & 0 & & 1 \\ -1 & & 0 & & & \\ & \ddots & & & \mathbf{0} & \\ 0 & & -1 & & & \end{pmatrix} \tag{7}$$

を用いて，無限小正準変換による一般座標と一般運動量の微小な変化は

$$\delta\boldsymbol{\eta} = \epsilon \boldsymbol{J} \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\eta}} \tag{8}$$

と表される．

2.2　ポアソン括弧式による表式

「第 12 回 ポアソン括弧式」で

$$\{u, v\} = \left(\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{J} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\eta}} \tag{9}$$

という関係式を得た．関数 u, v は任意なので，

$$u \to \boldsymbol{\eta} \ , \qquad v \to G$$

と置き換えると，式 (9) は

$$\{\boldsymbol{\eta}, G\} = \left(\frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{J} \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\eta}}$$

となる（u と $\boldsymbol{\eta}$ の置き換えについては，$\boldsymbol{\eta}$ の各成分に置き換えると考えればよい）．ここで，

$$\frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \mathbf{1}$$

は単位行列なので，結局，

$$\{\boldsymbol{\eta}, G\} = \boldsymbol{J} \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\eta}}$$

となる．これを式 (8) に代入すると，無限小正準変換による微小な変化は

$$\delta\boldsymbol{\eta} = \epsilon \{\boldsymbol{\eta}, G\} \tag{10}$$

となる．

2.3 保存量との関係

式 (1) の最後の式に式 (3) を代入すると，

$$
\begin{aligned}
K &= H + \frac{\partial}{\partial t}\left\{q_i P_i + \epsilon G(q_i, P_i, t)\right\} \\
&= H + \epsilon \frac{\partial G}{\partial t}
\end{aligned} \tag{11}
$$

となる．一方，無限小正準変換後のハミルトニアンを $H(\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta})$ としてテイラー展開すると，

$$
H(\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta}) \approx H(\boldsymbol{\eta}) + \left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)^{\mathrm{T}} \delta\boldsymbol{\eta}
$$

となる．ここで，右辺第 2 項に式 (8) を代入し，ポアソン括弧式の表式 (9) を適用すると，

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)^{\mathrm{T}} \delta\boldsymbol{\eta} &= \epsilon \left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{J} \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\eta}} \\
&= \epsilon \left\{H, G\right\}
\end{aligned}
$$

となる．よって，無限小正準変換後のハミルトニアンは

$$
H(\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta}) \approx H(\boldsymbol{\eta}) + \epsilon \left\{H, G\right\}
$$

となる．式 (11) の K と $H(\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta})$ の差を計算すると，

$$
\begin{aligned}
K - H(\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta}) &= \epsilon \frac{\partial G}{\partial t} - \epsilon \left\{H, G\right\} \\
&= \epsilon \left(\frac{\partial G}{\partial t} + \left\{G, H\right\}\right) \\
&= \epsilon \frac{dG}{dt}
\end{aligned}
$$

である．但し，ポアソン括弧式による時間発展の表式を用いた（第 12 回参照）．よって，

$$
\frac{dG}{dt} = 0 \quad \text{ならば} \quad K = H(\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta})
$$

となり，G が保存量であれば無限小正準変換でハミルトニアンは不変であることが解る．

3 無限小正準変換の例

無限小正準変換の具体例を見るために，関数 $G(q_i, p_i, t)$ に保存量を与えてみよう．

3.1　運動量

関数が運動量の場合を考える．$G(q_i, p_i, t) = p_j$ を式 (10) に代入し，ポアソン括弧式の性質（第 12 回参照）を使うと

$$\delta q_i = \epsilon \{q_i, p_j\} = \epsilon \delta_{ij} \tag{12}$$
$$\delta p_i = \epsilon \{p_i, p_j\} = 0 \tag{13}$$

となる．式 (12) は一般座標のある成分 q_j が $\delta q_j = \epsilon$ だけ平行移動することを示している（その他の成分 $i \neq j$ は平行移動しない)。つまり，この場合の無限小正準変換は平行移動を表す．なお，式 (13) より，平行移動によって運動量は変化しないのが解る．

3.2　角運動量

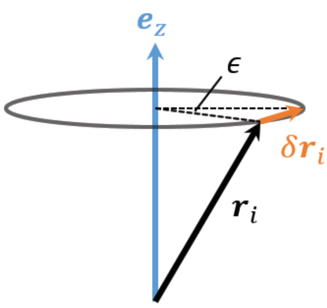
関数が角運動量の場合を考える．$G(q_i, p_i, t) = [\boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{p}_i]_z$ を式 (10) に代入し，ポアソン括弧式の性質を使うと，一般座標の各成分に対して

$$\delta x_i = \epsilon \{x_i, x_i p_{iy} - y_i p_{ix}\} = -\epsilon y_i$$
$$\delta y_i = \epsilon \{y_i, x_i p_{iy} - y_i p_{ix}\} = \epsilon x_i$$
$$\delta z_i = \epsilon \{z_i, x_i p_{iy} - y_i p_{ix}\} = 0$$

となる．z 軸方向の単位ベクトル $\boldsymbol{e}_z = (0, 0, 1)$ を使うと，上式は

$$\delta \boldsymbol{r}_i = \epsilon \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r}_i \tag{14}$$

となり，位置ベクトル $\boldsymbol{r}_i$ を z 軸の周りに ϵ だけ回転することを示している．つまり，この場合の無限小正準変換は回転を表す．



図

3.3 エネルギー

関数がエネルギー（ハミルトニアン）の場合を考える．$G(q_i, p_i, t) = H$ を式 (10) に代入すると

$$\delta\boldsymbol{\eta} = \epsilon\{\boldsymbol{\eta}, H\} \tag{15}$$

となる．ここで，正準方程式をポアソン括弧式を使って書くと（第 12 回参照）

$$\dot{\boldsymbol{\eta}} = \{\boldsymbol{\eta}, H\} \tag{16}$$

であるから，これを式 (15) に代入して

$$\delta\boldsymbol{\eta} = \epsilon\dot{\boldsymbol{\eta}} \tag{17}$$

を得る．式 (17) の $\delta\boldsymbol{\eta}$ は微小時間 ϵ の間の $\boldsymbol{\eta}$ の変化である．つまり，この場合の無限小正準変換は時間発展を表す．

4 補足：物理量の時間発展

物理量 $u(q_i, p_i)$ が時間に陽に依存しないとき，時間の全微分はポアソン括弧式を使って（第 12 回参照）

$$\frac{du}{dt} = \{u, H\} \tag{18}$$

となる．ここで，$u \to du/dt$ に置き換えると

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{du}{dt}\right) = \left\{\frac{du}{dt}, H\right\}$$

$$\therefore \frac{d^2u}{dt^2} = \{\{u, H\}, H\} \tag{19}$$

となる．但し，式 (18) を代入した．同様に，時間に関する 3 階微分は

$$\frac{d^3u}{dt^3} = \{\{\{u, H\}, H\}, H\} \tag{20}$$

である．ところで，関数 u の時間に関するテイラー展開は

$$u(q_i, p_i) = u_0 + t\left(\frac{du}{dt}\right)_0 + \frac{t^2}{2!}\left(\frac{d^2u}{dt^2}\right)_0 + \frac{t^3}{3!}\left(\frac{d^3u}{dt^3}\right)_0 + \ldots$$

であるから，式 (18)-(20) を代入すると

$$\begin{aligned} u(q_i, p_i) &= u_0 + t\{u, H\}_0 + \frac{t^2}{2!}\{\{u, H\}, H\}_0 + \frac{t^3}{3!}\{\{\{u, H\}, H\}, H\}_0 + \ldots \\ &\equiv u_0 e^{\hat{H}t} \end{aligned} \tag{21}$$

となる．但し，u_0 は時刻 $t=0$ での $u(q_i,p_i)$ の値であり，ポアソン括弧式の下付き添え字 “0” も $t=0$ での値を表す．また，式 (21) の最後の表式では

$$\hat{H}=\{*,H\}_0 \tag{22}$$

という演算子を導入している．式 (21) は時刻 t での物理量を $t=0$ での初期値に結び付ける公式で，量子力学においても重要な役割を果たす．