第 9 回　無限小正準変換

理学部　物理科学科　齊藤 国靖

2025 年 8 月 6 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化座標と一般化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れる場合について詳しく説明する．

1　恒等変換

第 7 回で説明した正準変換 II において，母関数に含まれる関数 $F_2(q_i, P_i, t)$ 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，一般化座標，一般化運動量，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．以後，$F_2(q_i, P_i, t)$ のことも母関数と呼ぶ.

2　無限小正準変換

正準変換のうち，正準変数の微小変化を表すものを

無限小正準変換

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

という．ここで，$\delta\boldsymbol{\eta}$ の大きさは微小であるため，

無限小正準変換　＝　恒等変換からの微小なズレ

と考えることもできる．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

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

となるから，一般化運動量の微小変化は

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

となることが解る．同様に，式 (1) の 2 番目の式は

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i + \epsilon \frac{\partial G}{\partial P_i} \tag{5}$$

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．但し，$p_i = P_i - \delta p_i$ に対し，$\partial p_i / \partial P_i = 1 - \partial \delta p_i / \partial P_i$ とした．よって，式 (5) より

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

であり，一般化座標の微小変化は

$$\delta q_i = Q_i - q_i \approx \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} \tag{6}$$

となることが解る．

2.1　行列を用いた表式

式 (4) と (6) をまとめると

正準変数の微小変化

$$\delta q_i = \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}\ , \qquad \delta p_i = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \tag{7}$$

である．但し，ここでの関数 G はテイラー展開した後の $G(q_i, p_i, t)$ なので注意しよう．式 (7) に対応し，$2n$ 次元ベクトル

$$\delta \boldsymbol{\eta} = \begin{pmatrix} \delta q_1 \\ \vdots \\ \delta q_n \\ \delta p_1 \\ \vdots \\ \delta p_n \end{pmatrix}\ , \qquad \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial G}{\partial q_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial G}{\partial q_n} \\ \frac{\partial G}{\partial p_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial G}{\partial p_n} \end{pmatrix} \tag{8}$$

を導入すると，第 8 回「ポアソン括弧式」で用いた $2n \times 2n$ 行列

$$\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} & & & 1 & & 0 \\ & \mathbf{0} & & & \ddots & \\ & & & 0 & & 1 \\ -1 & & 0 & & & \\ & \ddots & & & \mathbf{0} & \\ 0 & & -1 & & & \end{pmatrix} \tag{9}$$

により，式 (7) は次の様に表される．

$$\delta \boldsymbol{\eta} = \epsilon \boldsymbol{J} \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\eta}} \tag{10}$$

2.2　ポアソン括弧式による表式

第 8 回「ポアソン括弧式」で

$$\{u, v\} = \left(\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\eta}} \right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{J} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\eta}} \tag{11}$$

という関係式を得た．関数 u, v は任意なので，

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

とすると，式 (11) 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 (10) に代入すると，正準変数の微小変化は

$$\boxed{\delta\boldsymbol{\eta} = \epsilon\{\boldsymbol{\eta}, G\}} \tag{12}$$

と書ける．ここでも，関数 G はテイラー展開した後の $\underline{G(q_i, p_i, t)}$ なので注意.

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，

$$\begin{aligned} K &= H + \frac{\partial}{\partial t}\{q_i P_i + \epsilon G(q_i, P_i, t)\} \\ &= H + \epsilon\frac{\partial G}{\partial t} \end{aligned} \tag{13}$$

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

$$H(\boldsymbol{\eta} + \delta\boldsymbol{\eta}) \approx H(\boldsymbol{\eta}) + \left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)^{\mathrm{T}} \delta\boldsymbol{\eta} \tag{14}$$

となる．ここで，右辺第 2 項に式 (10) を代入し，ポアソン括弧式の表式 (11) を適用すると

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

となる．よって，式 (14) は

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

であり，式 (13) の K との差を計算すると

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

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[*1].

[*1] 第 8 回を参照.

以上により，

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

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

関数 $G(q_i, p_i, t)$ に保存量を代入し，無限小正準変換の具体例を見てみよう．

3.1　運動量

保存量として運動量を考え，

$$G(q_i, p_i, t) = p_j$$

を式 (12) に代入し，ポアソン括弧式の性質を使うと[*2]

$$\delta q_i = \epsilon \{q_i, p_j\} = \epsilon \delta_{ij} \tag{15}$$

$$\delta p_i = \epsilon \{p_i, p_j\} = 0 \tag{16}$$

となる．式 (15) は

一般化座標のある成分 q_j だけが $\delta q_j = \epsilon$ だけ**平行移動**する

ことを示しており，その他の成分 $i \neq j$ は平行移動しない．つまり，運動量による無限小正準変換は平行移動を表す．なお，式 (16) 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

保存量として角運動量を考え，

$$G(q_i, p_i, t) = [\boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{p}_i]_z$$

を式 (12) に代入し，ポアソン括弧式の性質を使うと，座標の各成分に対して

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

[*2] 第 8 回を参照．

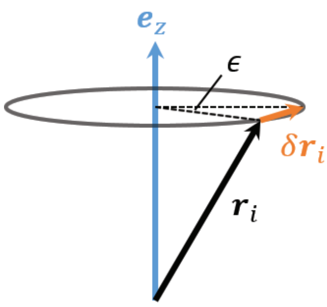
となる．z 軸方向の単位ベクトル $\boldsymbol{e}_z = (0,0,1)$ を使うと，上式は

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

となり，図の様に

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，角運動量による無限小正準変換は回転を表す．



図

3.3　エネルギー

保存量としてエネルギー（ハミルトニアン）を考え，

$$G(q_i, p_i, t) = H$$

を式 (12) に代入すると

$$\delta \boldsymbol{\eta} = \epsilon \{\boldsymbol{\eta}, H\} \tag{17}$$

となる．ここで，ポアソン括弧式を用いて正準方程式を書くと[*3]

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

であるから，これを式 (17) に代入して

$$\delta \boldsymbol{\eta} = \epsilon \dot{\boldsymbol{\eta}} \tag{18}$$

が得られる．式 (18) の $\delta\boldsymbol{\eta}$ は

微小時間 ϵ の間の $\boldsymbol{\eta}$ の時間変化

であり，ハミルトニアンによる無限小正準変換は正準変数の時間発展を表す．

[*3] 第 8 回を参照.

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[*4]

$$\frac{du}{dt} = \{u, H\} \tag{19}$$

で与えられる．上式で $u \to du/dt$ と置き換えると

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{du}{dt}\right) = \left\{\frac{du}{dt}, H\right\}$$
$$\therefore \frac{d^2u}{dt^2} = \{\{u, H\}, H\} \tag{20}$$

となる．但し，右辺に式 (19) を代入した．同様に，時間に関する 3 階微分は

$$\frac{d^3u}{dt^3} = \{\{\{u, H\}, H\}, H\} \tag{21}$$

である．ところで，関数 u の時間に関するテイラー展開は

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

であるから，式 (19)-(21) を代入すると

$$u(q_i, p_i) = u_0 + t\{u, H\}_0 + \frac{t^2}{2!}\{\{u, H\}, H\}_0 + \frac{t^3}{3!}\{\{\{u, H\}, H\}, H\}_0 + \dots \tag{22}$$

となる．但し，u_0 は時刻 $t = 0$ における $u(q_i, p_i)$ 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．ここで，演算子

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

を導入すると，式 (22) は

物理量の時間発展

$$u(q_i, p_i) = e^{\hat{H}t}u_0$$

と書ける．これは時刻 t での物理量 $u(q_i, p_i)$ と初期値 u_0 を結び付ける公式であり，演算子 $e^{\hat{H}t}$ は**時間推進演算子**と呼ばれ，量子力学においても重要な役割を果たす．

[*4] 第 8 回を参照．