前回

- ラグランジアンからハミルトニアンへの変換（ルジャンドル変換）

  ラグランジアン $L(q,\dot{q})$ に対して、一般化運動量 $p=\dfrac{\partial}{\partial \dot{q}}L(q,\dot{q})$ とするとき、

  $H=p\dot{q}-L$ をハミルトニアンと呼ぶ。

  このとき、ハミルトニアンの変数は自動的に $H=H(p,q)$ となっている。

- ハミルトニアンは、正準方程式 $\begin{cases}\dfrac{\partial H}{\partial q}=-\dot{p}\\ \dfrac{\partial H}{\partial p}=\dot{q}\end{cases}$ を満たす。

- エントロピーと体積の関数になっていて扱いにくい $U(S,V)$ に対して、

  $F=U-\dfrac{\partial U}{\partial S}\cdot S=U-TS$ と置くと、$F=F(T,V)$ は T, S の関数になっている

  （但し、$T\equiv\dfrac{\partial U}{\partial S}(S,V)$ である）

  これもルジャンドル変換である。

１０正準変換

１０-１ラグランジアンの変数変換【復習】

座標変換 $\begin{cases}Q_1=Q_1(q_1,\cdots q_n)\\ \quad\vdots\\ Q_n=Q_n(q_1,\cdots q_n)\end{cases}$ についてそのままラグランジュ方程式が成立。

つまり、 $\dfrac{\partial L}{\partial q_i}-\dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\mapsto\dfrac{\partial L}{\partial Q_i}-\dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i}\right)=0$

例）

$$\begin{cases} X = x + y \\ Y = x - y \end{cases} \mapsto \begin{cases} \dot{X} = \dot{x} + \dot{y} \\ \dot{Y} = \dot{x} - \dot{y} \end{cases} \mapsto \begin{array}{l} L(x, y, \dot{x}, \dot{y})\text{ に代入} \\ \text{して、}x, y, \dot{x}, \dot{y}\text{を消去} \end{array} \mapsto \begin{cases} \dfrac{\partial L}{\partial X} - \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{X}}\right) = 0 \\ \dfrac{\partial L}{\partial Y} - \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{Y}}\right) = 0 \end{cases}$$

１０-２ 証明

１０-２-(A) 準備

$\dot{Q}_i$ の変換式を $\dot{q}_i$ で偏微分して、$\dfrac{\partial \dot{Q}_i}{\partial \dot{q}_i} = \dfrac{\partial Q_i}{\partial q_i}$ を得て置く。

１０-２-(B)　Q と $\dot{Q}$ がどのように L に含まれているかを調べる(ここが肝心)、

$$Q_i \mapsto \begin{cases} q_i = q_i(Q_1 \sim Q_n) \\ \dot{q}_i = \dot{q}_i(Q_1 \sim Q_n, \dot{Q}_1 \sim \dot{Q}_n) \mapsto L(q_1 \sim q_n, \dot{q}_1 \sim \dot{q}_n) \\ \dot{q}, \dot{Q}\text{ の両方を経由} \end{cases}$$

$$\dot{Q}_i \mapsto \begin{cases} \dot{q}_i = \dot{q}_i(Q_1 \sim Q_n, \dot{Q}_1 \sim \dot{Q}_n) \\ \dot{q}\text{のみを経由} \end{cases} \mapsto L(q_1 \sim q_n, \dot{q}_1 \sim \dot{q}_n)$$

(量子力学を学ぶための解析力学入門／高橋, p25)

Q は q と $\dot{q}$ を経由して L に入るのに対し、$\dot{Q}$ は $\dot{q}$ のみを経由しています。

これさえ把握できれば、以下 2), 3) の偏微分を計算するだけです。

１０-２-(C) 第一項は、$\dfrac{\partial L}{\partial Q_i} = \sum_j \dfrac{\partial L}{\partial q_j}\dfrac{\partial q_j}{\partial Q_i} + \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\dfrac{\partial \dot{q}_j}{\partial Q_i}$

１０-２-(D) 第二項は、

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i}\right) = \frac{d}{dt}\sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_i} = \frac{d}{dt}\sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\frac{\partial q_j}{\partial Q_i} = \sum_j \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right)\frac{\partial q_j}{\partial Q_i} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial q_j}{\partial Q_i}\right)$$

ですから、両辺等しいと置いてみると、

$0=\sum_j\left\{\frac{\partial L}{\partial q_j}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right)\right\}\left(\frac{\partial q_j}{\partial Q_i}+\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial Q_i}\right)$ となり、元のラグランジュ方程式が成り立てば、新しい変数についても必ず同じ形の方程式が成り立つことがわかります。

（証明終）

１０-３ハミルトニアンと正準方程式における変数変換

もう少し広い変換が許されます。$(q,p)\to(Q,P)$という変換について、運動量と座標の入り混じった新変数を定義しても正準方程式は不変です。

$$\begin{cases} Q_i=Q_i(q_1\cdots q_n,p_1\cdots p_n) \\ P_i=P_i(q_1\cdots q_n,p_1\cdots p_n) \end{cases} \mapsto \begin{cases} \dot{Q}=H_P \\ \dot{P}=-H_Q \end{cases}$$

たとえば、$x+p$などという変数を平気で定義してしまうのです。

注）qと$\dot{q}$を混ぜる変換ではラグランジュ方程式は成り立ちません

省略）理由は、証明の１０-２-(D)のところで、

$\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i}=\sum_j\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_i}+$　余分な項$\frac{\partial L}{\partial q_j}\frac{\partial q_j}{\partial \dot{Q}_i}$のように、

余分な項が出てくるからです

この点では、ハミルトニアンの方が圧倒的に便利

１０-４　正準方程式が不変に保たれる変換＝正準変換

出発点である、『ラグランジアンと最小作用の原理』に再び立ち戻ります。

ハミルトニアンを一旦ラグランジアンに戻して、それが「同等(＝最小作用の原理を満たす)」であれば、同じ運動なのですから、変数変換した新変数で同じ正

準方程式が成立、といってよいでしょう。

つまり、変換後の$\overline{L'}=\sum P_i\dot{Q}_i-H'(Q_i,P_i)$が、$\overline{L}=\sum p_i\dot{q}_i-H(q_i,p_i)$

と『同等』であれば良いということです。

ここで、「同等」と言ったのは、完全に同じでなくとも、$\overline{L}=\overline{L'}+\dfrac{dW}{dt}$というふうに付加項が付いても OK ということでした。すなわち、

$$\overline{L'}=\sum P_i\dot{Q}_i-H'(Q_i,P_i)=\sum p_i\dot{q}_i-H(q_i,p_i)+\frac{dW}{dt}$$

でも OK ということです。

注）時間微分が付いても、積分すると定数になるので、最小作用の原理に影響しないのでした。

$$\int_{t_1}^{t_2}\dot{W}(q,Q)dt=\underbrace{W(q(t_2),Q(t_2))-W(q(t_1),Q(t_1))}_{\text{途中の値（＝関数の形）には寄らない定数}}$$

注）厳密には、この「ラグランジアンもどき」の最小作用の原理は、証明が必要で、かつ、この場合は$\delta\dot{p}$も始点終点でゼロが必要。

１０-５ Wの意味

Wが与えられた正準変換がどんな変換か、一番よく特徴を表す指標になっています。云いかえれば、Wが決まれば正準変換がひとつ決まると云ってもよいのです。このWと正準変換の関係を調べて見ましょう。

変換$(p,q)\to(P,Q)$、すなわち、

$$q_i=q_i(Q_1\cdots Q_n,P_1\cdots P_n)$$

$$p_i = p_i\left(Q_1 \cdots Q_n, P_1 \cdots P_n\right), \quad i\!=\!1 \sim n$$

が正準変換であるとします。すると、変換前後で、ラグランジアンもどきが同じ(＝dW/dt が付く)ということですから、

$$\overline{L} = \sum p_i \dot{q}_i - H\left(q_i, p_i\right) = \sum P_i \dot{Q}_i - H'\left(Q_i, P_i\right) + \frac{dW}{dt}$$ となります。

ここで W が、$W = W\left(q_1 \cdots q_n, Q_1 \cdots Q_n\right)$ と与えられているとします。どの変数の関数であるか重要です。今は、q_i と Q_i の関数、としたわけです。

すると、$\displaystyle \frac{dW}{dt} = \sum_i \frac{\partial W}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial W}{\partial Q_i}\dot{Q}_i$ となります。

注意――変数は必ず二種類で、最小作用の原理から正準変換を

直接導くには必ず q_i と Q_i を変数にする必要があります。

時間微分するので、$\overline{L}$ に含まれる時間微分変数 $\dot{q}_i$ と $\dot{Q}_i$ が必要なわけです。

これをラグランジアンの変換の式 $\overline{L} = \sum p_i \dot{q}_i - H\left(q_i, p_i\right) = \cdots$ に入れますと、

$$\text{右辺} = \sum P_i \dot{Q}_i - H'\left(Q_i, P_i\right) + \sum \frac{\partial W}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial W}{\partial Q_i}\dot{Q}_i$$

（左辺は $\overline{L} = \sum p_i \dot{q}_i - H\left(q_i, p_i\right)$ ）

となりますから、両辺を $\dot{q}$ と $\dot{Q}$ について整理してみると、

$$\sum\left(p_i - \frac{\partial W}{\partial q_i}\right)\dot{q}_i - \sum\left(P_i - \frac{\partial W}{\partial Q_i}\right)\dot{Q}_i = \sum H\left(q_i, p_i\right) - H'\left(Q_i, P_i\right)$$

です。

１０-６ 恒等式から変換式を導く

両辺が恒等的に等しくなるためには、

[1] まず、左辺の$\dot{q}$と$\dot{Q}$の係数(括弧の中身)がゼロになる必要があります。

∵ 右辺には、$\dot{q}$と$\dot{Q}$は全く入っていないからです。

[2] すると、０＝右辺となりますから、HとH'も等しくなくてはならないことがわかります。以上から、

$$p_i = \frac{\partial W(q_1 \cdots q_n, Q_1 \cdots Q_n)}{\partial q_i},\ \ P_i = -\frac{\partial W(q_1 \cdots q_n, Q_1 \cdots Q_n)}{\partial Q_i},\ \ H(p_i, q_i) = H'(P_i, Q_i)$$

が変換式ということになります。

注意）単純に、$P = \cdots$, $Q = \cdots$という式ではないことです。つまり、

$p_i = f(q, Q),\ \ P_i = g(q, Q)$

という連立方程式であり、これを解いて初めて、

$(p_i, q_i) \to (P_i, Q_i)$の変換が直接得られる、と考えるのです。

もう一つ、$H' = H$の意味は、関数形が同じということではなく、新変数で変数変換したH'をそのままハミルトニアンとせよ、ということです。念のため。

このように、あるWを与えれば、正準変換がひとつ決まります。このWを、

正準変換(*canonical transformation*)の母関数(*generator*)

と言います。とにかく、いろいろな、Wを与えて、正準変換を網羅しよう、というのは一番シンプルな考え方です。

実は、与えられた変換 $(p_i, q_i) \to (P_i, Q_i)$が正準変換かどうかを直接チェックするのは結構、面倒なのです。その便法が「ポワソンの括弧式」と呼ばれるもので

後半で説明します。

１０-７ 母関数の例１

$W(q_i, Q_i) = -\sum_i q_i Q_i$ としましょう(他の変数は後で)。すると、直ちに

$p_i = \dfrac{\partial W}{\partial q_i} = -Q_i$，$P_i = -\dfrac{\partial W}{\partial Q_i} = q_i$ が得られます。

たとえば、質点の自由落下のハミルトニアンは、

$H = \dfrac{p^2}{2m} + mgq$ ですから、変換後は、$H' = \dfrac{Q^2}{2m} + mgP$ であり、変数名が入れ代わっただけです。(ただ入れ替えただけでは正準変換にならないことに注意！)。

１０-８ 具体例 2—ポワンカレ変換

もう少し自明でなくて面白い変換を考えましょう。$W = \dfrac{1}{2} q^2 \cot Q$ という奇妙な形のものです。変換は、

$$p = \frac{\partial W}{\partial q} = q \cot Q$$

$$P = -\frac{\partial W}{\partial Q} = \frac{1}{2} q^2 \frac{1}{\sin^2 Q}$$

ですから、q を消去するために、上式の自乗を下式で除して、

$\dfrac{p^2}{P} = 2\cot^2 Q \sin^2 Q = 2\cos^2 Q$ となりますから、

$p = \sqrt{2P}\cos Q$ が得られ、これを $p = \dfrac{\partial W}{\partial q} = q \cot Q$ に代入して、

$$q = \frac{p}{\cot Q} = \sqrt{2P}\sin Q$$

という変換であることがわかります。

これを$m=1, \omega_0=1$の調和振動子に適用すると、

$H=\frac{p^2}{2}+\frac{q^2}{2}$ は、$H'=\frac{2P\cos^2 Q}{2}+\frac{2P\sin^2 Q}{2}=P$ となってしまいます。

正準方程式は、

$\dot{Q}=\frac{\partial H'}{\partial P}=1$

$\dot{P}=-\frac{\partial H'}{\partial Q}=0$ です。

$\dot{Q}=1$ ということは、$Q(t)=t+Q_0$ であり、まるで直線運動です。一体全体何が起こったのでしょうか。これを理解するには、運動を、(p,q)の間の関係として捉えるとよいでしょう。

もともとのハミルトニアンは、$H=\frac{p^2}{2}+\frac{q^2}{2}$ でしたから、エネルギー保存則を思い出せば、$(p(t),q(t))$を二次元平面にプロットしてみると円運動です。座標と速度が増減を繰り返しながらぐるぐる廻っているのです(この二次元平面を「位相空間」と言います。統計力学でも出てくる、重要な概念で、次回説明します)。

これに対し、与えられた変換 $p=\sqrt{2P}\cos Q$ 、$q=\sqrt{2P}\sin Q$ は、明らかに P が半径で、Q が角度です。つまり、円運動を極座標で表すという変換だったわけです。この変換をポワンカレ変換と言います。

一般の調和振動子のハミルトニアン $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega_0^2 q^2}{2}$ に対するポワンカレ変換

は、 $p=\sqrt{2m\omega_0 P}\cos Q$, $q=\dfrac{p}{\cot Q}=\sqrt{\dfrac{2P}{m\omega_0}}\sin Q$ です。これに対する母関数や正準方程式を求めてみます。 $p=\dfrac{\partial W}{\partial q}(q,Q)$, $P=-\dfrac{\partial W}{\partial Q}(q,Q)$ ですから、

変換式から P を消去すれば、母関数の第一の式 $p=\dfrac{\partial W}{\partial q}(q,Q)$ が使えます。

すなわち、$\dfrac{p}{q}=m\omega_0\cot Q$ より、

$p=\dfrac{\partial W}{\partial q}(q,Q)=m\omega_0 q\cot Q$ となって、$W(q,Q)=\dfrac{1}{2}m\omega_0 q^2\cot Q+f(Q)$

が得られます。 $f(Q)$ は任意関数ですがゼロとします。

１０-９母関数のルジャンドル変換

$W=W(q,Q)$ ではなく、 p や P を変数には出来ないのでしょうか。

「変数を変える」といったら、前にやったルジャンドル変換です。

$W(q_i,Q_i)=-\sum_i P_i Q_i+W'(q_i,P_i)$ とおいて $\overline{L}=\overline{L'}+\dfrac{dW(q,Q)}{dt}$ に代入すれば、

$$\underbrace{\sum p_i\dot{q}_i-H(q_i,p_i)}_{\overline{L}}=\underbrace{\sum P_i\dot{Q}_i-H'(Q_i,P_i)}_{\overline{L'}}\ \underbrace{-\sum\dot{P}_iQ_i-\sum P_i\dot{Q}_i+\frac{\partial W'}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial W'}{\partial P_i}\dot{P}_i}_{dW/dt}$$

$\therefore H'-H=\sum -p\dot{q}+\dfrac{\partial W'}{\partial q}\dot{q}-\dot{P}Q+\dfrac{\partial W'}{\partial P}\dot{P}$ となり、前と同じ議論

(左辺には $\dot{q}$, $\dot{P}$ は含まれていないので、右辺の $\dot{q}$, $\dot{P}$ の係数はゼロ)

により、

変換 $p_i=\dfrac{\partial W'(q,P)}{\partial q_i}$, $Q_i=\dfrac{\partial W'(q,P)}{\partial P_i}$, $H=H'$ が得られます。

例えば $W'=qP$ は恒等変換。

∵） $p=\dfrac{\partial W'}{\partial q}=\dfrac{\partial(qP)}{\partial q}=P$ 、及び $Q=\dfrac{\partial W'}{\partial P}=\dfrac{\partial(qP)}{\partial P}=q$

注) ここでW'，$\overline{L'}$などは微分ではなく、別の関数ということです。

１０-１０ *Poisson* の括弧式

母関数から変換を *generate* するのではなく、与えられた変換が正準変換であるかどうかをチェックする *Poisson* の括弧式と呼ばれるものがあります。

これは二つの変数A,Bに対する「*Poisson* の括弧式」というものを、

$$[A,B]=\sum_i \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i}-\frac{\partial B}{\partial p_i}\frac{\partial A}{\partial q_i}$$

と定義します。(p,q)は、正準変換を行う前に使っていた変数です。書き方はいろいろで、$[A,B]$、$\{A,B\}$とか、「ポワッソン」であることを$[A,B]_P$と書いて示したりしているようです。このポワッソンの括弧式の性質として、定義から明らかに、$[A,B]=-[B,A]$および$[A,A]=0$です。

それから、もう一つ、重要なこととして、どの正準変数(p,q)で偏微分しているのかを、はっきり明記しておく必要があります。

変数変換$(p,q)\to(P,Q)$において、このポワッソンの括弧式の値が不変に保たれている場合、その変換は正準変換になります。すなわち、

$[p_i,q_j]=[P_i,Q_j]$、$[p_i,p_j]=[P_i,P_j]$、$[q_i,q_j]=[Q_i,Q_j]$

の三式が成り立てば OK というわけです。微分はすべて元の変数です。

注）一番目はδ_{ij}，二番三番はゼロです。

１０-１１ 証明

１０-１１-(A) 元の変数における括弧式$[p_i, q_j]$

$$[q_i, p_j] = \sum_k \frac{\partial q_i}{\partial q_k}\frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_i}{\partial q_k}\frac{\partial q_j}{\partial p_k}$$

ですから、$\dfrac{\partial p_i}{\partial p_k} = \dfrac{\partial q_i}{\partial q_k} = \delta_{ik}$、及び、$\dfrac{\partial p_i}{\partial q_k} = \dfrac{\partial q_i}{\partial p_k} = 0$ 等に注意すると、

$$[p_i, q_j] = \sum_k \delta_{ik} \cdot \delta_{jk} - 0 \cdot 0 = \delta_{ij}$$

が得られます。もちろん、$[p_i, p_j] = \sum_k \dfrac{\partial p_i}{\partial q_k}\dfrac{\partial p_j}{\partial p_k} - \dfrac{\partial p_j}{\partial q_k}\dfrac{\partial p_i}{\partial p_k} = \sum_k 0 \cdot \delta_{jk} - 0 \cdot \delta_{ik} = 0$

なども簡単に得られます。

次に、変換後の変数の括弧式は、

$$[Q_i, P_j] = \sum_k \frac{\partial Q_i}{\partial q_k}\frac{\partial P_j}{\partial p_k} - \frac{\partial P_j}{\partial q_k}\frac{\partial Q_i}{\partial p_k}$$

です。

１０-１１-(B) 母関数の準備

まず $p_i = \dfrac{\partial W(q_1 \cdots q_n, Q_1 \cdots Q_n)}{\partial q_i}$, $P_i = -\dfrac{\partial W(q_1 \cdots q_n, Q_1 \cdots Q_n)}{\partial Q_i}$ より、

一つ目の式を使って、

$$\frac{\partial P_j}{\partial q_k} = \frac{\partial}{\partial q_k}\left(-\frac{\partial W}{\partial Q_j}\right) = -\frac{\partial}{\partial Q_j}\left(\frac{\partial W}{\partial q_k}\right) = -\frac{\partial p_k}{\partial Q_j} \qquad \text{—(I)}$$

を得ます。

次にさっきやった母関数のルジャンドル変換$W''(p, Q) = W(q, Q) - \sum_i q_i p_i$ から、

さらに、$\overline{L} = \overline{L'} + \dfrac{dW(q,Q)}{dt}$ を使って、

$q_i = -\dfrac{\partial W''(p,Q)}{\partial p_i}$，$P_i = -\dfrac{\partial W''(p,Q)}{\partial Q_i}$ が得られるので、このうち、

二つ目の式を使って、

$$\frac{\partial P_j}{\partial p_k} = \frac{\partial}{\partial p_k}\left(-\frac{\partial W''(p,Q)}{\partial Q_j}\right) = \frac{\partial}{\partial Q_j}\left(-\frac{\partial W''(p,Q)}{\partial p_k}\right) = \frac{\partial q_k}{\partial Q_j} \quad \text{—(II)}$$

となります。以上 I、II を括弧式に戻してやると、

$$[Q_i, P_j] = \sum_k \frac{\partial Q_i}{\partial q_k}\underbrace{\frac{\partial P_j}{\partial p_k}}_{W''\text{より}} + \underbrace{\frac{\partial P_i}{\partial q_k}}_{W\text{より}}\frac{\partial Q_j}{\partial p_k} = \underbrace{\sum_k \frac{\partial Q_i}{\partial q_k}\frac{\partial q_k}{\partial Q_j} + \frac{\partial p_k}{\partial Q_j}\frac{\partial Q_i}{\partial p_k}}_{Q=Q(\{q\},\{p\})} = \frac{dQ_i}{dQ_j} = \delta_{ij}$$

となって確かに一致します。ほかのものも同様にして証明できます。

１０-１２ ハイゼンベルグの運動方程式

ポワッソンの括弧式の他の性質を見てみます。任意の関数 $F(q,p)$ を時間微分してみると、

$$\frac{dF}{dt} = \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i$$

です。正準方程式を思い出すと、$\dot{q}_i = \dfrac{\partial H}{\partial p_i}$、$\dot{p}_i = -\dfrac{\partial H}{\partial q_i}$ ですから、代入すれば、

$$\frac{dF}{dt} = \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

となり、これはポワッソンの括弧式の定義そのものです。よって、

$$\frac{dF}{dt} = [F, H]$$

が得られます。

これは、量子力学では「ハイゼンベルグの運動方程式」と呼ばれるものです。

どんな量でも、時間微分を知りたければ、ハミルトニアンとのポワッソンの括弧式を計算すれば「機械的」に求まる、というわけです。

１０-１３ 例）ハイゼンベルグの運動方程式と正準方程式

たとえば、$F=q$ あるいは p とすれば、$\dot{q}=[q,H]$ と $\dot{p}=[p,H]$ となります。括弧式の中身を計算してやれば、正準方程式が導かれます。こちらの括弧式の方を正準方程式と呼ぶこともあります。対称的で覚えやすいかもしれませんが、ポワッソンの括弧式そのものの定義が複雑ですね。

また、$F=H$ では、$\dot{H}=[H,H]=0$ と、エネルギー保存則が出ます。

１０-１４ 調和振動子のハイゼンベルグの運動方程式

調和振動子のハミルトニアン $H=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{m\omega_0^2q^2}{2}$ に適用すると、

$\dot{q}=\dfrac{\partial q}{\partial q}\cdot\dfrac{\partial H}{\partial p}-\dfrac{\partial q}{\partial p}\cdot\dfrac{\partial H}{\partial q}=\dfrac{p}{m}$、$\dot{p}=\dfrac{\partial p}{\partial q}\cdot\dfrac{\partial H}{\partial p}-\dfrac{\partial p}{\partial p}\cdot\dfrac{\partial H}{\partial q}=0-m\omega_0^2q$ です。

１０-１５Bogoliubov 変換

この Poisson 括弧式を使って変換 $\begin{cases}Q=\alpha q-\beta p\\ P=\beta q+\alpha p\end{cases}$ が正準変換かどうか見てみましょう。

$$[Q,P]=\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p}-\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p}=\frac{\partial(\alpha q-\beta p)}{\partial q}\frac{\partial(\beta q+\alpha p)}{\partial p}-\frac{\partial(\beta q+\alpha p)}{\partial q}\frac{\partial(\alpha q-\beta p)}{\partial p}$$

$$=\alpha(\alpha)-\beta(-\beta)-=\alpha^2+\beta^2$$

で、これが元の変数での値 $[q,p]=1$ に一致するためには、$\alpha^2+\beta^2=1$ という条件

が必要になります。この条件は、$\alpha=\cos\theta, \beta=\sin\theta$ となります。

なお、$\theta=0$ で恒等変換、$\dfrac{\pi}{2}$ で変数入替となります。この変換は、量子力学で超伝導現象を解明するのに使われたボゴリューボフ変換と呼ばれるものです。但し、x と p ではなく、生成消滅演算子の間の変換ですが。

１０-１６　角運動量

次の例として、角運動量をやってみましょう。$\vec{l}=\vec{r}\times\vec{p}$ ですから、

デカルト座標で書けば、$\vec{l}=\begin{pmatrix} yp_z-zp_y & zp_x-xp_z & xp_y-yp_x \end{pmatrix}$

となります。

これらの成分間の括弧式は$\alpha=x,y,z$ として、

$$[l_x,l_y]=\sum_\alpha \frac{\partial l_x}{\partial x_\alpha}\frac{\partial l_y}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial l_y}{\partial x_\alpha}\frac{\partial l_x}{\partial p_\alpha}=\sum_\alpha \frac{\partial(yp_z-zp_y)}{\partial x_\alpha}\frac{\partial(zp_x-xp_z)}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial(zp_x-xp_x)}{\partial x_\alpha}\frac{\partial(yp_z-zp_y)}{\partial p_\alpha}$$
$$=(p_z\cdot 0-p_y\cdot(-x))-(p_x\cdot y-p_x\cdot 0)=xp_y-yp_x=l_z$$

となります。これと、$[p,q]=1$ の関係式は量子力学でもよく使われるものです。

(以下、旧ノート)

注 1) ラグランジアンは先週やったように、ハミルトニアンから簡単に逆算できて $L=\sum p_i\dot{q}_i - H(q_i, p_i)$ となります。ただし、変数は q と $\dot{q}$ ではなく、q と p です。ですから、ラグランジアンもどきということで、L ではなく、$\overline{L}=\overline{L}(p,q)$ と書いておいた方が良いでしょう。この $\overline{L}$ の作用積分に対して最小作用の原理を適用するとどうなるでしょうか。

なお、$\overline{L}$ の独立変数は p と q ですから、$\delta q(t_1)=\delta q(t_2)=0$、$\delta p(t_1)=\delta p(t_2)=0$ という条件をつけます。すると、

$$\overline{S}=\int_{t_1}^{t_2} dt\overline{L}(p,q)=\int_{t_1}^{t_2} dt\sum_i p_i\dot{q}_i - H(q_i, p_i)$$

の変分をとるわけですから、

$$\delta\overline{S}=\int_{t_1}^{t_2} dt\sum_i \delta p_i\dot{q}_i + p_i\delta\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial q_i}\delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i}\delta p_i = \int_{t_1}^{t_2} dt\sum_i \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i}\right)\delta p_i + p_i\delta\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial q_i}\delta q_i$$

となるので、第三項を部分積分すれば、

$$\int_{t_2}^{t_2} dtp_i\delta\dot{q}_i = p_i\delta q_i\Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} dtp_i\delta q_i = -\int_{t_1}^{t_2} dt\dot{p}_i\delta q_i$$

となり(始点と終点は固定して変分しますから $\delta q(t_1)=\delta q(t_2)=0$)、結局、

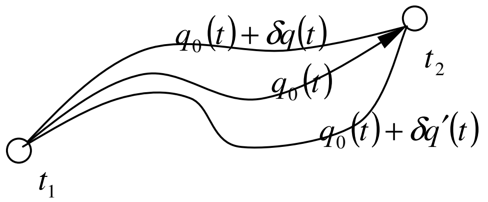
$$\delta\overline{S}=\int_{t_1}^{t_2} dt\sum_i \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i}\right)\delta p_i - \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i}\right)\delta q_i$$

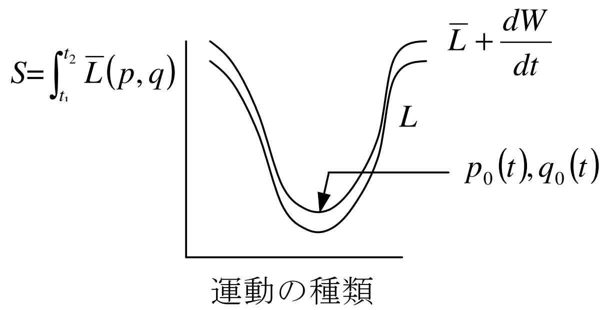
が得られ、任意の微小関数 $\delta p_i, \delta q_i$ に対して、$\delta\overline{S}$ が極小になるためには、括弧の中身がゼロにならねばなりません。これで「最小作用の原理　≡　正準方程式」

が直接証明されましたことになります。

注 2)

なぜ $\frac{dW(q,p)}{dt}$ が付いてもよいかというと、そもそも最小作用の原理は、$S=\int_{t_1}^{t_2}dt\bar{L}(p(t),q(t))$ が、運動の始点・終点での独立変数の値を定数として固定する、という条件下で極小値を取るようにというものでした。





つまり、左図のように、経路を変えて極小値を探すわけです。そうして、極小値を与える運動 $p_0(t),q_0(t)$ が定まったとしましょう。作用積分は運動をいろいろ変えたときに $p_0(t),q_0(t)$ のところで極小になります。ここで、ラグランジアンもどきに、p と q の勝手な変数の時間微分 $\frac{dW(p,q)}{dt}$ を足し加えたとしましょう。何が起こるでしょうか。新しいラグランジアンもどき $\bar{L}+\frac{dW}{dt}$ に対応する作用積分は運動をいろいろ変えたときに、やはり $p(t)=p_0(t),q(t)=q_0(t)$ のところで極小となってくれるのでしょうか。

答えはもちろん、イエスです。$S=\int_{t_2}^{t_2}\bar{L}+\frac{dW}{dt}dt=\int_{t_2}^{t_2}\bar{L}dt+W\big|_{t_1}^{t_2}$ ですから、二項目

はたとえば終点では$W(t_2)=W(q_0(t_2)+\delta q(t_2), p_0(t_2)+\delta p_0(t_2))$となり、

$\delta p(t_2)=\delta q(t_2)=0$なのですから、どんな運動$p(t), q(t)$に対しても定数です。よって、結局、作用積分は、$p(t)=p_0(t),\ q(t)=q_0(t)$で極小となることは全く変わらないのです。

注 3)

具体例 3

前の二つの例は、$W(q,Q)$としましたが、そうでない場合はどうなるでしょうか。

$W(q_i,Q_i)=-\sum_i P_iQ_i+W'(q_i,P_i)$で、新しい母関数$W'(q,P)$を定義してみます。

左辺と右辺で変数が異なるように見えますが、Pは、$P_i=-\dfrac{\partial W(q,Q)}{\partial Q_i}$として消してしまって$W(q,Q)$に持って行くわけです。

この$W(q,Q)$の表式を先ほどの変換に代入してみます。

$$\begin{aligned}\sum p_i\dot{q}_i-H(q,p)&=\sum P_i\dot{Q}_i-H'(Q,P)+\frac{\partial W(q,Q)}{\partial t}\\&=\sum P_i\dot{Q}_i-H'(Q,P)+\frac{d}{dt}\left[\sum -P_iQ_i+W'(q,P)\right]\\&=\sum P_i\dot{Q}_i-H'(Q,P)+\sum -\dot{P}_iQ_i-P_i\dot{Q}_i+\frac{\partial W'}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial W'}{\partial P_i}\dot{P}_i\end{aligned}$$

整理すると、$\dot{Q}$の項が消えて、

$$=\sum\frac{\partial W'}{\partial q}\dot{q}_i-H'(Q,P)-\sum\left(Q_i-\frac{\partial W'}{\partial P_i}\right)\dot{P}_i$$

となるので、q,P(そして、その時間微分)の関数だと思うと、

$p_i = \dfrac{\partial W'(q,P)}{\partial q_i}$、$Q_i = \dfrac{\partial W'(q,P)}{\partial P_i}$、$H(q,p) = H'(Q,P)$という関係式が得られます。

先ほどのものと符号が微妙に違うので注意が必要です。

この場合、例えば、$W'(q,P) = qP$としてみると、

$p = \dfrac{\partial W'}{\partial q} = P$、$Q = \dfrac{\partial W'}{\partial P} = q$ですから、恒等変換(何もしない)であることがわかります。

具体例 4

Wの変数をどういう風にとるかという問題ですが、

$W(q_i, Q_i) = -\sum_i P_i Q_i + W'(q_i, Q_i)$、$p_i = \dfrac{\partial W'(q,P)}{\partial q_i}$、$Q_i = \dfrac{\partial W'(q,P)}{\partial P_i}$

と同様にして、いろいろ変えることが出来ます。

$W(q,Q) = \sum qp + W''(p,Q)$、$q_i = -\dfrac{\partial W''(p,Q)}{\partial p_i}$、$Q_i = -\dfrac{\partial W''(p,Q)}{\partial Q_i}$

$W(q,Q) = \sum qp - QP + W'''(p,P)$、$q_i = -\dfrac{\partial W'''(p,P)}{\partial p_i}$、$P_i = -\dfrac{\partial W'''(p,P)}{\partial P_i}$

を証明するのも良い練習問題です。

($\sum p_i \dot{q}_i - H(q,p) = \sum P_i \dot{Q}_i - H'(Q,P) + \dfrac{\partial W(q,Q)}{\partial t}$に代入するだけですが)。

この形からあきらかなように、これら一群の母関数の変数の置き換えは、先週やったのと同様に、ルジャンドル変換になっています。

注 5)

前回、ルジャンドル変換でわかりにくかったようなので、再度説明します。

$\overline{L}(q,p)=p\dot{q}-H(q,p)$に対して、変数変換$(q,p)\to(Q,P)$を行った時、

(注意、繰り返しますが、ラグランジアンにバーが付いているのは、qとpの関数と見ているからです。右辺の$\dot{q}$は正準方程式$\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p}$で消してしまいます)。

変換式を代入した新しい$\overline{L}'$が、$\overline{L}'=P\dot{Q}-H'(Q,P)+\frac{dW}{dt}(q,Q)$という形になれば、最小作用の原理がそのまま成立するので同じ運動になります(同じ運動に対して作用積分が極小となる、ということです)。そのためには、

$$\overline{L}'=P\dot{Q}-H'(Q,P)+\frac{\partial W}{\partial q}\dot{q}+\frac{\partial W}{\partial Q}\dot{Q}$$

ですから、両辺の$\dot{q}$と$\dot{Q}$の係数を比較すると、

$P=-\frac{\partial W}{\partial Q}$、$p=\frac{\partial W}{\partial q}$、$H(q,p)=H'(Q,P)$ が必要な条件です。

この$W(q,Q)$を先に与えると、正準変換の形が決まってしまいます。ですから、Wを母関数と呼ぶわけです。

問題はこの次です。QではなくPを独立変数にしたい場合どうすれば良いでしょうか。ただ単に変数変換するだけであれば、Pは、

$$P=-\frac{\partial W}{\partial Q}(q,Q)$$

で与えられていますからこれをQについて解いてそのまま代入し、$W(q,Q(q,P))$とすればよいと思われるのですが、なぜ、そうしないのでしょうか。

実はもう一つ条件が付いていて、新しい関数$W'(q,P)$に対して、新変数で微分すると、対称的に旧変数になるようにしたいのです。つまり、

$\dfrac{\partial W'}{\partial P}=Q$ となるようにしたいというのです。この条件を付けると、新しい変数でも正準変換を母関数から求める式が「同じ格好」になってくれます(熱力学で云えば、$F(T,V)=U(S,V)-TS$ と変数変換するだけでなく、$\dfrac{\partial U}{\partial S}=T \Rightarrow \dfrac{\partial F}{\partial T}=-S$ となるようにしたかった、というわけです)。

二つ変数があるとわかりにくいので 1 変数で説明すると、

$f(x)$ と云う関数に対して、その微分 $y=\dfrac{df}{dx}$ 自身を変数にした関数 $g(y)$ を作りたい、というわけです。ただし、それだけなら、$y=\dfrac{df(x)}{dx}$ を逆に解いて、$x=x(y)$ にして、$f(x)$ に代入すれば、$f(x(y))$ となります。しかし、先ほど云ったように、もう一つ、$x=\dfrac{dg}{dy}(y)$ となるようにしたいと言うわけです。もちろん、$f(x(y))$ では、そうはなっていません。

どうでもいいことですが、$\dfrac{dg(y)}{dy}=\quad\dfrac{df(x(y))}{dy}=\dfrac{df}{dx}\dfrac{dx}{dy}=\dfrac{df}{dx}\left(\dfrac{d^2f}{dx^2}\right)^{-1}$ となってしまいます。

実は、条件を満たす方法うまい方法が、ルジャンドル変換でして、

$g(y)=xy-f(x)$ と置け、ということなのです。

ともかく、こう置くと、不思議と思えるほどうまい具合に

$$\frac{dg(y)}{dy}=\frac{d(xy)}{dy}-\frac{df}{dx}\frac{dx}{dy}=y\frac{dx}{dy}+x-y\frac{dx}{dy}=x$$

になります。ここで、変換式の符号は微分の符号で決まります。つまり、

$y=\pm\dfrac{df}{dx}(x)$の符号が、相対的な符号を$xy\mp f(x)$と決めます。

$x=\pm'\dfrac{dg}{dy}(y)$の符号が、全体の符号を$\pm'(xy\mp f(x))$と決めます。

これをハミルトニアンの導出に当てはめると、変数の変換としては$\dot{q}\to p$でし

たから、qはちょっと隠しておくと、$L=L(\dot{q})$に対して新しい変数

$p=\dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}}(\dot{q})$を独立変数にとって、

$\dot{q}=\dfrac{\partial H}{\partial p}(p)$となるようにしたい、ということになります。どちらも微分の符号は

正ですから、変換式は$H(p)=p\dot{q}-L(\dot{q})$となります。

母関数の変換ではどうでしょうか。最初の母関数は$W(q,Q)$で、変数の変換は、

$Q\to P$でした。元の微分の符号は

$P=-\dfrac{\partial W}{\partial Q}$とマイナスですから、新しい変数に対して、

$Q=\pm\dfrac{\partial W'}{\partial P}$のどちらを希望するかによって、

$W'(q,P)=\pm[PQ+W(q,Q)]$となります。前回の講義ではプラス$Q=\dfrac{\partial W'}{\partial P}$を取った

ため、$W'=PQ+W$でした。

もう一つの方の変数を$q\to p$と置きかえる場合は、元の微分が

$p=\dfrac{\partial W}{\partial q}$とプラスの符号ですから、新変数に対して、

$q=\pm\dfrac{\partial W''}{\partial p}$のどちらを希望するかによって、

$W''(p,Q)=\pm[pq-W(q,Q)]$となります。前回の講義では、マイナス$q=-\dfrac{\partial W''}{\partial p}$を取ったため、$W''=-pq+W$でした。

これら二つの変換$Q\to P$、$q\to p$を同時に行うには、当然のことですが、

$W'''(P,p)=-pq+PQ+W$とおけば良く、微分は$Q=\dfrac{\partial W'''}{\partial P}$と$q=-\dfrac{\partial W''}{\partial p}$です。

このように、相対符号は、元の母関数の微分の符号で決まります。これは偏微分して、打ち消し合うように選べば OK です。全体の符号は、新変数での微分の符号を決めますが、たとえこれを間違えても、それに対応した「別の」変換式が出てきますから最後までそれを使えば大丈夫です。

結局、最初の母関数$W(q,Q)$の微分をラグランジアンに代入して、正準変換を直接求める手順

$$\overline{L}=p\dot{q}-H(q,p)=P\dot{Q}-H'(Q,P)+\frac{dW}{dt}(q,Q)=P\dot{Q}-H'(Q,P)+\frac{\partial W}{\partial q}\dot{q}+\frac{\partial W}{\partial Q}\dot{Q}$$

だけ覚えておけばよいことになります。(どうして$W(q,Q)$が最初なのかというと、ハミルトニアンへのルジャンドル変換に$p\dot{q}$が入っているからです。さらにどうして、彼らが入っているかというと、$\dot{q}\to p$と変数変換するからです)。

なお、実際に母関数を与えて正準変換を作る場合、W',W'',W'''については、いちいちWに戻らなくとも、勝手に定義して大丈夫です。定義したW',W'',W'''に対して、$-pq$やPQを引けば逆に$W(q,Q)$に必ずなる、というわけです。

具体例 3

変換の方を先に挙げてみましょう。$\begin{cases} Q = \cos\theta q + \sin\theta p \\ P = -\sin\theta q + \cos\theta p \end{cases}$ というものです。θ は定数で、座標と運動量の入り混じった変数に変換します。$\theta = 0$ で恒等変換です。

この形の正準変換は、量子力学で超伝導現象の解明(BCS 理論)にも使われた有名なボゴリューボフ変換です。もちろん、その場合は q と p ではなく、生成消滅演算子間の変換ですが。

さて、この変換の母関数を考えてみましょう。そのままでは q と p が独立変数になっていますから、母関数は作れません。そこで、$\begin{cases} p = f(q,Q) \\ P = g(q,Q) \end{cases}$ という形に直してやります。上式はそのまま移項するだけでよく、下式は、その上式を代入して、$P = -\sin\theta q + \cos\theta\left(-\dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}q + \dfrac{Q}{\sin\theta}\right)$ ですから、

$$\begin{cases} p = -\dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}q + \dfrac{1}{\sin\theta}Q \\ P = -\dfrac{1}{\sin\theta}q + \dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}Q \end{cases}$$

が得られます。これと、$W = W(q,Q)$ の場合の変換式、

$$\begin{cases} p_i = \dfrac{\partial W}{\partial q_i} \\ P_i = -\dfrac{\partial W}{\partial Q_i} \end{cases}$$

を比較して積分すれば、

$$\begin{cases} W = -\dfrac{\cos\theta}{2\sin\theta}q^2 + \dfrac{1}{\sin\theta}Qq + f(Q) \\ W = \dfrac{1}{\sin\theta}qQ - \dfrac{\cos\theta}{2\sin\theta}Q^2 + g(q) \end{cases}$$

が得られますので、二つの式を比較して、

$$W(q,Q)=\frac{qQ}{\sin\theta}-\frac{\cos\theta}{2\sin\theta}\left(q^2+Q^2\right)$$

が得られます。微分すれば、

$$\begin{cases} p_i=\dfrac{\partial W}{\partial q_i}=\dfrac{Q}{\sin\theta}-\dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}q \\ P_i=-\dfrac{\partial W}{\partial Q_i}=-\dfrac{q}{\sin\theta}+\dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}Q \end{cases}$$

です。両辺に$\sin\theta$をかけて、

$$\therefore\begin{cases} \sin\theta p=Q-\cos\theta q \\ \sin\theta P=-q+\cos\theta Q \end{cases}$$

となり、上式はそのまま移項、下式は、$\cos\theta\times$上式を引いて、

$$\therefore\begin{cases} Q=\sin\theta p+\cos\theta q \\ -\cos\theta p+P=-\sin\theta q \end{cases}\quad\therefore\begin{cases} Q=\cos\theta q+\sin\theta p \\ P=-\sin\theta q+\cos\theta p \end{cases}$$

となります。

今日は正準変換の定義と母関数による変換式の導出を学びました。