§45 正準変換

点正準変換

ラグランジアンLとおなじように，ハミルトニアンHも，座標変換

$$(q_1, q_2, \cdots, q_N) \rightarrow Q_i = Q_i(q_1, \cdots, q_N) = Q_i(q)$$

にたいして不変である．

まず，一般化座標 p_i は，ラグランジアンを用いて

$$p_i = \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_i}$$

とかける．これより，

$$p_i = \frac{L(Q(q,t), \dot{Q}(q,\dot{q},t), t)}{\partial \dot{q}_i}$$

$$= \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_j} \frac{\partial \dot{Q}_j}{\partial \dot{q}_i} = \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_j} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}\left(\sum_k \frac{\partial Q_j}{\partial q_k} \dot{q}_k \right)$$

$$= \sum_j P_j \sum_k \frac{\partial Q_j}{\partial q_k} \delta_{ik} = \sum_j P_j \frac{\partial Q_j}{\partial q_i}$$

とかけるので，ハミルトニアンHは，

$$H = \sum_{i=1}^{N} p_i \dot{q}_i - L = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \dot{q}_i \frac{\partial Q_j}{\partial q_i} P_j - L$$

$$= \sum_{j=1}^{N} P_j \dot{Q}_j - L$$

となり，まったく同一の表現

$$H = \sum_{i=1}^{N} P_i \dot{Q}_i - L$$

を得る．これより，δP_i と δQ_i を変分をとることにより，正準方程式が同じようにみちびける．

$$\frac{\partial H}{\partial Q_i} = -\dot{P}_i, \quad \frac{\partial H}{\partial P_i} = \dot{Q}_i$$

正準変換

ハミルトン力学の長所は，（一般化）座標と（一般化）運動量についてもごちゃまぜにした，より一般的な変換を考えることができることである．

$$\{p, q, t\} \longrightarrow Q_i = Q_i(p, q, t), \quad P_i = P_i(p, q, t) \quad \cdots ①$$

もちろん，このような変換すべてが認められるわけではない．物理的に意味のある変換のみを許さなければならない．具体的には，変換後の Q_i, P_i が正準方程式

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H'}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial H'}{\partial Q_i} \qquad (H \to H') \quad \cdots ②$$

をみたさなくてはならない．そのために H' がみたすべき条件について考えなくてはならない．この条件については，最小作用の原理にもどるのがいちばんよい．それは，

$$\delta S = \delta \int_A^B \left(\sum_i p_i dq_i - H dt \right) = 0 \quad (\text{但し} A, B \text{で} p_i, q_i \text{は固定}) \quad \cdots ③$$

である．同じようにして，

$$\delta S = \delta \int_A^B \left(\sum_i P_i dQ_i - H dt \right) = 0 \quad (\text{但し} A, B \text{で} P_i, Q_i \text{は固定}) \quad \cdots ④$$

である．③，④が両立する条件は，

$$\sum_i p_i \dot{q}_i - H = \sum_i P_i \dot{Q}_i - H' + \frac{dF}{dt} \quad \cdots ⑤$$

である．ここで F を変換の母関数という．

F は一般に q, p, Q, P, t の関数である．つまり $F = F(q, p, Q, P, t)$ である．だが一方で，q, p, Q, P のうち独立な係数の組は2つだけであるから，F を2つの組に指定して，

$$F(q, Q) \quad \text{or} \quad F(q, P) \quad \text{or} \quad F(q, P) \quad \text{or} \quad F(Q, P)$$

の4つに切り分けることができる．

1. $F = W_1(q, Q, t)$ のとき

もっともすぐに考察できるのは，Fの引数が q, Q, t でだけなるときである．このときは，⑤より

$$\sum_i p_i dq_i - H dt = \sum_i P_i dQ_i - H' dt + dF$$

$$\therefore dW_1(q, Q, t) = \sum_i (p_i dq_i - P_i dQ_i) + (H' - H) dt \quad \cdots ⑥$$

となる．⑥より，

$$\frac{\partial W_1(q, Q, t)}{\partial q_i} = p_i, \quad \frac{\partial W_1(q, Q, t)}{\partial Q_i} = -P_i$$

$$H' = H + \frac{\partial W_1(q, Q, t)}{\partial t} \quad \cdots ⑦$$

を得る．

2. $F = -\sum P_i Q_i + W_2(q, P, t)$ のとき

つぎに，Fが q, P, t の関数を引数としてふくんでいるときを考えてみよう．ところが，このときは⑥がこのままでは q, P, t の全微分の形になっていない．よってこのままでは不適なので，ルジャンドル変換を適切にほどこしてあげなくてはならない．そこで，⑥を

$$d\Big(\underbrace{F + \sum_i P_i Q_i}_{= W_2(q, P, t) \text{ とおく}}\Big) = \sum_i (p_i dq_i + Q_i dP_i) + (H' - H) dt \quad \cdots ⑧$$

とおいて，上のように W_2 をおくと，これより

$$p_i = \frac{\partial W_2(q, P, t)}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial W_2(q, P, t)}{\partial P_i}$$

$$H' = H + \frac{\partial W(q, P, t)}{\partial t} \quad \cdots ⑨$$

とかける．

3. $F = \sum p_i q_i + W_3(p, Q, t)$ のとき

1, 2, と同じようにして，⑥を

$$d\Big(\underbrace{F - \sum_i p_i q_i}_{= W_3(p, Q, t)\text{ とおく}}\Big) = \sum_i (-q_i dp_i - P_i dQ_i) + (H' - H)dt \quad \cdots ⑩$$

とおけばよい．これより

$$q_i = -\frac{\partial W_3(p, Q, t)}{\partial p_i}, \quad P_i = \frac{\partial W_3(p, Q, t)}{\partial Q_i}$$

$$H' = H + \frac{\partial W_3(p, Q, t)}{\partial t} \quad \cdots ⑪$$

である．

4. $F = \sum (p_i q_i - P_i Q_i) + W_4(p, P, t)$

引数を座標2つから運動量2つにおきかえるので，ルジャンドル変換が2回必要なのは意外な結果ではない．⑥より

$$d\Big(\underbrace{F - \sum_i p_i q_i + \sum_i P_i Q_i}_{= W_4(p, P, t)\text{ とおく}}\Big) = \sum_i (-q_i dp_i + Q_i dP_i) + (H' - H)dt \quad \cdots ⑫$$

これより

$$q_i = -\frac{\partial W_4(p, P, t)}{\partial p_i}, \quad Q_i = \frac{\partial W_4(p, P, t)}{\partial P_i}$$

$$H' = H + \frac{\partial W_4(p, P, t)}{\partial t} \quad \cdots ⑬$$

である．

※ ⑦, ⑨, ⑪, ⑬ からわかるように，

$$H' = H + \frac{\partial W}{\partial t} \quad \cdots ⑭$$

については，どの形も同じである．とくに，W が t によらないとき，$H = H'$ となる．

正準変数とポアソン括弧

これまで、一般化座標 q_i と、それにともなう一般化運動量

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

を考えてきた。ところが、今まででよくわかったように、ハミルトン力学ではもはや p と q が本質的な違いをもはや数学的にもっていない。そこで、新たな正準変数の定義として、一般化座標 Q_i, P_i を

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H'}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial H'}{\partial Q_i} \quad \cdots (15)$$

をみたす変数の組として定義したほうが、より自然であろう。

命題1 f, g が正準変数 q, p の関数であるとする。このとき、新たな正準変数を $Q = Q(q, p, t)$, $P = P(q, p, t)$ によって定めるとき、以下が成り立つ。

$$\{f, g\}_{q,p} = \{f, g\}_{Q,P} \quad \cdots (16)$$

すなわち、ポアソン括弧は正準不変量である。

(証明) まず、

$$\begin{aligned}
\{f, g\} &= \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i} \right) \\
&= \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \sum_j \left(\frac{\partial g}{\partial Q_j}\frac{\partial Q_j}{\partial p_i} + \frac{\partial g}{\partial P_j}\frac{\partial P_j}{\partial p_i} \right) - \frac{\partial f}{\partial p_i} \sum_j \left(\frac{\partial g}{\partial Q_j}\frac{\partial Q_j}{\partial q_i} + \frac{\partial g}{\partial P_j}\frac{\partial P_j}{\partial q_i} \right) \right) \\
&= \sum_j \frac{\partial g}{\partial Q_j} \left(\sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial Q_j}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial Q_j}{\partial q_i} \right) \right) + \sum_j \frac{\partial g}{\partial P_j} \left(\sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial P_j}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial P_i}{\partial q_i} \right) \right) \\
&= \sum_j \frac{\partial g}{\partial Q_j}\{f, Q_j\}_{q,p} + \sum_j \frac{\partial g}{\partial P_j}\{f, P_j\}_{q,p} \quad \cdots (17)
\end{aligned}$$

となる。

ここで、

$$\{Q_i, Q_j\}_{q,p} = 0, \quad \{P_i, P_j\}_{q,p} = 0, \quad \{Q_i, P_j\}_{q,p} = \delta_{ij} \quad \cdots (18)$$

を仮定する(もちろんこれは実際に成り立つ)。

するとこのとき, ⑰式

$$\{f, g\}_{q,p} = \sum_j \frac{\partial g}{\partial Q_j}\{f, Q_j\}_{q,p} + \sum_j \frac{\partial g}{\partial P_j}\{f, P_j\}_{q,p} \quad \cdots ⑲$$

において $f = Q_k, P_k$ を代入してみると, ⑰式は

$$\{Q_k, g\}_{q,p} = 0 + \sum_j \frac{\partial g}{\partial P_j}\delta_{jk} = \frac{\partial g}{\partial P_k}$$

$$\{P_k, g\}_{q,p} = -\frac{\partial g}{\partial Q_k} + 0$$

となる. これより, $g = f$ といいかえて,

$$\{f, Q_k\}_{q,p} = -\frac{\partial f}{\partial P_k} \ , \quad \{f, P_k\}_{q,p} = \frac{\partial f}{\partial Q_k} \quad \cdots ⑳$$

となる. これより, ⑳式を⑲式に代入して,

$$\{f, g\}_{q,p} = \sum_j \left(\frac{\partial g}{\partial P_j}\frac{\partial f}{\partial Q_j} - \frac{\partial g}{\partial Q_j}\frac{\partial f}{\partial P_k} \right) = \{f, g\}_{Q,P}$$

となる. 以上より, 題意は示された. (証明終)

基本括弧式

前の証明では, 正準変数 Q_i, P_i が q, p のポアソン括弧で⑱式の交換関係をみたすことを仮定した. もちろん, これは一般に成り立つ事実である.

正準変数 q, p から, 新たな Q, P を $Q = (q, p, t)$, $P = P(q, p, t)$ として定めたとする. このとき, まず,

$$\{q_i, q_j\}_{q,p} = 0 \ , \quad \{p_i, p_j\}_{q,p} = 0$$

$$\cdots ㉑$$

$$\{q_i, p_j\}_{q,p} = \delta_{ij}$$

は自明である. ところが, これだけではなく, 一般に, Q, P が正準変数ならば,

$$\{Q_i, Q_j\}_{q,p} = 0 \ , \quad \{P_i, P_j\}_{q,p} = 0$$

$$\cdots ㉒$$

$$\{Q_i, P_j\}_{q,p} = \delta_{ij}$$

も成り立つ. これは⑱式の主張そのものである. ところが, これは逆も成り立つことが分かっている. つまり, ㉒式が成り立つとき, P, Q は正準変数である.

命題2 q_i, p_i を正準変数の組として，関数の組

$$Q_i = Q_i(q, p, t), \quad P_i = P_i(q, p, t)$$

が与えられているとする．このとき，以下の同値関係が成り立つ．

$$\left(\begin{array}{c} Q_i, P_i \text{ が正準変数の組} \\ \text{である} \end{array}\right) \iff \begin{cases} \{Q_i, Q_j\}_{q,p} = 0 \\ \{P_i, P_j\}_{q,p} = 0 \\ \{Q_i, P_j\}_{q,p} = \delta_{ij} \end{cases}$$

上の命題の証明は一般にめんどうなので，ここではやらない．一変数の組（$i=1$）だけならできないこともないが，一変数だけやるのも微妙なので，後回しにする．