

量子力学を学ぶための解析力学の基礎

— 変分原理、正準形式、Noether の定理 —

国広「量子力学」(東京図書：2018年9月)用補遺

1 はじめに

古典力学の正準形式 (Hamilton 形式) には次の利点がある：

1. 力学の形式的な構造に対する深い理解が得られる。
2. 一般化座標とともに一般化運動量 (正準運動量) を導入することにより、運動量と座標を対称的に取り扱うことができ、系を記述する独立変数のとり方に大幅な自由度が得られる。
3. 統計力学や量子力学の両方に対する出発点となる。特に、下の表のような量子力学との密接な形式的対応関係を持つ。また、Hamiltonian がある微小変換で不変のとき、その変換の生成子は保存量となる、ということは古典力学、量子力学共通に成立する。たとえば、座標回転の生成子は角運動量 $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ であり、Hamiltonian が回転不変ならば、 \mathbf{L} は保存される。

古典力学	量子力学
シンプレクティック多様体	Hilbert 空間
正準変換	ユニタリー変換
Poisson 括弧	交換子

2 Hamilton の正準方程式

2.1 Hamilton の原理

n 体系を考える。系の Lagrangian を $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ と書くと、Euler-Lagrange 方程式は

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (2.1)$$

作用 S を次のように定義する：

$$S(t_2, t_1; [\mathbf{q}]) = \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt. \quad (\mathbf{q} \equiv (q_1, q_2, \dots, q_n)) \quad (2.2)$$

これは、時間 t_1, t_2 の関数であり、軌道 $\mathbf{q}(t)$ の汎関数である。Euler-Lagrange 方程式は次の変分原理（Hamilton の原理）から得られる：

$$\delta S(t_2, t_1; [\mathbf{q}]) = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0. \quad \text{ただし、} \quad \delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0, \quad \forall i \quad (2.3)$$

実際、

$$\begin{aligned} \delta S(t_2, t_1; [\mathbf{q}]) &= \sum_i \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) dt, \\ &= \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \Big|_{t_1}^{t_2} + \sum_i \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i dt, \quad \forall \delta q_i. \end{aligned} \quad (2.4)$$

ところが、 $\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$ だから、(2.1) を得る。

一般化運動量を次式で定義する：

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}. \quad (2.5)$$

Hamiltonian は次式で定義される：

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - L. \quad (2.6)$$

Euler-Lagrange 方程式を用いて、次の Hamilton の正準運動方程式を得る：

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (2.7)$$

正準運動方程式 (2.7) は次の ‘Lagrangian’ に対する変分原理により得られる ($\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$)：

$$\bar{L}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t). \quad (2.8)$$

実際、このとき作用は

$$\begin{aligned} S &= \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt = \int_{t_1}^{t_2} \bar{L}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) dt, \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_i p_i \dot{q}_i - H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \right) dt, \end{aligned} \quad (2.9)$$

と書けるので、

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} \bar{L} dt = \sum_i \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i - \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i \right] dt = 0 \quad (2.10)$$

ところが、 δp_i と δq_i は任意なので、(2.7) を得る。

さて、(2.9) の最後の式を書き直すと、

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_i p_i dq_i - H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) dt \right], \quad (2.11)$$

となる。したがって、

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), \quad (2.12)$$

および、

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i, \quad (2.13)$$

を得る。これを (2.12) に代入すると、 $\frac{\partial S}{\partial t} = -H(\mathbf{q}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}}, t)$ 、すなわち、

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(\mathbf{q}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}}, t) = 0. \quad (2.14)$$

これを Hamilton-Jacobi の方程式という。

2.2 最小作用の原理

これは Maupertuis (モーペルテュイ) の原理とも呼ばれ、エネルギーが保存している場合の簡約化された変分原理である。すなわち、次の状況を考える：

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E = \text{一定}. \quad (2.15)$$

まず、(2.9) の最後の関係式より、

$$S(t, t_1) = \int_{t_1}^t \left(\sum_i p_i dq_i - H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) dt \right), \quad (2.16)$$

と書けることに注意する。したがって、 $H = E$ の時には、

$$S(t, t_1) = \int_{t_1}^t \sum_i p_i dq_i - E(t - t_1), \quad (2.17)$$

である。

さて、 $t = t_1$ での位置 $\mathbf{q}^{(1)}$ を固定し、ある定まった位置 $\mathbf{q}^{(2)}$ に到達する時刻 t を変化させてみる：このとき、

$$\delta S = -H\delta t = -E\delta t. \quad (2.18)$$

一方、(2.17) より、

$$\delta S = \delta W - E\delta t. \quad (2.19)$$

ただし、

$$W \equiv \int_{t_1}^t \sum p_i dq_i. \quad (2.20)$$

(2.18) と (2.19) より、

$$\delta W = \delta \int_{t_1}^t \sum p_i dq_i = 0. \quad (2.21)$$

これを、最小作用の原理あるいは Maupertuis の原理という¹。特に、1次元の場合は、

$$\delta \int_{t_1}^t p dq = 0. \quad (2.22)$$

例

$$L = \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{q}_i^2 - V(\mathbf{q}), \quad (2.23)$$

のとき、 $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i = m_i \dot{q}_i$ より、

$$E = \frac{1}{2} \sum_i m_i \left(\frac{dq_i}{dt} \right)^2 + V(\mathbf{q}) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{q}) \equiv T + V. \quad (2.24)$$

ただし、 $T \equiv \frac{1}{2} \sum_i m_i \left(\frac{dq_i}{dt} \right)^2 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i}$ は系の運動エネルギー。したがって、

$$dt = \sqrt{\frac{\sum_i m_i (dq_i)^2}{2(E - V)}} = \sqrt{\frac{\sum_i m_i (dq_i)^2}{2T}}, \quad (2.25)$$

だから、

$$\sum_i p_i dq_i = \sum_i m_i \dot{q}_i dq_i = \sum_i m_i (dq_i)^2 / dt = \sqrt{2T \sum_i m_i (dq_i)^2}. \quad (2.26)$$

よって、

$$W = \int_{\mathbf{q}^{(1)}}^{\mathbf{q}^{(2)}} \sqrt{2T \sum_i m_i (dq_i)^2}, \quad (2.27)$$

¹作用はこのとき必ずしも最小とは限らず最大になることもあるので、正確には「停留作用の原理」と呼ぶべきである。

となり、最小作用の原理は、

$$\delta \int_{\mathbf{q}^{(1)}}^{\mathbf{q}^{(2)}} \sqrt{2T \sum_i m_i (dq_i)^2} = 0, \quad (2.28)$$

となる。これより、エネルギー保存則が成り立つ場合の軌道が定まる。

3 Poisson 括弧

定義 : Poisson 括弧 $\{A, B\}$

$$\{A, B\}_{qp} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right). \quad (3.1)$$

以下では、誤解がない場合、下つき添え字 qp を省略する。

性質

1. 反対称性 $\{A, B\} = -\{B, A\}$.
2. 線形性 λ_1, λ_2 が正準変数を含まないとき、 $\{A, \lambda_1 B + \lambda_2 C\} = \lambda_1 \{A, B\} + \lambda_2 \{A, C\}$.
3. $\{AB, C\} = A\{B, C\} + \{A, C\}B$.
4. ヤコビの恒等式 $\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0$.

Poisson 括弧を用いた正準方程式の表現

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\}, \quad \dot{p}_i = \{p_i, H\}. \quad (3.2)$$

これより、 q, p, t の任意の関数 $F(q, p, t)$ の時間微分 (全微分) は、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F &= \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial F}{\partial t}, \\ &= \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

特に、 F が t を陽に含んでいない ($\partial F / \partial t = 0$) とき、

$$\frac{d}{dt} F = \{F, H\}. \quad (3.4)$$

したがって、

$$F \text{ が保存量} \Leftrightarrow \{F, H\} = 0. \quad (3.5)$$

基本 Poisson 括弧

$$\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}. \quad (3.6)$$

後に示すように、Poisson 括弧は正準変数の選び方に依らない。

角運動量

角運動量 $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. 成分で書くと、

$$L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k, \quad (i = 1, 2, 3). \quad (3.7)$$

ここに、 ϵ_{ijk} はレヴィ・チビタの完全反対称テンソル.

角運動量の Poisson 括弧:

$$\begin{aligned} \{L_i, L_j\} &= \{\epsilon_{ilk} x_l p_k, \epsilon_{jmn} x_m p_n\}, \\ &= \epsilon_{ilk} \epsilon_{jmn} \{x_l p_k, x_m p_n\}, \\ &= \epsilon_{ilk} \epsilon_{jmn} [x_l \{p_k, x_m p_n\} + \{x_l, x_m p_n\} p_k], \\ &= \epsilon_{ilk} \epsilon_{jmn} [x_l \{p_k, x_m\} p_n + x_m \{x_l, p_n\} p_k], \\ &= \epsilon_{ilk} \epsilon_{jmn} [-\delta_{km} x_l p_n + \delta_{ln} x_m p_k], \\ &= -\epsilon_{ilk} \epsilon_{jkn} x_l p_n + \epsilon_{ilk} \epsilon_{jml} x_m p_k, \\ &= -(-\delta_{ij} \delta_{ln} + \delta_{in} \delta_{lj}) x_l p_n + (-\delta_{ij} \delta_{km} - \delta_{im} \delta_{kj}) x_m p_k, \\ &= \delta_{ij} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - x_j p_i - \delta_{ij} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + x_i p_j, \\ &= x_i p_j - x_j p_i, \\ &= \epsilon_{ijk} L_k. \end{aligned} \quad (3.8)$$

ここで、

$$\epsilon_{ijk} L_k = \epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} = x_i p_j - x_j p_i, \quad (3.9)$$

となることを用いた。

[簡潔な表現]

$2n$ 次元のベクトルを次のように定義する :

$$\boldsymbol{\eta} \equiv {}^t (q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, p_2, \dots, p_n). \quad (3.10)$$

また、 $2n \times 2n$ 行列 \mathbf{J} を次のように定義する :

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

ここに、 $\mathbf{0}$ および $\mathbf{1}$ はそれぞれ $n \times n$ のゼロおよび単位行列である。

\mathbf{J} の性質

$$(1) \mathbf{J}^2 = -\mathbf{1}. \quad (2) {}^t\mathbf{J} = -\mathbf{J} = \mathbf{J}^{-1}. \quad (3) \det \mathbf{J} = 1.$$

任意の p, q, t の関数 u, v の Poisson 括弧は、

$$\{u, v\}_{pq} = {}^t \left(\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\eta}} \right) \mathbf{J} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\eta}}. \quad (3.12)$$

と書ける。

特に、基本 Poisson 括弧は、簡潔に

$$\{\eta_i, \eta_j\} = J_{ij}, \quad (3.13)$$

あるいは、

$$\{\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}\} = \mathbf{J}, \quad (3.14)$$

と書ける。

更に、Hamilton の運動方程式は

$$\dot{\eta}_i = \sum_j J_{ij} \frac{\partial H}{\partial \eta_j}, \quad (3.15)$$

あるいは、

$$\dot{\boldsymbol{\eta}} = \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}}, \quad (3.16)$$

と書ける。

4 Lagrangian の不変性と保存則

例として、系が時間に対して一様である場合を考える。それは Lagrangian $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$ が時間 t に陽に依存しないことを意味する：

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0. \quad (4.1)$$

したがって、このときの Lagrangian の全微分は Euler-Lagrange 方程式を用いると

$$\begin{aligned} \frac{dL}{dt} &= \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \ddot{\mathbf{q}} \\ &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right) \cdot \dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \ddot{\mathbf{q}} \\ &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \dot{\mathbf{q}} \right). \end{aligned} \quad (4.2)$$

すなわち、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \dot{\mathbf{q}} \right) = \frac{dL}{dt}. \quad (4.3)$$

よって、次の保存則を得る：

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \dot{\mathbf{q}} - L \right) = 0. \quad (4.4)$$

これはエネルギー保存則である。時間についての一様性はエネルギー保存則を導く。

次に空間一様な系においては（全）運動量が保存されることを確認しよう。例として次の Lagrangian で記述される 2 体系を考える：

$$L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dot{\mathbf{r}}_1, \dot{\mathbf{r}}_2) = \sum_{i=1,2} \frac{m_i}{2} \dot{\mathbf{r}}_i^2 - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (4.5)$$

ここで、相互作用ポテンシャルが相対座標 $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ のみに依存していることに注意する。このとき、Lagrangian(4.5) は次の任意の位置の無限小の平行移動 \mathbf{a} に対して不変である：

$$\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i + \mathbf{a}, \quad \delta \mathbf{r}_i \equiv \mathbf{r}'_i - \mathbf{r}_i = \mathbf{a} \quad (4.6)$$

$\delta \dot{\mathbf{r}}_i = 0$ であることに注意。このときの Lagrangian の変化 δL を具体的に計算すると、

$$0 = \delta L = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \delta \mathbf{r}_i = \mathbf{a} \cdot \sum_{i=1,2} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i} = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2) \quad (4.7)$$

ここに、 $\mathbf{p}_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}$ は粒子 i の運動量である。 \mathbf{a} は任意であるから、次の全運動量保存則を得る：

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \text{一定}. \quad (4.8)$$

[問] 空間の等方性による角運動量の保存則を確認せよ。[ヒント] 単位ベクトル \mathbf{n} 方向に角度 $\delta\varphi$ だけ回転させたとき、ベクトルとしての座標と速度の変化はそれぞれ以下のように与えられる： $\delta \mathbf{r}_i = \delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r}_i$, $\delta \dot{\mathbf{r}}_i = \delta\varphi \mathbf{n} \times \dot{\mathbf{r}}_i$.

一般の次のような無限小変換を考える：を考えよう²

$$\delta q_i = q'_i - q_i = F_i^a(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \epsilon_a, \quad \delta \dot{q}_i = \dot{q}'_i - \dot{q}_i = \frac{dF_i^a(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})}{dt} \epsilon_a. \quad (4.9)$$

²畑浩之著「解析力学」（基幹講座 物理学：東京図書 2014）第3章参照。

ここで、 a は 1 から d までの値を取るものとする。この変換のもとで Lagrangian が次のようにある関数 Y^a の全微分を除いて不変であるとしよう。すなわち、

$$\delta L \equiv L(\mathbf{q}', \dot{\mathbf{q}}'; t) - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}; t) = \epsilon_a \frac{dY^a(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}; t)}{dt}. \quad (4.10)$$

一方、左辺を Euler-Lagrange 方程式を用いて具体的に計算すると、

$$\delta L = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \delta \mathbf{q} \right) = \epsilon_a \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \mathbf{F}^a \right). \quad (4.11)$$

両式を等値して、

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \mathbf{F}^a - Y^a \right] = 0, \quad (a = 1, 2, \dots, d). \quad (4.12)$$

すなわち、次の定理が得られた：無限小変換 (4.9) のもとで Lagrangian が (4.10) のように変化するとき、

$$G^a(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \mathbf{F}^a - Y^a, \quad (a = 1, 2, \dots, d) \quad (4.13)$$

は保存量である。これを Noether の定理という。

5 正準変換

次に正準変数 (q, p) から (Q, P) への変数変換を考える：

$$Q_i = Q_i(q, p, t), \quad P_i = P_i(q, p, t). \quad (5.1)$$

(Q, P) についての基本 Poisson 括弧式が (q, p) と同じであるとき、すなわち、

$$\{Q_i, P_j\}_{qp} = \delta_{ij}, \quad \{Q_i, Q_j\}_{qp} = \{P_i, P_j\}_{qp} = 0. \quad (5.2)$$

が満たされるとき、変換 (5.1) を正準変換という。

$2n$ 次元のベクトルを次のように定義する：

$$\zeta \equiv {}^t (Q_1, Q_2, \dots, Q_n, P_1, P_2, \dots, P_n), \quad (5.3)$$

更に、 $2n \times 2n$ 行列 M を次のように定義する：

$$(M)_{ij} = \frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_j}. \quad (5.4)$$

5.1 正準変換の必要十分条件

このとき、正準変換の条件 (5.2) は、

$$\mathbf{M}\mathbf{J}^t\mathbf{M} = \mathbf{J}, \quad (5.5)$$

と等価であることが分かる。

実際、

$$\begin{aligned} \{\zeta_i, \zeta_j\}_\eta &= \frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_k} J_{kl} \frac{\partial \zeta_j}{\partial \eta_l}, \\ &= (\mathbf{M})_{ik} J_{kl} ({}^t\mathbf{M})_{lj}, \\ &= J_{ij}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

これまで、独立変数を元の正準変数 η に取ってきた。独立変数を ζ に取っても、Poisson 括弧 $\{u, v\}$ の値は変わらない: 実際、

$${}^t(\partial u / \partial \eta) = {}^t(\partial u / \partial \zeta)\mathbf{M}, \quad (\partial v / \partial \eta) = {}^t\mathbf{M}(\partial v / \partial \zeta), \quad (5.7)$$

に注意すると、

$$\begin{aligned} \{u, v\}_\eta &= {}^t(\partial u / \partial \zeta)\mathbf{M}\mathbf{J}^t\mathbf{M}(\partial v / \partial \zeta), \\ &= {}^t(\partial u / \partial \zeta)\mathbf{J}(\partial v / \partial \zeta), \\ &= \{u, v\}_\zeta. \end{aligned} \quad (5.8)$$

正準変換 (5.1) が時間に依存しないとき、

$$H(p, q) = H(p(Q, P), p(Q, P)) \equiv K(Q, P), \quad (5.9)$$

だから、Poisson 括弧の正準変換不変性より、

$$\frac{dQ_i}{dt} = \{Q_i, H\}_{qp} = \{Q_i, K\}_{QP} = \frac{\partial K}{\partial P_i}, \quad (5.10)$$

$$\frac{dP_i}{dt} = \{P_i, H\}_{qp} = \{P_i, K\}_{QP} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}. \quad (5.11)$$

すなわち、

$$\frac{dQ_i}{dt} = \frac{\partial K}{\partial P_i}, \quad \frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}. \quad (5.12)$$

(Q, P) は Hamilton の正準方程式を満たす。

5.2 母関数による表現

正準変換の必要十分条件は

$$\sum_i p_i dq_i - \sum_i P_i dQ_i = dF(q, p, t), \quad (5.13)$$

と書ける。ただし、 $dt = 0$ 。

F を変換の母関数、あるいは生成子 (generator) という。

例 1 $F = F_1(q, Q, t)$ のとき。

$$p_i = \partial F_1 / \partial q_i, \quad P_i = -\partial F_1 / \partial Q_i, \quad (5.14)$$

となる。特に、 $F_1 = \sum_i q_i Q_i$ の場合、 $p_i = Q_i$ 、 $P_i = -q_i$ 、すなわち、

$$Q_i = p_i, \quad P_i = -q_i, \quad (5.15)$$

となり、符号を別にして一般化座標と運動量を入れ替えたものがそれぞれ一般化運動量と一般化座標となっている。

例 2. $F = F_2(q, P) - \sum_i Q_i P_i$ のとき。

$$p_i = \partial F_2 / \partial q_i, \quad Q_i = \partial F_2 / \partial P_i, \quad (5.16)$$

となる。特に、 $F_2 = \sum_i q_i P_i$ のとき、 $p_i = P_i$ 、 $Q_i = q_i$ となり、恒等変換となる。

5.3 無限小変換

次の無限小正準変換を考える：

$$\zeta = \eta + \delta\eta. \quad (5.17)$$

ここで、 $\delta\eta$ は無限小の量である。

この変換を与える母関数は $F = F_2(q, P, t) - \sum_i Q_i P_i$ において

$$F_2(q, P) = \sum_i q_i P_i + \epsilon G(q, P, t) \simeq \sum_i q_i P_i + \epsilon G(q, p, t), \quad (5.18)$$

と与えられる。 $(|\epsilon| \ll 1)$ 無限小変換なので、右辺の P を p で近似した。このとき、

$$p_i = P_i + \epsilon \partial G / \partial q_i, \quad Q_i = q_i + \epsilon \partial G / \partial p_i. \quad (5.19)$$

すなわち、

$$\delta q_i \equiv Q_i - q_i = \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}, \quad \delta p_i \equiv P_i - p_i = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}. \quad (5.20)$$

まとめて、

$$\delta \boldsymbol{\eta} = \epsilon \boldsymbol{J} \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\eta}}. \quad (5.21)$$

成分で書くと、

$$\delta_i = \epsilon J_{ij} \frac{\partial G}{\partial \eta_j}. \quad (5.22)$$

ところが、任意の u に対して $\{\boldsymbol{\eta}, u\} = \boldsymbol{J} \partial u / \partial \boldsymbol{\eta}$ だから、

$$\delta \boldsymbol{\eta} = \epsilon \{\boldsymbol{\eta}, G\}, \quad (5.23)$$

となる。

例 時間推進の母関数としての Hamiltonian
 $\epsilon = dt, G = H$ とすると、

$$\delta \boldsymbol{\eta} = dt \{\boldsymbol{\eta}, H\} = dt \dot{\boldsymbol{\eta}} = d\boldsymbol{\eta}. \quad (5.24)$$

これは、時間推進 $t \rightarrow t + dt$ による系の変化が Hamiltonian で生成されることを示している。

6 保存量

任意の力学量 u の無限小正準変換のもとでの変化を考える。

$$\begin{aligned} \delta u &= u(\boldsymbol{\eta} + \delta \boldsymbol{\eta}) - u(\boldsymbol{\eta}), \\ &= \frac{\partial u}{\partial \eta_i} \delta \eta_i, \\ &= \frac{\partial u}{\partial \eta_i} \epsilon J_{ij} \frac{\partial G}{\partial \eta_j}, \\ &= \epsilon \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\eta}} \boldsymbol{J} \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\eta}}, \\ &= \epsilon \{u, G\}. \end{aligned} \quad (6.1)$$

特に、 $u = H$ のとき、

$$\delta H = \epsilon \{H, G\} = -\epsilon \frac{dG}{dt}. \quad (6.2)$$

これは、次の重要な事実を表現している。まず、 $dG/dt = 0$ は G が保存量であることを意味する。このとき、 $\delta H = \epsilon \{H, G\} = 0$ であるから、 G によって生成される変換に対して Hamiltonian は不変である。よって、「保存量は Hamiltonian を不変にするような無限小正準変換の母関数 (生成子) である。」

7 無限小正準変換と Poisson 括弧

次の正準変換を考える：

$$(q, p) \rightarrow (Q, P). \quad (7.1)$$

対応する無限小変換は、

$$Q_i = q_i + \delta q_i, \quad P_i = p_i + \delta p_i, \quad (7.2)$$

$$\delta q_i = \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}, \quad \delta p_i = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}. \quad (7.3)$$

このとき、任意の物理量 $F(q, p)$ は次のように変換される：

$$\begin{aligned} \delta F &\equiv F(Q, P) - F(q, p) = F(q + \delta q, p + \delta p) - F(q, p), \\ &\simeq \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \delta p_i \right), \\ &= \epsilon \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right), \\ &= \epsilon [F, G]. \end{aligned} \quad (7.4)$$

x 方向の並進移動 $\mathbf{r} = (x, y, z) \rightarrow \mathbf{r}' = (x + \epsilon a, y, z)$ に対しては、 $G = \epsilon p_x$ なので、

$$F(\mathbf{r}', \mathbf{p}) = F(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \epsilon a [F, p_x], \quad (7.5)$$

となる。これを繰り返すと、有限の並進 $\mathbf{r} = (x, y, z) \rightarrow \mathbf{r}' = (x + a, y, z)$ に対しては、

$$F(\mathbf{r} + \mathbf{a}, \mathbf{p}) = F(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + a [F, p_x] + \frac{a^2}{2} [[F, p_x], p_x] + \cdots = e^{\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}} F(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (7.6)$$

同様に、 \mathbf{n} 方向の角度 θ の有限回転は

$$F(\mathbf{r}', \mathbf{p}') = e^{\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}} F(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (7.7)$$

となる。

次に、 N 体系の速度 \mathbf{V} による Galilei 変換を考えよう。

$$\mathbf{r}_a \rightarrow \mathbf{r}'_a = \mathbf{r}_a + \mathbf{V}t, \quad \mathbf{p}_a \rightarrow \mathbf{p}'_a = \mathbf{p}_a + m_a \mathbf{V}. \quad (a = 1, 2, \dots, N) \quad (7.8)$$

\mathbf{V} が小さいとして無限小変換を考え、その生成子を $B = \mathbf{G} \cdot \mathbf{V}$ と書くと、

$$\delta \mathbf{r}_a \{ \mathbf{r}_a, B \} = \mathbf{V}t, \quad \delta \mathbf{p}_a \{ \mathbf{p}_a, B \} = m_a \mathbf{V}. \quad (7.9)$$

これより、

$$B = \sum_a \mathbf{p}_a \cdot \mathbf{V}t - \sum_a m_a \mathbf{r}_a \cdot \mathbf{V} \quad (7.10)$$

と取ればよいことが分かる。すなわち、

$$\mathbf{G} = \sum_a \mathbf{p}_a t - \sum_a m_a \mathbf{r}_a = \sum_a \mathbf{p}_a t - M \mathbf{R}. \quad (7.11)$$

ただし、 $M = \sum_a m_a$ は全質量、 $\mathbf{R} = \sum_a m_a \mathbf{r}_a / M$ は重心（質量中心）である。

8 Lagrangian 形式での Noether の定理の与える保存量が生成子になっていること

Noether の定理の与える無限小変換 $\delta q_i = F_i^a(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})\epsilon_a$ に対する保存量 G^a を正準座標で表すと、

$$G^a(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{p})) = p_i F_i^a(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{p})) - Y^a(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{p})).$$

以下で、

$$\{q_1, \epsilon_a G^a\} = \delta q_i = \epsilon_a F_i^a(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{p})), \quad (8.1)$$

を示す³。

まず、次の等式に注意する：

$$\frac{\partial F_j^a}{\partial p_i} = \frac{\partial F_j^a}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \frac{\partial \dot{\mathbf{q}}}{\partial p_i}.$$

$\partial Y^a / \partial p_i$ についても同様の式が成り立つ。すると、右辺の Poisson 括弧は、

$$\{q_1, \epsilon_a G^a\} = \epsilon_a \left[F_i^a + \left(\mathbf{p} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}^a}{\partial \dot{\mathbf{q}}} - \frac{\partial Y^a}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right) \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial p_i} \right]. \quad (8.2)$$

ところが、この第2項はゼロであることを示すことができる。実際、もとの Lagrangian 形式にもとって、 $\delta q_i = \epsilon_a F_i^a$ に対する Lagrangian の変化を計算すると、

$$\begin{aligned} \delta L &= \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \cdot \delta \mathbf{q} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \delta \dot{\mathbf{q}} \\ &= \epsilon_a \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \cdot \mathbf{F}^a + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \frac{d\mathbf{F}^a}{dt} \right) \\ &= \epsilon_a \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \cdot \mathbf{F}^a + \mathbf{p} \cdot \frac{d\mathbf{F}^a}{dt} \right) \\ &= \epsilon_a \frac{d}{dt} Y^a. \end{aligned} \quad (8.3)$$

³畑 §7.9.4. 参照。

ところが、

$$\frac{d}{dt}Y^a(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \frac{\partial Y^a}{\partial \mathbf{q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial Y^a}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \ddot{\mathbf{q}}$$

$F_{ia}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$ についても同様の式が成り立つ。したがって、(8.3) 両辺の \ddot{q}_k の係数を等値することにより、

$$\mathbf{p} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}^a}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial Y^a}{\partial \dot{q}_k}. \quad (8.4)$$

よって、(8.2) の第2項が消える。よって、

$$\{q_1, \epsilon_a G^a\} = \epsilon_a F_i^a = \delta q_i. \quad (8.5)$$

これは所望の等式である。