

## 正準変換覚え書き — 単純な場合ほど面食らう？

正準変数の一部だけ，例えば「運動量だけ変換する」という場合がある。電磁気学のゲージ変換がその例である。すべての変数が変わらない「恒等変換」や「 $p, q$  入れ替え」など，自明な場合の母関数はよく実例に挙げられているが，このような中途半端な場合は，すっきりとした説明が見あたらない。学生さんから質問を受けてその場ですぐには答えられず，あらためて復習してみた例の一つである。以下では簡単のため 1 自由度の場合で説明するが，多自由度への拡張は自明であろう。

ハミルトンの原理 ハミルトン方程式は，以下の作用積分を最小にする条件から導かれる：

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} [ p\dot{q} - H(p, q, t) ] dt = \int_{t_1}^{t_2} [ p\delta\dot{q} + \dot{q}\delta p - \frac{\partial H}{\partial q}\delta q - \frac{\partial H}{\partial p}\delta p ] dt = 0 \quad (1)$$

部分積分により得られる等式

$$\int_{t_1}^{t_2} p\delta\dot{q} dt = - \int_{t_1}^{t_2} \dot{p}\delta q dt \quad (2)$$

を使えば

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[ - \left( \dot{p} + \frac{\partial H}{\partial q} \right) \delta q + \left( \dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p} \right) \delta p \right] dt = 0 \quad (3)$$

となる。ハミルトン形式では  $p, q$  を独立とみなすから，以下のハミルトン方程式が得られる：

$$\dot{p} = - \frac{\partial H}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (4)$$

正準変換  $(p, q, t)$  の関数として与えられる新しい変数  $(p', q')$  が，新たにハミルトニアン  $H'(p', q', t)$  を構成してハミルトン方程式を満たすようにすることができるなら，その変数変換は正準変換と呼ばれる。もし，変換後の変数  $(p', q')$  とハミルトニアン  $H'$  が

$$[ p\dot{q} - H(p, q, t) ] - [ p'\dot{q}' - H'(p', q', t) ] = \frac{dW}{dt} \quad (\text{全微分}) \quad (5)$$

を満たすなら，(1) より

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} [ p'\dot{q}' - H'(p', q', t) ] dt = 0 \quad (6)$$

となり，新たなハミルトン方程式が導かれるから，(5) が正準変換の条件になる。

母関数 この関数  $W$  は  $(p, q, p', q', t)$  の任意の関数でよいのであるが，このままでは何の役にも立たない。時間  $t$  以外で自由度（独立変数の数）は 2 ( $p', q'$  は  $p, q, t$  の関数で表される) であるから，2 つの独立変数を 新旧にまたがって 1 つずつ 選べば，新しい正準変数  $(p', q')$  とハミルトニアン  $H'(p', q', t)$  をセットで決める手段を与えるものとなり，正準変換の母関数と呼ばれる。

独立変数の選び方には，ちょうど熱力学関数の  $U(S, V)$ ,  $H(S, P)$ ,  $F(T, V)$ ,  $G(T, P)$  のように，以下の 4 通りのケースがある。もちろん，多変数の場合はこれらの混合型も可能である。

(ケース 1)  $q, q'$  を独立変数に選び， $W = W_1(q, q', t)$  とする場合：

まず，(5) の両辺に  $dt$  をかけて微分形で書く：

$$p dq - p' dq' + (H' - H) dt = \frac{\partial W_1}{\partial q} dq + \frac{\partial W_1}{\partial q'} dq' + \frac{\partial W_1}{\partial t} dt \quad (7)$$

$q, q', t$  を独立とみなして，両辺の  $dq, dq', dt$  の係数を比較すれば

$$p = \frac{\partial W_1}{\partial q}, \quad p' = - \frac{\partial W_1}{\partial q'} \quad (8)$$

$$H' = H + \frac{\partial W_1}{\partial t} \quad (9)$$

が得られる。要するに、関数  $W_1(q, q', t)$  を 適当に見つくるって、連立方程式 (8) を解いて  $p', q'$  を  $(p, q, t)$  の関数として決めてやれば、(9) の  $H'$  を用いた新しいハミルトン方程式が得られる。

なお、 $W_1$  が時間を含んでいない場合はエネルギー保存則が成り立っており、(9) は単に

$$H'(p', q') = H(p(p', q'), q(p', q')) \quad (10)$$

とすればよいだけである。

(ケース2)  $q, p'$  を独立変数とする場合：

熱力学でおなじみのルジャンドル変換、 $W_2(p', q, t) = W_1 + p'q'$  により、

$$dW_1 = dW_2 - p'dq' - q'dp' \quad (11)$$

を用いて (7) を変形すれば、

$$pdq + q'dp' + (H' - H)dt = \frac{\partial W_2}{\partial q}dq + \frac{\partial W_2}{\partial p'}dp' + \frac{\partial W_2}{\partial t}dt \quad (12)$$

$$p = \frac{\partial W_2}{\partial q}, \quad q' = \frac{\partial W_2}{\partial p'}, \quad H' = H + \frac{\partial W_2}{\partial t} \quad (13)$$

が得られる。

注 . この場合、微分形の左辺を比べれば分かるように、元の (5) の右辺の  $W$  は  $W_2$  ではなく、 $W = W_2 - p'q'$  である。(以下でも同様)「この関数  $W$  は  $(p, q, p', q', t)$  の任意の関数でよい……」以下の文脈では、このことが明確に書かれていないことがあって、Wiki などを見て調べた熱心な学生さんが自分でフォローしてみて戸惑うようだ。

(ケース3)  $q', p$  を独立変数とする場合：

$W_3(p, q', t) = W_1 - pq$  により、同様にして

$$q = -\frac{\partial W_3}{\partial p}, \quad p' = -\frac{\partial W_3}{\partial q'}, \quad H' = H + \frac{\partial W_3}{\partial t} \quad (14)$$

(ケース4)  $p, p'$  を独立変数とする場合：

$W_4(p, p', t) = W_1 - pq + p'q'$  により

$$q = -\frac{\partial W_4}{\partial p}, \quad q' = \frac{\partial W_4}{\partial p'}, \quad H' = H + \frac{\partial W_4}{\partial t} \quad (15)$$

(特例ケース) 前書きで述べた、変数の片方、たとえば運動量だけ変換する場合を考えてみよう。ケース1の  $W_1(q, q', t)$  では、 $q' = q$  のため母関数の変数が新旧にまたがらないので、新旧の正準変数の間の関係を与える母関数の資格があるのかどうか気になる所だが、ともかく  $t$  とあわせて2変数の関数  $W_1(q, t)$  であると見なして、(7) を

$$(p - p')dq + (H' - H)dt = \frac{\partial W_1}{\partial q}dq + \frac{\partial W_1}{\partial t}dt \quad (16)$$

と書いてみよう。この場合でも、ちゃんと  $p'$  と  $H'$  を与える式

$$p - p' = \frac{\partial W_1}{\partial q}, \quad H' - H = \frac{\partial W_1}{\partial t} \quad (17)$$

が得られるのである。しかしながら、この形ですべての可能性を尽くしているかどうかは自明ではない。どうしても心許ないなら、ケース2の  $W_2(p', q, t)$  を用いればよい。今の場合  $p'$  の相方(あいかた)も  $q$  であり、 $\partial W_2 / \partial p' = q$  でなければならぬから、母関数は  $p'$  について一次式

$$W_2(p', q, t) = qp' + F(q, t), \quad \text{したがって} \quad p = p' + \frac{\partial F}{\partial q} \quad (18)$$

の形に制限され、結果的にはケース1で母関数を  $W_1(q, t)$  としてよかったことになる。  $F = W_1$  と置けば、この式を今の場合のルジャンドル変換とみなすことができる。 ケース1～4と教科書的に箇条書きされると、その類型から少し外れていることが気になるかもしれないが、各ケースで示された母関数の機能に照らして考えてみれば、今の場合は上の設定で十分なのである。

(例) 電磁場中の荷電粒子の運動

任意のスカラー関数 (ゲージ関数)  $\chi(\mathbf{r}, t)$  を用いて電磁ポテンシャルを

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla\chi(\mathbf{r}, t), \quad \phi'(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{r}, t) \quad (19)$$

と変換する (ゲージ変換)。このとき、電磁場

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (20)$$

は  $\phi'$ ,  $\mathbf{A}'$  で定義しても同じで変更されず、その結果、荷電粒子の運動方程式

$$m\ddot{\mathbf{r}} = q [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] \quad (21)$$

は不変である (ゲージ不変性)。これは、電磁場のゲージ変換が荷電粒子の運動に関しては、以下のように正準変換になっているからに外ならない。

正準座標変数  $q$  は電荷  $q$  と同じで紛らわしいので、ここでは通常の  $r$  のままで書くことにする。元の正準運動量とハミルトニアンは、ラグランジアンを

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 - q[\phi(\mathbf{r}, t) - \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)] \quad (22)$$

とすることにより、

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (23)$$

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - L = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 + q\phi(\mathbf{r}, t) \quad (24)$$

で与えられているとする。これが電磁ポテンシャル ( $\phi, \mathbf{A}$ ) のもとでの荷電粒子の運動を表現するのであれば、新たな ( $\phi', \mathbf{A}'$ ) のもとでの運動は、単に ( $\phi, \mathbf{A}$ ) を ( $\phi', \mathbf{A}'$ ) に変えるだけで、

$$\mathbf{p}' = m\dot{\mathbf{r}} + q\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t), \quad H'(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} [\mathbf{p}' - q\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t)]^2 + q\phi'(\mathbf{r}, t) \quad (25)$$

によって表現されるはずである。そこで、座標  $r$  は不変であるから先ほどの特例ケースと考えると、ものの試しに母関数を

$$W_1(\mathbf{r}, t) = -q\chi(\mathbf{r}, t) \quad (W_2(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t) = \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}' - q\chi(\mathbf{r}, t) \text{ でも結論は同じ}) \quad (26)$$

としてみよう。そうすれば、(25) の  $\mathbf{p}'$ ,  $H'$  はうまくことに正準変換

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} - \frac{\partial W_1}{\partial \mathbf{r}}, \quad H' = H + \frac{\partial W_1}{\partial t} \quad (27)$$

で与えられることが分かる。つまり、電磁ポテンシャル ( $\phi, \mathbf{A}$ ) と ( $\phi', \mathbf{A}'$ ) のもとでの荷電粒子の運動は、ゲージ関数  $q\chi(\mathbf{r}, t)$  を母関数とする正準変換で結ばれているのである。正準変換というのは、同じ運動の見方、表し方を変えるだけ のことであるから、座標変数  $r$  が不変である以上、 $r$  で書かれた荷電粒子の運動方程式 (21) が (正準変換であることが示された) ゲージ変換で変わらないのは当然と言える。

ラグランジアンは、逆をたどって  $L' = \mathbf{p}' \cdot \dot{\mathbf{r}} - H'$  を  $r$  と  $\dot{\mathbf{r}}$  で表せば、やはり

$$L'(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 - q[\phi'(\mathbf{r}, t) - \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t)] = L + q \left( \frac{\partial \chi}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla \chi \right) \quad (28)$$

の形となる。  $L = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - H$  であるから、当然のことながら作用積分不変の条件 (5)

$$L' - L = \frac{d}{dt} q\chi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{全微分}) \quad (29)$$

を満たしていることがわかる。