§8　正準変数としてのエネルギーと時間

Lagrange の未定乗数法の応用例も兼ねて，エネルギーと時間が正準共役変数であることを考える．そして，この関係は，古典論から量子論での波動方程式（Schrödinger 方程式）を求める手続き（正準量子化の手続き）に関連していることを述べる．

1）変分法の復習

一般化座標 q_i と一般化運動量 p_i は，それぞれ，$q_i(t)$，$p_i(t)$ のように時間の関数として，既に，Hamiltonian に変分原理を直接適用することで，Hamilton の正準方程式を直接導いた．再度復習すると，変分原理での作用積分は Lagrangian が用いられているから，Hamiltonian を用いて Lagrangian を表現して，

$$L=\sum_{i=1}^{f}p_i\dot{q}_i-H(q_1,q_2,\cdots,q_f;p_1,p_2,\cdots,p_f) \tag{1}$$

である．変分原理から，

$$\delta I=\int_{t_1}^{t_2}\{\sum_{i=1}^{f}(p_i\delta\dot{q}_i+\dot{q}_i\delta p_i-\frac{\partial H}{\partial q_i}\delta q_i-\frac{\partial H}{\partial p_i}\delta p_i)\}dt=0 \tag{2}$$

第一項に**時間微分**があるので，この項だけ部分積分を行った結果は，

$$\int_{t_1}^{t_2}(\sum_{i=1}^{f}p_i\delta\dot{q}_i)dt=\sum_{i=}^{f}\int_{t_1}^{t_2}\{p_i\frac{d}{dt}(\delta q_i)\}dt=\sum_{i=1}^{f}[p_i\delta q_i]_{t_1}^{t_2}-\sum_{i=1}^{f}\int_{t_1}^{t_2}(\dot{p}_i\delta q_i)dt$$

で，変分の定義から $\delta q_i(t_1)=\delta q_2(t_2)=0$ であり，第一項は０となる．結果として，

$$\delta I=\int_{t_1}^{t_2}\sum_{i=1}^{f}\{(\dot{q}_i-\frac{\partial H}{\partial p_i})\delta p_i-(\dot{p}_i+\frac{\partial H}{\partial q_i}\delta q_i)\}dt=0 \tag{3}$$

となる．$\delta q_i(\mathrm{t}_1)=0,\ \delta q_i(t_2)=0;\quad \delta p_i(\mathrm{t}_2)=0,\ \delta p_i(t_2)=0$ を前提として，いかなる δq_i，δp_i に対しても(3)が恒等的に０である為には，

$$\dot{q}_i-\frac{\partial H}{\partial p_i}=0,\qquad \dot{p}_i+\frac{\partial H}{\partial q_i}=0\quad(i=1,2,......,f) \tag{4}$$

で，これは Hamilton の正準方程式である． (4)に現れる Hamiltonian は (1) から，

$$H(q_1, q_2, \cdots, q_f; p_1, p_2, \cdots, p_f) = \sum_{i=1}^{f} p_i \dot{q}_i - L \tag{5}$$

$$\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1,2,......,f) \tag{6}$$

(6)は(4)を書き直しただけである． q_i，p_iは一般化座標とこれに対応する一般化運動量であり，正準変数と呼ばれることを述べた．

２） 時間 t も正準変数と見なす場合：t を陽に含む H

時間 t は，これまで，一般化座標や運動量とは別の変数として扱ってきた．しかし，ここでは，時間 t も正準変数と見なすと，これに正準共役変数が(-E)となることを述べる．この議論のために，(1), (5)の Hamiltonian に時間 t が，陽に含まれるとして議論する．故に，次の様に，H の変数として t を加え，H を全エネルギ−E と記す．

$$L = \sum_{i=1}^{f} p_i \dot{q}_i - H(q_1, q_2, \cdots, q_f; p_1, p_2, \cdots, p_f; t) \tag{7}$$

$$E = H(q_1, q_2, \cdots, q_f; p_1, p_2, \cdots, p_f; t) \tag{8}$$

変分原理により，

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} \{ \sum_{i=1}^{f} (p_i \dot{q}_i - E) \} dt = 0 \tag{9}$$

である．しかし，変分の定義に時間変数 t がある． t も正準変数q_i，p_iと同じように考えるために，t もq_i，p_iも別のパラメーター τ の関数であると考える．そして，(9)の時間 t による定積分を τ による定積分に変える． $t = t_1$の時$\tau = \tau_1$ ， $t = t_2$の時$\tau = \tau_2$であること，また，$dt = \frac{dt}{d\tau} d\tau$，$\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt} = \frac{dq_i}{d\tau}\frac{d\tau}{dt}$であるから，これらを(9)に代入すると，

$$\delta I = \delta\int_{\tau_1}^{\tau_2}\{\sum_{i=1}^{f} p_i \frac{dq_i}{d\tau} - E\frac{dt}{d\tau}\}d\tau = 0 \tag{10}$$

となる．この括弧内の２項を比べると，$(p_i \frac{dq_i}{d\tau}) \leftrightarrow (-E\frac{dt}{d\tau})$ の対応関係があることが判る．$p_i \leftrightarrow (-E)$　 $q_i \leftrightarrow t$　が対応している．そこで，$(-E\frac{dt}{d\tau})$を$(p_{f+1}\frac{dq_{f+1}}{d\tau})$として他の$(p_i\frac{dq_i}{d\tau}) = (p_i\dot{q}_i)$に含めることにする． (10)は，f→(f+1)となり，

$$\delta I = \delta\int_{\tau_1}^{\tau_2}\{\sum_{i=1}^{f+1} p_i\dot{q}_i\}d\tau = 0 \tag{11}$$

$$g(q_1,....,q_f,q_{f+1};p_1,...,p_f,p_{f+1}) = H(q_1,....,q_f,q_{f+1};p_1,...,p_f) + p_{f+1} = 0 \tag{12}$$

となる．付帯条件の(12)は　$p_{f+1} = -E = -H$　としたことに対応する． (11)が極値を取ることに対する拘束条件である．g はq_i, p_i　$(i = 1, 2, ..., f, f+1)$の関数である．しかし， H は初めに t を陽に含むとしただけであるから，q_i $(i = 1, 2, ..., f, f+1)$は（f＋１）個の変数だが， p_i $(i = 1, 2, ..., f)$は f 個で， p_{f+1} は H の外にあることに注意． (12)のような条件を持つ極値問題には，さきほどの Lagrange の未定乗数法を使う．

(12)の拘束条件の関数 g に，未定乗数λを掛けて元々の関数に加え，この変分が０とすれば良い．

$$\delta I = \delta\int_{\tau_1}^{\tau_2}\{\sum_{i=1}^{f+1} p_i\dot{q}_i + \lambda\cdot g\}d\tau = 0 \tag{13}$$

(13)の右辺を具体的に書けば,

$$\int_{\tau_1}^{\tau_2}\delta\{\sum_{i=1}^{f+1} p_i\dot{q}_i + \lambda\cdot g\}d\tau = \int_{\tau_1}^{\tau_2}\sum_{i=1}^{f+1}\delta\{p_i\dot{q}_i + \lambda\cdot g(q_i,p_i)\}d\tau$$

$$= \int_{\tau_1}^{\tau_2}\sum_{i=1}^{f+1}\{p_i\delta\dot{q}_i + \dot{q}_i\delta p_i + \lambda\frac{\partial g}{\partial q_i}\delta q_i + \lambda\frac{\partial g}{\partial p}\delta p_i\}d\tau$$

変分では，いつもの様に，第一項に**時間微分**があるので，この項だけ部分積分を

行った結果は,

$$\int_{t_1}^{t_2}(\sum_{i=1}^{f+1} p_i\delta\dot{q}_i)dt = \sum_{i=}^{f+1}\int_{\tau_1}^{\tau_2}\{p_i \frac{d}{d\tau}(\delta q_i)\}d\tau = \sum_{i=1}^{f+1}[p_i\delta q_i]_{\tau_1}^{\tau_2} - \sum_{i=1}^{f+1}\int_{\tau_1}^{\tau_2}(\dot{p}_i\delta q_i)d\tau$$

で，変分の定義から $\delta q_i(\tau_1) = \delta q_2(\tau_2) = 0$ であり，第一項は 0 となる． (13)に戻すと

$$\delta I = \int_{\tau_1}^{\tau_2}\sum_{i=1}^{f+1}\{-\dot{p}_i\delta q_i + \dot{q}_i\delta p_i + \lambda\frac{\partial g}{\partial q_i}\delta q_i + \lambda\frac{\partial g}{\partial p_i}\delta p_i\}d\tau = 0$$

となり，結果として， $p_i\delta\dot{q}_i \to -\dot{p}_i\delta q_i$ となるので,

$$\delta I = \int_{\tau_1}^{\tau_2}\sum_{i=1}^{f+1}\{(-\dot{p}_i + \lambda\frac{\partial g}{\partial q_i})\delta q_i + (\dot{q}_i + \lambda\frac{\partial g}{\partial p_i})\delta p_i\}d\tau = 0 \tag{14}$$

これが， $\delta q_i(\tau_1) = \delta q_2(\tau_2) = 0$， $\delta p_i(\tau_1) = \delta p_2(\tau_2) = 0$ を前提として，いかなる $\delta q_i, \delta p_i \quad (i = 1, 2, ..., f, f+1)$ に対しても成立するためには,

$$(-\dot{p}_i + \lambda\frac{\partial g}{\partial q_i}) = 0, \quad (\dot{q}_i + \lambda\frac{\partial g}{\partial p_i}) = 0 \quad (i = 1, 2, ..., f, f+1) \tag{15}$$

である．また，この逆も成立する． q_i, p_i の微分が τ による微分であることを明示するには，(15)は,

$$(-\frac{dp_i}{d\tau} + \lambda\frac{\partial g}{\partial q_i}) = 0, \quad (\frac{dq_i}{d\tau} + \lambda\frac{\partial g}{\partial p_i}) = 0 \quad (i = 1, 2, ..., f, f+1) \tag{16}$$

と書いた方が良い．

$p_{f+1} = (-E)$， $q_{f+1} = t$ 　であり，また，(12)は,

$$g(q_1,....,q_f,q_{f+1};p_1,...,p_f,p_{f+1}) = H(q_1,....,q_f,q_{f+1};p_1,...,p_f) + p_{f+1} = 0$$

であるから,

$$\frac{\partial g}{\partial q_{f+1}} = \frac{\partial}{\partial q_{f+1}}(H + p_{f+1}) = \frac{\partial H}{\partial q_{f+1}} = \frac{\partial H}{\partial t} \tag{17-1}$$

$$\frac{\partial g}{\partial p_{f+1}} = \frac{\partial}{\partial p_{f+1}}(H + p_{f+1}) = \frac{\partial p_{f+1}}{\partial p_{f+1}} = 1 \tag{17-2}$$

である． (16)の第二式で $p_{f+1} = (-E)$， $q_{f+1} = t$ 　を考え， (17-2)を使えば,

$$\lambda = -\frac{dq_{f+1}}{d\tau} = -\frac{dt}{d\tau} \tag{18}$$

であることがわかる．未定乗数が決まる． (16)の第一式で $p_{f+1} = (-E)$，$q_{f+1} = t$ を考え，(17-1)と(18)を使うと， $\frac{dp_{f+1}}{d\tau} = \lambda \frac{\partial g}{\partial q_{f+1}}$は， $\frac{d(-E)}{d\tau} = (-\frac{dt}{d\tau}) \cdot \frac{\partial H}{\partial t}$ であり，

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} \tag{19}$$

となる．これは初めに H が t を陽に含むと考えた結果に対応している．もし，H が t を陽に含まなければ，当然， $\frac{dE}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = 0$ であり，これまでやって来たように，エネルギ−は保存される．

一方， $q_i, p_i \ (i = 1,2,.....,f)$ についての(16)の第一，第二式は，

$$\frac{dp_i}{d\tau} = \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i} = (-\frac{dt}{d\tau})\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad \frac{dq_i}{d\tau} = -(-\frac{dt}{d\tau})\frac{\partial H}{\partial p_i}$$

これらは，既に何回も述べた正準方程式である．

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad (i = 1,2,.....,f) \tag{20}$$

正準方程式は H が t を陽に含んでも，含まなくても成立することが判る．

３）正準量子化手続きとの関連

$p_{f+1} = (-E)$，$q_{f+1} = t$が正準共役である関係は，古典論でのエネルギ−と運動量の直交座標成分を次のような**線形微分演算子に置き換えて**，量子論での波動方程式（Schrödinger 方程式）を導く際に重要である．

$$-E \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}, \quad p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \tag{21}$$

この置き換え操作は**正準量子化の手続き**と呼ばれる．最初の置き換え式は，右側の分子分母に i を掛ければ， $E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ となるので，この式だけ $E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ と書かれる場合がある．しかし，(21)では，$(-E, \mathrm{t}), (p_x, x), (p_y, y), (p_z, z)$ の場合で全て同じ

関係になっており，より統一的な記述と言える．正準量子化は，量子力学が古典力学を特殊例として内包することを保証するものであり，非常に重要である．

量子力学におけるポアソン括弧を，任意の演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ に対して，

$$[\hat{A},\hat{B}] = \frac{i}{\hbar}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \qquad (22)*$$

と定義すると，以下の演算子のポアソン括弧は，

$$[\hat{p}_x,\hat{x}] = \frac{i}{\hbar}(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\,\hat{p}_x)$$
$$[\hat{p}_y,\hat{x}] = \frac{i}{\hbar}(\hat{p}_y\hat{x} - \hat{x}\,\hat{p}_y) \qquad (23)*$$
$$[\hat{p}_x,\hat{p}_y] = \frac{i}{\hbar}(\hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\,\hat{p}_x)$$

となる．[＊　*量子力学における普通の定義は，* $[\hat{A},\hat{B}] = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$　*で．係数* $(i/\hbar)$ *は無い．この有無の意味については次節４）で議論する*]

量子力学では，**直交座標系位置座標成分も線形演算子** $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$**にな**る．

$$x \to \hat{x},\ \ y \to \hat{y},\ \ z \to \hat{z} \qquad (24)$$

この演算子の右側に来るものに，それぞれ，x, y, z を掛ける演算を意味する．ポアソン括弧も演算子で，微分記号のように，この右側に来るものに作用する．

(21)と(24)の**古典力学の量子力学への読み替え規則**を (23)に代入してみよう． $\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x$ は演算子であるから，この演算子が任意の関数 f に作用するとして，その結果を計算してみると，

$$(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x)f = \frac{\hbar}{i}\{(\frac{\partial}{\partial x}\hat{x} - \hat{x}\frac{\partial}{\partial x})\}f = \frac{\hbar}{i}\{\frac{\partial}{\partial x}(\hat{x}f) - \hat{x}(\frac{\partial f}{\partial x})\} = \frac{\hbar}{i}\{f + \hat{x}(\frac{\partial f}{\partial x}) - \hat{x}(\frac{\partial f}{\partial x})\} = \frac{\hbar}{i}f$$

故に，演算子としての $\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x$ は，

$$(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x) = \frac{\hbar}{i} \qquad (25)$$

である．　(25)を(22)の第一式右辺に代入すると，演算子の関係であるから，右側に任意の関数 f があるとして，

$$[\hat{p}_x,\hat{x}]f = \frac{i}{\hbar}(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x)\mathrm{f} = (\frac{i}{\hbar})(\frac{\hbar}{i})f = f$$

正準共役な演算子対のポアソン括弧（演算子）は，１を掛けるだけの演算子$\hat{1}$（何もしない演算子）となることが判る．一方，正準共役ではない運動量成分と位置成分の演算子対，正準共役ではない運動量成分同士の演算子対，は０となる．

$$[\hat{p}_x,\hat{x}] = \hat{1}$$
$$[\hat{p}_y,\hat{x}] = 0 \tag{26}$$
$$[\hat{p}_x,\hat{p}_y] = 0$$

後の２例も始めの場合と同様にやってみると０となることが判る．

$$[\hat{p}_y,\hat{x}]f = \frac{i}{\hbar}\{\frac{\partial}{\partial y}(xf) - x\frac{\partial f}{\partial y}\} = \frac{i}{\hbar}\{x\frac{\partial f}{\partial y} - x\frac{\partial f}{\partial y}\} = 0$$

$$[\hat{p}_x,\hat{p}_y]f = \frac{i}{\hbar}\{\frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial f}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial y}(\frac{\partial f}{\partial x})\} = 0$$

このような関係は，以下の注意でも述べるように，古典力学の正準共役変数の定義に対応している．

４） 量子力学のポアソン括弧式と正準共役の定義について

古典力学の正準共役変数の定義を我々は， $[p_i,q_i]_C = 1$ と書いた．一般には， $[p_i,q_j]_C = \delta_{ij}$ である．だから， $[\hat{p}_x,\hat{x}] = \hat{1}$がこれに対応する．

しかし，元々の古典力学のポアソン括弧式の定義を，A に対する q の偏微分を先に持ってくる形で

$$[A,H]_C{}^* \equiv \sum_i(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}) \tag{c-1}$$

とすると， $[p_i,q_j]_C{}^* = -\delta_{ij}$となり，負符号が付く．これを避けるために，正準共役の関係を, p と q を入れ替えて書けば，負符号は付かない．

$$[q_i,p_j]_C{}^* = \delta_{ij} \tag{c-2}$$

(c-1)と(c-2)がセットで使われる．（上付きの＊は，ポアソン括弧式の定義が我々の

定義と異なるために付けてある.）

一方，我々がここで定義して使って来た古典力学のポアソン括弧式は，

$$[H,A]_C \equiv \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial A}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial p_i}\right) = [A,H]_C\,^* \tag{c-3}$$

である．表記は見かけ上で違うが，中身は(c-1)の定義と同じものである．しかし，我々のポアソン括弧式による正準共役変数の関係は，p を先に書いておけば負符号が出てこない.

$$[p_i,q_j]_C = \delta_{ij} \tag{c-4}$$

である．従って，(c-3)と(c-4)がセットとなる.

古典力学の結果を量子力学に拡張する場合，Dirac 以来の定義では，ポアソン括弧式を古典力学の(c-1)と同じ形式で，

$$[A,H]^* \equiv \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)$$

で考え，**量子力学のポアソン括弧式**を，

$$[\hat{A},\hat{B}]^* = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \tag{c-5}$$

と定義する.

[我々の定義(22)は，$[\hat{A},\hat{B}] = \frac{i}{\hbar}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ であったから，$(i/\hbar)$ だけ異なっていることに注意. この定義(22)を使う教科書は実は少数派で，Dirac 流が多数派である．私は少数派が好きなのである．少数派に身を置く方が全体が良く判るとの思いは私の経験的信念]

従って，(c-2) の正準共役関係 $[q_i,p_j]_C{}^* = \delta_{ij}$ は，演算子の関係として，

$$[\hat{q}_i,\hat{p}_j]^* = i\hbar\delta_{ij} \tag{c-6}$$

のように拡張される．ここで $(i\hbar)$ が現れる．しかし，確かに，

$$[\hat{x},\hat{p}_x]^* f = \frac{\hbar}{i}\{x\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(xf)\} = \frac{\hbar}{i}\{x\frac{\partial f}{\partial x} - f - x\frac{\partial f}{\partial x}\} = -\frac{\hbar}{i}f = -\frac{\hbar}{i}\frac{i}{i}f = i\hbar f$$

であるので　(c-6)は，

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

と同じことである．

しかしながら，(c-6)のように定義すると，

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j]^* = i\hbar\delta_{ij} \qquad \text{あるいは} \qquad [\hat{x}, \hat{p}_x]^* = i\hbar$$

であり，古典論の $[q_i, p_j]_C{}^* = \delta_{ij}$ との形式的対応が良くない．

これに対し，われわれが，(22)で採用したように，**量子力学におけるポアソン括弧**を，任意の演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ に対して，

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \frac{i}{\hbar}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$$

として定義しておくと，$\hat{p}_k = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial q_k}$ や　$\hat{p}_x = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}$　であるから，

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{i}{\hbar}(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\,\hat{p}_x), \qquad (\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x) = \frac{\hbar}{i}$$

となり，既に述べたように，(c-4)の古典論的正準共役変数の関係 $[p_i, q_j]_C = \delta_{ij}$ に，

$$[\hat{p}_i, \hat{q}_j] = \delta_{ij}\hat{1} \qquad \text{あるいは} \qquad [\hat{p}_x, \hat{x}] = \hat{1}$$

が対応する，形式的対応はこちらの方が良い．ただし，$[\hat{A}, \hat{B}] = (i/\hbar)(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ と**量子力学におけるポアソン括弧式**を定義しているので，古典力学のポアソン括弧式との対応では，$(i/\hbar)$ が現れて両者の対応は良くない．古典論の正準共役変数の定義を量子論の正準共役演算子の定義にそのまま対応させれば，古典論のポアソン括弧と量子論のポアソン括弧の定義の関係に $(i/\hbar)$ 現れる．

Dirac 以来の定義では，古典論のポアソン括弧と量子論のポアソン括弧はそのまま対応させるので，古典論の正準共役変数の定義と量子論の正準共役演算子の定義との関係に $(i\hbar)$ が現れる．殆どの教科書がこれに従う．　古典力学と量子力学の間で，正準共役の定義の形式的対応を優先して考えるか，それとも　ポアソン括弧式の形式的対応を優先して考えるかの違いであり，結果が異なる訳ではない．