泊松括号

除哈密顿方程以外，哈密顿力学还可以用泊松括号来描述；不仅如此，泊松括号还能为我们提供一些处理经典力学问题的特定方法。

狄拉克与泊松括号：狄拉克（Paul Adrie Maurice Dirac, 1902~1984），英国理论物理学家，量子力学的创始人之一。他在研究量子力学时，$[\hat{A},\hat{B}]$不等于0，不遵守交换律。狄拉克的脑海里闪过一个名词，他以前在上某门动力学课程的时候，似乎听说过一直运算，同样不符合乘法交换律。但他还不是十分确定，他甚至连那种运算的定义都给忘了。那天是星期天，所有的图书馆都关门了，这让狄拉克很着急。第二天一早，图书馆刚刚开门，他就冲了进去，果然，那正是他所需要的东西：他的名字叫做**“泊松括号”**。

泊松：法国数学家，1781年-4月25日。最初奉父命学医，但他对医学并无兴趣，不久便转向数学。于1798年进入巴黎综合工科学校，**成为拉格朗日、拉普拉斯的得意门生**。在毕业时由于其学业优异，又得到拉普拉斯的大力推荐，故1806年留校任辅导教师，1802年任巴黎理学院力学教授。1812年当选为巴黎科学院院士。1816年应聘为索邦大学教授。1826年被选为彼得堡科学院名誉院士。1837年被封为**男爵**。**著名数学家阿贝尔说：“泊松知道怎样做到举止非常高贵。”**泊松的科学生涯开始于研究微分方程及其在摆的运动和声学理论中的应用。他的工作的特色是应用数学方法研究各类物理问题，并由此得到数学上的发现。

- 泊松 (Poisson, 1781-1840, FR)
  - 泊松括号

    For $u=u(q_j, p_j, t)$, $v=v(q_j, p_j, t)$

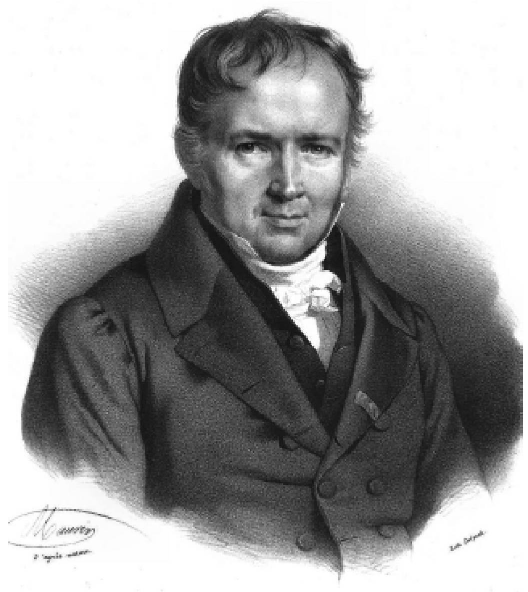
    定义： $[u,v]=\sum_j \left(\frac{\partial u}{\partial q_j}\frac{\partial v}{\partial p_j}-\frac{\partial v}{\partial q_j}\frac{\partial u}{\partial p_j}\right)$

  - 对易关系

    $[q_j, q_k]=0,\ [p_j, p_k]=0,\ [q_j, p_k]=\delta_{jk}$

  - 力学量的运动方程

    For $f=f(q_j, p_j, t)$: $\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+[f, H]$



很容易向量子力学过渡

专著《力学教程》

注：他还是伟大的数学家

泊松括号的引入

设$f(q,p,t)$是保守完整系统力学状态的某一函数，它对时间的全微商

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial f}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha+\frac{\partial f}{\partial p_\alpha}\dot{p}_\alpha\right)$$

利用哈密顿正则方程，上式改写为

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial f}{\partial q_\alpha}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial f}{\partial p_\alpha}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right)$$

定义泊松括号为

$$[f,H]\triangleq\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial f}{\partial q_\alpha}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial f}{\partial p_\alpha}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right)$$

则

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+[f,H]$$

泊松括号是一种求导的方式，或者说是偏导数的一个特定组合，这个特定组合是满足正则方程的，所以是「物理的」，即不会因为一些保持正则方程的非物理变换（如坐标变换）而改变的求导方式。

更一般的泊松括号定义为

$$[u,v] \triangleq \sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial u}{\partial q_\alpha}\frac{\partial v}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial u}{\partial p_\alpha}\frac{\partial v}{\partial q_\alpha}\right)$$

其中u和v可以是以广义坐标、广义动量和时间为自变量的任意力学量。

泊松括号的基本性质（七大特性）

（1）反对称性，即两个变量交换顺序后泊松括号变号

$$[u,v]=-[v,u]$$

（2）偏导性质

$$\frac{\partial}{\partial x}[u,v]=\left[\frac{\partial u}{\partial x},v\right]+\left[u,\frac{\partial v}{\partial x}\right]$$

（3）分配律

$$[u,v+w]=[u,v]+[u,w]$$

（4）结合律

$$[u, vw] = [u, v]w + v[u, w]$$

（5）涉及广义坐标和广义动量的泊松括号

$$[q_\alpha, q_\beta] = 0, \qquad [p_\alpha, p_\beta] = 0, \qquad [q_\alpha, p_\beta] = \delta_{\alpha\beta}$$

$$[q_\alpha, f] = \frac{\partial f}{\partial p_\alpha}, \qquad [p_\alpha, f] = -\frac{\partial f}{\partial q_\alpha}$$

上述5个性质的证明比较直接，作为课后习题。

量子力学中的基本对易子

$$[q_\alpha, q_\beta]_{qu} = 0, \qquad [p_\alpha, p_\beta]_{qu} = 0, \qquad [q_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$$

与这里的基本泊松括号式仅仅差了一个比例因子。对易子是泊松括号在量子力学中的扩展，在量子力学中是非常重要的基本运算。

（6）泊松恒等式，或称雅可比恒等式

$$[u, [v, w]] + [v, [w, u]] + [w, [u, v]] = 0$$

（7）泊松括号相对于正则变换的不变性：当广义动量和广义坐标由p_α和q_α换成另外一组正则变量P_β和Q_β时，泊松括号的值不变，即

$$[u,v]_{p,q}=[u,v]_{P,Q}$$

泊松括号的应用

1. 以泊松括号表示的运动方程

【定义】力学量：广义坐标、广义动量以及时间的函数

当采用泊松括号后，力学量$f(q,p,t)$随时间变化的动力学规律可表述为

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+[f,H]$$

特别是，如果力学量只与广义坐标和广义动量有关，而不显含时间，则该式简化为

$$\dot{f}=[f,H]$$

一个有意思的特例是，当$f=q_\alpha$或者$f=p_\alpha$时，上式分别变为

$$\dot{q}_\alpha=[q_\alpha,H],\quad \dot{p}_\alpha=[p_\alpha,H],\quad \alpha=1,2\cdots,s$$

它们正是哈密顿正则方程！值得一提的是，在以泊松括号的形式表述的运动方程中，广义动量和广义坐标完全对称。

运动积分与泊松括号（力学量守恒的充要条件）

根据$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+[f,H]$，力学量$f(q,p,t)$是系统运动积分的充要条件是

$$\frac{\partial f}{\partial t}+[f,H]=0$$

如果f不显含时间，则此条件简化为

$$[f,H]=0$$

这就是说，不显含时间的力学量成为运动积分的充要条件是它与系统哈密顿量的泊松括号为零。

作为一个特例，当系统的哈密顿量不显含时间时，显然有

$$\dot{H}=[H,H]=0$$

所以此时系统的哈密顿量一定守恒。

又如，如果哈密顿函数不显含某广义坐标q_α，则

$$[p_\alpha,H]=\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial p_\alpha}{\partial q_\beta}\frac{\partial H}{\partial p_\beta}-\frac{\partial p_\alpha}{\partial p_\beta}\frac{\partial H}{\partial q_\beta}\right)$$

$$=\sum_{\beta=1}^{s}\left(0-\delta_{\alpha\beta}\frac{\partial H}{\partial q_\beta}\right)=-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}=0$$

可见与循环坐标q_α共轭的广义动量p_α是运动积分。

- 力学量守恒的充要条件

【定理】力学量 $f=f(q_\alpha,p_\alpha,t)$ 是守恒量的充要条件为：

$$\frac{\partial f}{\partial t}+[f,H]=0$$

证明：充分性． $\frac{\partial f}{\partial t}+[f,H]=0\Rightarrow\frac{df}{dt}=0=>f=const.$ 故 f 为守恒量．

必要性． f 为守恒量 $=>\frac{df}{dt}=0\Rightarrow\frac{\partial f}{\partial t}+[f,H]=0$ （证毕）

【推论】力学量 $f=f(q_\alpha,p_\alpha)$ 是守恒量的充要条件为： $[f,H]=0$

证明：注意到 f 不显含时间．（证毕）

【推论】广义动量 p_β 为守恒量的充要条件为： $\frac{\partial H}{\partial q_\beta}=0.$

证明： $\frac{\partial p_\beta}{\partial q_\alpha}=0,\ \frac{\partial p_\beta}{\partial p_\alpha}=\delta_{\beta\alpha}\Rightarrow\cdots\Rightarrow[p_\beta,H]=\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}.$ （证毕）

【推论】广义能量 H 为守恒量的充要条件为： $\frac{\partial H}{\partial t}=0.$

泊松定理

泊松括号理论不只是再现哈密顿正则方法已经得到的规律，由它还可以发现新的规律。泊松定理指出，如果$u(q,p,t)$和$v(q,p,t)$是某系统的两个运动积分，则由它们组成的泊松括号也是运动积分，即$[u,v]=const.$

证明: $$\frac{d}{dt}[u,v]=\frac{\partial}{\partial t}[u,v]+[[u,v],H]=\left[\frac{\partial u}{\partial t},v\right]+\left[u,\frac{\partial v}{\partial t}\right]+[[u,v],H]$$

由于u,v是运动积分，所以

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial u}{\partial t}+[u,H]=0,\qquad \frac{\partial v}{\partial t}=\frac{\partial v}{\partial t}+[v,H]=0$$

即

$$\frac{\partial u}{\partial t}=[H,u],\qquad \frac{\partial v}{\partial t}=[H,v]$$

将此式代入第一式中，则

$$\frac{d}{dt}[u,v]=[[H,u],v]+[u,[H,v]]+[[u,v],H]$$
$$=-[v,[H,u]]-[u,[v,H]]-[H,[u,v]]$$

根据泊松恒等式，上式为零，所以泊松定理成立。

利用泊松定理，可以从两个已知的运动积分推出新的运动积分，如果新的运动积分独立于其他运动积分，则这种构造方法很有意义。不过，不可能指望两个运动积分的泊松括号总是独立的运动积分，否则将存在无穷多的运动积分，这与系统最多只能有2s个独立的运动积分矛盾！实际上，按照泊松定理的规则所生成的新泊松括号往往是普通常数，或者是原来运动积分的组合。

- 泊松定理

【泊松定理】如果 f 和 g 是力学系统的守恒量，则 $[f,g]$ 也是该系统的守恒量.

证明:

$$\left.\begin{aligned}&\frac{d[f,g]}{dt}=\frac{\partial[f,g]}{\partial t}+[[f,g],H]=[\frac{\partial f}{\partial t},g]+[f,\frac{\partial g}{\partial t}]+[[f,g],H]\\&f=const.\Rightarrow\frac{\partial f}{\partial t}+[f,H]=0,\qquad g=const.\Rightarrow\frac{\partial g}{\partial t}+[g,H]=0\end{aligned}\right\}$$

$$\Rightarrow\frac{d[f,g]}{dt}=[-[f,H],g]+[f,-[g,H]]+[[f,g],H]$$

$$=[g,[f,H]]+[f,[H,g]]+[H,[g,f]]=0$$ **（证毕）**

注：泊松定理告诉我们可以从已知的守恒量构造其它守恒量.

但是有时并不得到有意义的结果，如利用泊松括号给出常数，或者构造出来的新守恒量是已有守恒量的函数.

泊松括号的意义

- 为哈密顿力学提供了有别于正则方程的另一种描述；在以泊松括号的形式表述的运动方程中，广义动量和广义坐标完全对称。
- 用于寻找运动积分（力学守恒量）
- 力学规律的泊松括号形式，揭示了经典力学与量子力学的对应关系。从经典力学到量子力学，可以通过正则量子化来完成（即经典泊松括号变到量子泊松括号。在量子力学中，正则坐标与正则动量都变成了算符，而泊松括号变成了对易子或反对易子）。
- 哈密顿方程通过泊松括号，建立起哈密顿力学与辛几何之间的关系。

雅可比力学（哈密顿力学的发展）

- 雅可比 (Jacobi, 1804-1851, DE)
  - 正则变换（变换后正则方程形式不变）

$$\left.\begin{array}{c}(q_j, p_j)\to(\bar{q}_j, \bar{p}_j)\\ H\to\bar{H}\end{array}\right\}\Rightarrow \dot{\bar{q}}_j=\frac{\partial\bar{H}}{\partial\bar{p}_j}, \quad \dot{\bar{p}}_j=-\frac{\partial\bar{H}}{\partial\bar{q}_j}$$

  - 雅可比原理

$$\delta\int_{\tau_1}^{\tau_2}\sqrt{E-V(\boldsymbol{r}(\tau))}\,ds(\tau)=0$$

（类似于光学中的费马原理）

  - 哈密顿 - 雅可比方程

$$\frac{\partial S}{\partial t}+H\left(q_j, \frac{\partial S}{\partial q_j}, t\right)=0 \quad \left\{\begin{array}{l}\text{光学类比：}\ S\ \text{可看成惠更斯的波前曲面函数}\\ \text{有利于求解正则方程（哈密顿 - 雅可比定理）}\end{array}\right.$$

力学著作《动力学讲义》

卡尔·雅可比（Carl Gustav Jacob Jacobi，1804~1851），德国数学家。1804年12月10日生于普鲁士的波茨坦；1851年2月18日卒于柏林。雅可比是数学史上最勤奋的学者之一，与欧拉一样也是一位在数学上多产的数学家，是被广泛承认的历史上最伟大的数学家之一。雅可比善于处理各种繁复的代数问题，在纯粹数学和应用数学上都有非凡的贡献，他所理解的数学有一种强烈的柏拉图式的格调，其数学成就对后人影响颇为深远。在他逝世后，狄利克雷称他为拉格朗日以来德国科学院成员中最卓越的数学家。

正则变换

我们已经知道在给定位形 $\{q_\alpha(t_1)\}$ 和 $\{q_\alpha(t_2)\}$ 之间的可能运动中真实运动轨迹使得作用量 $S=\int_{t_1}^{t_2} L\,dt$ 极小．由此可以得到

【相空间中的哈密顿原理】 在给定相点 $\{q_\alpha(t_1),p_\alpha(t_1)\}$ 和 $\{q_\alpha(t_2),p_\alpha(t_2)\}$ 之间的可能相轨迹中真实运动的相轨迹使得作用量 $S=\int_{t_1}^{t_2}(\sum_\alpha p_\alpha\dot{q}_\alpha-H)\,dt$ 极小．

"证明"：从 $H=\sum_\alpha p_\alpha\dot{q}_\alpha-L$ 得到 $L=\sum_\alpha p_\alpha\dot{q}_\alpha-H$ 并代入原始的哈密顿原理即可．（证毕）．

【推论】由相空间的哈密顿原理可得到正则方程．

证明：
$$S=\int_{t_1}^{t_2}(\sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - H)dt$$

在相空间中，广义坐标和广义动量视为独立变量．对于任意给定时刻把它们的无限小改变分别记为 δq_α 和 δp_α．

$$S'=\int_{t_1}^{t_2}[\sum_\alpha (p_\alpha+\delta p_\alpha)\frac{d}{dt}(q_\alpha+\delta q_\alpha)-H(p_\alpha+\delta p_\alpha, q_\alpha+\delta q_\alpha, t)]dt$$

保留到一阶项，有

$$\delta S=S'-S=\int_{t_1}^{t_2}[\sum_\alpha(\delta p_\alpha \dot{q}_\alpha+p_\alpha\frac{d\delta q_\alpha}{dt})-\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\delta p_\alpha-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha]dt$$
$$=\int_{t_1}^{t_2}[\sum_\alpha(\dot{q}_\alpha-\frac{\partial H}{\partial p_\alpha})\delta p_\alpha-(\dot{p}_\alpha+\frac{\partial H}{\partial q_\alpha})\delta q_\alpha]dt+p_\alpha\delta q_\alpha\Big|_{t_1}^{t_2}$$

由于首末端相点固定，故 $\delta q_\alpha(t_1)=\delta q_\alpha(t_2)=0$

考虑到 δq_α 和 δp_α 的独立性，故 $\delta S=0$ 给出正则方程．（证毕）

【推论】作用量 $S=\int_{t_1}^{t_2}(\sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - H)dt$ 和

$$\tilde{S}=\int_{t_1}^{t_2}[\sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - H + \frac{d}{dt}\tilde{F}(q_\alpha, p_\alpha, t)]dt$$

给出相同的正则方程.

证明：$\tilde{S}=\int_{t_1}^{t_2}[\sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - H + \frac{d}{dt}\tilde{F}(q_\alpha, p_\alpha, t)]dt = S + \tilde{F}(q_\alpha, p_\alpha, t)\Big|_{t_1}^{t_2}$

$$\Rightarrow \delta\tilde{S} = \delta S + \sum_\alpha \left(\frac{\partial \tilde{F}}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha + \frac{\partial \tilde{F}}{\partial p_\alpha}\delta p_\alpha\right)\Bigg|_{t_1}^{t_2}$$

相空间首末端固定，即

$$\delta q_\alpha(t_1)=\delta q_\alpha(t_2)=0, \delta p_\alpha(t_1)=\delta p_\alpha(t_2)=0,$$

$$\Rightarrow \delta\tilde{S}=\delta S \qquad \text{（证毕）}$$

- 正则变换

我们看到哈密顿函数如果不显含某个正则变量，则正则方程可以少求解 2 个．如果我们对正则变量进行某种变换，得到新的正则变量和相应的哈密顿函数，使得新的哈密顿函数尽可能少的显含某些正则变量，则可以大大减少需要求解的正则方程的数目．

“正则”（canonical）有“标准”的意思，指（经典）哈密顿力学中一种特定的结构（辛结构：Symplectic structure）；该结构在量子理论中也被保留。

【定义】正则变换：$\{q_\alpha,p_\alpha\}\text{-->}\{Q_\alpha,P_\alpha\}$; 变换后新变量 Q_α,P_α 与新的哈密顿函数 H' 之间仍然满足正则方程，即

$$\begin{cases} Q_a = Q_a(q,p,t) \\ P_a = P_a(q,p,t) \end{cases}$$

$$\dot{Q}_\alpha=\frac{\partial H'}{\partial P_\alpha},\quad \dot{P}_\alpha=-\frac{\partial H'}{\partial Q_\alpha}\quad .$$

问题：怎样找到正则变换呢?

【定理】给定（母）函数 $F=F(q_\alpha,Q_\alpha,t)$，则

$$p_\alpha=\frac{\partial F}{\partial q_\alpha},\quad P_\alpha=-\frac{\partial F}{\partial Q_\alpha},\quad H'=H+\frac{\partial F}{\partial t}$$

给出正则变换 $\{q_\alpha,p_\alpha\}\text{-->}\{Q_\alpha,P_\alpha\}$.

F称为正则变换的“生成函数”或“母函数”

证明：给定母函数 $F=F(q_\alpha, Q_\alpha, t)$，由它生成的

$$p_\alpha=\frac{\partial F}{\partial q_\alpha},\quad P_\alpha=-\frac{\partial F}{\partial Q_\alpha},\quad H'=H+\frac{\partial F}{\partial t}$$

给出了变换 $\{q_\alpha, p_\alpha\}\text{-->}\{Q_\alpha, P_\alpha\}$ 以及新的哈密顿函数．

$$dF=\sum_\alpha\left(\frac{\partial F}{\partial q_\alpha}dq_\alpha+\frac{\partial F}{\partial Q_\alpha}dQ_\alpha\right)+\frac{\partial F}{\partial t}dt=\sum_\alpha p_\alpha dq_\alpha-\sum_\alpha P_\alpha dQ_\alpha+(H'-H)dt$$

$$\sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha-H=\sum_\alpha P_\alpha \dot{Q}_\alpha-H'+\frac{dF}{dt}$$

满足正则方程的 $\{q_\alpha,p_\alpha\}$ 使得 $\delta S=\delta\int_{t_1}^{t_2}\left(\sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha-H\right)dt=0$

令

$$S'=\int_{t_1}^{t_2}\left(\sum_\alpha P_\alpha \dot{Q}_\alpha-H'\right)dt$$

$$\Rightarrow \delta S'=\delta S-\delta F(q_\alpha, Q_\alpha, t)\Big|_{t_1}^{t_2}$$

Q是p和q的函数

$$\delta F(q_\alpha, Q_\alpha, t)\Big|_{t_1}^{t_2}=\sum_\alpha\frac{\partial F}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha\Big|_{t_1}^{t_2}+\sum_\alpha\frac{\partial F}{\partial Q_\alpha}\sum_\beta\left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial q_\beta}\delta q_\alpha+\frac{\partial Q_\alpha}{\partial p_\beta}\delta p_\alpha\right)\Bigg|_{t_1}^{t_2}=0$$

$\Rightarrow \delta S'=\delta S=0 \Rightarrow \{Q_\alpha, P_\alpha\}$ 满足正则方程．（证毕）

注：也可以用 q_α 和 P_α 来表示母函数．我们从 $P_\alpha=-\dfrac{\partial F}{\partial Q_\alpha}$ 反解出 Q_α

代入 $\Phi=F+P_\alpha Q_\alpha$ （勒让德变换）

可得 $\Phi=\Phi(q_\alpha,P_\alpha,t)$

由于 $dF=\sum_\alpha p_\alpha dq_\alpha-\sum_\alpha P_\alpha dQ_\alpha+(H'-H)dt$

$$\Rightarrow d\Phi=\sum_\alpha p_\alpha dq_\alpha+\sum_\alpha Q_\alpha dP_\alpha+(H'-H)dt$$

类似上一定理的证明，可以得到

$$p_\alpha=\frac{\partial\Phi}{\partial q_\alpha},\quad Q_\alpha=\frac{\partial\Phi}{\partial P_\alpha},\quad H'=H+\frac{\partial\Phi}{\partial t}$$

给出正则变换 $\{q_\alpha,p_\alpha\}\text{-->}\{Q_\alpha,P_\alpha\}$.

注：类似地也可以用 p_α 和 Q_α 来表示母函数．或者用 p_α 和 P_α 来表示母函数．

试求母函数 $F=\sum_\alpha q_\alpha Q_\alpha$ 对应的变换　（广义坐标与广义动量互换的变换）

解：

$$p_\alpha=\frac{\partial F}{\partial q_\alpha}=Q_\alpha \Rightarrow Q_\alpha=p_\alpha \quad \Rightarrow \dot{Q}_\alpha=\dot{p}_\alpha=-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}$$

$$P_\alpha=-\frac{\partial F}{\partial Q_\alpha}=-q_\alpha \quad \Rightarrow \dot{P}_\alpha=-\dot{q}_\alpha=-\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}$$

$$H'=H+\frac{\partial F}{\partial t}=H$$

将H’替换为H

$$\frac{\partial H'}{\partial Q_\alpha}=\sum_\beta\left(\frac{\partial H}{\partial q_\beta}\frac{\partial q_\beta}{\partial Q_\alpha}+\frac{\partial H}{\partial p_\beta}\frac{\partial p_\beta}{\partial Q_\alpha}\right)=\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}$$

将Q替换为p

$$\frac{\partial H'}{\partial P_\alpha}=\sum_\beta\left(\frac{\partial H}{\partial q_\beta}\frac{\partial q_\beta}{\partial P_\alpha}+\frac{\partial H}{\partial p_\beta}\frac{\partial p_\beta}{\partial P_\alpha}\right)=-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}$$

$$\Rightarrow \begin{cases}\dot{Q}_\alpha=\dfrac{\partial H'}{\partial P_\alpha}\\[2ex] \dot{P}_\alpha=-\dfrac{\partial H'}{\partial Q_\alpha}\end{cases}$$

注：此例中的变换将广义动量和广义坐标互换了．可见一般正则变换后的 Q_α 不再是纯粹空间坐标的含义．

问题：泊松括号在正则变换下怎么改变呢？

记 $[u,v]_{q,p}\equiv\sum_{\alpha}\left(\frac{\partial u}{\partial q_{\alpha}}\frac{\partial v}{\partial p_{\alpha}}-\frac{\partial v}{\partial q_{\alpha}}\frac{\partial u}{\partial p_{\alpha}}\right)$， $[u,v]_{Q,P}\equiv\sum_{\alpha}\left(\frac{\partial u}{\partial Q_{\alpha}}\frac{\partial v}{\partial P_{\alpha}}-\frac{\partial v}{\partial Q_{\alpha}}\frac{\partial u}{\partial P_{\alpha}}\right)$

【定理】：在正则变换下

$$[Q_{\beta},P_{\gamma}]_{q,p}=\delta_{\beta\gamma},\quad [Q_{\beta},Q_{\gamma}]_{q,p}=0,\quad [P_{\beta},P_{\gamma}]_{q,p}=0$$

证明： $[Q_{\beta},P_{\gamma}]_{q,p}=\frac{\partial Q_{\beta}}{\partial q_{\alpha}}\frac{\partial P_{\gamma}}{\partial p_{\alpha}}-\frac{\partial P_{\gamma}}{\partial q_{\alpha}}\frac{\partial Q_{\beta}}{\partial p_{\alpha}}$（重复指标表示求和）

$d\Phi=p_{\alpha}dq_{\alpha}+Q_{\beta}dP_{\beta}+(H'-H)dt$ 是全微分 $\Rightarrow \frac{\partial Q_{\beta}}{\partial q_{\alpha}}=\frac{\partial p_{\alpha}}{\partial P_{\beta}}$

$d(\Phi-p_{\alpha}q_{\alpha})=-q_{\alpha}dp_{\alpha}+Q_{\beta}dP_{\beta}+(H'-H)dt\quad\Rightarrow\frac{\partial Q_{\beta}}{\partial p_{\alpha}}=-\frac{\partial q_{\alpha}}{\partial P_{\beta}}$

$[Q_{\beta},P_{\gamma}]_{q,p}=\frac{\partial p_{\alpha}}{\partial P_{\beta}}\frac{\partial P_{\gamma}}{\partial p_{\alpha}}+\frac{\partial P_{\gamma}}{\partial q_{\alpha}}\frac{\partial q_{\alpha}}{\partial P_{\beta}}$

一方面 $P_{\gamma}=P_{\gamma}(q_{\alpha}(Q_{\beta},P_{\beta},t),p_{\alpha}(Q_{\beta},P_{\beta},t),t)$

$\Rightarrow[Q_{\beta},P_{\gamma}]_{q,p}=\frac{\partial P_{\gamma}}{\partial P_{\beta}}$

另一方面，同一组正则变量相互独立 $\Rightarrow \frac{\partial P_{\gamma}}{\partial P_{\beta}}=\delta_{\beta\gamma}$ 第一个关系得证

其他同理.(证毕)

注：上述定理也可以作为正则变换的判据.

【推论】：在正则变换下 $[u,v]_{q,p}=[u,v]_{Q,P}$

证明思路：根据泊松括号的定义，计算可得

$$[u,v]_{q,p}=\frac{\partial u}{\partial q_\alpha}\frac{\partial v}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial v}{\partial q_\alpha}\frac{\partial u}{\partial p_\alpha}$$

（重复指标表示求和）

$$=\cdots=\frac{\partial u}{\partial Q_\beta}\frac{\partial v}{\partial Q_\gamma}[Q_\gamma,Q_\beta]_{q,p}+\frac{\partial u}{\partial P_\beta}\frac{\partial v}{\partial P_\gamma}[P_\gamma,P_\beta]_{q,p}$$

$$+\left(\frac{\partial u}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial v}{\partial P_\beta}-\frac{\partial v}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial u}{\partial P_\beta}\right)[Q_\gamma,Q_\beta]_{q,p}$$

$$=\left(\frac{\partial u}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial v}{\partial P_\beta}-\frac{\partial v}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial u}{\partial P_\beta}\right)\delta_{\gamma\beta}$$

$$=\left(\frac{\partial u}{\partial Q_\beta}\frac{\partial v}{\partial P_\beta}-\frac{\partial v}{\partial Q_\beta}\frac{\partial u}{\partial P_\beta}\right)=[u,v]_{Q,P}$$

（证毕）

哈密顿—雅可比方程

（Hamilton-Jacobi方程，简称H-J方程）

若能找到一个母函数 $S(q_\alpha,P_\alpha,t)$，由它生成的新哈密顿函数 $H'=0$，由正则方程可知，新的正则变量都为常数．即

$$\dot{Q}_\alpha=0,\ \dot{P}_\alpha=0\Rightarrow Q_\alpha=\mu_\alpha,\ P_\alpha=\nu_\alpha,\ (\alpha=1,\cdots,s)$$

其中常数 μ_α 和 ν_α 由初始条件确定．

至此，$2s$个运动积分全部找出，再根据正则变换方程求得q和p

当给定母函数 $S(q_\alpha,P_\alpha,t)$ 后，新旧正则变量的关系为

$$p_\alpha=\frac{\partial S}{\partial q_\alpha},\ Q_\alpha=\frac{\partial S}{\partial P_\alpha}\qquad(@)$$

回忆

$$\Phi=\Phi(q_\alpha,P_\alpha,t)$$

$$p_\alpha=\frac{\partial\Phi}{\partial q_\alpha},\ Q_\alpha=\frac{\partial\Phi}{\partial P_\alpha},\ H'=H+\frac{\partial\Phi}{\partial t}$$

可以从 (@) 后一式及 $Q_\alpha=\mu_\alpha,\ P_\alpha=\nu_\alpha$ 反解出 $q_\alpha=q_\alpha(\mu_\beta,\nu_\beta,t)$

然后将其同 $P_\alpha=\nu_\alpha$ 代入 (@) 前一式可解出 $p_\alpha=p_\alpha(\mu_\beta,\nu_\beta,t)$

所以问题的关键是怎样寻找这样的母函数 $S(q_\alpha,P_\alpha,t)$!

【定理】母函数 S 满足 H-J 方程 $\dfrac{\partial S}{\partial t}+H\left(q_\alpha,\dfrac{\partial S}{\partial q_\alpha},t\right)=0.$

$$\left.\begin{array}{l}\text{证明：母函数 } S \text{ 使得 } H'=H+\dfrac{\partial S}{\partial t}=0 \\[2ex] \text{这里 } H=H(q_\beta,p_\beta,t) \\[2ex] p_\alpha=\dfrac{\partial S}{\partial q_\alpha} \text{ 且 } S \text{ 中的 } P_\alpha=\nu_\alpha\end{array}\right\} \Longrightarrow H\text{-}J\text{ 方程．（证毕）}$$

注：这是一阶偏微分方程，它含有 $s+1$ 个独立变量(广义坐标和时间)，根据偏微分方程理论，它的完全解应包含 $s+1$ 个积分常数．且完全解可表示为

$$S=S(q_1,\cdots,q_s,\underbrace{\nu_1,\cdots\nu_s}_{\text{新动量 } P_1,\cdots P_s},t)+\underbrace{C}_{\text{常数}}.$$

【定理】母函数 S 是沿真实运动轨迹的作用量

证明：

$$\left.\begin{aligned} &\frac{dS}{dt}=\frac{\partial S}{\partial t}+\sum_\alpha \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha \\ &H\text{-}J\text{ 方程 } \frac{\partial S}{\partial t}=-H \\ &\text{另外正则变换关系 } p_\alpha=\frac{\partial S}{\partial q_\alpha} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \frac{dS}{dt}=\sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha-H=L$$

$$\Rightarrow S=\int_{t_0}^{t} L\,dt+S(t_0)$$

故 S 表达式与作用量相同（仅差常数）. 需要注意到是推导 H-J 方程时已经用到了正则方程，即只对真实运动成立，所以作用量的被积函数 $L(q_\alpha,\dot{q}_\alpha,t)$ 中的广义坐标和广义动量均沿真实轨迹变化. 即母函数 S 是沿真实运动轨迹的作用量.（证毕）

【定义】哈密顿主函数：沿真实运动轨迹的作用量

关于哈密顿主函数的注

(1) 哈密顿主函数 S 是广义坐标和时间的函数，因此可视为场函数.

$S(q_\alpha, v_\alpha, t)=const.$ 是 S 的等值面方程，随着时间的变化，这个等值面在空间传播.

(2) 广义动量和广义能量是由 S 派生

$$p_\alpha=\frac{\partial S}{\partial q_\alpha} \qquad \frac{\partial S}{\partial t}=-H$$

$$\downarrow$$

$$(p_1, p_2, \cdots, p_s)\equiv \boldsymbol{p}=\nabla S\equiv\left(\frac{\partial S}{\partial q_1}, \frac{\partial S}{\partial q_2}, \cdots, \frac{\partial S}{\partial q_s}\right)$$

系统在位形空间（位形点类比于“粒子”）的运动方向与 S 的等值面垂直.

因此，S 的等值面可以类比于光的波前面，系统的运动可以类比为光的传播. （请回忆光的波动理论）

用 $H\text{-}J$ 方程求解动力学问题的步骤——

(1) 写出哈密顿函数 $H=H(q_\beta, p_\beta, t)=H\left(q_\alpha, \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}, t\right)$

(2) 按 $\frac{\partial S}{\partial t}+H\left(q_\alpha, \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}, t\right)=0$ 建立 $H\text{-}J$ 方程

(3) 求出哈密顿主函数 S，并将其中 s 个非可加的积分常数 $\nu_1, \cdots \nu_s$ 视为新的广义动量 .

(4) 利用正则变换关系 $p_\alpha=\frac{\partial S}{\partial q_\alpha}$, $Q_\alpha=\frac{\partial S}{\partial P_\alpha}$

以及 $Q_\alpha=\mu_\alpha$ $(const.)$, $P_\alpha=\nu_\alpha$ $(const.)$

解出 $q_\alpha=q_\alpha(\mu_\beta, \nu_\beta, t)$, $p_\alpha=p_\alpha(\mu_\beta, \nu_\beta, t)$

试用 *H-J* 方程求解一维谐振子问题.

解：以谐振子偏离平衡位置的量 q 作为广义坐标哈密顿量，相应广义动量记为 p 。容易写出哈密顿量

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{kq^2}{2}=\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2+\frac{m\omega^2 q^2}{2}$$

故 *H-J* 方程可以表示为

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2+\frac{m\omega^2 q^2}{2}$$

注意到 H 不显含时间，因此广义能量守恒，所以 $H=E$，那么

$$\left.\begin{array}{l} -\dfrac{\partial S}{\partial t}=\dfrac{1}{2m}\left(\dfrac{\partial S}{\partial q}\right)^2+\dfrac{m\omega^2 q^2}{2}=E \\ \text{令 } S=f(t)+g(q) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} f(t)=-Et+C_1 \\ g(q)=\int_0^q \sqrt{m(2E-m\omega^2 x^2)}\,dx+C_2 \end{array}\right.$$

于是求得哈密顿主函数为 $S=\int_0^q \sqrt{m(2E-m\omega^2 x^2)}\,dx-Et+C$

其中非可加的常数为 E，即新系统的广义动量 $P=E$.

对应的广义坐标为

$$Q=\frac{\partial S}{\partial P}=\frac{\partial S}{\partial E}=-t+\int_0^q \frac{dx}{\omega\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}-x^2}}=-t+\frac{1}{\omega}\arcsin\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}q$$

这里 Q 有时间的量纲，可见新系统中能量和时间是一对正则变量.

由于新系统 Q 为常量，可记 $Q=-t_0$，则上式给出

$$q=\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\sin\omega(t-t_0)$$

$$p=\frac{\partial S}{\partial q}=\sqrt{m(2E-m\omega^2q^2)}=\sqrt{2mE}\cos\omega(t-t_0)$$

注：与我们熟悉的公式 $q=A\sin(\omega t+\varphi)$对比知道

$$E=\frac{m\omega^2A^2}{2}=\frac{kA^2}{2},\quad \varphi=-\omega t_0\qquad\Rightarrow p=m\omega A\cos(\omega t+\varphi)$$

Hamilton-Jacobi方程的意义

- 将求解2s个常微分方程的哈密顿正则方程转化为解一个（一阶非线性）偏微分方程，在理论上指出了另一条可行、可靠的路径。

- 可导出定态薛定谔方程（实际上，薛定谔正是从H-J方程构建他那伟大方程的）。定态薛定谔方程几乎完全在经典力学的哈密顿力学的框架中建立，这说明了哈密顿表述具备不囿于经典力学的强大生命力。究其原因，是哈密顿表述采用了能量作为研究的出发点，而不是牛顿表述的核心——力，因为后者在微观世界中没有合适的对应，而能量的概念在各种尺度上都是有效的物理量。

“运动的量度”之争：经典力学发展的两条路径

1638年，伽利略最先提出了对运动的两种量度。

牛顿力学（沿动量对时间微商建立动力学的路径）：$\frac{d(mv)}{dt}=f$

从1644年笛卡尔提出动量概念，至1687年牛顿的《原理》发表

分析力学：沿动能对时间（位移）的微商建立动力学的路径：

$$\frac{d(\frac{1}{2}mv^2)}{ds}=f \qquad \frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j}-\frac{\partial T}{\partial q_j}=Q_j$$

自1686年莱布尼茨提出活力定律开始（动能为“活力”，力是“死力”），经过200年的发展：伯努力、达朗贝尔、莫培督、欧拉、拉格朗日、哈密顿、泊松、雅可比。

作业

- 证明泊松括号的前五大性质