第二章 哈密顿力学概要

2.1 哈密顿正则方程

2.1.1 勒让德变换与哈密顿正则方程

- 在位形空间的最小作用量原理中，拉氏量作为广义坐标和广义速度的函数 $L = L(q, \dot{q}, t)$，由此可以给出体系的拉格朗日方程。引入广义动量

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \qquad \Rightarrow \qquad \dot{q}_\alpha = \dot{q}_\alpha(p, q, t) \tag{1.1}$$

则可以 $\{p_\alpha\}, \{q_\alpha\}$ 为独立变量构建力学体系。

- 利用 (1.1)，做 Legendre 变换（本章采用重复指标的求和约定）

$$H(q, p, t) = p_\alpha \dot{q}_\alpha(p, q, t) - L\big(q, \dot{q}(p, q, t), t\big) \tag{1.2}$$

其中作为广义坐标和广义动量函数的 $H(p, q, t)$ 被称为体系的哈密顿函数，简称哈密顿量。

- 对 (1.2) 两边取微分（并利用拉格朗日方程 $\dot{p}_\alpha = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}$）

$$\begin{aligned} dH &= p_\alpha d\dot{q}_\alpha + \dot{q}_\alpha dp_\alpha - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} dq_\alpha - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} d\dot{q}_\alpha - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \dot{q}_\alpha dp_\alpha - \dot{p}_\alpha dq_\alpha - \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned} \tag{1.3}$$

由此可以读出

$$\begin{cases} \dot{q}_\alpha = \dfrac{\partial H}{\partial p_\alpha} \\ \dot{p}_\alpha = -\dfrac{\partial H}{\partial q_\alpha} \end{cases} \tag{1.4}$$

以及 $\partial_t H = -\partial_t L$.

- 方程 (1.4) 式被称为哈密顿正则方程，这是一组一阶微分方程，与拉格朗日（二阶微分）方程等价。即，由 (1.2)、(1.4) 式

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = \dot{q}_\alpha + p_\beta \frac{\partial \dot{q}_\beta(p, q)}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta} \frac{\partial \dot{q}_\beta(p, q)}{\partial p_\alpha} = \dot{q}_\alpha$$

$$\dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = -p_\beta \frac{\partial \dot{q}_\beta(p, q)}{\partial q_\alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\beta} \frac{\partial \dot{q}_\beta(p, q)}{\partial q_\alpha} + \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}$$

第二式便还原为拉格朗日方程。

- 由正则方程

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \dot{p}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

因此，当 H 不显含时间（自然 L 也不显含时间）时，体系的哈密顿量守恒，其值便为体系的能量。

- 方程 (1.4) 式中 p_α 、q_α 之间形式对称，被称为一组共轭正则变量，相应以

$\{p_\alpha\},\{q_\alpha\}$ 为坐标的 $2s$ 维空间被称为体系的相空间。给定初值的运动解 $\{q(t),p(t)\}$ 构成相空间中的相轨道，其演化方程即为哈密顿正则方程。因哈密顿正则方程是 $2s$ 个一阶微分方程组成的方程组，因此任意不同的相轨道之间不会相交。

☞ 例 1：考虑一维谐振子，拉氏量

$$L=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}kx^2$$

正则动量

$$p=\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}=m\dot{x}$$

哈密顿量为

$$H=p\dot{x}-L=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kx^2$$

显然，机械能守恒

$$E=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kx^2$$

其相轨道为依赖于能量的椭圆。

☞ 例 2：相对论性带电粒子的哈密顿量

$$L=-mc^2\sqrt{1-\beta^2}-\left(q\phi(x)-q\vec{v}\cdot\vec{A}(x)\right)$$

正则动量为

$$\vec{P}=\frac{\partial L}{\partial \vec{v}}=\frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}+q\vec{A}$$

哈密顿量

$$H=\vec{P}\cdot\vec{v}-L=\frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}}+q\phi=\sqrt{\left(\vec{P}-q\vec{A}\right)^2c^2+m^2c^4}+q\phi$$

其非相对论形式（去掉无关常量 mc^2）为

$$H=\frac{\left(\vec{P}-q\vec{A}\right)^2}{2m}+q\phi$$

☞ 例 3：Kepler 问题

$$L=\frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2+r^2\dot{\theta}^2\right)+\frac{\alpha}{r}$$

相应正则动量

$$p_r=m\dot{r}\,,\qquad p_\theta=mr^2\dot{\theta}$$

哈密顿量

$$H=\frac{p_r^2}{2m}+\frac{p_\theta^2}{2mr^2}-\frac{\alpha}{r}$$

注意到 θ 为循环坐标，即 $\partial_\theta H=0$，故 $p_\theta=J\big(\text{常量}\big)$

$$H=\frac{p_r^2}{2m}+\frac{J^2}{2mr^2}-\frac{\alpha}{r}$$

相应变成一个自由度的问题。而循环坐标 θ 在哈密顿力学的意义上被称为可遗坐标。相应径向自由度的正则方程为

$$\begin{cases} \dot{r} = \dfrac{\partial H}{\partial p_r} = \dfrac{p_r}{2m} \\ \dot{p}_r = -\dfrac{\partial H}{\partial r} = \dfrac{J^2}{mr^3} - \dfrac{\alpha}{r^2} \end{cases}$$

2.1.2 相空间的哈密顿原理

- 作为相空间轨道泛函的作用量定义为

$$S[q(t), p(t)] = \int_{t_1}^{t_2} [p_\alpha \dot{q}_\alpha - H(q, p, t)]\, dt \qquad (1.5)$$

其中，初末态位形 $\left(t_1, q^{(1)}\right)$ 和 $\left(t_2, q^{(2)}\right)$ 给定。如此，最小作用量确定的相空间轨道方程便是哈密顿正则方程。

证明：等时变分

$$\delta[p_\alpha \dot{q}_\alpha - H(q, p, t)] = p_\alpha \delta\dot{q}_\alpha + \dot{q}_\alpha \delta p_\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\delta p_\alpha - \frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha$$
$$= \frac{d}{dt}(p_\alpha \delta q_\alpha) + \left(\dot{q}_\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\right)\delta p_\alpha - \left(\dot{p}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right)\delta q_\alpha \qquad (1.6)$$

故知

$$\delta S = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \dot{q}_\alpha = \dfrac{\partial H}{\partial p_\alpha} \\ \dot{p}_\alpha = -\dfrac{\partial H}{\partial q_\alpha} \end{cases} \qquad (1.7)$$

- 拉格朗日力学中"位形空间的最小作用量原理"可以看作是相空间最小作用量原理的等价表示。
  - 考虑二元函数 $f = f(x, y)$，其取极值的必要条件为

$$\partial_x f = 0 \qquad (1.8)$$
$$\partial_y f = g(x, y) = 0 \qquad (1.9)$$

也等价于由(1.9)式反解出 $y = y(x)$，则 $f = f\big(x, y(x)\big) = \bar{f}(x)$，相应在(1.9)式成立的条件下，取极值的必要条件变为

$$\partial_x \bar{f}(x) = 0 \qquad (1.10)$$

  - 从相空间最小作用量原理过渡到位形空间的最小作用量原理的过程有些类似与如上过程，作为 $q(t), p(t)$ 泛函的作用量 $S[q(t), p(t)]$ 取极值的必要条件为(1.7)式，或

$$\frac{\delta S}{\delta q_\alpha} = -\left(\dot{p}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right) = 0 \qquad (1.11)$$
$$\frac{\delta S}{\delta p_\alpha} = \dot{q}_\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = 0 \qquad (1.12)$$

如果利用(1.12)反解出 $p_\alpha = p_\alpha(q, \dot{q}, t)$，代入(1.5)式便得作为 $q(t)$ 的作用

量泛函

$$S[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} [p_\alpha(q,\dot{q},t)\dot{q}_\alpha - H(q,p(q,\dot{q},t),t)]\,dt = \int_{t_1}^{t_2} L(q,\dot{q},t)\,dt$$

如此，取极值的必要条件便是

$$\frac{\delta S}{\delta q_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) = 0$$

这样便得到了位形空间的最小作用量原理。

- 正则变量 p 与 q 之间的独立性：
  - 从(1.6)过渡到正则方程(1.7)式的过程中可以看出变分 δq 与 δp 之间是相互独立的，与之相对应的是在拉格朗日力学，作为衍生变量的 $\dot{q}$ 的变分 $\delta\dot{q} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta q$，因此不能看作为独立变分。
  - 正则变量 p 与 q 之间的独立性会给出更大的坐标变换的自由度，即在一定的所谓正则变换下

$$\begin{cases} q'_\alpha = q'_\alpha(q,p,t) \\ p'_\alpha = p'_\alpha(q,p,t) \end{cases}$$

正则方程仍然成立，甚至可以通过正则变换找到求解运动方程所需要的 $2s$ 个运动积分。

2.1.3 ξ 符号

- 为了体现正则共轭变量 p_α、q_α 之间对偶，可以把它们重新编排成 $2s$ 个坐标

$$(\xi^1, \xi^2, \dots, \xi^{2s}) = (q_1, q_2, \dots, q_s, p_1, p_2, \dots, p_s)$$

则正则方程可以写作

$$\dot{\xi}^i = \omega^{ij}\partial_j H = \omega^{ij}\frac{\partial H}{\partial \xi^j}$$

其中 ω^{ij} 构成矩阵

$$\omega = \left(\omega^{ij}\right) = \begin{pmatrix} 0_{s\times s} & \mathbb{1}_{s\times s} \\ -\mathbb{1}_{s\times s} & 0_{s\times s} \end{pmatrix}$$

且有 $\omega^{-1} = -\omega = \omega^T$.

2.1 泊松括号

2.2.1 泊松括号的引入与性质

- 哈密顿力学中力学量作为广义坐标和动量的函数 $A = A(q,p,t)$，其变化率为

$$\dot{A} = \partial_t A + \frac{\partial A}{\partial q_\alpha}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial A}{\partial p_\alpha}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = \partial_t A + [A,H] \qquad (2.1)$$

其中，任意两个力学量的 Poisson 括号定义为

$$[A,B] = \frac{\partial A}{\partial q_\alpha}\frac{\partial B}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial A}{\partial p_\alpha}\frac{\partial B}{\partial q_\alpha} = (\partial_i A)\omega^{ij}\left(\partial_j B\right) \qquad (2.2)$$

  - 容易验证

$$[q_\alpha, q_\beta] = 0\,, \qquad [p_\alpha, p_\beta] = 0\,, \qquad [q_\alpha, p_\beta] = \delta^\alpha_\beta \qquad (2.3)$$

这些被称为基本泊松括号，可等价表示为

$$[\xi^i, \xi^j] = \omega^{ij} \tag{2.4}$$

➢ 泊松括号的性质：

1) 常数的泊松括号为零：$[A, c] = 0,\ \forall c = \text{const.}$
2) 反交换：$[A, B] = -[B, A]$
   特例：$[A, A] = 0$
3) 双线性：对于任意常数 a, b
   $$[A, aB + bC] = a[A, B] + b[A, C], \qquad [aB + bC, A] = a[B, A] + b[C, A]$$
4) 莱布尼兹法则：$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$
5) 时间偏导法则：$\partial_t[A, B] = [\partial_t A, B] + [\partial_t A, B]$
6) 正则坐标与力学量的泊松括号：
   $$[q_\alpha, A] = \frac{\partial A}{\partial p_\alpha}\ , \qquad [p_\alpha, A] = -\frac{\partial A}{\partial q_\alpha}$$
7) 雅可比恒等式：$\big[A, [B, C]\big] + \big[C, [A, B]\big] + \big[B, [C, A]\big] = 0$ (2.5)

- 由 (2.2) 式可知 $[A, B] = L_A B$ 其中 $L_A = (\partial_i A)\omega^{ij}\partial_j = \tilde{A}^j \partial_j$ 为仅与 A 相关的线性微商算符，如此自然有性质 3)、4) .
- 易判断雅可比恒等式左侧可以分解为 24 项的求和，其中每一项均会含有一个二阶导数因子。因此证明 C 的二阶导数项求和为零，便可证明雅可比恒等式。与 C 的二阶导数相关的项有
  $$\big[A, [B, C]\big] + \big[B, [C, A]\big] \to (L_A L_B - L_B L_A)C$$
  $$\to \big(\tilde{A}^i \tilde{B}^j - \tilde{A}^j \tilde{B}^i\big)\partial_i \partial_j C = G^{ij}\partial_i \partial_j C$$
  其中
  $$G^{ij} = (\partial_k A)\omega^{ki}(\partial_l B)\omega^{lj} - (\partial_k A)\omega^{kj}(\partial_l B)\omega^{li} = -G^{ji}$$
  故雅可比恒等式左侧二阶导数项求和为零，即有恒等式的成立。

2.2.2 泊松括号的应用

➢ 运动方程的表示：正则方程可以表示为

$$\begin{cases} \dot{q}_\alpha = [q_\alpha, H] \\ \dot{p}_\alpha = [p_\alpha, H] \end{cases} \tag{2.6}$$

而一般的力学量 $A = A(q, p, t)$ 的运动方程表示为 (2.1) 式。

- 若物理量 $A = A(q, p)$ 不显含时间，则其作为守恒量的充要条件是
  $$[A, H] = 0$$
  特例：若 $\partial_t H = 0$ ，则 $\dot{H} = [H, H] = 0$
- 泊松定理（请自行证明）：若 A 、B 为守恒的物理量，则 $C = [A, B]$ 也守恒。

☞ 例 4：求角动量分量的泊松括号

$$[J_1, J_2] = [x_2 p_3 - x_3 p_2, x_3 p_1 - x_1 p_3] = x_2[p_3, x_3]p_1 + x_1[x_3, p_3]p_2 = J_3$$

一般性地有，

$$\big[J_i, J_j\big] = \epsilon_{ijk} J_k$$

此外

$$[J_1,J^2]=[J_1,J_2]J_2+[J_1,J_3]J_3=0$$

2.2.3 Liouville 定理

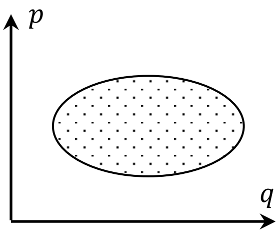
➢ 问题的引入：

考虑一个自由度很大（比如 $n_f=s>10^{20}$ ）的复杂体系，我们无法确切知道它的初始状态，当然也不能预言它准确的相轨道。这其实就是统计物理所要面对的情况。

我们将如上的体系看作为复杂的微观体系，对这样体系的宏观观测量，其实对应于力学量函数 $f=f(q,p)$ 的时间平均，即 t_0 时刻观测的宏观量的值为

$$\langle f\rangle(t_0)=\frac{1}{\tau}\int_{t_0}^{t_0+\tau}f\big(q(t),p(t)\big)\,\mathrm{d}t \qquad (2.7)$$

其中 τ 为宏观仪器的响应时间，它应该远大于微观过程的弛豫时间，所以可以认为 (2.7) 在 $\tau\to\infty$ 的极限下也是成立的[1]。



(2.7)式对于预言宏观观测量仍然无能为力，因为我们无法确切知道系统的相轨道$q(t),p(t)$。但在足够长的时间内（$\tau\to\infty$），可以认为微观态遍历了所有被允许的相空间的代表点（相点），如右图所示。这里，“被允许”可以被理解为是将相点限制在相空间的某个能量壳层 $E\in(E_0,E_0+\Delta E)$ ，当然，可以是薄层（$\Delta E\ll E_0$）。如此可以在图中相空间体元

$$\mathrm{d}q\mathrm{d}p=\prod_{\alpha=1}^{s}\mathrm{d}q_\alpha\mathrm{d}p_\alpha$$

中可以引入相点的概率密度 $\rho(q,p,t)$ ，对应于相点存在于相应体元中的概率为

$$\mathrm{d}P=\rho(q,p,t)\mathrm{d}q\mathrm{d}p \qquad (2.8)$$

满足概率归一化条件

$$\int\rho(q,p,t)\mathrm{d}q\mathrm{d}p=1$$

相应用(2.8)定义的概率取代(2.7)中的 $\mathrm{d}P=\mathrm{d}t/\tau$ ，则有

$$\langle f\rangle(t)=\int f(q,p)\rho(q,p,t)\mathrm{d}q\mathrm{d}p \qquad (2.9)$$

(2.9)式被称为可观测量 f 的系综平均。相当于同时制备了大量的被允许的系统的样品——一个系综，每个样品由图中的一个相点代表，每个相空间体元

[1] 另一重意义上，统计上发现微观粒子数（状态数）越多，在近平衡（准静态）的演化过程中，测量值对统计平均值的偏离（即所谓的涨落）就相对越小，所以对于这样的过程，宏观观测量数值仅在宏观时间尺度上缓慢演化，因此可以取(2.7) 式中的 $\tau\to\infty$.

内相点的数目正比于(2.8)所定义的概率。(2.9)式可以看作是统计物理学中最为基本的假定。

- 刘维尔定理：

  前面给出的系综示意图中，相点的数目守恒，而相点的数密度 $\rho_n = \rho \cdot N$，其中 $N(\gg 1)$ 为相点的总数目。所以相点数守恒的连续性方程可以写作

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \qquad (2.10)$$

  对于 $2s$ 维相空间，采用 ξ 记号和求和约定

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = \partial_i\left(\rho \dot{\xi}^i\right) = \partial_i\left(\rho \omega^{ij} \partial_j H\right) = \partial_i \rho \omega^{ij} \partial_j H = [\rho, H]$$

  因此

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \partial_t \rho + [\rho, H] = 0 \qquad (2.11)$$

  这便是刘维尔定理。尤其是当系统宏观上长期稳定时，$\partial_t \rho = 0$，相应$\rho = \rho(q, p)$ 为守恒量。