Huazhong University of Science and Technology

School of Physics

哈密顿力学

Author:
杜溪翔 (QQ:1330950431)

2022 年 10 月 29 日

目录

1 正则方程

1.1 正则运动方程

在拉格朗日力学中, 我们已经定义了广义动量

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \tag{1.1}$$

并且用这个关系重写拉格朗日方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0 \tag{1.2}$$

按照哈密顿量的定义, 有

$$H = \sum_j p_j \dot{q}_j - L \tag{1.3}$$

反解1.1式, 可以将广义速度用广义坐标和广义动量表示出来

$$\dot{q}_j = \dot{q}_j(q_k, p_k, t) \tag{1.4}$$

这个关系进行了一次变量代换 $H(q_k, p_k, t) \to (q_j, p_j, t)$, 哈密顿量为

$$H(q_k, p_k, t) = \sum_j p_j \dot{q}_j - L(q_k, \dot{q}_k, t) \tag{1.5}$$

哈密顿的全微分

$$\mathrm{d}H = \sum_k (\frac{\partial H}{\partial q_k}\mathrm{d}q_k + \frac{\partial H}{\partial p_k}\mathrm{d}p_k) + \frac{\partial H}{\partial t}\mathrm{d}t \tag{1.6}$$

从1.5可得

$$\mathrm{d}H = \sum_k (\dot{q}_k \mathrm{d}q_k + p_k \mathrm{d}\dot{q}_k - \frac{\partial L}{\partial q_k}\mathrm{d}q_k - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\mathrm{d}\dot{q}_k) - \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t \tag{1.7}$$

根据广义动量定义, 上式化为

$$\mathrm{d}H = \sum_k (\dot{q}_k \mathrm{d}p_k - \dot{p}_k \mathrm{d}q_k) - \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t \tag{1.8}$$

对比两个全微分式子, 可以得到

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \tag{1.9}$$

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \tag{1.10}$$

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \tag{1.11}$$

将该关系代入1.6

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} &= \sum_k (\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial H}{\partial q_k}) + \frac{\partial H}{\partial t} \\ &= \frac{\partial H}{\partial t} \end{aligned} \tag{1.12}$$

上式告诉我们, 若哈密顿量不显含时间, 则哈密顿量守恒, 在数值上等于系统的能量.

1.2 勒让德变换

勒让德变换将一个矢量空间上的函数变成其对偶空间上的函数.

$$f(x) \longrightarrow g(p) \tag{1.13}$$

$F(p)$ 定义如下

$$F(p,x) = px - f(x) \tag{1.14}$$

并给出约束

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(p,x)}{\partial x} &= 0 \\ \Rightarrow p &= \frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} \\ \Rightarrow x &= x(p) \end{aligned} \tag{1.15}$$

则 $f(x)$ 的勒让德变换

$$g(p) = F(p, x(p)) \tag{1.16}$$

勒让德变换的几何意义可以说明如下, 函数 f 的勒让德变换是一个新变量 p 的函数 g, 作法如下. 在 x,y 平面上作 f 的图像. 设给定 p. 考虑直线 $y = px$. 取使得曲线在铅直方向上离此直线最远之点 $x = x(p)$: 对每个 p 值, 函数 $px - f(x) = F(p,x)$ 在 $x = x(p)$ 时对 x 有最大值. 现定义 $g(p) = F(p, x(p))$.

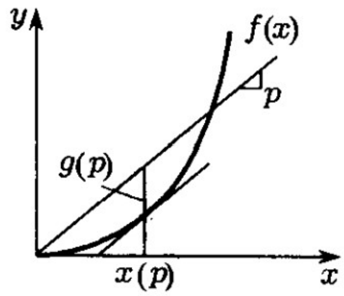

图 1: 勒让德变换

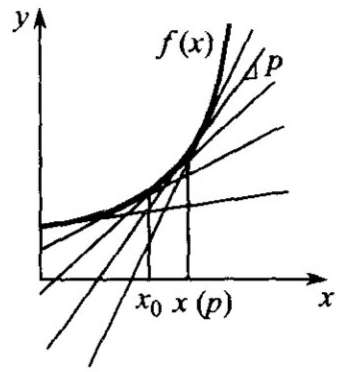

图 2: 勒让德变换的对合性

对合性 勒让德变换是对合的, 即再次施行可得恒等变换: 若 f 在勒让德变换下变为 g, 则 g 之勒让德变换即是 f.

$g(p)$ 就变量 p 施行勒让德变换, 作函数

$$G(x,p) = xp - g(p) \tag{1.17}$$

我们来证明 $G(x, p(x)) = f(x)$. 为此要注意对 $G(x,p) = xp - g(p)$ 有一个简单的几何解释: 它是 $f(x)$ 的图像的切线在横坐标 x 处的纵坐标而此切线之斜率为 p. 对固定的 p, 函数 $G(x,p)$ 是 x 的线性函数, 而且 $\partial G/\partial x = p$, 而当 $x = x(p)$ 时, 由 $g(p)$ 的定义 $G(x,p) = xp - g(p) = f(x)$.

现在固定 $x=x_0$ 而让 p 变化.$G(x,p)$ 之值将是直线 $x=x_0$ 与 $f(x)$ 的具有各个不同斜率 p 的切线之交点的纵坐标. 由图像的凸性可知, 所有这些切线都在 $f(x)$ 图像的下方, 因此 $G(x,p)$ 对于固定的 $x(p_0)$ 的最大值等于 $f(x)$(而且在 $p=p(x_0)=f'(x_0)$ 处达到).

多变量情况 现在令 $f(\boldsymbol{x})$ 是矢量变量 $\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_n)$ 的凸函数 (即二次型 $((\partial^2 f/\partial \boldsymbol{x}^2)\mathrm{d}\boldsymbol{x},\mathrm{d}\boldsymbol{x})$ 为正定). 这时勒让德变换是矢量变量 $\boldsymbol{p}=(p_1,\cdots,p_n)$ 的函数 $g(\boldsymbol{p})$, 定义为

$$g(\boldsymbol{p})=F(\boldsymbol{p},x(\boldsymbol{p}))=\max_x F(\boldsymbol{p},\boldsymbol{x}) \tag{1.18}$$

这里 $F(\boldsymbol{p},\boldsymbol{x})=(\boldsymbol{p},\boldsymbol{x})-f(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{p}=\partial f/\partial \boldsymbol{x}$.

1.3 从哈密顿原理推导正则方程

哈密顿原理为

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} L(q_j,\dot{q}_j,t)\mathrm{d}t=0 \tag{1.19}$$

用哈密顿量表示

$$L(q_j,\dot{q}_j,t)=\sum_k p_k\dot{q}_k-H(q_j,p_j,t) \tag{1.20}$$

哈密顿原理写为

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}\sum_k\left(p_k\delta\dot{q}_k+\dot{q}_k\delta p_k-\frac{\partial H}{\partial q_k}\delta q_k-\frac{\partial H}{\partial p_k}\delta p_k\right)\mathrm{d}t=0 \tag{1.21}$$

等时变分的性质 $\delta\dot{q}_k=\mathrm{d}\delta q/\mathrm{d}t$, 我们可以写出

$$\int_{t_1}^{t_2}\sum_k p_k\delta\dot{q}_k\mathrm{d}t=-\sum_k\int_{t_1}^{t_2}\dot{p}_k\delta q_k\mathrm{d}t \tag{1.22}$$

代入1.21得到

$$\int_{t_1}^{t_2}\sum_k((\dot{q}_k-\frac{\partial H}{\partial p_k})\delta p_k-(p_k+\frac{\partial H}{\partial q_k})\delta q_k)=0 \tag{1.23}$$

考虑到 $\delta q,\delta p$ 相互独立, 有

$$\begin{cases}\dot{q}_k=\dfrac{\partial H}{\partial p_k}\\ \dot{p}_k=-\dfrac{\partial H}{\partial q_k}\end{cases} \tag{1.24}$$

1.4 作为坐标函数的作用量

哈密顿原理

$$S=\int_{t_1}^{t_2}L\mathrm{d}t \tag{1.25}$$

描述的是连接 $q(t_1),q(t_2)$ 的轨道中, 真实轨道使得 S 取极值. 下面我们从另一个角度考虑作用量的概念, 将作用量作为坐标的函数, 确定轨道是真实运动的轨道, 将作用量看作是沿着真实轨道的积分, 比较具有相同初始位置, 而在 t_2 时刻通过不同位置的轨道 S 值.

对 S 变分, 有

$$\delta S=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\bigg|_{t_1}^{t_2}+\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)\delta q\mathrm{d}t \tag{1.26}$$

对于真实的运动, 满足拉格朗日方程, 故第二项是 0, 初始位置固定, 则有 $\delta q(t_1)=0$, 将 $\delta q(t_2)$ 简记为 δq, 有

$$\delta S=\sum_i p_i\delta q_i \tag{1.27}$$

则作用量对坐标的偏导数为对应的广义动量

$$\frac{\partial S}{\partial q_i}=p_i \tag{1.28}$$

下面我们要求作用量对时间的偏导数, 类似的, 它是在给定初始位置 $q(t_1)$, 在不同时刻 t_2 终于 $q^{(2)}$ 时, 作用量与 t_2 的依赖关系. 我们可以不通过变分的方法求出, 根据作用量的定义

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}=L \tag{1.29}$$

将作用量看成坐标和时间的函数, 它的全导数

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial S}{\partial t}+\sum_i\frac{\partial S}{\partial q_i}\dot{q}_i=\frac{\partial S}{\partial t}+\sum_i p_i\dot{q}_i \tag{1.30}$$

根据以上两式, 得到

$$\frac{\partial S}{\partial t}=L-\sum_i p_i\dot{q}_i \tag{1.31}$$

或者

$$\frac{\partial S}{\partial t}=-H \tag{1.32}$$

于是得到作用量的全微分表达式

$$\mathrm{d}S=\sum_i p_i\mathrm{d}q_i-H\mathrm{d}t \tag{1.33}$$

由 $\delta S=0$, 可以得到

$$\delta S=\int\delta p\left(\mathrm{d}q-\frac{\partial H}{\partial p}\mathrm{d}t\right)-\int\delta q\left(\mathrm{d}p+\frac{\partial H}{\partial q}\mathrm{d}t\right) \tag{1.34}$$

于是得到哈密顿正则运动方程.

1.5 莫培督原理

力学系统的运动可以完全由最小作用量原理[1]确定, 如果只需确定运动的轨道而不涉及能量, 则可以建立更简单的最小作用量原理.

假设哈密顿量不显含时间, 则系统的能量守恒

$$H(p,q)=E=\mathrm{const} \tag{1.35}$$

[1] 又称哈密顿原理

坐标的初值和种植保持不变, 对末态时间变分

$$\delta S = -H\delta t = -E\delta t \tag{1.36}$$

作用量为

$$S = \int \sum_i p_i \mathrm{d}q_i - E(t - t_0) \tag{1.37}$$

其中

$$S_0 = \int \sum_i p_i \mathrm{d}q_i \tag{1.38}$$

称为简约作用量[2], 将1.37代入1.36, 得到

$$\delta S_0 = 0 \tag{1.39}$$

即

$$\delta \int \sum_i p_i(q; E)\mathrm{d}q_i = 0 \tag{1.40}$$

这称为**莫培督原理**

拉格朗日量写成

$$L = \frac{1}{2}\sum_{i,k} a_{ik}(q)\dot{q}_i\dot{q}_k - U(q) \tag{1.41}$$

广义动量为

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \sum_k a_{ik}(q)\dot{q}_k \tag{1.42}$$

能量为

$$E = \frac{1}{2}\sum_{i,k} a_{ik}(q)\dot{q}_i\dot{q}_k + U(q) \tag{1.43}$$

由上式得到

$$\mathrm{d}t = \sqrt{\frac{\sum a_{ik}\mathrm{d}q_i\mathrm{d}q_k}{2(E-U)}} \tag{1.44}$$

那么简约作用量

$$S_0 = \int \sum_{i,k} a_{ik}\frac{\mathrm{d}q_k}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}q_i = \int \sqrt{2(E-U)\sum\nolimits_{i,k} a_{ik}\mathrm{d}q_i\mathrm{d}q_k} \tag{1.45}$$

对于一个质点

$$\sum_{i,k} a_{ik}\mathrm{d}q_i\mathrm{d}q_k = \mathrm{d}l \tag{1.46}$$

其莫培督原理为

$$\delta \int \sqrt{2m(E-U)}\mathrm{d}l = 0 \tag{1.47}$$

按照上面操作写出的作用量 $S = S(E, t)$, 对其变分

$$\delta S = \frac{\partial S_0}{\partial E} - (t - t_0)\delta E - E\delta t \tag{1.48}$$

[2]有些文献中 S 称为哈密顿主函数,S_0 称为哈密顿特征函数

由1.36, 得到

$$\frac{\partial S_0}{\partial E} = \int \sqrt{\frac{\sum_{i,k} a_{ik} \mathrm{d}q_i \mathrm{d}q_k}{2(E-U)}} = t - t_0 \tag{1.49}$$

这与轨道方程1.47一起确定系统的运动.

2 正则变换 哈密顿——雅可比方程

2.1 泊松括号

2.1.1 泊松括号

两个函数 u, v 在一组正则坐标 q_j, p_j 下的泊松括号为

$$\{u, v\}_{q,p} = \sum_j \left(\frac{\partial u}{\partial q}\frac{\partial v}{\partial p} - \frac{\partial u}{\partial p}\frac{\partial v}{\partial q}\right) \tag{2.1}$$

有基本对易关系

$$\{q_j, q_k\}_{q,p} = 0, \quad \{p_j, p_k\}_{q,p} = 0, \quad \{q_j, p_k\}_{q,p} = \delta_{jk} \tag{2.2}$$

泊松括号是双线性斜对称函数, 具有以下性质

1. 自反性

$$\{u, u\} = 0 \tag{2.3}$$

2. 斜对称

$$\{u, v\} = -\{v, u\} \tag{2.4}$$

3. 线性

$$\{au + bv, w\} = a\{u, w\} + b\{v, w\} \tag{2.5}$$

4. 乘法公式

$$\{uv, w\} = u\{v, w\} + \{u, w\}v \tag{2.6}$$

$$\{u, vw\} = v\{u, w\} + \{u, v\}w \tag{2.7}$$

5. 雅可比恒等式

$$\{u, \{v, w\}\} + \{v, \{w, u\}\} + \{w, \{u, v\}\} \tag{2.8}$$

在这里 u, v 都是广义坐标和广义动量的函数, 即

$$u = u(q_j, p_j), \quad v = v(q_j, p_j) \tag{2.9}$$

2.1.2 泊松括号在正则变换下的行为

我们也可以采用另一组变量 (Q_j, P_j) 作为泊松括号的底, 它们是 (q_k, p_k) 的**正则变换**, 即

$$Q_j = Q_j(q_k, p_k), \quad P_j(q_k, p_k) \tag{2.10}$$

或

$$q_j = q_j(Q_k, P_k), \quad p_j = p_j(Q_k, P_k) \tag{2.11}$$

定义一个列矢量 $\boldsymbol{\eta}$,n 为系统自由度的数目

$$\eta_j = q_j, \quad \eta_{j+n} = p_j \quad (j = 1, \cdots, n) \tag{2.12}$$

哈密顿量在 $\boldsymbol{\eta}$ 下的梯度为

$$\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)_j = \frac{\partial H}{\partial q_j}, \quad \left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)_{j+n} = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad (j = 1, \cdots, n) \tag{2.13}$$

$2n \times 2n$ 的辛矩阵为

$$\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{n\times n} & \mathbf{1}_{n\times n} \\ -\mathbf{1}_{n\times n} & \mathbf{0}_{n\times n} \end{pmatrix} \tag{2.14}$$

则正则运动方程为

$$\dot{\eta} = \boldsymbol{J}\frac{\partial H}{\partial \eta} \tag{2.15}$$

泊松括号可以写成

$$\{u, v\}_\eta = \left(\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)^T \boldsymbol{J}\frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\eta}} \tag{2.16}$$

基本对易关系为

$$\{\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}\}_\eta = \boldsymbol{J} \tag{2.17}$$

我们同样引入一个列向量表示另一组广义坐标和其共轭的广义动量 (Q, P), 即

$$\xi_j = Q_j, \quad \xi_{j+n} = P_j \tag{2.18}$$

将 (Q, P) 看作 (q, p) 的函数

$$\dot{\xi} = \boldsymbol{M}\dot{\eta} \tag{2.19}$$

其中 M 是两组变量的雅可比式

$$M_{jk} = \frac{\partial \xi_j}{\partial \eta_k} \tag{2.20}$$

哈密顿量的偏导数按如下变换

$$\frac{\partial H}{\partial \eta_j} = \frac{\partial H}{\partial \xi_k}\frac{\partial \xi_k}{\partial \eta_j} \tag{2.21}$$

即

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{M}^T\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\xi}} \tag{2.22}$$

根据2.19, 得到

$$\dot{\xi} = \boldsymbol{M}\dot{\eta} = \boldsymbol{M}\boldsymbol{J}\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{M}\boldsymbol{J}\boldsymbol{M}^T\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\xi}} \tag{2.23}$$

若 (Q,P) 也是正则变量, 那么 (Q,P) 也应当满足正则运动方程, 有

$$\dot{\xi} = \boldsymbol{J}\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\xi}} \tag{2.24}$$

与2.23对比, 得到

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{J}\boldsymbol{M}^T = \boldsymbol{J} \tag{2.25}$$

这就是正则变换需要满足的条件.

新变量在旧变量下的泊松括号为

$$\{\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\xi}\}_\eta = \left(\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)^T \boldsymbol{J}\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{M}\boldsymbol{J}\boldsymbol{M}^T = \boldsymbol{J} \tag{2.26}$$

按定义, 新变量在新变量下的泊松括号为

$$\{\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\xi}\}_\xi = \boldsymbol{J} \tag{2.27}$$

基本对易关系在正则变换下保持不变, 下面我们考察任意函数的泊松括号

$$\{u,v\}_\xi = \left(\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right)^T \boldsymbol{J}\left(\frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right) = \left(\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)^T \boldsymbol{M}\boldsymbol{J}\boldsymbol{M}^T\left(\frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right) = \left(\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)^T \boldsymbol{J}\left(\frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right) = \{u,v\}_\eta \tag{2.28}$$

上面式子表明, 所有的泊松括号在正则变换下保持不变, 即具有**正则不变性**. 这让我们写泊松括号时不用再写出它的角标

$$\{u,v\} \equiv \{u,v\}_\eta = \{u,v\}_\xi \tag{2.29}$$

2.1.3 泊松括号的运动方程

由于泊松括号具有正则不变性, 用泊松括号写出的运动方程与所用的广义坐标和广义动量无关. 下面我们导出泊松括号的运动方程, 函数 u 对时间的全导数

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} &= \sum_j\left(\frac{\partial u}{\partial q_j}\dot{q}_j + \frac{\partial u}{\partial p_j}\dot{p}_j\right) + \frac{\partial u}{\partial t} \\ &= \sum_j\left(\frac{\partial u}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial u}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j}\right) + \frac{\partial u}{\partial t}\end{aligned} \tag{2.30}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \{u,H\} + \frac{\partial u}{\partial t} \tag{2.31}$$

这方程的确独立于所采用的广义坐标, 正则运动方程作为该方程的特例

$$\dot{q}_j = \{q_j,H\} \tag{2.32}$$

$$\dot{p}_j = \{p_j,H\} \tag{2.33}$$

用我们在前面引入的列向量

$$\dot{\eta} = \{\boldsymbol{\eta},H\} \tag{2.34}$$

考虑哈密顿量的全导数

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \{H,H\} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \tag{2.35}$$

若哈密顿量不显含时间, 则哈密顿量守恒, 这是我们已经知道的结果.

若 u 是运动积分, 即 $u = \text{const}$, 那么

$$\{u, H\} + \frac{\partial u}{\partial t} = 0 \tag{2.36}$$

若不显含时间

$$\{H, u\} = 0 \tag{2.37}$$

2.1.4 用泊松括号构造运动积分 泊松定理

设有两个运动积分 φ 和 ψ, 满足

$$\{\varphi, H\} = -\frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad \{\psi, H\} = -\frac{\partial \psi}{\partial t} \tag{2.38}$$

用雅可比恒等式

$$\{\varphi, \{\psi, H\}\} + \{\psi, \{H, \varphi\}\} + \{H, \{\varphi, \psi\}\} \tag{2.39}$$

以2.38代入

$$\{\{\varphi, \psi\}, H\} + \frac{\partial}{\partial t}\{\varphi, \psi\} = 0 \tag{2.40}$$

由此可知 $\{\varphi, \psi\}$ 也是运动积分, 这就是**泊松定理**.

例如根据角动量的基本对易关系

$$\{L_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} L_k \tag{2.41}$$

若角动量的两个分量是运动积分, 则另一个分量也是运动积分. 动量和角动量的泊松括号也可以给出运动积分

$$\{p_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} L_k \tag{2.42}$$

2.2 正则变换

2.2.1 正则变换的判断

前面已经提到 $(q, p) \to (Q, P)$ 并且满足正则运动方程形式不变的变换称为**正则变换**, 我们给出正则变换的判定条件为[3]

$$\boldsymbol{M J M}^T = \boldsymbol{J} \quad \text{或} \quad \{\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}\}_\eta = \boldsymbol{J} \tag{2.43}$$

2.2.2 从哈密顿原理形式不变性到正则变换

一个广义的变换我们写作

$$Q_j = Q_j(q_k, p_k, t), \quad P_j = P_j(q_k, p_k, t) \tag{2.44}$$

若该变换是正则变换, 正则运动方程也成立, 我们要求存在一个函数 $K(Q_k, P_k, t)$ 使得

$$\dot{Q}_k = \frac{\partial K}{\partial P_k}, \quad \dot{P}_k = -\frac{\partial K}{\partial Q_k} \tag{2.45}$$

[3]这一节我们讨论的正则变换可以是含时的, 而上一节讨论的正则变换是不含时的, 值得一提的是, 在含时的情况下, 泊松括号仍具有正则不变性.

这个函数 $K(Q_k, P_k, t)$ 就是 (Q, P) 的哈密顿量，正则运动方程可以由哈密顿原理导出，对于新旧变量应当都满足哈密顿原理

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_k p_k \dot{q}_k - H(q, p, t) \right] \mathrm{d}t = 0 \tag{2.46}$$

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_k P_k \dot{Q}_k - K(Q, P, t) \right] \mathrm{d}t = 0 \tag{2.47}$$

积分号内相差一个时间的全导数项，即

$$\sum_k p_k \dot{q}_k - H(q, p, t) = \sum_k P_k \dot{Q}_k - K(Q, P, t) + \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} \tag{2.48}$$

F 称为正则变换的**母函数**，每个正则变换均由该函数表征.

将2.48写成

$$\mathrm{d}F = \sum_k p_k \mathrm{d}q_k - \sum_k P_k \mathrm{d}Q_k + (K - H)\mathrm{d}t \tag{2.49}$$

这里 $F = F_1(q, Q, t)$

$$p_k = \frac{\partial F_1}{\partial q_k}, \quad P_k = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_k}, \quad K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t} \tag{2.50}$$

进行适当的勒让德变换，可以得到另外三种形式的母函数.

以 q, P 为变量的母函数，记 $F_2(q, P, t) = F + \sum_k P_k \dot{Q}_k$

$$\mathrm{d}(F + \sum_k P_k \dot{Q}_k) = \sum_k p_k \mathrm{d}q_k + \sum_k Q_k \mathrm{d}P_k + (K - H)\mathrm{d}t \tag{2.51}$$

$$p_k = \frac{\partial F_2}{\partial q_k} \quad Q_k = \frac{\partial F_2}{\partial P_k}, \quad K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \tag{2.52}$$

以 p, Q 为变量的母函数，记 $F_3(p, Q, t) = F - \sum_k p_k \dot{q}_k$

$$\mathrm{d}(F - \sum_k p_k \dot{q}_k) = -\sum_k q_k \mathrm{d}p_k - \sum_k P_k \mathrm{d}Q_k + (K - H)\mathrm{d}t \tag{2.53}$$

$$q_k = -\frac{\partial F_3}{\partial p_k}, \quad Q_k = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_k}, \quad K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t} \tag{2.54}$$

以 p, P 为变量的母函数，记 $F_4(p, P, t) = F - \sum_k p_k \dot{q}_k + \sum_k P_k \dot{Q}_k$

$$\mathrm{d}(F - \sum_k p_k \dot{q}_k + \sum_k P_k \dot{Q}_k) = -\sum_k q_k \mathrm{d}p_k + \sum_k Q_k \mathrm{d}P_k + (K - H)\mathrm{d}t \tag{2.55}$$

$$q_k = -\frac{\partial F_4}{\partial p_k}, \quad Q_k = \frac{\partial F_4}{\partial P_k}, \quad K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t} \tag{2.56}$$

2.50,2.52,2.54,2.56隐式给出了 (Q, P) 与 (q, p) 的关系，由此可以解出 $Q(q, p), P(q, p)$.

2.2.3 关于正则变换的一些说明

文献中存在对正则变换的两种不同的定义. 其中一个定义是, 对一个不显含时间的系统, 其哈密顿量为 $H(q,p)$,(q,p) 满足正则方程, 如果某个不依赖与时间的坐标和动量的变换 $Q=Q(q,p), P=P(q,p)$ 不改变正则方程的形式, 即存在一个新的哈密顿量 $K(Q,P)$ 使 (Q,P) 满足正则方程. 那么这样的变换就被定义为正则变换.

另一种定义是要求变换保持任意两个力学量之间的泊松括号, 即对任意的两个力学量 u,v

$$\{u,v\}_{Q,P}=\{u,v\}_{q,p} \tag{2.57}$$

这两种定义实际上第一种更宽松一些, 第二种严格一些, 例如标度变换

$$Q_i=q_i, \quad P_i=\lambda p_i \tag{2.58}$$

这个变换符合第一个定义的要求, 新的哈密顿量为 $K=\lambda H$, 按照第一个定义, 这是一个正则变换, 但是这个变换并没有保持基本泊松括号不变, 所以不符合第二个定义, 除非 $\lambda=1$, 这是唯一的可能. 对于不显含时间的问题, 如果我们要求新的哈密顿量与旧的一致, 那么第一类变换就只有 $\lambda=1$ 的可能性了. 这也是我们在2.24中将 (Q,P) 的哈密顿量取为 H 的原因.

2.3 哈密顿——雅可比方程

2.3.1 哈密顿主函数

我们希望变换后的哈密顿函数 $K(Q,P,t)$ 恒等于零, 因为在这种情况下正则方程为

$$\dot{P}_k=-\frac{\partial K}{\partial Q_k}=0, \quad \dot{Q}_k=\frac{\partial K}{\partial P_k}=0 \tag{2.59}$$

这保证所有正则变量都是常数.

按照2.50,2.52,2.54,2.56,$K=0$ 可以表示为

$$H(q,p,t)+\frac{\partial F}{\partial t}=0 \tag{2.60}$$

取 $F_2(q,P,t)$ 形式的母函数, 那么有

$$p_k=\frac{\partial F_2}{\partial q_k} \tag{2.61}$$

将上式代入2.60, 得到

$$H(q_1,q_2,\cdots,q_s,\frac{\partial F_2}{\partial q_1},\frac{\partial F_2}{\partial q_2},\cdots,\frac{\partial F_2}{\partial q_s},t)+\frac{\partial F_2}{\partial t}=0 \tag{2.62}$$

这是决定母函数 $F_2(q,P,t)$ 的一阶非线性偏微分方程, 即**哈密顿——雅可比方程**.

哈密顿——雅可比方程的解叫做**哈密顿主函数**, 记作 $S(q,P,t)$. 解得哈密顿主函数后,2.52给出正则变换公式. 变换后的正则变量全是常数, 进行逆变换, 回到原来的正则变量, 问题就宣告解决.

哈密顿——雅可比方程是 $s+1$ 个变量 $(q_1,q_2,\cdots,q_s,t)$ 的偏微分方程, 这方程的解应当含有 $s+1$ 个积分常数,S 可以加上任意常数仍是方程的解. 故 S 有 s 个积分常数 $C_1,C_2,\cdots,C_s$ 不以相加的形式出现.S 是 (q,P,t) 的函数,$P_1,P_2,\cdots,P_s$ 可以任意选取, 只要是常数. 选取 s 个积分常数为 $P_1,P_2,\cdots,P_s$.

哈密顿主函数 S 的时间变化率为

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \sum_k \frac{\partial S}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial S}{\partial t} \tag{2.63}$$

由2.52

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \sum_k p_k\dot{q}_k - H = L \tag{2.64}$$

可见 S 就是作用量函数, 这也就验证了将 F_3 写成 S 的合理性.

于是用哈密顿——雅可比方程2.62求解问题的步骤如下

1. 将哈密顿量 $H(q,p,t)$ 中的 p_k 改写为 $\frac{\partial S}{\partial q_k}$, 写出哈密顿——雅可比方程.

2. 解出哈密顿主函数 $S(q,C,t)$, 含有 s 个非相加常数.

3. 将积分常数 C_k 作为变换后的广义动量 P_k, 用 S 作为变换的母函数, 变换后的正则变量都是常数.

4. 按照变换公式2.52得到原来正则变量的运动方程.

2.3.2 哈密顿特征函数

若哈密顿函数不显含时间, 这时哈密顿——雅可比方程中的空间变量 $q_1, q_2, \cdots, q_s$ 与时间变量 t 可以分离.

令

$$S(q,P,t) = W(q,P) - Et \tag{2.65}$$

代入哈密顿——雅可比方程2.62, 得到

$$H(q_1,q_2,\cdots,q_s,\frac{\partial W}{\partial q_1},\frac{\partial W}{\partial q_2},\cdots,\frac{\partial W}{\partial q_s}) = E \tag{2.66}$$

方程2.66是 $W(q,P)$ 的一阶非线性偏微分方程, 也叫做**哈密顿——雅可比方程**, 它的解 $W(q,P)$ 叫做**哈密顿特征函数**, 也叫做**简约作用量**. 除了 E 以外, 哈密顿特征函数还有 $s-1$ 个非相加常数, 不妨把 E 算作 C_1. 用 $W(q,P)$ 作为正则变换的母函数, 其中积分常数 $E, C_2, \cdots, C_s$ 作为变换后的广义动量, 则变换后的哈密顿函数

$$K = H + \frac{\partial W}{\partial t} = H = E \tag{2.67}$$

这样, 变换后的广义坐标都是可遗坐标, 易解.

用哈密顿——雅可比方程2.66求解问题的步骤如下.

1. 将哈密顿量 $H(q,p)$ 中的 p_k 分别改写为 $\partial W/\partial q_k$, 按2.66写出哈密顿——雅可比方程.

2. 解出哈密顿特征函数 $W(q_1,q_2,\cdots,q_s,E,C_2,\cdots,C_s)$, 它含有 s 个非相加的积分常数.

3. 用 W 作为正则变换的母函数, 其中积分常数 $E, C_2, \cdots, C_s$ 是变换后的动量, 变换后的哈密顿量为 $K=E$, 所有的坐标 Q_k 都是可以可遗坐标.

4. 按2.52求出变换公式. 回到原来的正则变量.

2.3.3 分离变量

对于多于一个自由度的系统, 一般而言, 求解相关的哈密顿——雅可比方程是很困难的. 某些系统的哈密顿——雅可比方程是可以分离变量的, 这样的系统称为**可分离系统**. 如果所有变量都可以分离, 就是完全可分离系统.

以保守系统为例, 若 H 中某一坐标 (不妨为 q_1) 以及与之对应的偏微商 $\partial W/\partial q_1$ 以某种组合形式出现 $\phi_1(q_1, \partial W/\partial q_1)$, 那么哈密顿——雅可比方程具有以下形式

$$H\big(q_1, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \phi_1(q_1, \frac{\partial W}{\partial q_1})\big) - E = 0 \tag{2.68}$$

将哈密顿特征函数分离变量

$$W = W'(q_k) + W_1(q_1), \quad k \neq 1 \tag{2.69}$$

有

$$H\big(q_k, \frac{\partial W'}{\partial q_k}, \phi_1(q_1, \frac{\mathrm{d}W_1}{\mathrm{d}q_1})\big) - E = 0 \tag{2.70}$$

可以得到

$$\phi_1(q_1, \frac{\mathrm{d}W_1}{\mathrm{d}q_1}) = C_2 \tag{2.71}$$

$$H(q_k, \frac{\partial W'}{\partial q_k}, C_2) - E = 0, \quad k \neq 1 \tag{2.72}$$

这样就完成了对变量 q_1 的分离工作, 类似地可以分离其他变量.

对于完全可分离系统, 哈密顿特征函数具有以下形式

$$W = \sum_k W_k(q_k, E, C_2, \cdots, C_s) \tag{2.73}$$

哈密顿——雅可比方程此时可以分离为 s 个如下形式的方程

$$\varPhi_k(q_k, \frac{\mathrm{d}W_k}{\mathrm{d}q_k}, E, C_2, \cdots, C_s) = 0, \quad k = 1, 2, \cdots, s \tag{2.74}$$

这些方程通常可以积分求解, 由此可以得到哈密顿特征函数.

当 q_k 是可遗坐标时, 有

$$W_k(q_k) = C'_k q_k \tag{2.75}$$

其中 C'_k 是与可遗坐标共轭的广义动量,$p_k = \partial W/\partial q_k = C'_k$.

如果系统的哈密顿量是 s 个独立部分的和, 即

$$H(q_1, \cdots, q_s, p_1, \cdots, p_s) = \sum_k H_k(q_k, p_k) \tag{2.76}$$

则该系统是完全可分离的.

3 作用量与角变量

3.1 微分流形

一个集合 M 若有有限多或可数多个**区图**而其每点均可以至少在一个区图中表示, 就说 M 上有一个**微分流形**构造.

区图就是欧式坐标空间 $\boldsymbol{q}=(q_1,q_2,\cdots,q_n)$ 中的开集 U 以及由 U 到 M 的某个子集上的一对一映射 $\varphi:U\to\varphi U\subset M$.

若两个区图 U 与 U' 中的点 $\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{p}'$ 在 M 中有相同的像, 则 $\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{p}'$ 各有领域 $V\subset U$ 与 $V'\subset U'$, 它们在 M 中也有相同的像. 这样就得到了一个由区图 U 的一部分 $V\subset U$ 到另一区图的一部分 $V'\subset U'$ 的映射 $\varphi'^{-1}\varphi:V\to V'$

这是由欧式空间 $\boldsymbol{q}$ 中的区域 V 到欧式空间 $\boldsymbol{q}'$ 中的区域 V' 上的映射, 而由 n 个 n 元函数给出:$\boldsymbol{q}'=\boldsymbol{q}'(\boldsymbol{q}),(\boldsymbol{q}=\boldsymbol{q}(\boldsymbol{q}'))$. 若 $\boldsymbol{q}'(\boldsymbol{q})$ 和 $\boldsymbol{q}(\boldsymbol{q}')$ 都可微, 就说它们是**等价**的.

图册就是相容区图的并. 若两个图册之并仍为图册, 就说明它们是等价的.

微分流形就是等价图册的类.n 是流形的**维数**.

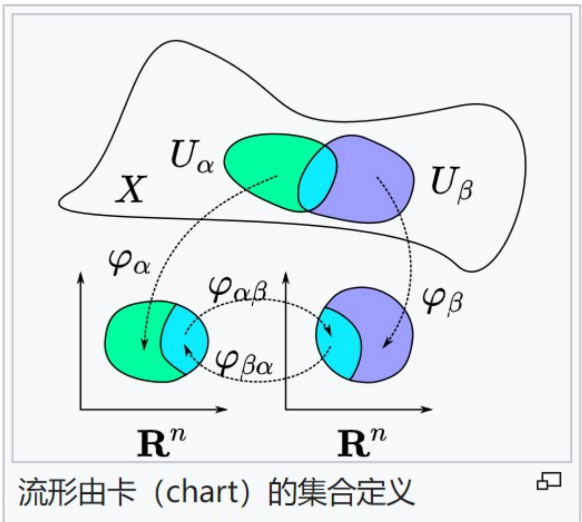

图 3: 微分流形

1. 欧式空间 $\mathbb{R}^n$ 是一个流形, 图册仅有一个区图构成.

2. 考虑一个平面摆. 其构形空间——圆周 S^1 是一个流形. 一个常用的图册是角坐标 $\varphi:\mathbb{R}^1\to S^1$.

3. “球面” 数学摆的构型空间是二维球面 S^2.

4. “平面双摆” 的构型空间是两个圆周的直积, 即二维环面

$$T^2=S^1\times S^1$$

5. “球面双摆” 的构形空间是两个球面的直积 $S^2\times S^2$.

图 4: 平面摆、球面摆与平面双摆

3.2 一个自由度系统的作用量——角变量

周期性的运动在物理学中具有特殊的重要性. 在研究周期性的运动的时候, 我们有时只关注运动的频率, 而不关注轨道的细节. 哈密顿——雅可比方程给出了这种方法. 在这方法中, 并不是将哈密顿——雅可比方程的解函数中直接出现的积分常数 C_i 选为新动量. 而是用一组适当定义的常数 J_i, 叫作**作用量**.

简单起见, 我们先考虑只有一个自由度的系统. 设系统是保守的, 则哈密顿量可以写成

$$H(q,p) = E \tag{3.1}$$

解出动量

$$p = p(q,E) \tag{3.2}$$

此式可以看作是哈密顿量取常数值 E 时系统点在相空间 (q,p) 的轨道方程. 可以区分出两种类型的周期运动

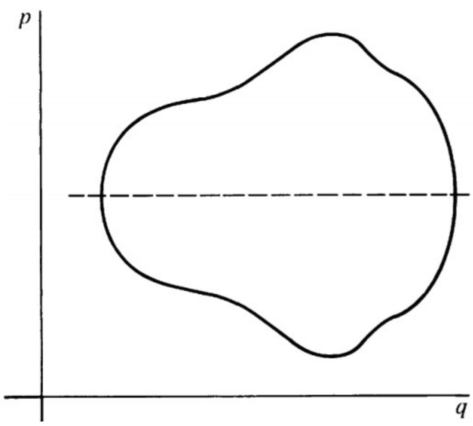

图 5: 天平动 (Libration)

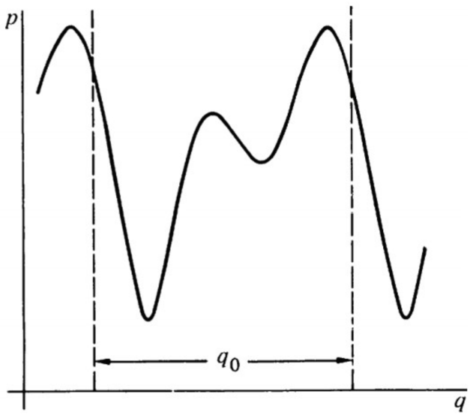

图 6: 转动 (Rotation)

1. 天平动 (Libration), 第一种类型的轨道是**闭合的**, 系统在相空间周期重复它原先经过的各点.q,p 都是时间的周期函数, 具有相同的频率. 在势阱中运动的粒子, 初始位置处于动能的两个零点之间时, 就能得到这种性质的周期运动.

2. 转动 (Rotation), 相空间的轨道使得 p 是 q 的周期函数, 其周期是 q_0,q 每增加 q_0 时系统的位形保持不变.

同一个系统在不同的参数下能够进行不同类型的周期运动, 一个典型的例子是单摆. 当系统的能量不足以使摆越过最高点, 运动类型为天平动. 当系统的能量能够使单摆越过最高点, 运动类型为转动.

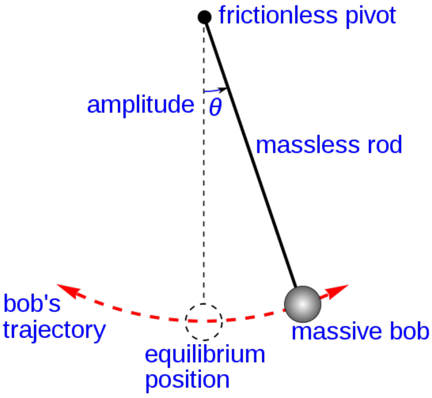

图 7: 单摆

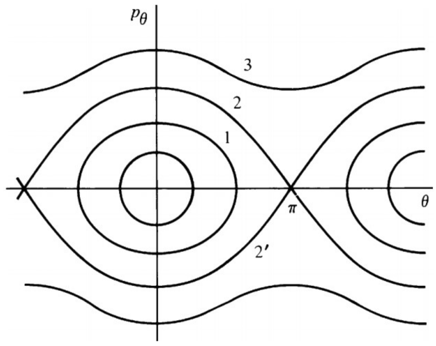

图 8: 不同能量下单摆的相轨道

不论哪种类型的周期运动, 我们都能引入一个新的变量 I 来替代 E 作为变换后的动量.I 的定义为

$$I(E) = \frac{1}{2\pi}\oint p(q,E)\mathrm{d}q \tag{3.3}$$

积分环路为整个周期, 根据上式可以将哈密顿量的数量写成 I 的函数 $H(I)$. 那么哈密顿特征函数可以写成

$$W = W(q,I) \tag{3.4}$$

由第三类正则变换给出共轭与 I 的广义坐标为

$$w = \frac{\partial W}{\partial I} \tag{3.5}$$

w 具有角度的量纲, 这样定义的广义坐标 w 称为**角变量**. 角变量的运动方程由哈密顿正则方程给出

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H(I)}{\partial I} = \frac{\mathrm{d}H(I)}{\mathrm{d}I} = \omega(I) \tag{3.6}$$

角变量 w 的变化率是常数, 有

$$w = \omega t + w_0 \tag{3.7}$$

考虑 q 经历一个周期时角变量 w 的变化

$$\Delta w = \oint \frac{\partial w}{\partial q}\mathrm{d}q = \oint \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial I}\mathrm{d}q = \frac{\partial}{\partial I}\oint \frac{\partial W}{\partial q}\mathrm{d}q = \frac{\partial}{\partial I}\oint p\mathrm{d}q = \frac{\partial}{\partial I}(2\pi I) = 2\pi \tag{3.8}$$

3.8表明,q 经历一个周期是, 角变量变化 2π. 按3.6定义的 $\mathrm{d}H(I)/\mathrm{d}I = \omega(I)$ 即为运动的角频率. 因此, 作用量——角变量方法提供了一种有效的技巧: 不必求出系统运动的完全解就能得到周期运动的频率.

例题 3.1 一质量为 m 的质点在势能 $V(x)=F|x|$(F 是一正直常量) 作用下做一维运动, 利用作用量——角变量把运动周期表达成能量的函数.

解:

$$H=\frac{1}{2m}p^2+F|x| \tag{3.9}$$

质点的运动范围为 $[\frac{-E}{F},\frac{E}{F}]$($E$ 为总能量), 则作用量为

$$\begin{aligned} I&=\frac{1}{2\pi}\oint p\mathrm{d}x=\frac{1}{2\pi}2\int_{-\frac{E}{F}}^{\frac{E}{F}}\sqrt{2m(E-V)}\mathrm{d}x\\ &=\frac{4}{2\pi}\int_0^{\frac{E}{F}}\sqrt{2m(E-Fx)}\mathrm{d}x\\ &=\frac{4\sqrt{2m}}{3\pi F}E^{3/2} \end{aligned} \tag{3.10}$$

$$H(I)=E=\left(\frac{3\pi FI}{4\sqrt{2m}}\right)^{2/3} \tag{3.11}$$

则角频率

$$\begin{aligned} \omega&=\frac{\partial H(I)}{\partial I}=\left(\frac{3\pi F}{4\sqrt{2m}}\right)^{2/3}\cdot\frac{2}{3}I^{-1/3}\\ &=\left(\frac{3\pi F}{4\sqrt{2m}}\right)^{2/3}\cdot\frac{2}{3}\left(\frac{4\sqrt{2m}}{3\pi F}E^{3/2}\right)^{-1/3}\\ &=\frac{\pi F}{2\sqrt{2mE}} \end{aligned} \tag{3.12}$$

运动的周期为

$$T=\frac{2\pi}{\omega}=\frac{4\sqrt{2mE}}{F} \tag{3.13}$$

如果要求出运动方程, 我们先写出哈密顿——雅可比方程

$$\frac{1}{2m}\big(\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}x}\big)^2+F|x|=E \tag{3.14}$$

哈密顿特征函数为

$$W(x,E)=\int\sqrt{2m(E-F|x|)}\mathrm{d}x \tag{3.15}$$

用作用量表示

$$W(x,I)=\int\sqrt{2m\left[\big(\frac{3\pi FI}{4\sqrt{2m}}\big)^{2/3}-F|x|\right]}\mathrm{d}x \tag{3.16}$$

由正则变换给出

$$\begin{aligned} \omega t+w_0=w=\frac{\partial W}{\partial I}&=\frac{\partial}{\partial I}\int\sqrt{2m\left[\big(\frac{3\pi FI}{4\sqrt{2m}}\big)^{2/3}-F|x|\right]}\mathrm{d}x\\ &=\int\frac{2}{3}\frac{m\alpha I^{-1/3}}{\sqrt{2m(\alpha I^{2/3}-F|x|)}}\mathrm{d}x\qquad \alpha=\left(\frac{3\pi F}{4\sqrt{2m}}\right)^{2/3},\quad \omega=\frac{2}{3}\alpha I^{-1/3}\\ &=\omega\int\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{\frac{2}{m}(E-F|x|)}} \end{aligned} \tag{3.17}$$

3.3 完全可分离系统的作用量——角变量

只要哈密顿——雅可比方程中有一组或多组以上的坐标是可分离的, 就可以引入作用量——角变量. 考虑保守系统的哈密顿特征函数, 完全可分离意味着

$$W(q, C_1, C_2, \cdots, C_s) = \sum_i W_i(q_i, C_1, C_2, \cdots, C_n) \tag{3.18}$$

$$p_i = \frac{\partial W_i(q_i, C_1, C_2, \cdots, C_n)}{\partial q_i} = p_i(q_i, C_1, C_2, \cdots, C_n) \tag{3.19}$$

3.19是系统点的相轨道在 (q_i, p_i) 平面的投影, 当相轨道在每一组 (q_i, p_i) 平面的投影都是闭合轨道时, 就能定义该系统的作用量——角变量.

作用量 I_i 定义为 (q_i, p_i) 平面内相轨道的面积除以 2π

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint p_i \mathrm{d}q_i \tag{3.20}$$

根据正则变换式,3.20也能写成

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint \frac{\partial W_i(q_i, C_1, C_2, \cdots, C_s)}{\partial q_i} \mathrm{d}q_i, \quad i = 1, 2, \cdots, s \tag{3.21}$$

将 s 个作用量选为变换后的动量, 哈密顿特征函数也可以写成作用量的函数

$$W = W(q_1, q_2, \cdots, q_s, I_1, I_2, \cdots, I_s) \tag{3.22}$$

$$= \sum_i W_i(q_i, I_1, I_2, \cdots, I_s) \tag{3.23}$$

哈密顿量是哈密顿——雅可比方程中出现的常数 C_1, 也可以写成 I_i 的函数

$$H = H(I_1, I_2, \cdots, I_s) \tag{3.24}$$

按照第三类母函数的正则变换式定义与 I_i 共轭的角变量 w_i

$$w_i = \frac{\partial W}{\partial I_i} = \sum_{j=1}^{s} \frac{\partial W_j(q_j; I_1, I_2, \cdots, I_s)}{\partial I_i} \tag{3.25}$$

角变量 w_i 满足哈密顿正则方程

$$\frac{\mathrm{d}w_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H(I_1, I_2, \cdots, I_s)}{\partial I_i} = \omega_i(I_1, I_2, \cdots, I_s) \tag{3.26}$$

角变量 w_i 的变化率 ω_i 是作用量的函数, 是常数, 则角变量随时间均匀增加

$$w_i = \omega_i t + w_{0i} \tag{3.27}$$

现在我们需要对周期运动作一些解释, 多自由度运动的性质使得即使某些 (q_i, p_i) 的组合是周期函数, 总的系统运动也不一定是周期的. 例如对于三维谐振子, 沿着三个笛卡尔轴的频率可以不相等, 在这种情况下, 质点的运动可能不是周期的. 一个多自由度的系统, 对于时间的周期性只出现在各个频率之比都是**有理数**的情形下, 这时, 我们称系统的各个频率 ω_i 是**公度**的. 反之, 我们则称他们为**非**

共度的, 这种运动称为**多重周期**的, 相轨道是不闭合的李萨如图. 特别地, 当各个频率之比都不是有理数, 相轨道将遍历有限区域的每一个点, 这可以用**庞加莱回归定理**证明[4].

按3.26式确定的角频率 ω_i 即多重周期运动的角频率, 现在证明这种关系. 我们想知道广义坐标 q 以何种方式依赖于角变量 w, 为此, 我们先考虑每个 q_j 经历 m_j(整数) 周天平动或转动时角变量 w_i 的变化. 注意, 我们考虑的并不是随时间演化的真实运动, 而是虚位移. 某一个角变量 w_i 的无限小变化

$$\delta w_i = \sum_j \frac{\partial w_i}{\partial q_j}\mathrm{d}q_j = \sum_j \frac{\partial^2 W}{\partial I_i \partial q_j}\mathrm{d}q_j = \frac{\partial}{\partial I_i}\sum_j p_j(q_j, I)\mathrm{d}q_j \tag{3.28}$$

在刚刚所描述的虚位移下,w_i 的变化

$$\delta w_i = 2\pi\frac{\partial}{\partial I_i}\sum_j \oint_{m_j}\frac{1}{2\pi}p_j(q_j, I)\mathrm{d}q_j = 2\pi\frac{\partial}{\partial I_i}\sum_j (m_j I_j) = 2\pi m_i \tag{3.29}$$

写成矢量的形式

$$\Delta\boldsymbol{w} = \boldsymbol{m}, \quad \boldsymbol{w} = (w_1, w_2, \cdots, w_s)^T, \quad \boldsymbol{m} = (m_1, m_2, \cdots, m_s)^T \tag{3.30}$$

对于天平动类型的运动, 各个 q_i 与 p_i 在完成一整周运动时回到他们的初始值.3.26所描述的结果为:$\boldsymbol{\eta} = (q_1, q_2, \cdots, q_s, p_1, p_2, \cdots, p_s)^T$ 是 $\boldsymbol{w}$ 的一个函数, 这函数使得当 $\boldsymbol{w}$ 的变化量为 $\Delta\boldsymbol{w} = 2\pi\boldsymbol{m}$ 时,$\boldsymbol{\eta}$ 的变化量为 $\Delta\boldsymbol{\eta} = 0$. 则 $\boldsymbol{\eta}$ 的分量是各个 w_i 的周期函数, 周期为 2π. 可以用 $\boldsymbol{w}$ 将 η 傅里叶展开, 例如 q_k

$$q_k = \sum_{j_1=-\infty}^{\infty}\sum_{j_2=-\infty}^{\infty}\cdots\sum_{j_s=-\infty}^{\infty} a^{(k)}_{j_1 j_2\cdots j_s}\mathrm{e}^{i(j_1 w_1 + j_2 w_2 + \cdots + j_s w_s)} \tag{3.31}$$

或者写为更紧凑的形式

$$q_k = \sum_{\boldsymbol{j}} a^{(k)}_{\boldsymbol{j}}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{w}} \tag{3.32}$$

角变量与时间的关系

$$\boldsymbol{w} = \boldsymbol{\omega}t + \boldsymbol{w}_0 \tag{3.33}$$

那么

$$q_k(t) = \sum_{\boldsymbol{j}} a^{(k)}_{\boldsymbol{j}}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{j}\cdot(\boldsymbol{\omega}t + \boldsymbol{w}_0)} \tag{3.34}$$

由此式可以看出,$q_k(t)$ 一般不是 t 的周期函数, 除非各种 ω_i 是可公度的, 否则,q_k 不会按固定的时间间隔重复数值, 此时为多重周期运动.

从形式上看, 所有频率是可公度的条件是要有 $n-1$ 个形式为

$$\sum_{i=1}^{s} n_i\omega_i = 0, \quad n_i \in \mathbb{N} \tag{3.35}$$

的关系式, 解出这些方程, 能把任何一个 ω_i 表达成任何其他频率的有理分数. 当各基本频率之间只有 m 个这样的关系式时, 这说系统是 $m-$ 重简并的, 当 $m = n-1$ 时, 运动是周期的, 即系统是**完全简并**的, 只要系统点的轨道是闭合的, 运动就是完全简并的.

[4]参见 Arnold V I. Mathematical Methods of Classical Mechanics

3.4 用作用量——角变量描述的开普勒问题

为了揭示解的性质, 我们不用平面运动这一结论而考虑空间运动, 采用球坐标求解, 哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{p_\theta^2}{r^2}+\frac{p_\phi^2}{r^2\sin^2\theta}\right)+V(r) \tag{3.36}$$

则哈密顿——雅可比方程为

$$\left(\frac{\partial W}{\partial r}\right)^2+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial W}{\partial \theta}\right)^2+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial W}{\partial \phi}\right)^2=2m[E-V(r)] \tag{3.37}$$

分离变量, 得到

$$W=W_r(r)+W_\theta(\theta)+W_\phi(\phi) \tag{3.38}$$

$$\begin{cases} W_\phi=\alpha_\phi\phi \\ \left(\dfrac{\mathrm{d}W_\theta}{\mathrm{d}\theta}\right)^2+\dfrac{\alpha_\phi^2}{\sin^2\theta}=\alpha_\theta^2 \\ \left(\dfrac{\mathrm{d}W_r}{\mathrm{d}r}\right)^2+\dfrac{\alpha_\theta^2}{r^2}=2m[E-V(r)] \end{cases} \tag{3.39}$$

对于开普勒问题

$$V(r)=-\frac{k}{r} \tag{3.40}$$

则作用量为

$$\begin{cases} I_\phi=\dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\oint\alpha_\phi\mathrm{d}\phi=\alpha_\phi \\ I_\theta=\dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\oint\sqrt{\alpha_\theta^2-\frac{\alpha_\phi^2}{\sin^2\theta}}\mathrm{d}\theta \\ I_r=\dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\oint\sqrt{2mE+\frac{2mk}{r}-\frac{\alpha_\theta^2}{r^2}}\mathrm{d}r \end{cases} \tag{3.41}$$

用 i 代表总角动量的极角

$$\cos i=\frac{\alpha_\phi}{\alpha_\theta} \tag{3.42}$$

那么有 θ 的作用量

$$I_\theta=\frac{1}{2\pi}\alpha_\theta\oint\sqrt{1-\frac{\cos^2 i}{\sin^2\theta}}\mathrm{d}\theta \tag{3.43}$$

积分的回路是 θ 从极限值 $-\theta_0$ 变到 θ_0 然后再回到 $-\theta_0$ 的路径, 其中 $\theta_0=\pi/2-i$, 则

$$I_\theta=\frac{4\alpha_\theta}{2\pi}\int_0^{\theta_0}\sqrt{1-\frac{\cos^2 i}{\sin^2\theta}}\mathrm{d}\theta \tag{3.44}$$

令

$$\cos\theta=\sin i\sin\psi \tag{3.45}$$

这一积分变为

$$I_\theta=\frac{4\alpha_\theta}{2\pi}\sin^2 i\int_0^{\pi/2}\frac{\cos^2\psi\mathrm{d}\psi}{1-\sin^2 i\sin^2\psi} \tag{3.46}$$

最后, 令

$$u = \tan\psi \tag{3.47}$$

积分成为

$$I_\theta = \frac{4\alpha_\theta}{2\pi}\int_0^\infty \left(\frac{1}{1+u^2} - \frac{\cos^2 i}{1+u^2\cos^2 i}\right)\mathrm{d}u = \alpha_\theta(1-\cos i) = \alpha_\theta - \alpha_\phi \tag{3.48}$$

r 的作用量 I_r 为

$$I_r = \frac{1}{2\pi}\oint\sqrt{2m[E-V(r)] - \frac{(I_\theta + I_\phi)^2}{r^2}}\mathrm{d}r, \quad V(r) = -\frac{k}{r} \tag{3.49}$$

完成这一积分后, 能用这一方程解出以三个作用量 I_ϕ, I_θ, I_r 表示的能量 $H = E(I_\phi, I_\theta, I_r)$. 将会看到,$I_\phi$ 和 I_θ 在 E 中只能以 $I_\theta + I_\phi$ 的组合形式出现, 因此, 相应的频率 ω_ϕ 和 ω_θ 必然相等, 这意味着**有心力产生的任何运动至少是单一简并的**, 这是运动被限制在与角动量 L 垂直平面内的必然结果. 简并的出现可以分为必然和偶然两种, **必然简并**是指有系统的对称性造成的简并. 另一类简并称为偶然简并, 例如势能某些特殊形式造成的简并.

现在我们的任务为计算3.49的积分, 可以用初等函数积分法, 也可以用留数定理积出, 我们直接给出答案

$$I_r = -(I_\theta + I_\phi) + k\sqrt{\frac{m}{-2E}} \tag{3.50}$$

3.50式给出了 H 对作用量变量的函数依存关系, 解出 E, 即得

$$H = E = -\frac{mk^2}{2(I_r + I_\theta + I_\phi)^2} \tag{3.51}$$

由此可以看到,I_θ 和 I_ϕ 确实如料想的那样, 以 $I_\theta + I_\phi$ 这样的组合形式出现. 甚至在这里三个作用量以 $I_r + I_\theta + I_\phi$ 的形式出现, 因此系统的三个频率相等, 运动是**完全简并**的. 这是平方反比有心力的特有性质. 运动角频率为

$$\omega = \frac{\partial H}{\partial I_r} = \frac{\partial H}{\partial I_\theta} = \frac{\partial H}{\partial I_\phi} = \frac{mk^2}{(I_r + I_\theta + I_\phi)^3} = \sqrt{\frac{(-2E)^3}{mk^2}} \tag{3.52}$$

轨道的周期为

$$T = \pi k\sqrt{\frac{m}{-2E^3}} \tag{3.53}$$

3.5 对称性与简并

$$\text{非 Abel 对称性群} \xrightarrow{\text{导致}} \text{能级简并}$$

1. 在有心力束缚运动中, 势能具有空间旋转对称性, 即 SO(3) 对称性. 会导致 I_θ, I_ϕ 的简并. 对于平方反比势能, 存在一个新的运动常数,Runge-Lenz 矢量 $\boldsymbol{R}.\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{L}$ 一起可以构成 SO(4) 的 Lie 代数, 这样的 SO(4) 对称性会导致额外的简并.

2. 量子力学中, 中心势场 $V(r)$ 作用下能量本征态的波函数

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{x}'|n,l,m\rangle = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{3.54}$$

对于一般情况, 简并是 $(2l+1)$ 重的. 在库伦势中, 存在厄米算符

$$\boldsymbol{M}=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon r}\boldsymbol{r},\quad [\boldsymbol{M},H]=0,\quad \boldsymbol{N}=\left(-\frac{m}{2E}\right)^{1/2}\boldsymbol{M} \tag{3.55}$$

它的经典对应量为 Runge-Lenz 矢量,$\boldsymbol{M}$ 与 $\boldsymbol{L}$ 的六个分量构成封闭的 Lie 代数

$$\begin{cases}[L_i,L_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}L_k\\ [N_i,L_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}N_k\\ [N_i,N_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}L_k\end{cases} \tag{3.56}$$

这是四维转动的生成代数, 这个 SO(4) 对称性会导致额外的简并[5].

4 浸渐不变量与哈内角

4.1 浸渐不变量

如果哈密顿函数含有一个随时间变化的参数 λ, 且这个参数随时间的变换非常缓慢, 即

$$\tau\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}\ll\lambda \tag{4.1}$$

如果有某个力学量在这条件下不随时间改变, 这个力学量就称为**浸渐不变量**.

先考虑一个自由度的系统, 哈密顿量为

$$H=H(q,p,\lambda) \tag{4.2}$$

其中 λ 是一个参数, 在这个参数是常数时系统的运动为周期运动. 用作用量——角变量的方法处理, 哈密顿特征函数为 $W(q,I,\lambda)$. 于是有正则变换

$$p=\frac{\partial W}{\partial q},\quad \omega=\frac{\partial W}{\partial I} \tag{4.3}$$

变换后的哈密顿量为

$$K=H+\frac{\partial W}{\partial t}=E(I,\lambda) \tag{4.4}$$

现在让参数 λ 随着时间变化, 相应系统的运动也不再是周期运动, 则正则变换的母函数

$$W=W(q,I,\lambda(t)) \tag{4.5}$$

变换后的哈密顿量为

$$\begin{aligned}K(w,I,\lambda(t))&=E(I,\lambda)+\frac{\partial W}{\partial t}\\&=E(I,\lambda)+\left(\frac{\partial W}{\partial\lambda}\right)_{q,I}\dot{\lambda},\quad \Lambda=\left(\frac{\partial W}{\partial\lambda}\right)_{q,I}\\&=E(I,\lambda)+\Lambda\dot{\lambda}\end{aligned} \tag{4.6}$$

[5] 参见 J.J.Sakurai, 现代量子力学 [M], 世界图书出版社

则哈密顿正则方程为

$$\dot{I} = -\frac{\partial K}{\partial w} = -\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial w}\right)_I \dot{\lambda} \tag{4.7}$$

$$\dot{w} = \frac{\partial K}{\partial I} = \frac{\partial E}{\partial I} + \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial I}\right)_w \dot{\lambda} \tag{4.8}$$

在 q 变化一个周期时,Λ 的变化为

$$\Delta\Lambda = \oint \frac{\partial \Lambda}{\partial q}\mathrm{d}q = \frac{\partial}{\partial \lambda}\oint \frac{\partial W}{\partial q}\mathrm{d}q = \frac{\partial}{\partial \lambda}(2\pi I) = 0 \tag{4.9}$$

Λ 是 q 的周期函数,q 是 w 的周期函数, 因此 Λ 是 w 的周期函数, 在一个周期内 Λ 的变化率的平均值

$$\overline{\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial w}\right)_I} = \int_0^{2\pi}\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial w}\right)_I \mathrm{d}w = 0 \tag{4.10}$$

将4.7对整个周期求平均值

$$\bar{\dot{I}} = -\overline{\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial w}\right)_I \dot{\lambda}} = -\overline{\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial w}\right)_I}\dot{\lambda} = 0 \tag{4.11}$$

这样就证明了作用量 I 是浸渐不变量.

1. 单摆的 E/ω 是浸渐不变量.
2. 绝热过程中 pV^γ 是浸渐不变量.
3. 磁场中运动的粒子磁矩 μ 是浸渐不变量.

4.2 经典力学的几何相——哈内角