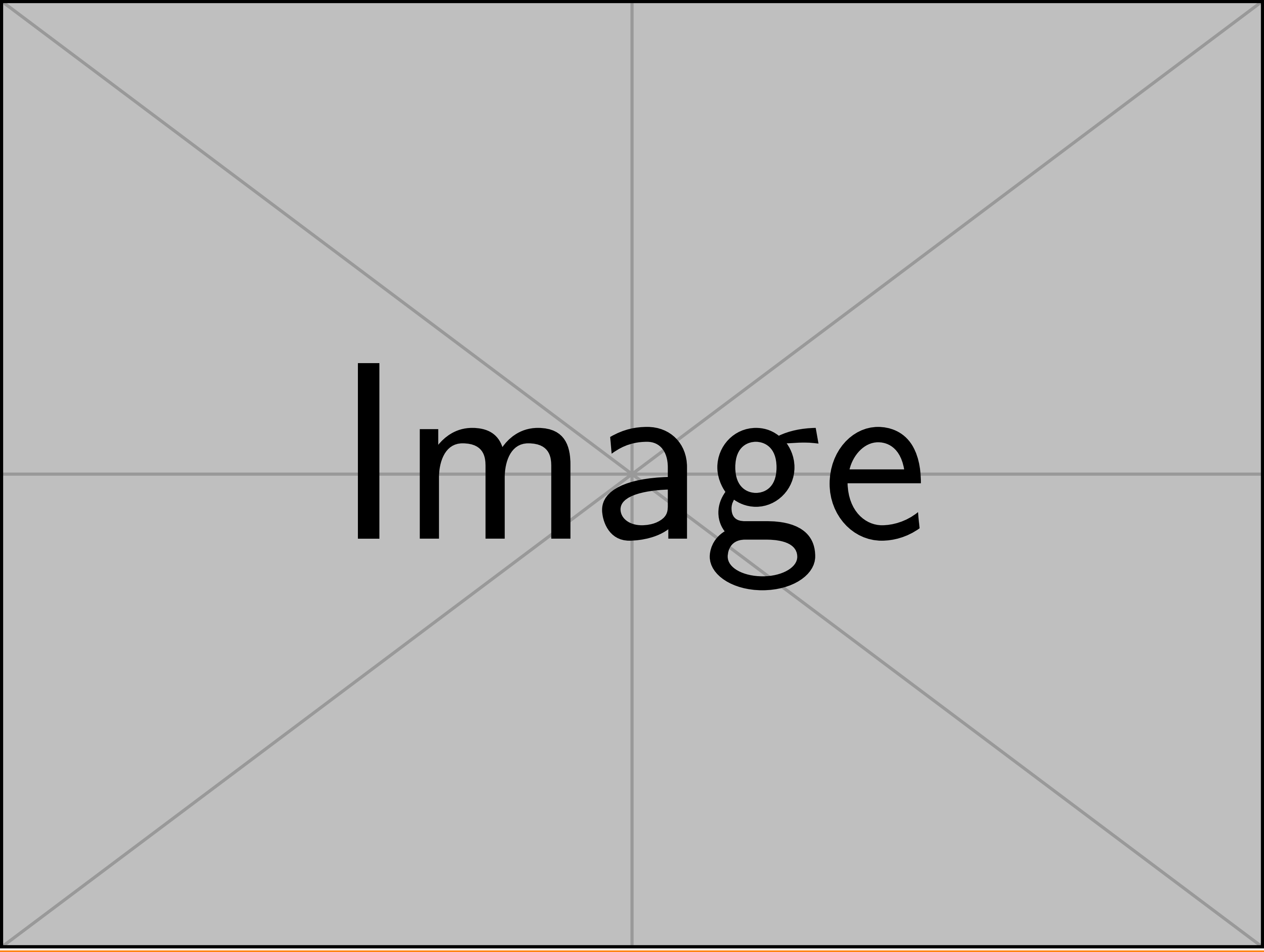

物理化学基础

Foundation of Physical Chemistry

作者：栀子忍冬

时间：May 21, 2022

联系作者/获取更新

作者邮箱 loniceras@163.com
获取更新 https://github.com/loniceras/foundation_of_physical_chemistry

建议的 BibTeX 信息

```
@book{Lonicera21,
    author={栀子忍冬},
    title={物理化学基础(v0.1)},
    year={2021},
    url={https://github.com/loniceras/foundation_of_physical_chemistry}
}
```

版本信息 (当前: v0.1)

版本号	发布时间	主要修订内容
v0.1	21.08.10	初始版本

LaTeX 模板信息

本作品采用 ElegantLaTeX 系列模板的 ElegantBook 4.1. 更多信息可访问项目官网 https://elegantlatex.org 和项目 GitHub 页面 https://github.com/ElegantLaTeX.

目录

第 1 章 普通物理概要

1.1 分析力学

分析力学与**时空观**是密切联系在一起的. 如果不考虑广义相对论, 物理规律是在一个时空背景上加以描述的, 而该时空背景就是**参考系**. 参考系中一定时空点发生的物理现象称为**事件**. **惯性系**是一类特殊的参考系, 一个不受外力的运动物体在惯性系中保持恒定速度, 一个相对某惯性系作匀速直线运动的惯性系也是惯性系. 物理规律虽然是基于某个具体的参考系来描述的, 但规律本身实际上是不依赖于匀速的惯性参考系的选取的, 这就是伽利略的**相对性原理**. 伽利略的绝对时空观和爱因斯坦的狭义相对论时空观都承认相对性原理, 但是绝对时空观承认**瞬时相互作用原理**, 而狭义相对论时空观承认**光速不变原理**.

原理 1.1 (时空观的基本假设)

绝对时空观承认相对性原理和瞬时相互作用原理, 狭义相对论时空观承认相对性原理和光速不变原理.

- 相对性原理: 在不同惯性系中的物理规律具有相同的形式.
- 瞬时相互作用原理: 惯性系中物理相互作用的最大可能的传播速度是无穷大的.
- 光速不变原理: 惯性系中物理相互作用的最大可能的传播速度是光在真空中的速度 c.

♡

在绝对时空观下, 时间和空间是相互独立的, 它们分别构成一维 (时间维) 欧几里得空间和三维 (空间维) 欧几里得空间. 给定惯性系 K, 时空点 $(t_1, \boldsymbol{r}_1)$ 和 $(t_2, \boldsymbol{r}_2)$ 的两个事件之间的**空间间隔**为 $\Delta r = \sqrt{(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)^2}$, **时间间隔**为 $\Delta t = \sqrt{(\boldsymbol{t}_1 - \boldsymbol{t}_2)^2}$. 注意, $\Delta r > 0$ 和 $\Delta t > 0$ 始终成立. 在绝对时空观下, 能使任意两个事件的空间间隔和时间间隔均保持不变的线性坐标变换称为**伽利略变换**. 给定事件 P, 其在惯性系 S 和 S$'$ 中的坐标分别为 $(t, \boldsymbol{r})$ 和 $(t', \boldsymbol{r}')$, 则两惯性系之间的伽利略变换满足 $t' = t$ 且 $\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} - ct\boldsymbol{\beta}$, 其中 $\boldsymbol{v}$ 是 S$'$ 相对于 S 的速度, $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{v}/c$.

在狭义相对论时空观下, 时间和空间是相互关联的, 它们构成四维闵可夫斯基空间. 在闵可夫斯基空间中, 时空点的坐标称为**四维坐标** (也称为**洛伦兹四矢量**). 给定惯性系 K, 时空点 $(t_1, \boldsymbol{r}_1)$ 和 $(t_2, \boldsymbol{r}_2)$ 的两个事件之间的**不变间隔**为 $\Delta s = \sqrt{c^2(t_2 - t_1)^2 - (\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)^2}$. 如果 $\Delta s^2 = 0$, 则称 Δs 为**类光间隔**; 如果 $\Delta s^2 > 0$, 则称 Δs 为**类时间隔**; 如果 $\Delta s^2 < 0$, 则称 Δs 为**类空间隔**. 在狭义相对论时空观下, 能使任意两个事件的不变间隔保持不变的线性坐标变换称为**洛伦兹变换**. 给定事件 P, 其在惯性系 S 和 S$'$ 中的坐标分别为 $(t, \boldsymbol{r})$ 和 $(t', \boldsymbol{r}')$, 则两惯性系之间的洛伦兹变换满足 $ct' = \gamma(ct - \boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{r})$ 且 $\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + (\gamma - 1)(\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{\beta}/\boldsymbol{\beta}^2 - \gamma ct\boldsymbol{\beta}$, 其中 $\boldsymbol{v}$ 是 S$'$ 相对于 S 的速度, $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{v}/c$, $\gamma = 1/\sqrt{1 - \boldsymbol{\beta}^2}$. 对于运动速度远小于光速的物体, 狭义相对论时空观退化为绝对时空观, 经典非相对论性力学仍然是有效的, 令 $\boldsymbol{\beta}^2 \to 0$ 即可得到非相对论极限下的情形.

我们可以采用具有不同变换规则的两套记号来表示四维坐标. 如果 $r^\mu = (r^0, r^1, r^2, r^3) = (ct, x, y, z)$, 则称 r^μ 为**逆变四矢量**. 如果 $r_\mu = (r^0, -r^1, -r^2, -r^3) = (ct, -x, -y, -z)$, 则称 r_μ 为**协变四矢量**. 逆变四矢量和协变四矢量通过升高或降低指标来转换, 即 $r_\mu = \eta_{\mu\nu} r^\nu$, $r^\mu = \eta^{\mu\nu} r_\nu$, $\eta_{\mu\beta}\eta^{\beta\nu} = \delta_\mu^\nu$. 其中, $\eta_{\mu\nu}$ 为闵可夫斯基空间的**度规张量**, $\eta^{\mu\nu}$ 为闵可夫斯基空间的度规张量的逆, δ_μ^ν 为克罗内克记号. 容易发现, $\eta_{00} = \eta^{00} = 1$, 且对意 $i \in \{1, 2, 3\}$ 都有 $\eta_{ii} = \eta^{ii} = -1$. 前述将度规张量 $\eta_{\mu\nu}$ 中的一个协变指标 ν 和逆变四矢量 r^ν 的逆变指标按照爱因斯坦求和规则求和并得到一个协变四矢量 r_μ 的过程称为指标的**缩并**. 所有缩并一定是在一个协变指标 (下标) 和一个逆变指标 (上标) 之间进行. 给定协变四矢量 A_μ 和逆变四矢量 B^μ, 两者相乘并缩并指标可得 A_μ 和 B^μ 的**内积** $A \cdot B = A_\mu B^\mu = A^\mu B_\mu$, 该内积 $A \cdot B$ 在洛伦兹变换下保持不变. 闵可夫斯基空间中两个无限接近的点 (事件) 之间的不变间隔的平方为 $\mathrm{d}r^2 = \mathrm{d}r^\mu\, \mathrm{d}r_\mu = \eta_{\mu\nu}\, \mathrm{d}r^\mu\, \mathrm{d}r^\nu = \eta^{\mu\nu}\, \mathrm{d}r_\mu\, \mathrm{d}r_\nu$, 可以发现它是 $\mathrm{d}r$ 和其自身的内积.

逆变四矢量在洛伦兹变换下仍为逆变四矢量, 即 $r'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu r^\nu$, 其中 $\Lambda^\mu{}_\nu$ 是洛伦兹变换矩阵. 一个任意的洛伦兹变换类似于 ‘‘四维空间中的广义转动’’, 它可以分解为六种基本 ‘‘转动’’ 的合成, 分别对应 “0-1, 0-2, 0-3 平面内的转动’’ 和 “1-2, 1-3, 2-3 平面内的转动”, 前三者为相应方向上的推动, 后三者类似于普通三维空间内的转动, 更多相关讨论可参考有关洛伦兹群的相关理论. 如果其他物理量也能满足前述洛伦兹变换的规则, 我们可以将逆变四矢量的相关约定应用在这些物理量上. 通过度规张量可将协变四矢量的相关约定应用在这些物理量上, 即 $r'_\mu = \Lambda_{\mu\nu} r^\nu = \Lambda_\mu{}^\nu r_\nu$, 其中 $\Lambda_{\mu\nu} = \eta_{\mu\beta}\Lambda^\beta{}_\nu$, $\Lambda_\mu{}^\nu = \eta_{\mu\beta}\Lambda^\beta{}_\alpha\eta^{\alpha\nu}$. 一个具有任意个上标或下标的四维张量在洛伦兹变换下的变换规则就是它的每个上标 (或下标) 都按照相应的逆变四矢量 (或协变四矢量) 的变换规则来进行变换. 例如, 张量 $A^{\mu\nu}{}_{\rho\sigma\tau}$ 在洛伦兹变换下的规则是 $A'^{\mu'\nu'}{}_{\rho'\sigma'\tau'} = \Lambda^{\mu'}{}_\mu \Lambda^{\nu'}{}_\nu \Lambda_{\rho'}{}^\rho \Lambda_{\sigma'}{}^\sigma \Lambda_{\nu'}{}^\nu A^{\mu\nu}{}_{\rho\sigma\tau}$. 各阶张量是唯一的在

洛伦兹变换下具有确定变换性质的数学对象. 如果一个物理理论要符合狭义相对论的要求, 表述它的数学方程一定是用正确的张量形式写出来的, 此时该方程描述的物理规律才可能在不同参考系中普遍成立.

命题 1.1 (张量的微分与积分)

闵可夫斯基空间内的张量可以进行微分, 张量可以是零阶的标量场, 一阶的矢量场, 二阶的张量场等. 给定张量 $T(\boldsymbol{x})$, 定义微分算符 ∂_μ 满足 $\partial_\mu T(\boldsymbol{x}) = \partial T(\boldsymbol{x})/\partial x^\mu$, 显然 $\partial_\mu T(\boldsymbol{x})$ 比 $T(\boldsymbol{x})$ 多一个协变指标. 通过度规张量升高指标可以得到具有逆变指标的微分算符 $\partial^\mu = \eta^{\mu\nu}\partial_\nu$. 对于标量场 $\varPhi(\boldsymbol{x})$, 有 $\partial_\mu = (\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \boldsymbol{\nabla})$ 和 $\partial^\mu = (\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\boldsymbol{\nabla})$, 因此缩并两个作用于 $\varPhi(\boldsymbol{x})$ 的微分算符 ∂^μ 和 ∂_μ, 可得到标量算符 $-\Box = \partial^\mu\partial_\mu = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2$, 其中 $\Box$ 称为达朗贝尔算符. 对于矢量场 $A^\mu(\boldsymbol{x})$, 有标量 $\partial_\mu A^\mu = \partial^\mu A_\mu = \partial A^0/\partial x^0 + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}$.
闵可夫斯基空间内的张量也可进行积分, 积分可以沿一维闭合回路, 二维闭合曲面或三维闭合超曲面进行. 一维闭合曲线上的线元 (一阶张量) 可表示为 $\mathrm{d}x^\mu$, 二维闭合曲面上的面元 (二阶张量) 可表示为 $\mathrm{d}S^{\mu\nu}$, 三维闭合超曲面上的超曲面元 (三阶张量) 可表示为 $\mathrm{d}V^{\mu\nu\rho}$, 四维闭合空间上的体元 (四阶张量) 可表示为 $\mathrm{d}^4\boldsymbol{x}$.

$$\mathrm{d}S^{\mu\nu} = \begin{vmatrix} \mathrm{d}x^\mu & \mathrm{d}x'^\mu \\ \mathrm{d}x^\nu & \mathrm{d}x'^\nu \end{vmatrix}, \quad \mathrm{d}V^{\mu\nu\rho} = \begin{vmatrix} \mathrm{d}x^\mu & \mathrm{d}x'^\mu & \mathrm{d}x''^\mu \\ \mathrm{d}x^\nu & \mathrm{d}x'^\nu & \mathrm{d}x''^\nu \\ \mathrm{d}x^\rho & \mathrm{d}x'^\rho & \mathrm{d}x''^\rho \end{vmatrix}.$$

面元 $\mathrm{d}S^{\mu\nu}$ 的 Hodge 对偶面元 $\mathrm{d}\tilde{S}^{\mu\nu} = \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}\,\mathrm{d}S_{\rho\sigma}$ 是二阶张量, 超曲面元 $\mathrm{d}V^{\mu\nu\rho}$ 的 Hodge 对偶超曲面元 $\mathrm{d}\tilde{V}^\mu = -\frac{1}{6}\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}\,\mathrm{d}V_{\nu\rho\sigma}$ 是一阶张量, 其中 $\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ 是 Levi-Civita 记号. 如果采用微分几何语言, 线元 $\mathrm{d}x^\mu$ 称为微分 1-形式, 面元 $\mathrm{d}S^{\mu\nu}$ 称为微分 2-形式, 超曲面元 $\mathrm{d}V^{\mu\nu\rho}$ 称为微分 3-形式, 所有的微分形式都是反对称的张量. 微分几何中的斯托克斯定理告诉我们: 如果 ω 是 n 维可定向流形 M 上的一个微分 $(n-1)$-形式, 则有 $\int_M \mathrm{d}\omega = \int_{\partial M}\omega$, 其中 ∂M 代表流形的边界. 因此, 闭合一维曲线 C 上的积分可转化为该一维曲线所围成的二维曲面 S 上的积分, 闭合二维曲面 S 上的积分可转化为该二维曲面所围成的三维超曲面 V 上的积分, 一个闭合三维超曲面 V 上的积分, 可转化为该三维闭合超曲面所围成的四维空间 $\varOmega$ 上的积分, 即

$$\int_S \mathrm{d}S^{\nu\mu}\,\partial_\nu = \oint_C \mathrm{d}x^\mu\,, \quad \int_V (\mathrm{d}\tilde{V}_\mu\,\partial_\nu - \mathrm{d}\tilde{V}_\nu\,\partial_\mu) = \oint_S \mathrm{d}\tilde{S}_{\mu\nu}\,, \quad \int_\varOmega \mathrm{d}^4\boldsymbol{x}\,\partial_\mu = \oint_V \mathrm{d}\tilde{V}_\mu\,.$$

更多相关内容参考微分几何和张量分析相关专著.

质点模型在分析力学中广泛使用, 当给定物体的尺寸和形状对运动问题的影响不大时, 即可将该物体视作没有尺寸和形状的几何点处理来简化问题. 质点在参考坐标系中的位置可用**径矢** $\boldsymbol{r}$ 表示, 质点所处的时间可用 t 表示. 由多个质点通过某种方式构成的集合称为**质点系**. 经验表明, 给定质点系中所有质点的位置和速度就可以确定质点系当前的状态, 并且原则上可预测质点系今后的运动. 事实上, 当质点系在运动过程中受到一定**约束条件**的限制时, 并不需要确定所有质点的位置和速度即可确定质点系当前状态和预测今后运动. 考虑一个具有 n 个质点的质点系, 对其的约束条件可记作 $f(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_n,\dot{\boldsymbol{r}}_1,\dot{\boldsymbol{r}}_2,\ldots,\dot{\boldsymbol{r}}_n,t)=0$ 或 $f(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_n,\dot{\boldsymbol{r}}_1,\dot{\boldsymbol{r}}_2,\ldots,\dot{\boldsymbol{r}}_n,t)\geq 0$. 前者称为**双面约束条件**, 后者称为**单面约束条件**. 双面约束条件可以分为**完整约束**和**非完整约束**, 完整约束可减少一个独立坐标和一个独立速度分量, 非完整约束只能减少一个独立速度分量. 完整约束又可分为**几何约束**和**可积运动约束**, 几何约束 $f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_n,t)=0$ 仅对质点系的几何位形加以限制, 可积运动约束同时对质点系的几何位形和运动情况加以限制, 但可以通过对其积分转化为几何约束. 所有约束条件都是完整约束的质点系称为**完整力学体系**, 否则称为**非完整力学体系**. 如果约束反力在任意虚位移上所作的功都等于零, 即 $\sum_i \boldsymbol{F}_i\cdot\delta\boldsymbol{r}_i=0$, 则该约束条件称为**理想约束**. 其中, 约束反力是指约束条件对质点系中各质点产生的反作用力, 虚位移是指质点系中各质点在给定位置满足约束条件的任何无限小位移. 所有约束条件都是理想约束的质点系称为**理想力学体系**, 否则称为**非理想力学体系**. 今后我们只考虑理想完整力学体系. 此外, 存在耗散力的体系 (即**非保守体系**) 已不是纯粹的力学体系, 因其复杂的微观机制而通常不能被直接处理, 但对一些简单的情形可近似地用力学方法处理.

给定具有 n 个质点和 k 个相互独立的完整约束的理想完整力学体系, 我们至少需要 $3n-k$ 个参数才能确定某时刻该力学体系中各质点位置, 即确定力学体系的位形. 我们称能够确定位形的最少参数 $3n-k$ 为该力学体系的**独立广义坐标数**, 称能够唯一确定位形的一组 $3n-k$ 个参数为该力学体系的**广义坐标** q. 应当注意, 力学体系的广义坐标仅代表一些互相独立的参数, 它们可以是距离或角度等常见物理量, 也可以根本没有几何意义, 完

整力学体系的**自由度**即为独立广义坐标数. 广义坐标 q 对时间 t 的导数 $\mathrm{d}q/\mathrm{d}t$ 称为**广义速度**, 记作 $\dot{q}$. 广义坐标 q 对时间 t 的二阶导数 $\mathrm{d}^2q/\mathrm{d}t^2$ 称为**广义加速度**, 记作 $\ddot{q}$. 如果一个独立广义坐标数为 s 的力学体系的广义坐标为 $(q_1, q_2, \dots, q_s)$, 则其广义速度为 $(\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_s)$, 广义加速度为 $(\ddot{q}_1, \ddot{q}_2, \dots, \ddot{q}_s)$, 它们可形式上分别记作列向量 $\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, \ddot{\boldsymbol{q}}$. 仿照质点的径矢的概念, 我们也可以对力学体系定义**广义位矢** $(\boldsymbol{r}_1(\boldsymbol{q}, t), \boldsymbol{r}_2(\boldsymbol{q}, t), \dots, \boldsymbol{r}_n(\boldsymbol{q}, t))$.

原理 1.2 (最小作用量原理)

每个力学体系可以由一个确定的函数 $\mathcal{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t)$ 表征, 其中 $\boldsymbol{q}$ 是广义坐标, $\dot{\boldsymbol{q}}$ 是广义速度, t 是时间. 假设力学体系在 $t = t_\mathrm{i}$ 时广义坐标 $\boldsymbol{q}_\mathrm{i}$ 和 $t = t_\mathrm{f}$ 时的广义坐标 $\boldsymbol{q}_\mathrm{f}$ 是给定的, 则该体系由运动方程确定的真实运动轨迹 $\boldsymbol{q}(t)$ 一定使得

$$S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}; \boldsymbol{q}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}) = \int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} \mathcal{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t)\, \mathrm{d}t \tag{1.1}$$

取极值 (通常是极小值, 但也可能是鞍点或极大值). 其中, $S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}; \boldsymbol{q}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f})$ 称为体系的哈密顿作用量 (常简称为作用量), $\mathcal{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t)$ 称为体系的拉格朗日函数. ♡

我们运用变分法来获得体系在拉格朗日力学下的运动方程. 考虑哈密顿作用量 $S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}; \boldsymbol{q}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f})$ 的等时变分

$$\begin{aligned}
\delta S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}; \boldsymbol{q}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}) &= \int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} \mathcal{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t)\, \mathrm{d}t = \int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} \sum_{\beta=1}^{s} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_\beta}\, \delta q_\beta + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_\beta}\, \delta \dot{q}_\beta \right) \mathrm{d}t \\
&= \int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} \sum_{\beta=1}^{s} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_\beta}\, \delta q_\beta + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_\beta}\, \delta q_\beta \right) - \delta q_\beta \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_\beta} \right) \right) \mathrm{d}t \\
&= \sum_{\beta=1}^{s} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_\beta}\, \delta q_\beta \bigg|_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} + \int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_\beta} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_\beta} \right) \right) \delta q_\beta\, \mathrm{d}t\,.
\end{aligned}$$

注意, 对等时变分有 $\delta \dot{q}_\alpha = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\, \delta q_\alpha$. 由于 $\delta \boldsymbol{q}(t_\mathrm{i}) = \delta \boldsymbol{q}(t_\mathrm{f}) = 0$, 得 $\sum_{\beta=1}^{s} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_\beta}\, \delta q_\beta \Big|_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} = 0$. 为了使 $S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}; \boldsymbol{q}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f})$ 取极小值, $\delta S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}; \boldsymbol{q}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}) = 0$. 由于 δq_β 的任意性, 得对任意 $\alpha \in \{1, 2, \dots, s\}$ 有**欧拉–拉格朗日方程**

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_\alpha} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) = 0. \tag{1.2}$$

力学体系的拉格朗日函数 $\mathcal{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t)$ 具有**规范不定性**, 即在**定域规范变换** $\tilde{\mathcal{L}}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t) = \mathcal{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t) + \mathrm{d}f(\boldsymbol{q}, t)/\mathrm{d}t$ 下有 $\delta \tilde{S}(\boldsymbol{q}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}; \boldsymbol{q}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}) = \delta S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}; \boldsymbol{q}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f})$, 进而在定域规范变换下体系的欧拉–拉格朗日方程和运动规律也不变, 此即为体系的**规范不变性**.

通过拉格朗日变量定义**广义动量** $p = \partial \mathcal{L}/\partial \dot{q}$ 和**广义力** $F = \partial \mathcal{L}/\partial q$, 得**广义动量定理**

$$\forall \alpha \in \{1, 2, \dots, s\}, \quad \dot{p_\alpha} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_\alpha} = F_\alpha. \tag{1.3}$$

在定域规范变换 $\tilde{\mathcal{L}}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t) = \mathcal{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t) + \mathrm{d}f(\boldsymbol{q}, t)/\mathrm{d}t$ 下, 广义动量为 $\tilde{p}_\alpha = p_\alpha + \partial f/\partial q_\alpha$, 因此广义动量也具有规范不定性, 其值取决于拉格朗日函数的规范选择. 考虑力学体系的所有质点在空间内整体平移相同的位移, 不妨对任意 $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ 都有 $\partial \boldsymbol{r}_i/\partial q_\alpha = \boldsymbol{e}$ 且 $\delta \boldsymbol{r}_i = \sum_{\beta=1}^{s} \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\beta}\, \delta q_\beta = \delta q_\alpha\, \boldsymbol{e}$. 如果该体系的所有质点在空间内整体平移后的拉格朗日函数仍保持不变 (即体系满足**空间平移不变性**或**空间均匀性**), 即 $\partial \mathcal{L}/\partial q_\alpha = 0$, 则 $\dot{p_\alpha} = 0$. 考虑力学体系的所有质点在空间内整体旋转相同的角度, 不妨对任意 $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ 都有 $\partial \boldsymbol{r}_i/\partial q_\alpha = \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{e}$ 且 $\delta \boldsymbol{r}_i = \sum_{\beta=1}^{s} \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\beta}\, \delta q_\beta = \delta q_\alpha\, (\boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{e})$. 如果该体系的所有质点在空间内整体旋转后的拉格朗日函数仍保持不变 (即体系满足**空间转动不变性**或**空间各向同性**), 即 $\partial \mathcal{L}/\partial q_\alpha = 0$, 则 $\dot{p_\alpha} = 0$. 现在我们考虑 $\mathcal{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t)$ 对时间的导数

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\mathcal{L}}{\mathrm{d}t} &= \sum_{\beta=1}^{s} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_\beta} \dot{q_\beta} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q_\beta}} \ddot{q_\beta} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} = \sum_{\beta=1}^{s} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_\beta} \dot{q_\beta} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_{\beta=1}^{s} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q_\beta}} \dot{q_\beta} - \sum_{\beta=1}^{s} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q_\beta}} \right) \dot{q_\beta} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \\
&= \sum_{\beta=1}^{s} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_\beta} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q_\beta}} \right) \right) \dot{q_\beta} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_{\beta=1}^{s} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q_\beta}} \dot{q_\beta} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_{\beta=1}^{s} p_\beta \dot{q_\beta} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}.
\end{aligned}$$

通过拉格朗日变量定义**广义能量** $E=\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\dot{q_\beta}-\mathcal{L}(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)$, 得**广义能量定理**

$$\dot{E}=-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial t} \tag{1.4}$$

在定域规范变换 $\tilde{\mathcal{L}}(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)=\mathcal{L}(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)+\mathrm{d}f(\boldsymbol{q},t)/\mathrm{d}t$ 下, 广义能量为 $\tilde{E}=E-\partial f/\partial t$, 因此广义能量也具有规范不定性, 其值取决于拉格朗日函数的规范选择. 考虑力学体系的所有质点在时间内整体平移, 如果该体系时间在平移后的拉格朗日函数仍保持不变 (即体系满足**时间平移不变性**或**时间均匀性**), 即 $\partial\mathcal{L}/\partial t=0$, 则 $\dot{E}=0$. 在狭义相对论时空观下, 空间平移不变性和时间平移不变性合并为**时空平移对称性**, 而空间转动不变性被推广为**洛伦兹对称性**.

类似地, 我们运用变分法来获得体系在哈密顿力学下的运动方程. 定义**哈密顿函数** $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 满足

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)+\mathcal{L}(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)=\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\dot{q_\beta}=\boldsymbol{p}\cdot\dot{\boldsymbol{q}}. \tag{1.5}$$

由于广义动量具有规范不定性, 其值取决于拉格朗日函数的规范选择, 因此我们可将广义动量视作与广义坐标地位平等的独立变量. 考虑哈密顿作用量 $S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i},\boldsymbol{p}_\mathrm{i},t_\mathrm{i};\boldsymbol{q}_\mathrm{f},\boldsymbol{p}_\mathrm{f},t_\mathrm{f})$ 的等时变分

$$\begin{aligned}\delta S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i},\boldsymbol{p}_\mathrm{i},t_\mathrm{i};\boldsymbol{q}_\mathrm{f},\boldsymbol{p}_\mathrm{f},t_\mathrm{f})&=\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}\mathcal{L}(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)\,\mathrm{d}t=\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}\sum_{\beta=1}^{s}\left(p_\beta\,\delta\dot{q_\beta}+\dot{q_\beta}\,\delta p_\beta-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q_\beta}\,\delta q_\beta-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_\beta}\,\delta p_\beta\right)\mathrm{d}t\\&=\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\,\delta q_\beta+\sum_{\beta=1}^{s}\left(\dot{q_\beta}\,\delta p_\beta-\dot{p_\beta}\,\delta q_\beta-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q_\beta}\,\delta q_\beta-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_\beta}\,\delta p_\beta\right)\right)\mathrm{d}t\\&=\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\,\delta q_\beta\Bigg|_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}+\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}\left(\sum_{\beta=1}^{s}\left(\dot{q_\beta}-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_\beta}\right)\delta p_\beta-\sum_{\beta=1}^{s}\left(\dot{p_\beta}+\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q_\beta}\right)\delta q_\beta\right)\mathrm{d}t\,.\end{aligned}$$

注意, 对等时变分有 $\delta\dot{q_\alpha}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\delta q_\alpha$. 由于 $\delta\boldsymbol{q}(t_\mathrm{i})=\delta\boldsymbol{q}(t_\mathrm{f})=0$, 得 $\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\,\delta q_\beta\Big|_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}=0$. 为了使 $S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i},\boldsymbol{p}_\mathrm{i},t_\mathrm{i};\boldsymbol{q}_\mathrm{f},\boldsymbol{p}_\mathrm{f},t_\mathrm{f})$ 取极小值, $\delta S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i},\boldsymbol{p}_\mathrm{i},t_\mathrm{i};\boldsymbol{q}_\mathrm{f},\boldsymbol{p}_\mathrm{f},t_\mathrm{f})=0$. 由于 δq_β 和 δp_β 的任意性, 得对任意 $\alpha\in\{1,2,\dots,s\}$ 有**哈密顿方程**

$$\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_\alpha}=\dot{q_\alpha},\quad\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q_\alpha}=-\dot{p_\alpha}. \tag{1.6}$$

拉格朗日函数 $\mathcal{L}(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)$ 的规范不定性也可以推广至在定域规范变换 $\tilde{\mathcal{L}}(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)=\mathcal{L}(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)+\mathrm{d}f(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)/\mathrm{d}t$ 下有 $\delta S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i},\boldsymbol{p}_\mathrm{i},t_\mathrm{i};\boldsymbol{q}_\mathrm{f},\boldsymbol{p}_\mathrm{f},t_\mathrm{f})=\delta S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i},\boldsymbol{p}_\mathrm{i},t_\mathrm{i};\boldsymbol{q}_\mathrm{f},\boldsymbol{p}_\mathrm{f},t_\mathrm{f})$. 对拉格朗日函数 $\mathcal{L}(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)$ 进行勒让德变换, 也可以获得哈密顿函数 $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 和哈密顿方程, 即由

$$\mathrm{d}\mathcal{H}=\sum_{\beta=1}^{s}(p_\beta\,\mathrm{d}\dot{q_\beta}+\dot{q_\beta}\,\mathrm{d}p_\beta)-\sum_{\beta=1}^{s}\left(\dot{p_\beta}\,\mathrm{d}q_\beta+p_\beta\,\mathrm{d}\dot{q_\beta}+\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial t}\,\mathrm{d}t\right)=\sum_{\beta=1}^{s}\left(\dot{q_\beta}\,\mathrm{d}p_\beta-\dot{p_\beta}\,\mathrm{d}q_\beta-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial t}\,\mathrm{d}t\right)$$

知对任意 $\alpha\in\{1,2,\dots,s\}$ 有 $\partial\mathcal{H}/\partial p_\alpha=\dot{q_\alpha}$ 和 $\partial\mathcal{H}/\partial q_\alpha=-\dot{p_\alpha}$. 由 $\partial\mathcal{H}/\partial q_\alpha=-\,\partial\mathcal{L}/\partial q_\alpha$ 可知, 体系的拉格朗日函数不显含某个广义坐标当且仅当其哈密顿函数也不显含该广义坐标. 此外, 易发现 $\partial\mathcal{H}/\partial t=-\,\partial\mathcal{L}/\partial t$, 因而体系的拉格朗日函数不显含时间当且仅当体系的哈密顿函数不显含时间. 考虑 $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 对时间的导数, 有

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{H}}{\mathrm{d}t}=\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q_\beta}\dot{q_\beta}+\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_\beta}\dot{p_\beta}\right)+\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial t}=\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial t}.$$

易发现哈密顿函数 $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 即为采用哈密顿变量表示的广义能量. 如果体系的哈密顿函数 $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 不显含时间, 则该体系在运动过程中恒有广义能量 $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 为定值 E, 并称该类体系是**广义保守的**.

对拉格朗日函数 $\mathcal{L}(\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{\zeta}},\dot{\boldsymbol{q}},t)=\mathcal{L}(\zeta_1,\zeta_2,\dots,\zeta_r,q_{r+1},q_{r+2},\dots,q_s,\dot{\zeta}_1,\dot{\zeta}_2,\dots,\dot{\zeta}_r,\dot{q_{r+1}},\dot{q_{r+2}},\dots,\dot{q_s},t)$ 进行勒让德变换时, 我们可以仅将部分拉格朗日变量 $\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}}$ 转化为哈密顿变量 $\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}$, 最终得到具有组合变量的罗斯函数 $\mathcal{R}(\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{\zeta}},\boldsymbol{p},t)=\mathcal{R}(\zeta_1,\zeta_2,\dots,\zeta_r,q_{r+1},q_{r+2},\dots,q_s,\dot{\zeta}_1,\dot{\zeta}_2,\dots,\dot{\zeta}_r,p_{r+1},p_{r+2},\dots,p_s,t)$ 和罗斯方程. 定义**罗斯函数**满足

$$\mathcal{R}(\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{\zeta}},\boldsymbol{p},t)+\mathcal{L}(\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{\zeta}},\dot{\boldsymbol{q}},t)=\sum_{\beta=r+1}^{s}p_\beta\dot{q_\beta}=\boldsymbol{p}\cdot\dot{\boldsymbol{q}}, \tag{1.7}$$

现对 $\mathcal{R}(\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{\zeta}},\boldsymbol{p},t)$ 作全微分, 得

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\mathcal{R}&=\sum_{\beta=r+1}^{s}(p_\beta\,\mathrm{d}\dot{q}_\beta+\dot{q}_\beta\,\mathrm{d}p_\beta)-\sum_{\beta=1}^{r}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\xi_\beta}\,\mathrm{d}\xi_\beta+\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\xi}_\beta}\,\mathrm{d}\dot{\xi}_\beta\right)-\sum_{\beta=r+1}^{s}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q_\beta}\,\mathrm{d}q_\beta+\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}_\beta}\,\mathrm{d}\dot{q}_\beta\right)-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial t}\,\mathrm{d}t\\&=\sum_{\beta=1}^{r}\left(-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\xi_\beta}\,\mathrm{d}\xi_\beta-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\xi}_\beta}\,\mathrm{d}\dot{\xi}_\beta\right)+\sum_{\beta=r+1}^{s}(\dot{q}_\beta\,\mathrm{d}p_\beta-\dot{p}_\beta\,\mathrm{d}q_\beta)-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial t}\,\mathrm{d}t\,.\end{aligned}$$

因此, 对任意 $\alpha\in\{1,2,\dots,r\}$ 有**罗斯方程**:

$$\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\xi_\alpha}=-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\xi_\alpha},\quad\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\dot{\xi}_\alpha}=-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\xi}_\alpha},\quad\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\xi_\alpha}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\dot{\xi}_\alpha}\right)=0;\tag{1.8}$$

对任意 $\alpha\in\{r+1,r+2,\dots,s\}$ 有**罗斯方程**:

$$\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial p_\alpha}=\dot{q}_\alpha,\quad\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial q_\alpha}=-\dot{p}_\alpha.\tag{1.9}$$

由 $\partial\mathcal{R}/\partial\xi_\alpha=-\partial\mathcal{L}/\partial\xi_\alpha$ 和 $\partial\mathcal{R}/\partial q_\alpha=-\partial\mathcal{L}/\partial q_\alpha$ 可知, 体系的拉格朗日函数不显含某个广义坐标当且仅当其罗斯函数也不显含该广义坐标. 此外, 易发现 $\partial\mathcal{R}/\partial t=-\partial\mathcal{L}/\partial t$, 因而体系的拉格朗日函数不显含时间当且仅当体系的罗斯函数不显含时间. 考虑 $\mathcal{R}(\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{\zeta}},\boldsymbol{p},t)$ 对时间的导数, 有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\mathcal{R}}{\mathrm{d}t}&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{\beta=r+1}^{s}p_\beta\dot{q}_\beta-\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{\beta=1}^{r}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\xi}_\beta}\dot{\xi}_\beta+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{\beta=r+1}^{s}p_\beta\dot{q}_\beta+\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial t}\right)\\&=-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{\beta=1}^{r}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\xi}_\beta}\dot{\xi}_\beta-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{\beta=1}^{r}\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\dot{\xi}_\beta}\dot{\xi}_\beta+\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial t},\end{aligned}$$

得 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\big(\mathcal{R}-\sum_{\beta=1}^{r}\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\dot{\xi}_\beta}\dot{\xi}_\beta\big)=\partial\mathcal{R}/\partial t$. 易发现 $\mathcal{R}(\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{\zeta}},\boldsymbol{p},t)-\sum_{\beta=1}^{r}\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\dot{\xi}_\beta}\dot{\xi}_\beta$ 即为采用罗斯变量表示的广义能量. 如果体系的罗斯函数 $\mathcal{R}(\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{\zeta}},\boldsymbol{p},t)$ 不显含时间, 则该体系在运动过程中恒有广义能量 $\mathcal{R}(\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{\zeta}},\boldsymbol{p},t)-\sum_{\beta=1}^{r}\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\dot{\xi}_\beta}\dot{\xi}_\beta$ 为定值 E.

我们现在考虑拉格朗日函数和哈密顿函数的独立变量变换问题. 考虑对拉格朗日函数 $\mathcal{L}(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)$ 的广义坐标 $\boldsymbol{q}$ 作**点变换**满足 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q},t)$, 此时自然有 $\mathcal{L}_{\boldsymbol{Q}}(\boldsymbol{Q},\dot{\boldsymbol{Q}},t)=\mathcal{L}(\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q},t),\dot{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{Q},\dot{\boldsymbol{Q}},t),t)$. 可以发现欧拉–拉格朗日方程在点变换下保持不变, 即对任意 $\alpha\in\{1,2,\dots,s\}$ 有

$$\begin{aligned}\frac{\partial\mathcal{L}_{\boldsymbol{Q}}}{\partial Q_\alpha}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\mathcal{L}_{\boldsymbol{Q}}}{\partial\dot{Q}_\alpha}\right)&=\sum_{\beta=1}^{s}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q_\beta}\frac{\partial q_\beta}{\partial Q_\alpha}+\sum_{\beta=1}^{s}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}_\beta}\frac{\partial\dot{q}_\beta}{\partial Q_\alpha}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{\beta=1}^{s}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}_\beta}\frac{\partial\dot{q}_\beta}{\partial\dot{Q}_\alpha}\\&=\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q_\beta}\frac{\partial q_\beta}{\partial Q_\alpha}-\frac{\partial\dot{q}_\beta}{\partial\dot{Q}_\alpha}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}_\beta}\right)+\sum_{\beta=1}^{s}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}_\beta}\left(\frac{\partial\dot{q}_\beta}{\partial Q_\alpha}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\dot{q}_\beta}{\partial\dot{Q}_\alpha}\right)\\&=\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q_\beta}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}_\beta}\right)\frac{\partial q_\beta}{\partial Q_\alpha}+\sum_{\beta=1}^{s}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}_\beta}\left(\frac{\partial\dot{q}_\beta}{\partial Q_\alpha}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial q_\beta}{\partial Q_\alpha}\right)=0.\end{aligned}$$

因此, 哈密顿方程在点变换下也保持不变, 即对任意 $\alpha\in\{1,2,\dots,s\}$ 都有 $\partial\mathcal{H}_{\boldsymbol{Q}}/\partial P_\alpha=\dot{Q}_\alpha$ 和 $\partial\mathcal{H}_{\boldsymbol{Q}}/\partial Q_\alpha=-\dot{P}_\alpha$, 其中 $P_\alpha=\partial\mathcal{L}_{\boldsymbol{Q}}\big/\partial\dot{Q}_\alpha$. 罗斯方程在点变换下也有类似的结论. 由于哈密顿函数的广义坐标和广义动量都是独立的变量, 我们实际上可以考虑更广泛的变换. 对哈密顿函数 $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 的广义坐标 $\boldsymbol{q}$ 和广义动量 $\boldsymbol{p}$ 作变换满足 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t)$ 和 $\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t)$, 此时自然有 $\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t)=\mathcal{H}(\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t),\boldsymbol{p}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t),t)$. 如果哈密顿方程能在该变换下保持不变, 即对任意 $\alpha\in\{1,2,\dots,s\}$ 都有 $\partial\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}}/\partial P_\alpha=\dot{Q}_\alpha$ 和 $\partial\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}}/\partial Q_\alpha=-\dot{P}_\alpha$, 则称该变换为**正则变换**. 通过正则变换产生的独立变量 $\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P}$ 显然应当满足最小作用量原理, 应当考虑

$$\delta S(\boldsymbol{q}_\mathrm{i},\boldsymbol{p}_\mathrm{i},t_\mathrm{i};\boldsymbol{q}_\mathrm{f},\boldsymbol{p}_\mathrm{f},t_\mathrm{f})=\delta\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}\left(\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\dot{q}_\beta-\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}f_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\right)\mathrm{d}t=0,$$

$$\delta S(\boldsymbol{Q}_\mathrm{i},\boldsymbol{P}_\mathrm{i},t_\mathrm{i};\boldsymbol{Q}_\mathrm{f},\boldsymbol{P}_\mathrm{f},t_\mathrm{f})=\delta\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}\left(\sum_{\beta=1}^{s}P_\beta\dot{Q}_\beta-\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t)+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}f_2(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t)\right)\mathrm{d}t=0,$$

以上两式相减时引入标度因子 λ, 定义第一类母函数 $F_1 = F_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t) = f_2(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t) - \lambda f_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$, 得

$$\delta\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}\left(\lambda\left(\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\dot{q}_\beta - \mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\right) - \left(\sum_{\beta=1}^{s}P_\beta\dot{Q}_\beta - \mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t)\right) - \frac{\mathrm{d}F_1}{\mathrm{d}t}\right)\mathrm{d}t = 0.$$

要使上式成立, 只要

$$\lambda\left(\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\dot{q}_\beta - \mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\right) = \sum_{\beta=1}^{s}P_\beta\dot{Q}_\beta + \mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t) + \dot{F}_1 = 0,$$

此时有

$$\mathrm{d}F_1\left(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t\right) = \lambda\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\,\mathrm{d}q_\beta - \sum_{\beta=1}^{s}P_\beta\,\mathrm{d}Q_\beta + \left(\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t) - \lambda\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\right)\mathrm{d}t\,.$$

对 $F_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t)$ 作勒让德变换可获得另外三类母函数. 定义第二类母函数 $F_2 = F_2(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P},t) = F_1 + \sum_{\beta=1}^{s}P_\beta Q_\beta$, 第三类母函数 $F_3 = F_3(\boldsymbol{p},\boldsymbol{Q},t) = F_1 - \lambda\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta q_\beta$, 第四类母函数 $F_4 = F_4(\boldsymbol{p},\boldsymbol{P},t) = F_2 - \lambda\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta q_\beta$, 此时有

$$\mathrm{d}F_2\left(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P},t\right) = \lambda\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\,\mathrm{d}q_\beta + \sum_{\beta=1}^{s}Q_\beta\,\mathrm{d}P_\beta + \left(\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t) - \lambda\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\right)\mathrm{d}t\,,$$

$$\mathrm{d}F_3\left(\boldsymbol{p},\boldsymbol{Q},t\right) = -\lambda\sum_{\beta=1}^{s}q_\beta\,\mathrm{d}p_\beta - \sum_{\beta=1}^{s}P_\beta\,\mathrm{d}Q_\beta + \left(\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t) - \lambda\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\right)\mathrm{d}t\,,$$

$$\mathrm{d}F_4\left(\boldsymbol{p},\boldsymbol{P},t\right) = -\lambda\sum_{\beta=1}^{s}q_\beta\,\mathrm{d}p_\beta + \sum_{\beta=1}^{s}Q_\beta\,\mathrm{d}P_\beta + \left(\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t) - \lambda\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\right)\mathrm{d}t\,.$$

当 $\lambda = 1$ 时即为正则变换, $\lambda \neq 1$ 时称为**拓展正则变换**. 我们将含标度因子的正则变换母函数的性质列在表 1.1 中. 如果母函数 F_i 不显含时间, 则 $\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}} = \lambda\mathcal{H}$. 一些常见的正则变换: 恒等变换 $F_2(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P},t) = \sum_{\beta=1}^{s}q_\beta P_\beta$ 或 $F_3(\boldsymbol{p},\boldsymbol{Q},t) = -\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta Q_\beta$; 对偶变换 $F_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t) = \pm\sum_{\beta=1}^{s}q_\beta Q_\beta$ 或 $F_4(\boldsymbol{p},\boldsymbol{P},t) = \pm\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta P_\beta$; 平移变换 $F_2(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P},t) = \sum_{\beta=1}^{s}(q_\beta P_\beta + a_\beta P_\beta - b_\beta q_\beta)$ 或 $F_3(\boldsymbol{p},\boldsymbol{Q},t) = \sum_{\beta=1}^{s}(-p_\beta Q_\beta + a_\beta p_\beta - b_\beta Q_\beta)$; 点变换 $F_2(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P},t) = \sum_{\beta=1}^{s}Q_\beta(\boldsymbol{q},t)P_\beta$.

表 1.1: 含标度因子的正则变换母函数的性质

$F_1 = F_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t)$	$F_2 = F_2(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P},t)$	$F_3 = F_3(\boldsymbol{p},\boldsymbol{Q},t)$	$F_4 = F_4(\boldsymbol{p},\boldsymbol{P},t)$
$p_\alpha = \lambda\,\partial F_1/\partial q_\alpha$	$p_\alpha = \lambda\,\partial F_2/\partial q_\alpha$	$q_\alpha = -\lambda\,\partial F_3/\partial p_\alpha$	$q_\alpha = -\lambda\,\partial F_4/\partial p_\alpha$
$P_\alpha = -\,\partial F_1/\partial Q_\alpha$	$Q_\alpha = \partial F_2/\partial P_\alpha$	$P_\alpha = -\,\partial F_3/\partial Q_\alpha$	$Q_\alpha = \partial F_4/\partial P_\alpha$
$\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}} = \lambda\mathcal{H} + \partial F_1/\partial t$	$\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}} = \lambda\mathcal{H} + \partial F_2/\partial t$	$\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}} = \lambda\mathcal{H} + \partial F_3/\partial t$	$\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}} = \lambda\mathcal{H} + \partial F_4/\partial t$

命题 1.2 (辛标记)

我们引入辛标记表示正则变换. 先回顾向量的偏导数规则: 若 $\boldsymbol{x} = (x_1,x_2,\dots,x_s)^\mathsf{T}$, $\boldsymbol{y} = (y_1,y_2,\dots,y_t)^\mathsf{T}$, 则 $\partial y/\partial\boldsymbol{x} = (\partial y/\partial x_1\,,\partial y/\partial x_2\,,\dots,\partial y/\partial x_s)^\mathsf{T}$, $\partial\boldsymbol{y}/\partial x = (\partial y_1/\partial x\,,\partial y_2/\partial x\,,\dots,\partial y_s/\partial x)^\mathsf{T}$, $\partial\boldsymbol{y}/\partial\boldsymbol{x}$ 为雅可比矩阵 $\partial(y_1,y_2,\dots,y_t)/\partial(x_1,x_2,\dots,x_s)$. 考虑哈密顿函数 $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 和 $\mathcal{H}_{\boldsymbol{QP}}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t)$, 记列向量 $\boldsymbol{\xi} = (q_1,q_2,\dots,q_s,p_1,p_2,\dots,p_s)^\mathsf{T}$, 列向量 $\boldsymbol{\varXi} = (Q_1,Q_2,\dots,Q_s,P_1,P_2,\dots,P_s)^\mathsf{T}$, 将一对正则变换记作 $\boldsymbol{\varXi} = \boldsymbol{\varXi}(\boldsymbol{\xi},t)$ 和 $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\varXi},t)$, 雅可比矩阵 $\partial\boldsymbol{\varXi}/\partial\boldsymbol{\xi}$ 记作 $\boldsymbol{M}$, 雅可比矩阵 $\partial\boldsymbol{\xi}/\partial\boldsymbol{\varXi}$ 记作 $\boldsymbol{W}$ (即 $\boldsymbol{M}^{-1}$). 对第一类母函数 $F_1 = F_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t)$ 作全微分, 由于 $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$, 故考虑函数 $\tilde{F}_1 = \tilde{F}_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t) = F_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t),t)$ 的全微分. 任取 $\alpha,\beta\in\{1,2,\dots,s\}$, 求算 $\frac{\partial\tilde{F}_1}{\partial\boldsymbol{q}_\alpha}, \frac{\partial\tilde{F}_1}{\partial\boldsymbol{q}_\beta}, \frac{\partial\tilde{F}_1}{\partial\boldsymbol{p}_\alpha}, \frac{\partial\tilde{F}_1}{\partial\boldsymbol{p}_\beta}$, 又由 $\frac{\partial^2\tilde{F}_1}{\partial\boldsymbol{q}_\alpha\partial\boldsymbol{q}_\beta} = \frac{\partial^2\tilde{F}_1}{\partial\boldsymbol{q}_\beta\partial\boldsymbol{q}_\alpha}$ 和 $\frac{\partial^2\tilde{F}_1}{\partial\boldsymbol{q}_\alpha\partial\boldsymbol{p}_\beta} = \frac{\partial^2\tilde{F}_1}{\partial\boldsymbol{p}_\beta\partial\boldsymbol{q}_\alpha}$ 和 $\frac{\partial^2\tilde{F}_1}{\partial\boldsymbol{p}_\alpha\partial\boldsymbol{p}_\beta} = \frac{\partial^2\tilde{F}_1}{\partial\boldsymbol{p}_\beta\partial\boldsymbol{p}_\alpha}$, 得方程

$$\sum_{\gamma=1}^{s}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\alpha}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\beta} = \sum_{\gamma=1}^{s}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha},\quad \sum_{\gamma=1}^{s}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\alpha}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\beta} = \sum_{\gamma=1}^{s}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\beta}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha} - \delta_{\alpha\beta},\quad \sum_{\gamma=1}^{s}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\alpha}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\beta} = \sum_{\gamma=1}^{s}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\beta}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\alpha}.$$

将三个方程分别表示为矩阵方程后重新整合，得到正则变换的辛条件

$$\boldsymbol{M}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{M}=\begin{pmatrix}\left(\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial \boldsymbol{q}}\right)^{\mathsf{T}} & \left(\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \boldsymbol{q}}\right)^{\mathsf{T}}\\ \left(\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial \boldsymbol{p}}\right)^{\mathsf{T}} & \left(\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \boldsymbol{p}}\right)^{\mathsf{T}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{0} & \boldsymbol{I}_s\\ -\boldsymbol{I}_s & \boldsymbol{0}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial \boldsymbol{q}} & \frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial \boldsymbol{p}}\\ \frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \boldsymbol{q}} & \frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \boldsymbol{p}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{0} & \boldsymbol{I}_s\\ -\boldsymbol{I}_s & \boldsymbol{0}\end{pmatrix}=\boldsymbol{\Omega}. \tag{1.10}$$

注意，$\boldsymbol{\Omega}$ 是可逆的反对称矩阵，有 $\boldsymbol{\Omega}^{-1}=\boldsymbol{\Omega}^{\mathsf{T}}=-\boldsymbol{\Omega}$, $\boldsymbol{\Omega}^2=-\boldsymbol{I}_{2s}$. 雅可比矩阵 $\boldsymbol{M}$ 称为辛矩阵，所有正则变换的雅可比矩阵构成的集合在矩阵乘法下构成辛群 $\mathrm{Sp}(2s,\mathbb{R})$. 如果正则变换 $f\colon \boldsymbol{\xi}\mapsto\boldsymbol{\Xi}$ 的辛矩阵为 $\boldsymbol{M}_1$，正则变换 $g\colon \boldsymbol{\Xi}\mapsto\boldsymbol{\Xi}'$ 的辛矩阵为 $\boldsymbol{M}_2$，则正则变换 $g\circ f\colon \boldsymbol{\xi}\mapsto\boldsymbol{\Xi}'$ 的辛矩阵为 $\boldsymbol{M}_2\boldsymbol{M}_1$. 另外，由普法夫值 $\mathrm{pf}(\boldsymbol{M}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{M})=\det(\boldsymbol{M})\,\mathrm{pf}(\boldsymbol{\Omega})=\mathrm{pf}(\boldsymbol{\Omega})=\pm1$，得 $\det(\boldsymbol{M})=1$，即辛矩阵的行列式值为 1. 事实上，辛标记也可用来表示哈密顿方程，即 $\dot{\boldsymbol{\xi}}=\boldsymbol{\Omega}(\partial\mathcal{H}/\partial\boldsymbol{\xi})$. 更多辛标记的应用可以参考相关数学物理专著.

如果能够通过正则变换使新哈密顿函数恒等于 0，那么新哈密顿函数的变量都变为常数，这为确定力学体系的运动方程提供了另一种手段. 考虑从哈密顿函数 $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 到新哈密顿函数 $\mathcal{H}_*(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t)$ 的正则变换母函数 S，由于四类母函数都具有 $\mathcal{H}_*(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t)=\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)+\partial S/\partial t$ 的形式，要使 $\mathcal{H}_*(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t)=0$，则 S 需满足 $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)+\partial S/\partial t=0$. 由于 $\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 均为常数，分别记作 $\boldsymbol{C}$ 和 $\boldsymbol{D}$. 考虑第二类母函数 $S=S(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P},t)$，由 $p_\alpha=\partial S/\partial q_\alpha$ 和 $Q_\alpha=\partial S/\partial D_\alpha=C_\alpha$，得到**哈密顿–雅可比方程**

$$\mathcal{H}\left(\boldsymbol{q},\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{q}},t\right)+\frac{\partial S(\boldsymbol{q},\boldsymbol{D},t)}{\partial t}=0. \tag{1.11}$$

哈密顿–雅可比方程是函数 $S(\boldsymbol{q},\boldsymbol{D},t)$ 的一阶偏微分方程，方程共有 $s+1$ 个自变量 (即 $\boldsymbol{q}$ 和 t)，因此也会有 $s+1$ 个独立的积分常数. 由于函数 S 仅以其导数的形式出现在方程中，故积分常数中会有 1 个以相加方式出现的，不妨考虑通积分 $S=S(\boldsymbol{q},\boldsymbol{D},t)+T$，忽略 T 不会对变换产生影响，因而只需考虑剩下 s 个自变量 $\boldsymbol{D}$. 考察 $\mathrm{d}S/\mathrm{d}t=\sum_{\beta=1}^{s}(\partial S/\partial q_\beta)\dot{q}_\beta+\partial S/\partial t=\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\dot{q}_\beta-\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\partial S/\partial\boldsymbol{q},t)=\mathcal{L}$，知 $S(\boldsymbol{q},\boldsymbol{D},t)=\int\mathcal{L}\,\mathrm{d}t$ 为积分限不定的哈密顿作用量. 当哈密顿函数不显含时间时，由体系广义能量为定值 E，得 $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\partial S/\partial\boldsymbol{q})+\partial S/\partial t=E+\partial S/\partial t=0$，哈密顿作用量可分离变量满足 $S=S(\boldsymbol{q},\boldsymbol{D},t)=W(\boldsymbol{q},\boldsymbol{D})+T(t)=W(\boldsymbol{q},\boldsymbol{D})-Et$，得到不含时哈密顿–雅可比方程

$$\mathcal{H}\left(\boldsymbol{q},\frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{q}}\right)=E. \tag{1.12}$$

考虑到 $\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\partial S/\partial\boldsymbol{q})=E$，有 $S=\int(\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\dot{q}_\beta-\mathcal{H})\,\mathrm{d}t=\int\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\,\mathrm{d}q_\beta-Et+S_0$，其中 S_0 为可略去的积分常数. 因此，$W(\boldsymbol{q},\boldsymbol{D})=\int\sum_{\beta=1}^{s}p_\beta\,\mathrm{d}q_\beta$ 为积分限不定的拉格朗日作用量.

命题 1.3 (泊松括号)

令 $e=e(\boldsymbol{q},t)$, $f=f(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$, $g=g(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$, $h=h(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$, $\boldsymbol{x}=(q_1,q_2,\ldots,q_s,p_1,p_2,\ldots,p_s)^{\mathsf{T}}$, $C_1,C_2\in\mathbb{R}$. 我们称

$$\{f,g\}=\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial f}{\partial q_\alpha}\frac{\partial g}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial g}{\partial q_\alpha}\frac{\partial f}{\partial p_\alpha}\right)=\sum_{\alpha=1}^{s}\begin{vmatrix}\frac{\partial f}{\partial q_\alpha} & \frac{\partial f}{\partial p_\alpha}\\ \frac{\partial g}{\partial q_\alpha} & \frac{\partial g}{\partial p_\alpha}\end{vmatrix}=\sum_{\alpha=1}^{s}\det\left[\frac{\partial(f,g)}{\partial(q_\alpha,p_\alpha)}\right]=\left(\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Omega}\frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{x}}$$

为泊松括号，称 $\{q_\alpha,q_\beta\}=\{p_\alpha,p_\beta\}=0$ 和 $\{q_\alpha,p_\beta\}=\delta_{\alpha\beta}$ 为基本泊松记号，其中 $\delta_{\alpha\beta}$ 为克罗内克记号.

1. 对任意 $\alpha\in\{1,2,\ldots,s\}$，有 $\partial\dot{e}/\partial\dot{q}_\alpha=\partial e/\partial q_\alpha$ 和 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\partial e/\partial q_\alpha)=\partial\dot{e}/\partial q_\alpha$.
2. 对任意 $\alpha\in\{1,2,\ldots,s\}$，有 $\{q_\alpha,f\}=\partial f/\partial p_\alpha$ 和 $\{p_\alpha,f\}=-\,\partial f/\partial q_\alpha$.
3. $\{f,g\}=-\{g,f\}$, $\{f,C_1g+C_2h\}=C_1\{f,g\}+C_2\{f,g\}$, $\{f,gh\}=\{f,g\}h+g\{f,h\}$.
4. 对任意 $x\in\{q_1,q_2,\ldots,q_s,p_1,p_2,\ldots,p_s,t\}$，有 $\partial\{f,g\}/\partial x=\{\partial f/\partial x\,,g\}+\{f,\partial g/\partial x\}$.
5. 雅可比恒等式 $\{f,\{g,h\}\}+\{g,\{h,f\}\}+\{h,\{f,g\}\}=0$.

泊松括号在研究守恒量相关问题上有较大用处. 考虑函数 $f=f(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$，有 $\mathrm{d}f/\mathrm{d}t=\partial f/\partial t+\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial f}{\partial q_\beta}\dot{q}_\beta+\frac{\partial f}{\partial p_\beta}\dot{p}_\beta\right)=\partial f/\partial t+\{f,\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\}$. 如果函数 f 不显含时间，则有 $\mathrm{d}f/\mathrm{d}t=\{f,\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\}$. 当力学体系状态随时间演变时保持不变的力学量 f 称为**运动积分**. 显然，运动积分 f 满足 $\mathrm{d}f/\mathrm{d}t=\{f,\mathcal{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\}=0$. **泊松定理**告诉我们：如果函数 f,g 是运动积分，则 $\{f,g\}$ 也是运动积分. 由于运动积分 f,g 有 $\partial f/\partial t=-\{f,\mathcal{H}\}$ 和 $\partial g/\partial t=-\{g,\mathcal{H}\}$，得 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\{f,g\}=\frac{\partial}{\partial t}\{f,g\}+\{\{f,g\},\mathcal{H}\}=\{\partial f/\partial t\,,g\}+\{f,\partial g/\partial t\}+\{\{f,g\},\mathcal{H}\}=\{-\{f,\mathcal{H}\},g\}+$

$\{f,-\{g,\mathcal{H}\}\}+\{\{f,g\},\mathcal{H}\}=-\{f,\{g,\mathcal{H}\}\}-\{g,\{\mathcal{H},f\}\}-\{\mathcal{H},\{f,g\}\}=0$, 因此 $\{f,g\}$ 也是运动积分. 泊松括号在正则变换下是保持不变的, 考虑函数 $f=f_\xi(\boldsymbol{\xi},t)=f_\Xi(\boldsymbol{\Xi},t)$ 和 $g=g_\xi(\boldsymbol{\xi},t)=g_\Xi(\boldsymbol{\Xi},t)$, 有

$$\{f,g\}_\Xi=\left(\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\Xi}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Omega}\frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\Xi}}=\left(\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}}\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \boldsymbol{\Xi}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Omega}\left(\frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\xi}}\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \boldsymbol{\Xi}}\right)=\left(\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right)^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{M}^{-1})^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{M}^{-1}\frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\xi}}=\left(\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Omega}\frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\xi}}=\{f,g\}_\xi.$$

相应地, 基本泊松括号在正则变化下也是保持不变的, 这可以作为正则变换的判据.

我们可以考虑由力学体系的位形或状态张成的空间的性质. 由广义坐标 $\boldsymbol{q}$ 张成的 s 维空间 C 称为**位形空间**. 力学体系的每个可能的位形都对应于 C 中一个点, 体系的位形随时间的演化相当于在 C 中画出一条连续的轨迹. 由广义坐标 $\boldsymbol{q}$ 和广义速度 $\dot{\boldsymbol{q}}$ 张成的 $2s$ 维空间 S 称为**状态空间**. 力学体系的每个可能的状态都对应于 S 中一个点, 体系的状态随时间的演化相当于在 S 中画出一条连续的轨迹. 由广义坐标 $\boldsymbol{q}$ 和广义动量 $\boldsymbol{p}$ 张成的 $2s$ 维空间 $\varGamma$ 称为**相空间**. 力学体系的每个可能的状态都对应于 $\varGamma$ 中一个点 (称为**相点**), 体系的状态随时间的演化相当于在 $\varGamma$ 中画出一条连续的轨迹 (称为**相轨道**). 相体积在正则变换下是保持不变的, 考虑相体积元 $\prod_{\beta=1}^{2s}\mathrm{d}\xi_\beta=\mathrm{d}q_1\,\mathrm{d}q_2\cdots\mathrm{d}q_s\,\mathrm{d}p_1\,\mathrm{d}p_2\cdots\mathrm{d}p_s$ 和 $\prod_{\beta=1}^{2s}\mathrm{d}\Xi_\beta=\mathrm{d}Q_1\,\mathrm{d}Q_2\cdots\mathrm{d}Q_s\,\mathrm{d}P_1\,\mathrm{d}P_2\cdots\mathrm{d}P_s$, 有**刘维尔定理**

$$\int_{\varLambda^*}\prod_{\beta=1}^{2s}\mathrm{d}\Xi_\beta=\int_\varLambda\left|\det\left(\frac{\partial\boldsymbol{\Xi}}{\partial\boldsymbol{\xi}}\right)\right|\prod_{\beta=1}^{2s}\mathrm{d}\xi_\beta=\int_\varLambda|\det(\boldsymbol{M})|\prod_{\beta=1}^{2s}\mathrm{d}\xi_\beta=\int_\varLambda\prod_{\beta=1}^{2s}\mathrm{d}\xi_\beta\,.$$

令 $\mathrm{d}N\,(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 表示 t 时刻相点 $(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ 周围的相体积元 $\mathrm{d}\varGamma$ 内相点的数量, 相空间的**概率密度函数**为

$$\rho(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\frac{\mathrm{d}N(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)}{\mathrm{d}\varGamma},\tag{1.13}$$

显然概率密度函数满足 $\int_\varGamma\rho(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\,\mathrm{d}\varGamma=1$. 我们可以考虑相空间中概率密度函数 $\rho(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 随时间的演化规律, 假设相空间内的总相点数 N 是守恒的, 不存在相点的净产生或净消失, 即 $\mathrm{d}N/\mathrm{d}t=0$. 令 $\alpha\in\{1,2,\ldots,s\}$, 体积元 $\mathrm{d}\varGamma=\mathrm{d}q_1\cdots\mathrm{d}q_s\,\mathrm{d}p_1\cdots\mathrm{d}p_s$, 广义坐标平面 q_α 的面积元 $\mathrm{d}A_\alpha=\mathrm{d}q_1\cdots\mathrm{d}q_{\alpha-1}\,\mathrm{d}q_{\alpha+1}\cdots\mathrm{d}q_s\cdots\mathrm{d}p_1\cdots\mathrm{d}p_s$, 广义动量平面 p_α 的面积元 $\mathrm{d}B_\alpha=\mathrm{d}q_1\cdots\mathrm{d}q_s\cdots\mathrm{d}p_1\cdots\mathrm{d}p_{\alpha-1}\,\mathrm{d}p_{\alpha+1}\cdots\mathrm{d}p_s$. 在 $\mathrm{d}t$ 内通过平面 q_α 进入 $\mathrm{d}\varGamma$ 的相点数为 $N\rho\dot{q_\alpha}\,\mathrm{d}A_\alpha\,\mathrm{d}t$, 在 $\mathrm{d}t$ 内通过平面 q_α 离开 $\mathrm{d}\varGamma$ 的相点数为 $N(\rho\dot{q_\alpha}+\frac{\partial}{\partial q_\alpha}(\rho\dot{q_\alpha})\,\mathrm{d}q_\alpha)\,\mathrm{d}A_\alpha\,\mathrm{d}t$, 因此在 $\mathrm{d}t$ 内通过平面 q_α 造成的 $\mathrm{d}\varGamma$ 内相点数净变化量为 $-N\frac{\partial}{\partial q_\alpha}(\rho\dot{q_\alpha})\,\mathrm{d}q_\alpha\,\mathrm{d}A_\alpha\,\mathrm{d}t$. 类似地, 在 $\mathrm{d}t$ 内通过 p_α 造成的 $\mathrm{d}\varGamma$ 内相点数净变化量为 $-N\frac{\partial}{\partial p_\alpha}(\rho\dot{p_\alpha})\,\mathrm{d}p_\alpha\,\mathrm{d}B_\beta\,\mathrm{d}t$. 现在考虑所有的广义坐标平面和广义动量平面, 得到在 $\mathrm{d}t$ 内体积元 $\mathrm{d}\varGamma$ 内相点数净变化总量为 $-\sum_{\beta=1}^s N(\frac{\partial}{\partial q_\beta}(\rho\dot{q_\beta})\,\mathrm{d}q_\beta\,\mathrm{d}A_\beta+\frac{\partial}{\partial p_\beta}(\rho\dot{p_\beta})\,\mathrm{d}p_\beta\,\mathrm{d}B_\beta)\,\mathrm{d}t=-\sum_{\beta=1}^s N(\frac{\partial}{\partial q_\beta}(\rho\dot{q_\beta})+\frac{\partial}{\partial p_\beta}(\rho\dot{p_\beta}))\,\mathrm{d}\varGamma\,\mathrm{d}t$. 如果令 $\boldsymbol{v}=(\dot{q_1},\ldots,\dot{q_s},\dot{p_1},\ldots,\dot{p_s})$, 则 $-\sum_{\beta=1}^s N(\frac{\partial}{\partial q_\beta}(\rho\dot{q_\beta})+\frac{\partial}{\partial p_\beta}(\rho\dot{p_\beta}))\,\mathrm{d}\varGamma\,\mathrm{d}t=-N\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\cdot}(\rho\boldsymbol{v})\,\mathrm{d}\varGamma\,\mathrm{d}t=-N(\boldsymbol{\nabla}\rho\cdot\boldsymbol{v}+\rho\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\cdot}\boldsymbol{v})\,\mathrm{d}\varGamma\,\mathrm{d}t$. 又由于在 $\mathrm{d}t$ 内体积元 $\mathrm{d}\varGamma$ 内相点数净变化总量为 $N(\partial\rho/\partial t)\,\mathrm{d}\varGamma\,\mathrm{d}t$, 得

$$\begin{aligned}-\frac{\partial\rho}{\partial t}=\boldsymbol{\nabla}\rho\cdot\boldsymbol{v}+\rho\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\cdot}\boldsymbol{v}&=\sum_{\beta=1}^s\left(\frac{\partial\rho}{\partial q_\beta}\dot{q_\beta}+\frac{\partial\rho}{\partial p_\beta}\dot{p_\beta}+\frac{\partial\dot{q_\beta}}{\partial q_\beta}\rho+\frac{\partial\dot{p_\beta}}{\partial p_\beta}\rho\right)\\&=\sum_{\beta=1}^s\left(\frac{\partial\rho}{\partial q_\beta}\dot{q_\beta}+\frac{\partial\rho}{\partial p_\beta}\dot{p_\beta}+\frac{\partial^2\mathcal{H}}{\partial q_\beta\partial p_\beta}\rho-\frac{\partial^2\mathcal{H}}{\partial p_\beta\partial q_\beta}\rho\right)=\sum_{\beta=1}^s\left(\frac{\partial\rho}{\partial q_\beta}\dot{q_\beta}+\frac{\partial\rho}{\partial p_\beta}\dot{p_\beta}\right)=\{\rho,\mathcal{H}\}.\end{aligned}$$

因此, 有**刘维尔方程**

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\cdot}(\rho\boldsymbol{v})=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\{\rho,\mathcal{H}\}=0.\tag{1.14}$$

相空间的概率密度的行为类似不可压缩流体, 刘维尔方程也具有流体连续性方程的形式. 如果选取相空间中的相点 $(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$, 经过 $\mathrm{d}t$ 后该相点抵达新的相点 $(\boldsymbol{q}+\mathrm{d}\boldsymbol{q}\,,\boldsymbol{p}+\mathrm{d}\boldsymbol{p})$ 并形成了一条相轨道, 现在我们沿该相轨道跟随相点移动, 并观察所处相点周围相体积元 $\mathrm{d}\varGamma$ 内相点的数目随所处时间的变化, 可以发现所处相点周围体积元内相点数目总是恒定的, 即 $\rho(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=\rho(\boldsymbol{q}+\mathrm{d}\boldsymbol{q}\,,\boldsymbol{p}+\mathrm{d}\boldsymbol{p}\,,t+\mathrm{d}t)$.

我们考虑狭义相对论时空观下的自由粒子的力学量和运动方程. 自由粒子的哈密顿作用量应与参考系的选择无关, 因此它在洛伦兹变换下是保持不变的. 当我们将最小作用量原理和作用量的洛伦兹不变性等基本原理相结合, 可以唯一确定自由粒子的哈密顿作用量为

$$S=\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}\mathcal{L}\,\mathrm{d}t=-mc\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}\mathrm{d}s\,.$$

其中, c 是光速, m 是粒子的一种内秉性质 (称为**质量**), $\mathrm{d}s=c\,\mathrm{d}\tau=c\,\mathrm{d}t\,\sqrt{1-\boldsymbol{v}^2/c^2}=c\,\mathrm{d}t\,/\gamma$ 是粒子运动的不变

间隔, $\mathrm{d}\tau$ 是固有时间间隔, $\boldsymbol{v}=\mathrm{d}\boldsymbol{x}/\mathrm{d}t$ 是粒子的广义速度. 因此, 粒子的拉格朗日函数, 广义动量, 广义能量分别为

$$\mathcal{L}=-mc^2\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}},\quad \boldsymbol{p}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\boldsymbol{v}}=\frac{m\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}}}=\frac{E\boldsymbol{v}}{c^2},\quad E=\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v}-\mathcal{L}=\frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}}}=c\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2c^2}.$$

此外, 有质能方程

$$E^2=\boldsymbol{p}^2c^2+m^2c^4, \tag{1.15}$$

静止的自由粒子也具有**静止质量** mc^2, 质量不为零的自由粒子不可能以光速运动. 粒子的运动方程为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=0. \tag{1.16}$$

在非相对论极限下, 粒子的拉格朗日函数, 广义动量, 广义能量, 运动方程分别为

$$\mathcal{L}=E=\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2,\quad \boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v},\quad \frac{\mathrm{d}(m\boldsymbol{v})}{\mathrm{d}t}=0.$$

我们也可以采用四维坐标的协变形式表示自由粒子的力学量和运动方程, 令 x^μ 为四维坐标. 采用变分法, 我们有

$$\delta S=-mc\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\delta\sqrt{\mathrm{d}x^\mu\,\mathrm{d}x_\mu}=-mc\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\frac{\mathrm{d}x^\mu\,\mathrm{d}\,\delta x_\mu}{\mathrm{d}s}=-mc\frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}s}\,\delta x_\mu\Big|_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}+mc\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\mathrm{d}s\,\delta x_\mu\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}s}.$$

由于 $\delta x_\mu(a)=\delta x_\mu(b)=0$, 得 $-mc\frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}s}\,\delta x_\mu\big|_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}=0$. 为了使 S 取极小值, $\delta S=0$. 由于 δx_μ 的任意性, 得粒子的运动方程的四维协变形式

$$\frac{\mathrm{d}^2x^\mu}{\mathrm{d}s^2}=0. \tag{1.17}$$

我们称 $v^\mu=\mathrm{d}x^\mu/\mathrm{d}s=(\gamma,\gamma\boldsymbol{v}/c)$ 为粒子的**四维速度**, $a^\mu=\mathrm{d}v^\mu/\mathrm{d}s=(\gamma^4(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{a})/c^2,\gamma^2\boldsymbol{a}/c+\gamma^4(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{a})\boldsymbol{v}/c^3)$ 为粒子的**四维加速度**, 称 $p^\mu=mcv^\mu=(\gamma mc,\gamma m\boldsymbol{v})=(E/c,\boldsymbol{p})$ 为粒子的**四维动量**, 称 $f^\mu=\mathrm{d}p^\mu/\mathrm{d}s=mc\,\mathrm{d}v^\mu/\mathrm{d}s=(\gamma(\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v})/c^2,\gamma\boldsymbol{f}/c)$ 为粒子的**四维力**. 其中, $\boldsymbol{a}=\mathrm{d}\boldsymbol{v}/\mathrm{d}t$ 是广义加速度, $\boldsymbol{f}=\mathrm{d}\boldsymbol{p}/\mathrm{d}t$ 是广义力. 由于四维速度, 四维加速度, 四维动量, 四维力都是四矢量, 它们在洛伦兹变换下的变换规则与四维坐标的变换规则一致. 注意, $v_\mu v^\mu=1$, $a_\mu v^\mu=0$, $f_\mu v^\mu=0$ 恒成立. 此外, 静止质量为 m 的粒子的四维动量 p^μ 和其自身的内积为 $p^\mu p_\mu=(E/c)^2-\boldsymbol{p}^2=m^2c^2$. 由多个粒子组成的体系的哈密顿作用量 S 为

$$S=\sum_i -m_ic\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\mathrm{d}s\,.$$

我们考虑狭义相对论时空观下的粒子与洛伦兹标量外场间存在相互作用时的力学量和运动方程. 与标量外场间存在相互作用的粒子的哈密顿作用量为, 拉格朗日函数, 运动方程分别为

$$S=\int_{t_{\mathrm{i}}}^{t_{\mathrm{f}}}\mathcal{L}\,\mathrm{d}t=-mc\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\mathrm{d}s\,\mathrm{e}^{\Phi(\boldsymbol{x})}.$$

其中, $\Phi(\boldsymbol{x})$ 是标量外场, 当 $\Phi(\boldsymbol{x})$ 恒为零时即为自由粒子情形. 粒子的拉格朗日函数, 广义动量, 广义能量分别为

$$\mathcal{L}=-mc^2\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}}\mathrm{e}^{\Phi(\boldsymbol{x},t)},\quad \boldsymbol{p}=\frac{m\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}}}\mathrm{e}^{\Phi(\boldsymbol{x},t)},\quad E=\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v}-\mathcal{L}=\frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}}}\mathrm{e}^{\Phi(\boldsymbol{x},t)}.$$

粒子的运动方程为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=-mc^2\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}}\mathrm{e}^{\Phi(\boldsymbol{x},t)}\frac{\partial\Phi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}. \tag{1.18}$$

在非相对论极限下, 令 $V(\boldsymbol{x},t)$ 是粒子与标量外场的相互作用能 (称为**势能**), 标量外场 $\Phi(\boldsymbol{x},t)=V(\boldsymbol{x},t)/mc^2$, 此时粒子的拉格朗日函数, 广义动量, 广义能量, 运动方程分别为

$$\mathcal{L}=\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2-V(\boldsymbol{x},t),\quad \boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v},\quad E=\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2+V(\boldsymbol{x},t),\quad \frac{\mathrm{d}(m\boldsymbol{v})}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial V(\boldsymbol{x},t)}{\partial\boldsymbol{x}}.$$

由多个粒子组成的体系的哈密顿作用量 S 为

$$S=\sum_i -m_ic\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\mathrm{d}s\,\mathrm{e}^{\Phi(\boldsymbol{x})}.$$

我们考虑狭义相对论时空观下的粒子与洛伦兹矢量外场间存在相互作用时的力学量和运动方程. 矢量外场常用四维势和四维流进行描述, 我们称 $A^\mu=(\Phi,\boldsymbol{A})$ 是矢量外场的**四维势**, 称 $J^\mu=\rho\,\mathrm{d}x^\mu/\mathrm{d}t=(c\rho,\boldsymbol{j})$ 为矢量外

场的**四维流**, 称 Φ 为 A^μ 的**标量势**, 称 $\boldsymbol{A}$ 为 A^μ 的**矢量势**, 称 $\rho=\sum_a e_a\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_a)$ 为 J^μ 的**荷密度**, 称 $\boldsymbol{j}=\rho\boldsymbol{v}$ 为 J^μ 的**流密度**, 称 e_a 为处于外场 a 处的粒子与矢量外场的耦合强度, 称 $\boldsymbol{r_a}$ 为处于外场 a 处的粒子的径矢, 并将 $\boldsymbol{E}=-\boldsymbol{\nabla}\Phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}$ 和 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}$ 视作一种场强. 注意, 标量势 Φ 和矢量势 $\boldsymbol{A}$ 的定义并不是唯一的, 可以存在两套不同的四维势 $A^\mu, A^{\mu\prime}$ 对应相同的 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ (即矢量外场的规范对称性). 荷密度 ρ 和流密度 $\boldsymbol{j}$ 之间有**连续性方程**

$$\partial_\mu J^\mu=0,\quad \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{j}=0,\quad \frac{\partial}{\partial t}\int_V\rho\,\mathrm{d}V=-\oint_S\boldsymbol{j}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}. \tag{1.19}$$

其中, $\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 是包围体积元 $\mathrm{d}V$ 的曲面的有向面元, $\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 指向曲面的外法线方向. 与矢量外场间存在相互作用的粒子的哈密顿作用量为

$$S=\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}\mathcal{L}\,\mathrm{d}t=-mc\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}\mathrm{d}s-\frac{e}{c}\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}A_\mu(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}x^\mu=-\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}\left(mc+\frac{e}{c}v^\mu A_\mu\right)\mathrm{d}s\,.$$

其中, e 是粒子与矢量外场的耦合强度, $A_\mu(\boldsymbol{x})$ 是四维势. 粒子的拉格朗日函数, 广义动量, 广义能量分别为

$$\mathcal{L}=-mc^2\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}}+\frac{e}{c}(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}))-e\Phi(\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{p}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\boldsymbol{v}}=\frac{m\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}}}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}),\quad E=\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v}-\mathcal{L}=\frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}}}+e\Phi(\boldsymbol{x}).$$

粒子的运动方程为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=e\left(\boldsymbol{E}+\frac{\boldsymbol{v}}{c}\times\boldsymbol{B}\right). \tag{1.20}$$

电磁场通常被认为是一个洛伦兹矢量场, 与电磁场间存在相互作用的带电粒子是前述与矢量外场间存在相互作用的粒子的特例, 此时耦合强度 e 是粒子的一种内秉性质 (称为**电荷**), $\boldsymbol{E}$ 称为**电场强度**, $\boldsymbol{B}$ 称为**磁感应强度**, ρ 称为**电荷密度**, $\boldsymbol{j}$ 称为**电流密度**, 连续性方程即为**电荷守恒定律**. 在非相对论极限下, 粒子的拉格朗日函数, 广义动量, 广义能量, 运动方程分别为

$$\mathcal{L}=\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2+\frac{e}{c}(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t))-e\Phi(\boldsymbol{x},t),\quad \boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t),\quad E=\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2+e\Phi(\boldsymbol{x},t),\quad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=e\left(\boldsymbol{E}+\frac{\boldsymbol{v}}{c}\times\boldsymbol{B}\right).$$

令 $F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu$ 是四维势 $A_\mu(\boldsymbol{x})$ 的场强的二阶反对称张量, $\tilde{F}^{\mu\nu}=0.5\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}F_{\rho\sigma}$ 是场强张量 $F_{\mu\nu}$ 的 Hodge 对偶. 具体地,

$$F_{\mu\nu}=\begin{pmatrix}0&-E_1&-E_2&-E_3\\E_1&0&-B_3&B_2\\E_2&B_3&0&-B_1\\E_3&-B_2&B_1&0\end{pmatrix},\quad \tilde{F}_{\mu\nu}=\begin{pmatrix}0&-B_1&-B_2&-B_3\\B_1&0&E_3&-E_2\\B_2&-E_3&0&E_1\\B_3&E_2&-E_1&0\end{pmatrix}.$$

注意, 影响粒子的力学量和运动方程的不是四维势 A_μ 本身, 而是其派生出的场强张量 $F_{\mu\nu}$. 事实上, 四维势 A_μ 经**规范变换** $\tilde{A}_\mu(\boldsymbol{x})=A_\mu(\boldsymbol{x})+\partial_\mu\Phi(\boldsymbol{x})$ 后哈密顿作用量变为

$$\tilde{S}=-mc\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}\mathrm{d}s-\frac{e}{c}\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}A_\mu(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}x^\mu-\frac{e}{c}\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}\frac{\partial\Phi(\boldsymbol{x})}{\partial x^\mu}\,\mathrm{d}x^\mu=S-\frac{e}{c}(\Phi(\boldsymbol{x}_b)-\Phi(\boldsymbol{x}_a)),$$

其中 $\Phi(\boldsymbol{x})$ 是任意标量场. 由于 $\delta\tilde{S}=\delta S$, 粒子的力学量和运动方程在矢量外场的四维势的规范变换下保持不变, 因此矢量外场存在**规范对称性**. 场强张量在洛伦兹变换下的变换规则为 $F'_{\mu'\nu'}=\Lambda_{\mu'}{}^{\mu}\Lambda_{\nu'}{}^{\nu}F_{\mu\nu}$. 对于仅含推动而不含三维空间转动的洛伦兹变换, 可以进一步给出 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 在洛伦兹变换下的变换规则为

$$\boldsymbol{E}'=\gamma(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{\beta}\times\boldsymbol{B})-\frac{\gamma^2}{1+\gamma}(\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{E})\boldsymbol{\beta},\quad \boldsymbol{B}'=\gamma(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{\beta}\times\boldsymbol{E})-\frac{\gamma^2}{1+\gamma}(\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{\beta}.$$

由 $F^{\mu\nu}$ 和 $\tilde{F}^{\mu\nu}$ 可以构造出两类洛伦兹不变量, 分别为

$$F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}=-\tilde{F}^{\mu\nu}\tilde{F}_{\mu\nu}=-2(\boldsymbol{E}^2-\boldsymbol{B}^2),\quad \tilde{F}^{\mu\nu}F_{\mu\nu}=-4\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{B}.$$

因此, 我们可以得出

- 如果 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 在某个惯性系中是垂直的, 则它们在任意惯性系中都是垂直的.
- 如果在某个惯性系中仅存在电场 (或磁场), 则在任意惯性系中电场 (或磁场) 不为零.
- 如果 $|\boldsymbol{E}|>|\boldsymbol{B}|$ 在某个惯性系中成立, 则在任意惯性系中都成立, 反之亦然.

我们也可以采用四维坐标的协变形式表示自由粒子的力学量和运动方程, 令 x^μ 为四维坐标. 假设场是已知的, 只

变分粒子的四维坐标, 我们有

$$
\begin{aligned}
\delta S &= -\delta\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(mc+\frac{e}{c}v^\mu A_\mu\right)\mathrm{d}s = -\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(mcv_\mu\,\mathrm{d}\,\delta x^\mu+\frac{e}{c}A_\mu\,\mathrm{d}\,\delta x^\mu+\frac{e}{c}\,\delta A_\mu\,\mathrm{d}x^\mu\right)\\
&= \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(mc\,\mathrm{d}v_\mu\,\delta x^\mu+\frac{e}{c}\,\delta x^\mu\,\mathrm{d}A_\mu-\frac{e}{c}\,\delta A_\mu\,\mathrm{d}x^\mu\right)-\left(mcv_\mu+\frac{e}{c}A_\mu\right)\delta x^\mu\Big|_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\\
&= \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(mc\,\mathrm{d}v_\mu\,\delta x^\mu+\frac{e}{c}\frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu}\,\delta x^\mu\,\mathrm{d}x^\nu-\frac{e}{c}\frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu}\,\delta x^\nu\,\mathrm{d}x^\mu\right)-\left(mcv_\mu+\frac{e}{c}A_\mu\right)\delta x^\mu\Big|_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\\
&= \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(mc\frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}s}+\frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu}-\frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu}\right)v^\nu\right)\delta x^\mu\,\mathrm{d}s-\left(mcv_\mu+\frac{e}{c}A_\mu\right)\delta x^\mu\Big|_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\\
&= \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(mc\frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}s}-\frac{e}{c}F_{\mu\nu}v^\nu\right)\delta x^\mu\,\mathrm{d}s-\left(mcv_\mu+\frac{e}{c}A_\mu\right)\delta x^\mu\Big|_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}.
\end{aligned}
$$

由于 $\delta x_\mu(a)=\delta x_\mu(b)=0$, 得 $(mcv_\mu+\frac{e}{c}A_\mu)\,\delta x^\mu\,\big|_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}=0$. 为了使 S 取极小值, $\delta S=0$. 由于 δx^μ 的任意性, 得粒子的运动方程的四维协变形式

$$
mc\frac{\mathrm{d}x_\mu}{\mathrm{d}s}=\frac{e}{c}F_{\mu\nu}\frac{\mathrm{d}x^\nu}{\mathrm{d}s}=\frac{e}{c}\begin{vmatrix}\partial_\mu & \partial_\nu\\ A_\mu & A_\nu\end{vmatrix}\frac{\mathrm{d}x^\nu}{\mathrm{d}s}. \tag{1.21}
$$

由 Bianchi 恒等式

$$
\partial_\mu\tilde{F}^{\mu\nu}=\partial_\mu F_{\nu\rho}+\partial_\nu F_{\rho\mu}+\partial_\rho F_{\mu\nu}=0,
$$

我们可以得到形式上的**法拉第电磁感应定律**和**磁高斯定理**

$$
\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t},\quad \nabla\cdot\boldsymbol{B}=0. \tag{1.22}
$$

矢量外场和场内多个粒子组成的体系的哈密顿作用量 S 应当包含三个部分, 分别为描述自由粒子的运动的哈密顿作用量 S_{m}, 描述粒子与场的相互作用的哈密顿作用量 S_{mf}, 描述场的运动的哈密顿作用量 S_{f}, 即

$$
\begin{aligned}
S = S_{\mathrm{m}}+S_{\mathrm{mf}}+S_{\mathrm{f}} &= -\sum_i m_ic\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\mathrm{d}s-\sum_i\frac{e_i}{c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}A_\mu(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}x^\mu+\frac{d}{c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\,\mathrm{d}^4x\\
&= -\sum_i m_ic\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\mathrm{d}s-\frac{1}{c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\rho A_\mu(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}x^\mu\,\mathrm{d}V+\frac{d}{c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\,\mathrm{d}^4x\\
&= -\sum_i m_ic\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\mathrm{d}s-\frac{1}{c^2}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}A_\mu J^\mu\,\mathrm{d}^4x+\frac{d}{c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\,\mathrm{d}^4x\,.
\end{aligned}
$$

其中, d 的数值与场的测量单位有关, 在高斯单位制下 $d=-1/16\pi$. 现在考虑矢量外场的力学量和运动方程, 矢量外场的哈密顿作用量为

$$
S=\int_{t_{\mathrm{i}}}^{t_{\mathrm{f}}}\mathcal{L}\,\mathrm{d}t=-\frac{1}{c^2}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}A_\mu J^\mu\,\mathrm{d}^4x+\frac{1}{16\pi c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\,\mathrm{d}^4x\,.
$$

假设场内粒子的运动是已知的, 只变分场的四维势, 我们有

$$
\begin{aligned}
\delta S &= -\frac{1}{c}\,\delta\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(\frac{1}{c}A_\mu J^\mu+\frac{1}{16\pi}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\right)\mathrm{d}^4x = -\frac{1}{c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(\frac{1}{c}J^\mu\,\delta A_\mu+\frac{1}{16\pi}\,\delta\big(F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\big)\right)\mathrm{d}^4x\\
&= -\frac{1}{c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(\frac{1}{c}J^\mu\,\delta A_\mu+\frac{1}{8\pi}F^{\mu\nu}\,\delta F_{\mu\nu}\right)\mathrm{d}^4x = -\frac{1}{c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(\frac{1}{c}J^\mu\,\delta A_\mu+\frac{1}{8\pi}F^{\mu\nu}\partial_\mu\,\delta A_\nu-\frac{1}{8\pi}F^{\mu\nu}\partial_\nu\,\delta A_\mu\right)\mathrm{d}^4x\\
&= -\frac{1}{c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(\frac{1}{c}J^\mu\,\delta A_\mu-\frac{1}{4\pi}F^{\mu\nu}\partial_\nu\,\delta A_\mu\right)\mathrm{d}^4x = -\frac{1}{c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}\left(\frac{1}{c}J^\mu+\frac{1}{4\pi}\frac{\partial F^{\mu\nu}}{\partial x^\nu}\right)\delta A_\mu\,\mathrm{d}^4x+\frac{\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}F^{\mu\nu}\,\delta A_\mu\,\mathrm{d}S_\nu}{4\pi c}\Bigg|_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}.
\end{aligned}
$$

由于 $\delta A_\mu(a)=\delta A_\mu(b)=0$, 得 $\frac{1}{4\pi c}\int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}F^{\mu\nu}\,\delta A_\mu\,\mathrm{d}S_\nu\,\Big|_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}}=0$. 为了使 S 取极小值, $\delta S=0$. 由于 δA^μ 的任意性, 得场的运动方程的四维协变形式

$$
\partial_\nu F^{\mu\nu}=-\frac{4\pi}{c}J^\mu. \tag{1.23}
$$

因此, 我们可以得到形式上的**高斯定理**和**安培环路定理**

$$
\nabla\cdot\boldsymbol{E}=4\pi\rho,\quad \nabla\times\boldsymbol{B}=\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}+\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}. \tag{1.24}
$$

现在考虑一般的场的分析力学, 并采用自然单位制 (此时 $c=1$). 将场的**正则坐标** $\phi(\boldsymbol{x},t)$ 记作 $\phi(x)$, 由于场依赖于连续时空, 我们需要引入**拉格朗日密度** $\mathscr{L}(\phi(x),\partial_\mu\phi(x))$, 此时场的作用量是

$$S=\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}\mathcal{L}\,\mathrm{d}t=\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}\mathrm{d}t\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}\mathscr{L}\,\mathrm{d}^3x=\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}\mathscr{L}\,\mathrm{d}^4x\,.$$

其中 $\mathscr{L}$ 和 d^4x 在洛伦兹变换下保持不变. 我们可采用变分法获得场的力学量和运动方程, 具体地

$$\begin{aligned}\delta S=\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}\delta\mathscr{L}\,\mathrm{d}^4x&=\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\phi(x)}\,\delta\phi(x)+\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi(x))}\,\delta(\partial_\mu\phi(x))\right)\mathrm{d}^4x\\&=\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\phi(x)}\,\delta\phi(x)+\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi(x))}\partial_\mu(\delta\phi(x))\right)\mathrm{d}^4x\\&=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi(x))}\,\delta\phi(x)\bigg|_\mathrm{i}^\mathrm{f}+\int_\mathrm{i}^\mathrm{f}\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\phi(x)}-\partial_\mu\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi(x))}\right)\delta\phi(x)\,\mathrm{d}^4x\,.\end{aligned}$$

由于 $\delta\phi(a)=\delta\phi(b)=0$, 得 $\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi(x))}\,\delta\phi(x)\Big|_\mathrm{i}^\mathrm{f}=0$. 为了使 S 取极小值, $\delta S=0$. 由于 $\delta\phi(x)$ 的任意性, 得场的**欧拉–拉格朗日方程**

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\phi(x)}-\partial_\mu\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi(x))}=0.\tag{1.25}$$

我们可以定义**正则动量** $\pi(x)=\partial\mathscr{L}/\partial\dot\phi$, **哈密顿密度** $\mathscr{H}(\phi(x),\boldsymbol{\nabla}\phi(x),\pi(x))=\pi\dot\phi-\mathscr{L}$. 通过勒让德变换, 可以得到场的**哈密顿方程**

$$\dot\phi(x)=\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\pi(x)},\quad\dot\pi(x)=-\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\phi(x)}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\boldsymbol{\nabla}\phi(x))}\right).\tag{1.26}$$

考虑函数 $f=f(\phi,\pi,t)$, 由于 $\boldsymbol{\nabla}\phi$ 不显含时, 有 $\mathrm{d}f/\mathrm{d}t=\partial f/\partial t+\frac{\partial f}{\partial\phi}\dot\phi+\frac{\partial f}{\partial\pi}\dot\pi=\partial f/\partial t+\{f,\mathscr{H}(\phi,\pi)\}$. 如果函数 f 不显含时间, 则有 $\mathrm{d}f/\mathrm{d}t=\{f,\mathscr{H}(\phi,\pi)\}$.

我们给出一些具体自由场的拉格朗日密度和运动方程. 实标量场 $\phi(x)$ 的拉格朗日密度和运动方程 (克莱因-高登方程) 为

$$\mathscr{L}=\frac{1}{2}(\partial_\mu\phi(x)\partial^\mu\phi(x)-m^2\phi^2(x)),\quad(\partial_\mu\partial^\mu+m^2)\phi(x)=0,$$

其正则动量和哈密顿密度为

$$\pi(x)=\dot\phi(x),\quad\mathscr{H}=\frac{1}{2}(\pi^2+(\boldsymbol{\nabla}\phi)^2+m^2\phi^2).$$

复标量场 $\phi(x)$ 的拉格朗日密度和运动方程为

$$\mathscr{L}=\frac{1}{2}\partial_\mu\phi^*(x)\partial^\mu\phi(x)-\frac{1}{2}m^2\phi^*(x)\phi(x),\quad(\partial_\mu\partial^\mu+m^2)\phi(x)=0,\quad(\partial_\mu\partial^\mu+m^2)\phi^*(x)=0,$$

其正则动量和哈密顿密度为

$$\pi(x)=\dot\phi^*(x),\quad\pi^*(x)=\dot\phi(x),\quad\mathscr{H}=\pi^*\dot\phi^*+\pi\dot\phi-\mathscr{L}=\pi\pi^*+\boldsymbol{\nabla}\phi\cdot\boldsymbol{\nabla}\phi^*+m^2\phi\phi^*.$$

狄拉克旋量场 $\psi(x)$ 的拉格朗日密度和运动方程 (狄拉克方程) 为

$$\mathscr{L}=\bar\psi(x)(\mathrm{i}\boldsymbol{\gamma}^\mu\partial_\mu-m)\psi(x),\quad(\mathrm{i}\boldsymbol{\gamma}^\mu\partial_\mu-m)\psi(x)=0,\quad(-\mathrm{i}\boldsymbol{\gamma}^\mu\partial_\mu-m)\bar\psi(x)=0,$$

其正则动量和哈密顿密度为

$$\pi(x)=\frac{\mathrm{i}}{2}\bar\psi(x)\boldsymbol{\gamma}^0,\quad\bar\pi(x)=-\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\gamma}^0\psi(x),\quad\mathscr{H}=\pi\dot\psi-\dot{\bar\psi}\bar\pi-\mathscr{L}.$$

其中, $\boldsymbol{\gamma}^\mu=\begin{pmatrix}0&\boldsymbol{\sigma}^\mu\\\bar{\boldsymbol{\sigma}}^\mu&0\end{pmatrix}$, 而 $\boldsymbol{\sigma}^0=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$, $\boldsymbol{\sigma}^1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$, $\boldsymbol{\sigma}^2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$, $\boldsymbol{\sigma}^3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$ 称为**泡利矩阵**. 矢量场 $A^\mu(x)$ 的拉格朗日密度和运动方程 (有源的麦克斯韦方程) 为

$$\mathscr{L}=-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}-J_\mu A^\mu,\quad\partial_\mu F^{\mu\nu}-J^\nu=0,$$

有源的麦克斯韦方程的四维协变形式可改写为

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{E}=\rho,\quad\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{B}=\boldsymbol{j}+\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}.$$

命题 1.4 (局域变分与全变分)

函数 $f(x)$ 在给定无穷小变换 T 下, 自变量 $x \mapsto x' = x + \delta x$, 函数 $f \mapsto f'$.

- 如果 $\delta f(x) = f'(x') - f(x) = f'(x + \delta x) - f(x)$, 则称 $\delta f(x)$ 为 $f(x)$ 的局域变分.
- 如果 $\delta_0 f(x) = f'(x) - f(x)$, 则称 $\delta_0 f(x)$ 为 $f(x)$ 的全变分.

局域变分与全变分之间 (在忽略函数二阶及以上小量时) 的关系为 $\delta = \delta_0 + \delta x^\mu\,\partial_\mu$. 全变分可以与微分算符对易, 即 $\delta_0(\partial_\mu\phi) = \partial_\mu(\delta_0\phi)$. 局域变分不可与微分算符对易, 且 $\delta(\partial_\mu\phi) = \partial_\mu(\delta\phi) - (\partial_\nu\phi)(\partial_\mu\delta x^\nu)$. 更多相关内容参考微分几何和场论相关专著.

在经典场论中, 任意使作用量不变的连续对称变换均会导致存在一个守恒流和运动积分. 考虑对称变换 T 下, 坐标 $x \mapsto x'$, 场 $\phi(x) \mapsto \phi'(x')$, 拉格朗日密度 $\mathscr{L}(\phi(x), \partial_\mu\phi(x)) \mapsto \mathscr{L}'(\phi'(x'), \partial_\mu\phi'(x'))$, 则

$$
\begin{aligned}
\delta\mathscr{L} &= \mathscr{L}' - \mathscr{L} = \delta_0\mathscr{L} + \delta x^\mu\,\partial_\mu\mathscr{L} = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\phi}\delta_0\phi + \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\delta_0(\partial_\mu\phi) + \delta x^\mu\,\partial_\mu\mathscr{L} \\
&= \left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\phi} - \partial_\mu\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\right)\delta_0\phi + \partial_\mu\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\delta_0\phi\right) + \delta x^\mu\,\partial_\mu\mathscr{L} = \partial_\mu\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\delta_0\phi\right) + \delta x^\mu\,\partial_\mu\mathscr{L}, \\
\delta S &= \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}} \mathscr{L}'\,\mathrm{d}^4x' - \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}} \mathscr{L}\,\mathrm{d}^4x = \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}} (\mathscr{L} + \delta\mathscr{L})(1 + \partial_\mu\,\delta x^\mu)\,\mathrm{d}^4x - \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}} \mathscr{L}\,\mathrm{d}^4x \\
&= \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}} (\delta\mathscr{L} + (\partial_\mu\,\delta x^\mu)\mathscr{L})\,\mathrm{d}^4x = \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}} \partial_\mu\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\delta_0\phi + \delta x^\mu\,\mathscr{L}\right)\mathrm{d}^4x \\
&= \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}} \partial_\mu\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\,\delta\phi - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\,\delta x^\nu\,\partial_\nu\phi + \delta x^\nu\,\delta^\mu_\nu\mathscr{L}\right)\mathrm{d}^4x \\
&= \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}} \partial_\mu\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\delta\phi + \left(\delta^\mu_\nu\mathscr{L} - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\partial_\nu\phi\right)\delta x^\nu\right)\mathrm{d}^4x = \int_{\mathrm{i}}^{\mathrm{f}} \partial_\mu J^\mu_{\text{Noether}}\,\mathrm{d}^4x\,.
\end{aligned}
$$

其中, J^μ_{Noether} 称为**诺特流**. 由于变换 T 是对称变换, 得 $\delta S = 0$, 因此有**诺特定理**

$$
\partial_\mu J^\mu_{\text{Noether}} = 0. \tag{1.27}
$$

诺特流 J^μ_{Noether} 的表达式中有两项，第一项对应场的变换，第二项对应时空坐标的变换. 诺特流是守恒流, 其对应的运动积分**诺特荷**为

$$
Q_{\text{Noether}} = \int_{V\to\infty} J^0_{\text{Noether}}\,\mathrm{d}^3x\,. \tag{1.28}
$$

洛伦兹矢量场的流密度及荷密度的连续性方程是诺特定理的特殊情况. 注意, 诺特定理仅在经典水平上是成立的, 而经典的对称性在量子化后很可能被破坏 (如对称性自发破缺或存在量子反常), 因此力学系统在量子化后经典的对称性是否仍然成立是需要进一步考察的.

四维闵可夫斯基空间的对称性由庞加莱群描述, 其具有 10 种独立的对称性, 包括 4 种时空平移对称性和 6 种洛伦兹对称性. 时空平移对称性的 4 个守恒荷是能量和动量, 而洛伦兹对称性的 6 个守恒荷是广义角动量. 在无穷小时空平移变换 F 下, 坐标 $x^\mu \mapsto x'^\mu = x^\mu + \epsilon^\mu$, 场 $\phi_r(x) \mapsto \phi'_r(x') = \phi_r(x) - \epsilon^\mu\partial_\mu\phi_r(x) = \phi_r(x)$, 有 $\delta\phi_r = 0$ 且 $\delta x^\mu = \epsilon^\mu$, 令**能量动量张量**为 $T^\mu{}_\nu = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_r)}\partial_\nu\phi_r - \delta^\mu_\nu\mathscr{L}$, 得 $J^\mu_{\text{Noether}} = -T^\mu{}_\nu\epsilon^\nu$, 因此有 $\partial_\mu T^\mu{}_\nu = 0$, 其对应的运动积分 $P_\nu = \int_{V\to\infty} T^0{}_\nu\,\mathrm{d}^3x = \int_{V\to\infty}(\pi_r\partial_\nu\phi_r - \delta^0_\nu\mathscr{L})\,\mathrm{d}^3x = (E, \boldsymbol{P})$. 其中, $T^0{}_0$ 称为**能量密度**, $T^\mu{}_0$ 称为**能量流密度**, $T^0{}_\nu$ 称为**动量密度**, $T^\mu{}_\nu$ 称为**动量流密度**. 因此, 如果体系的拉格朗日密度 $\mathscr{L}$ 在时间平移变换下保持不变, 则体系的广义能量 E 守恒; 如果体系的拉格朗日密度 $\mathscr{L}$ 在空间平移变换下保持不变, 则体系的广义动量 $\boldsymbol{P}$ 守恒. 注意, 由诺特定理导出的 $T^\mu{}_\nu$ 并非总是对称张量, 但可以令 $\tilde{T}^\mu{}_\nu = T^\mu{}_\nu + \partial_\rho\chi^{\rho\mu}{}_\nu$ 满足 $\chi^{\rho\mu}{}_\nu = -\chi^{\mu\rho}{}_\nu$, 此时 $\partial_\mu\tilde{T}^\mu{}_\nu = \partial_\mu T^\mu{}_\nu = 0$ 且 $\tilde{P}_\nu = P_\nu$, 因此可以选取适当的 Belinfante 张量 $\chi^{\rho\mu}{}_\nu$ 使 $\tilde{T}^\mu{}_\nu$ 成为对称张量. 在无穷小洛伦兹变换 F 下, 坐标 $x^\mu \mapsto x'^\mu = x^\mu + \delta\omega^{\mu\nu}\,x_\nu$, 场 $\phi_r(x) \mapsto \phi'_r(x') = \Lambda(a)_{rs}\phi_s(x) = \phi_r(x) + \frac{1}{2}\,\delta\omega_{\mu\nu}\,(J^{\mu\nu})_{rs}\phi_s(x)$, 有 $\delta\phi_r = \frac{1}{2}\,\delta\omega_{\mu\nu}\,(J^{\mu\nu})_{rs}\phi_s(x)$ 且 $\delta x^\mu = \delta\omega^{\mu\nu}\,x_\nu$. 其中 $J^{\mu\nu}$ 是无穷小洛伦兹变换的生成元, 满足 $[J^{\mu\nu}, J^{\rho\sigma}] = \eta^{\nu\rho}J^{\mu\sigma} + \eta^{\mu\sigma}J^{\nu\rho} - \eta^{\nu\sigma}J^{\mu\rho} - \eta^{\mu\rho}J^{\nu\sigma}$, 标量场满足 $(J^{\nu\rho})_{rs} = 0$, 矢量场满足 $(J^{\nu\rho})_{rs} = \eta^{\nu r}\eta^{\rho s} - \eta^{\nu s}\eta^{\rho r}$, 旋量场满足 $(J^{\nu\rho})_{rs} = \frac{1}{4}(\boldsymbol{\gamma}^\nu\boldsymbol{\gamma}^\rho - \boldsymbol{\gamma}^\rho\boldsymbol{\gamma}^\nu)_{rs} = \frac{1}{2\mathrm{i}}(\boldsymbol{\sigma}^{\nu\rho})_{rs}$. 由 $x^{\mu\prime}x'_\mu = (x^\mu + \delta\omega^{\mu\rho}\,x_\rho)(x_\mu + \delta\omega_\mu{}^\sigma\,x_\sigma) = x^\mu x_\mu + (\delta\omega_{\mu\nu} + \delta\omega_{\nu\mu})x_\mu x_\nu + O(\delta^2) = x^\mu x_\mu$, 得 $\delta\omega^{\mu\nu} = -\,\delta\omega^{\nu\mu}$, 因此 $T^{\mu\nu}\,\delta\omega_{\nu\rho}\,x^\rho = \frac{1}{2}\,\delta\omega_{\nu\rho}\,(T^{\mu\nu}x^\rho - T^{\mu\rho}x^\nu)$. 令

$M^{\mu\nu\rho}=T^{\mu\rho}x^\nu-T^{\mu\nu}x^\rho+\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_r)}(J^{\nu\rho})_{rs}\phi_s(x)$, 得 $J^\mu_{\text{Noether}}=\frac{1}{2}M^{\mu\nu\rho}\,\delta\omega_{\nu\rho}$, 因此有 $\partial_\mu M^{\mu\nu\rho}=0$, 其对应的运动积分 $M^{\nu\rho}=\int_{V\to\infty}M^{0\nu\rho}\,\mathrm{d}^3x=\int_{V\to\infty}(T^{0\rho}x^\nu-T^{0\nu}x^\rho+\pi_r(J^{\nu\rho})_{rs}\phi_s(x))\,\mathrm{d}^3x$. 其中, $M^{\nu\rho}$ 称为**角动量张量**. 如果 $T^{\mu\nu}$ 是对称张量, 则可定义 $\tilde{M}^{\mu\nu\rho}=T^{\mu\rho}x^\nu-T^{\mu\nu}x^\rho$, 其满足 $\tilde{M}^{\mu\nu\rho}=M^{\mu\nu\rho}+\partial_\sigma\chi^{\sigma\mu\nu\rho}$ 且 $\chi^{\sigma\mu\nu\rho}=-\chi^{\mu\sigma\nu\rho}$, 此时 $\partial_\mu\tilde{M}^{\mu\nu\rho}=\partial_\mu M^{\mu\nu\rho}=0$ 且 $\tilde{M}^{\nu\rho}=M^{\nu\rho}$. 当 $\nu,\lambda\in\{1,2,3\}$ 时, 令**空间角动量张量** $M^{nl}=L^{nl}+S^{nl}$ 满足 $L^{nl}=\int_{V\to\infty}(T^{0l}x^n-T^{0n}x^l)\,\mathrm{d}^3x=\int_{V\to\infty}\pi_r(\partial^l x^n-\partial^n x^l)\,\mathrm{d}^3x$ 且 $S^{nl}=\int_{V\to\infty}\pi_r(J^{nl})_{rs}\phi_s(x)\,\mathrm{d}^3x$, 这表明场的空间角动量张量 M^{nl} 可以分离为坐标部分 (轨道角动量) L^{nl} 和内禀部分 (自旋角动量) S^{nl}. 我们也可以定义**总空间角动量**为 $M^{nl}=\epsilon^{nlk}J_k$, 由 $\epsilon^{nlk}\epsilon^{nlm}=2\delta^k_m$, 得空间角动量矢量 $J_m=\frac{1}{2}\epsilon^{mnl}M^{nl}$, $\boldsymbol{J}=(M^{23},M^{31},M^{12})$.

1.2 量子力学

1.3 统计力学

统计力学基于概率原理描述具有大自由度的**热力学体系**, 体系中的所有粒子遵循经典力学规律, 大自由度又使体系具有**统计规律性**. 如果体系各部分的宏观性质不随时间改变, 且不存在外部或内部的某些作用使体系内以及体系与环境之间有任何宏观流 (物质流与能流) 和化学反应发生, 则称体系处于**平衡态**, 否则称体系处于**非平衡态**. 如果体系各部分的宏观性质不随时间改变, 但存在宏观流 (物质流或能流), 则称为**定态**. 换言之, 如果体系的**宏观状态**不随时间改变, 则称体系处于平衡态, 否则称体系处于非平衡态. 体系从非平衡态到达平衡态所需要的时间称为**弛豫时间**. 热力学体系以外的部分称为**环境**. 如果体系与环境之间不能交换物质与能量, 则称为**孤立体系**. 如果通过体系与环境的边界可交换能量, 但不能交换物质, 则称为**封闭体系**. 如果通过体系与环境的边界可交换物质与能量, 则称为**开放体系**. 热力学体系中物理性质均匀的一个宏观部分称为一个**相**, 各部分是完全均匀的体系称为**单相系**或**均相系**, 否则称为**复相系**或**非均相系**. 仅含一种化学组分的体系称为**单组分体系**, 否则称为**多组分体系**. 体系中粒子的种类和数目始终保持不变的体系称为**组成恒定体系**. 如果体系的宏观状态随时间发生改变, 则称体系经历了从**始态**到**终态**的**热力学过程**. 如果体系经历一个无限缓慢的热力学过程, 在过程的任意时刻体系都处于平衡态, 则称该过程**准静态过程**. 如果体系经历的热力学过程对体系和环境产生的影响能够在不引起其他变化的情况下完全消除, 则称该过程为**可逆过程**, 否则称为**不可逆过程**. 无耗散的准静态过程是可逆过程.

体系的宏观状态可由**宏观参量**描述, 处于平衡态的体系的宏观参量具有确定的数值. 常见的宏观参量包括几何参量 (如长度, 面积, 体积, 形变等), 力学参量 (如力, 压强, 胁强等), 电磁参量 (如电场强度, 电极化强度, 磁场强度, 磁化强度等), 热学参量 (如温度, 热力学能, 熵, 焓等), 化学参量 (如组分浓度, 化学势等). 处于平衡态的均相系的独立宏观参量的数目 F 满足 $F = R + \omega + 1$, 其中 R 是体系的可变物种数, ω 是可逆功的形式数, 1 来源于热交换. 通常将描述体系宏观状态的独立宏观参量称为体系的**状态变量**, 以状态变量为参数的函数称为体系的**状态函数**. 体系状态函数的改变量只取决于平衡始态和平衡终态, 与体系经历的热力学过程无关. 描述处于平衡态的均相系的各宏观参量之间关系的方程称为该体系的**物态方程**.

体系的微观状态分为纯态和混合态两类. 如果体系的微观状态可以由相空间 $\mathit{\Gamma}$ 的广义坐标 $\boldsymbol{q}$ 和广义动量 $\boldsymbol{p}$ 确定地描述, 则称微观状态处于**纯态**. 如果体系的微观状态由具有指定概率分布的一组微观状态概率性地描述, 则称微观状态处于**混合态**, 其中的微观状态的概率分布由概率密度函数指定. 从相空间的角度考虑, 处于纯态的微观状态就是一个相点, 而处于混合态的微观状态是一团相概率云.

我们现在考虑如何构建体系的微观状态和宏观状态之间的联系. 当我们测量体系的宏观参量时, 测量空间尺度是宏观小的 (宏观参量具有确定值) 而微观大的 (粒子的数量足够多), 测量时间尺度是宏观短的 (宏观参量具有确定值) 而微观长的 (粒子的微观状态已发生变化). 相空间 $\mathit{\Gamma}$ 中的相点在测量过程中必然会发生移动, 我们对宏观参量的测量值实际上是测量时间范围 $t_0 \le t \le t_0 + \tau$ 内众多微观量 $B(\boldsymbol{q}(t), \boldsymbol{p}(t))$ 的**时间平均值** $\langle B(t_0)\rangle_{\text{time}} = \frac{1}{\tau}\int_{t_0}^{t_0+\tau} B(\boldsymbol{q}(t), \boldsymbol{p}(t))\,\mathrm{d}t$. 但由于我们无法得到微观状态的实际相轨道表达式, 时间平均值也就不能计算. 我们转而考虑大量处于相同的宏观条件下, 具有相同宏观状态的相互独立的体系构成的集合, 即**系综**. 系综在相空间里表现为大量相点构成的区域, 这些相点具有相同的宏观状态. 具有给定宏观状态的体系的微观状态可以视作处于指定概率分布的一组系综内体系的微观状态, 此时该体系的微观状态处于混合态. 我们期望系综内所有体系在给定时刻下的微观状态包含相同宏观状态的体系在不同时刻的所有微观状态, 此时可以将体系在不同时刻的微观量的时间平均转化为系综内体系在同一时刻的微观量的系综平均, 这就解决了微观状态随时间演化对求宏观参量的困难. 考虑系综内体系在 t_0 时刻的微观量 $B(\boldsymbol{q}(t_0), \boldsymbol{p}(t_0))$ 的**系综平均值** $\langle B(t_0)\rangle_{\text{ens}} = \int_{\mathit{\Gamma}} \rho(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t_0) B(\boldsymbol{q}(t_0), \boldsymbol{p}(t_0))\,\mathrm{d}\mathit{\Gamma}$ 为系综的**宏观参量**, 我们引入**遍历性假设**后, 体系的宏观参量即为系综的宏观参量. 通常遍历性假设仅对封闭体系和保守体系有效, 但即使不引入遍历性假设, 我们也可以发展一套关于系综宏观性质的统计物理.

原理 1.3 (遍历性假设)

微观量的时间平均值与系综平均值相等, 即

$$\langle B(t_0)\rangle_{\text{time}} = \frac{1}{\tau}\int_{t_0}^{t_0+\tau} B(\boldsymbol{q}(t), \boldsymbol{p}(t))\,\mathrm{d}t = \int_{\mathit{\Gamma}} \rho(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t_0) B(\boldsymbol{q}(t_0), \boldsymbol{p}(t_0))\,\mathrm{d}\mathit{\Gamma} = \langle B(t_0)\rangle_{\text{ens}}, \tag{1.29}$$

记 $\langle B(t_0)\rangle = \langle B(t_0)\rangle_{\text{time}} = \langle B(t_0)\rangle_{\text{ens}}$.

我们现在可以考虑系综平均值 $\langle B(t)\rangle$ 随时间的演化规律

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\langle B(t)\rangle}{\mathrm{d}t} &= \int_\Gamma \frac{\partial\rho(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)}{\partial t}B(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})\,\mathrm{d}\Gamma = \int_\Gamma \sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial\rho}{\partial p_\beta}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q_\beta}-\frac{\partial\rho}{\partial q_\beta}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_\beta}\right)B(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})\,\mathrm{d}\Gamma\\ &= -\int_\Gamma \rho(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial B}{\partial p_\beta}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q_\beta}-\frac{\partial B}{\partial q_\beta}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_\beta}+B(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})\left(\frac{\partial^2\mathcal{H}}{\partial p_\beta\partial q_\beta}-\frac{\partial^2\mathcal{H}}{\partial q_\beta\partial p_\beta}\right)\right)\mathrm{d}\Gamma\\ &= -\int_\Gamma \rho(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)\{\mathcal{H},B\}\,\mathrm{d}\Gamma = \langle\{B,\mathcal{H}\}\rangle.\end{aligned}$$

特别地, 如果体系处于平衡态, 则 ρ_{eq} 为运动积分, $\partial\rho_{\text{eq}}/\partial t = \{\rho_{\text{eq}},\mathcal{H}\} = 0$, $\rho_{\text{eq}}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t) = \rho_{\text{eq}}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t+\mathrm{d}t) = \rho_{\text{eq}}(\boldsymbol{q}+\mathrm{d}\boldsymbol{q}\,,\boldsymbol{p}+\mathrm{d}\boldsymbol{p}\,,t+\mathrm{d}t)$, $\mathrm{d}\langle B(t)\rangle/\mathrm{d}t = \langle\{B,\mathcal{H}\}\rangle = 0$.

原理 1.4 (等几率原理)

对处于平衡态的孤立体系, 体系各个可能的微观状态出现的几率相等.

由具有固定广义能量 E 和广义坐标 $\boldsymbol{x}$ 的相互独立的热力学体系构成的集合称为**微正则系综**, 微正则系综中体系的微观状态为 μ 的概率密度满足

$$\rho_{(E,\boldsymbol{x})}(\mu) = \begin{cases}1/\Omega(E,\boldsymbol{x}), & \text{for } \mathcal{H}(\mu)=E,\\ 0, & \text{otherwise}.\end{cases} \tag{1.30}$$

根据等几率原理, 微正则系综可以用来描述孤立体系的热力学性质.