Day 16

Hamilton—Jacobi Theory

哈-雅理论最初提出的目的：解正则方程。这个解指的是 $2s$ 个初始坐标 $\{\bar{q},\bar{p}\}$ 由正则变换变成 $\{p(t),q(t)\}$。我们反过来要将 $\{q(t),p(t)\}$ 变常值。(找逆变换)

从而 $\{q(t),p(t)\}\to\{Q(t),P(t)\}$。 $\dot{Q}^a=\frac{\partial K}{\partial P_a}=0$。 $\dot{P}_a=-\frac{\partial K}{\partial Q^a}=0$。 最简单情形：$K(t)=0$ $\Rightarrow$ 找 F，使 $H+\frac{\partial F}{\partial t}=0$。将喉们信息放在正则变换中

(函数)，将每个相空间由它上面的一个点代表。记 $\{Q,P\}=\{\beta^1\cdots\beta^s,\alpha_1,\cdots\alpha_s\}$。使用Ⅱ型生成函数。$F_2(t,q,P)=S(t,q,\alpha)$。把这个生成函数称为主函数。

对于Ⅱ型变换有：$p_a=\frac{\partial S(t,q,\alpha)}{\partial q^a}$ $\beta^a=\frac{\partial S(t,q,\alpha)}{\partial\alpha_a}=\text{Const}$。将 Hamiltonian 中 p_a 换成上面 $\frac{\partial S}{\partial q^a}$，得到：$H(t,q^1\cdots q^s,\frac{\partial S}{\partial q^1}\cdots\frac{\partial S}{\partial q^s})+\frac{\partial S}{\partial t}=0$。此即所谓哈-雅方程

HJB方程是 $S(t,q)$ 的非线性方程，所以它其实很难得到通解。幸运地，我们只要找特解 $S(t,q,\alpha)$。由正则变换关系 $\beta^a=\frac{\partial S(t,q,\alpha)}{\partial\alpha_a}$ $\to q^a=q^a(t,\beta,\alpha)$。"完全积分"。

(只要正则变换可逆)

其中出现的"非可加"(在结构上的)常数就为 α，

再由 $p_a=\frac{\partial S(t,q,\alpha)}{\partial q^a}$ 得 $p_a(t,\beta,\alpha)$。

$\to$ 这结构是一个常数，直接取为 α_s。

最常用的找特解的方法是分离变量法。若Hamiltonian含有循环坐标，则 $S(t,q)$ 有如下结构：$S(t,q)=\bar{S}(t,q^1\cdots q^{s-1})+\left[\frac{\partial S}{\partial q^s}\right]\cdot q^s$

此时哈-雅方程变为 $H(t,q^1\cdots q^{s-1},\frac{\partial\bar{S}}{\partial q^1}\cdots\frac{\partial\bar{S}}{\partial q^{s-1}},\alpha_s)+\frac{\partial\bar{S}}{\partial t}=0$。这样我们成功将第 s 个坐标移出方程。可推广至多个循环坐标。(相当于对 $\{p_s,q_s\}$ 做恒等变换)

若Hamiltonian不显含时间，猜：主函数可分成时间+空间项。$S(t,q)=W(q)+V(t)$。 $\Rightarrow H(q,\frac{\partial S}{\partial q})+\frac{\partial V(t)}{\partial t}=H(q,\frac{\partial S}{\partial q})+\dot{V}(t)=0$。 H 不显含时间则 $H=\text{Const}$ $\Rightarrow H(q,\frac{\partial S}{\partial q})=-\dot{V}(t)=E$。

$\Rightarrow S(t,q)=W(q)-Et$，$W(q)$ 被称为特征函数。$\to H(q^1\cdots q^s,\frac{\partial W}{\partial q^1}\cdots\frac{\partial W}{\partial q^s})=E$。 $W=W(q,\alpha)$。 在 $S(t,q,\alpha)=W(q,\alpha)-Et$ 中，E 已作为第一个不可加的积分常数被引入，$W(q,\alpha)$ 中有 $s-1$ 个。

在正则变换前后为保证作用量等效，应有 $dF=p_a dq^a-P_a dQ^a+(K-H)dt$。若对于固定时间 t，只考虑相空间坐标变换有：$\delta F=p_a\delta q^a-P_a\delta Q^a$

演化，$P_a=p_a-\frac{\partial H}{\partial q^a}dt$ $Q^a=q^a+\frac{\partial H}{\partial p_a}\cdot dt$

$$
\begin{aligned}
p_a\delta q^a-P_a\delta Q^a&=p\delta q-(p+dp)\delta(q+dq)\\
&=p\delta q-(p+dp)(\delta q+d(\delta q))\\
&=-p\,d(\delta q)-dp\,\delta q
\end{aligned}
$$

而 $\delta(-L dt)=-\delta(L dt)=-\delta L\,dt$，$\delta L=\delta(p\dot{q})-\delta H=\delta p\dot{q}+p\cdot\delta\dot{q}-\frac{\partial H}{\partial q}\cdot\delta q-\frac{\partial H}{\partial p}\cdot\delta p=p\delta\dot{q}+\dot{p}\delta q$。

从而可看出结构相同。从而有 $p_a\cdot\delta q^a-P_a\delta Q^a=\delta(-L dt)$。(这是由Ⅱ型生成函数做等时变分得到的判断条件)

这说明无穷小时间演化的Ⅱ型生成函数为 $-L dt$。$\to$ 有限生成函数 $-\int L dt=-S$。

$\Rightarrow$ 作用量 S 与哈密顿主函数 S 都为正则变换生成函数。

给定初位形 $\{q(t_0)\}$、末位形 $\{q(t)\}$。其中有唯一经典路径连接。将上面作用量称为经典作用量，则 $S_{cl}=S_{cl}(t_0,q_0;t,q(t))$。

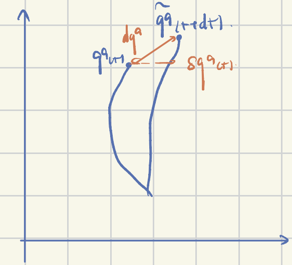
↑整个路径都变了，这不一定对。

我们希望证明总有 $dS=L dt=(p_a\dot{q}^a-H)dt=p_a dq^a-H dt$。考虑路径终点发生变化 $\{t,q\}\to\{t+dt,q+dq\}$。路径变化 $\tilde{q}_{cl}(t)=q_{cl}(t)+\delta q(t)$。

考虑端点变化带来的作用量变化。

$$
\begin{aligned}
dS_{cl}(t,q)&=S_{cl}(t+dt,q+dq)\\
&=\int_{t_0}^{t+dt}dt'\,L(t',\tilde{q}_{cl}(t'),\dot{\tilde{q}}_{cl}(t'))-\int_{t_0}^{t}dt'\,L(t',q_{cl}(t'),\dot{q}_{cl}(t'))\\
&=L\,dt+\int_{t_0}^{t}dt'\left(\frac{\partial L}{\partial q^a}\cdot\delta q^a+\frac{\partial L}{\partial\dot{q}^a}\cdot\delta\dot{q}^a\right)
\end{aligned}
$$

$$= \mathcal{L}dt + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot q^a}\delta q^a\right)\Big|_{t_0}^{t} + \int_{t_0}^{t} dt' \left(\frac{\partial L}{\partial q^a} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q^a}\right)\delta q^a$$



利用 $dq^a = \tilde q^a(t+dt) - q^a(t) = \tilde q^a(t) + \dot{\tilde q}^a dt - q^a(t) \approx \dot q^a dt + \delta q^a(t)$.

从而 $dS = p_a dq^a - (p_a\dot q^a - \mathcal{L})dt = p_a dq^a - H dt$. $\Rightarrow \frac{\partial S_{cl}(t,q)}{\partial t} = -H$. $\frac{\partial S_{cl}}{\partial q^a} = p_a$. 这直接给出 HJB 方程.

经典作用量可以拆成两部分: $S_{cl} = \int_{t_0}^{t} p_a dq^a - \int_{t_0}^{t} H dt$. 对于H不含时的系统. $W = \int_{t_1}^{t_2} p_a dq^a$ 为特征函数.

考虑那些H不显含时间的系统. 且系统从起点到终点经过路径上H为常数.

$$W = \int_{t_1}^{t_2} p_a \dot q^a dt = \int_{t_1}^{t_2} (p_a\dot q^a - H) + H \, dt = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt + H(t_2 - t_1).$$

⚠ 在最小作用原理中,我们约定,起终点位置与时间不变. 而这里我们约定路径H不变 ⇒ 各条路径到终点的时间必有变化.

考虑 路径和时间都变.

该条路径"迟"一些到达, 则也要考虑这段

$$\delta W = \int_{t_0}^{t} dt' \left(\frac{\partial L}{\partial q^a} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q^a}\right)\delta q^a(t) + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot q^a}\delta q^a\right)\Big|_{t_0}^{t} + \mathcal{L}\delta t + H\delta t.$$

$$\delta q^a = \tilde q^a(t) - q^a(t) = \tilde q^a(t+\delta t) - \dot{\tilde q}^a\delta t - q^a(t) = q^a(t) - q^a(t) - \dot{\tilde q}^a\delta t = -\dot{\tilde q}^a dt \approx -\dot q^a dt.$$

从而 $\delta W = \int \mathrm{I} - p_a dq^a + L\delta t - H\delta t \overset{\text{直接}}{=} 0$. 对于定常系统, 考虑所有H相同的路径, 在真实路径上简约作用量 (abbreviated) 取极值! (莫培督原理) (principle of Maupertuis.)

下面, 考虑如何从经典力学过渡到量子. 在量子中, 可观测量为 Hilbert 空间中算符. 可定义对易子 $[\hat f, \hat g] = \hat f\hat g - \hat g\hat f$. 若将经典力学中的想法移到量子力学中的规律上, 需将力学量换成相应算符. 将 $[\ ]_{cm} \Leftrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\ ]_{QM}$. 这样的操作称为正则量子化. 所谓 正则对易关系 $[\hat q, \hat p]_{QM} = i\hbar$. → 不确定性关系.

Heisenberg picture 中 力学量的演化: $\frac{d\hat O}{dt} = \frac{\partial \hat O}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}[\hat O, \hat H]_{QM}$.

对于经典作用量 有 $\vec p = \nabla S(\vec x)$, 对于非相对论性粒子, 若将S视作标量场, 则粒子的轨迹垂直于等S面. 这类比为几何光学中光线垂直于波前.

计算相速度 就是看等相面 $S=C$ 的移动速度. 对于单粒子系统有 $S = W(x) - Et$. 且 $(\nabla W)^2 = 2m(E-V)$.

$0 = dS = \sqrt{2m(E-V)} \cdot ds - E dt$. $\Rightarrow u = \frac{ds}{dt} = \frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}}$. 由于几何光学是波动光学在短波下近似 ⟺ 经典力学是"波动力学"近似?

猜: 经典作用量为波函数的相位. $\psi(t,\vec x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(t,\vec x)\right) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(W(x) - Et)\right]$. 它自然满足波动方程. $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - u^2\nabla^2\psi = 0$.

代入相速度, 整理有 $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi$. 将 $E \to i\hbar$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$. 此即 Schrödinger 方程.