量 子 力 学

天津大学无线电系半导体器件教研室
朱淳远 主编

国防工业出版社

量子力学

天津大学无线电系半导体器件教研室

朱淳远 主编

国防工业出版社

内容简介

本书介绍了非相对论量子力学，共分七章，内容包括：分析力学，量子力学基本原理，薛丁格方程，力学量的算符表示、表象，电子自旋，微扰理论，多体问题。其中集中讨论了单个粒子的运动，论述的重点放在处理问题的方法上，对于多体问题只作了简短的介绍。

本书可作为工科大学半导体专业学生的教学试用教材。

量子力学

天津大学无线电系半导体器件教研室

朱淳远 主编

*

国防工业出版社出版

北京市书刊出版业营业许可证出字第 074 号

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

上海商务印刷厂排版 国防工业出版社印刷厂印装

*

787×1092 1/16 印张 11 1/2 278 千字

1979 年 7 月第一版 1979 年 7 月第一次印刷 印数：00,001—25,000 册

统一书号 15034·1857 定价：1.20 元

前　言

本书系高等学校工科电子类半导体器件专业统编教材之一。

全书分七章，考虑到学生力学基础薄弱，尤其是分析力学部分没学习过，而这一部分对后续课程有用，所以特补充分析力学作为第一章，第二章至第七章讨论非相对论量子力学。这门课是在学生学完普通物理和高等数学基础上开设的基础理论课，共80学时。本课涉及的物理和数学基础较多，考虑到目前学生的学习基础，在有关部分以附录的形式补充了傅里叶变换和δ函数，并在第一章和第二章最后以附录的形式适当补充了质心系统、波的合成、波包、波群速、波的色散等内容，以供学习参考。第六章散射问题中格林函数和分波法部分涉及到的数学较多，不易接受，可根据情况删去不讲。

本书初稿完成后，曾由主审单位北京工业学院半导器教研室有关老师审阅，并提出了宝贵意见。根据这些意见，做了修改，最后完成这本教材。由于编者水平有限，错误与不当之处在所难免，希望使用本教材的老师和同学，提出宝贵意见。

编　者

一九七八年十二月

目　录

第一章　分 析 力 学

我们知道，在直角坐标系中，$3n$ 个质点须用 $3n$ 个直角坐标来描述质点系的位置，根据牛顿运动定律，需要列出 $3n$ 个运动方程。分析力学中引入广义坐标的概念，在有约束（例如给质点以一定的几何条件限制）的情况下，广义坐标数目小于 $3n$。引入广义坐标概念后，经过数学上的分析处理，可得到质点系的运动方程，即拉格朗日方程。拉格朗日方程是用广义坐标表示的，因此在有约束的情况下，方程的数目小于 $3n$，这给分析具体问题带来很大方便。最后还将引出哈密顿函数，并导出正则方程。这一部分内容，在统计力学及固体物理中讨论晶格振动问题上起着重要作用。在量子力学中，直接用到哈密顿函数，不过在那里是以算符形式表示的。本书第一章介绍分析力学的目的正在于此。

§1-1　保守力系、能量守恒定律

首先讨论一个质点情况（见图 1-1）。

设 m 为该质点的位置，可写成

$$\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{i}+y\boldsymbol{j}+z\boldsymbol{k}$$

式中 $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ 表示沿 X, Y, Z 轴的单位矢量[⊖]。作用于该质点的外力用 $\boldsymbol{f}$ 表示，其沿 X, Y, Z 轴的三个分量各为 f_x, f_y, f_z，则有

$$m\frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2}=\boldsymbol{f} \tag{1-1-1}$$

用三个方向的分量表示出来，则有

$$m\frac{d^2x}{dt^2}=f_x$$

$$m\frac{d^2y}{dt^2}=f_y$$

$$m\frac{d^2z}{dt^2}=f_z$$

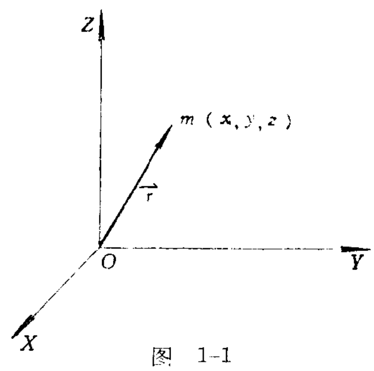

图 1-1

用 $\ddot{x}=\dfrac{d^2x}{dt^2}$ 表示 x 对时间 t 的二阶导数，$\ddot{y}=\dfrac{d^2y}{dt^2}$ 表示 y 对时间 t 的二阶导数，$\ddot{z}=\dfrac{d^2z}{dt^2}$ 表示 z 对时间 t 的二阶导数，则

$$m\ddot{x}=f_x;\quad m\ddot{y}=f_y;\quad m\ddot{z}=f_z \tag{1-1-2}$$

设质点处于保守力场中，即外力 $\boldsymbol{f}$ 可写成一标量函数 $U(x, y, z)$ 的梯度，即

$$\boldsymbol{f}=-\nabla U(x, y, z) \tag{1-1-3}$$

写成三个分量表示式，则有

⊖ 本书中，文中的黑斜体符号与图中带箭头的符号同表矢量。

$$f_x = -\frac{\partial}{\partial x} U(x, y, z)$$

$$f_y = -\frac{\partial}{\partial y} U(x, y, z) \qquad (1\text{-}1\text{-}4)$$

$$f_z = -\frac{\partial}{\partial z} U(x, y, z)$$

通常习惯把 x, y, z 坐标用 q_1, q_2, q_3 表示，并把式(1-1-4)代入式(1-1-2)，对三个分量求和

$$\sum_{i=1}^{3} m \frac{d^2 q_i}{dt^2} dq_i = -\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial U}{\partial q_i} dq_i$$

$$\sum_{i=1}^{3} m \frac{d^2 q_i}{dt^2} \frac{dq_i}{dt} dt = -\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial U}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} dt = -\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial U}{\partial q_i} dq_i$$

因为
$$dU = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial U}{\partial q_i} dq_i$$

所以
$$\sum_i m \frac{d^2 q_i}{dt^2} \frac{dq_i}{dt} dt = -dU$$

或
$$\sum_i m \frac{d\dot{q}_i}{dt} \dot{q}_i dt = -dU$$

两边积分得

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{2} m (\dot{q}_i)^2 = -U + 常数$$

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{2} m (\dot{q}_i)^2 + U = 常数 \qquad (1\text{-}1\text{-}5)$$

上述的标量函数 $U(x, y, z)$ 即位能(或称势能)，这一函数我们通常称为势函数，因它为一标量，故为标量函数。例如带电粒子在静电场中运动，它所受的静电场力，可写成带电粒子在静电场中的电位能对坐标的一阶导数，因此，静电场力为保守力。又如质点在重力场中运动，重力也可写成位能对坐标的一阶导数，重力场亦是保守力场。式(1-1-5)右边表示质点动能与位能的总和，即总能量不变，这就是能量守恒定律。现在我们讨论质点系的情况。设有 n 个质点，质量各为 $m_1, m_2, \cdots, m_n$，空间位置分别以 $x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2; \cdots; x_n, y_n, z_n$ 表示，如图 1-2 所示。为分析问题方便，我们用 q 表示位置，即用 $q_1, q_2, q_3, \cdots, q_{3n}$ 分别表示 $x_1, y_1, z_1; \cdots; x_n, y_n, z_n$，即

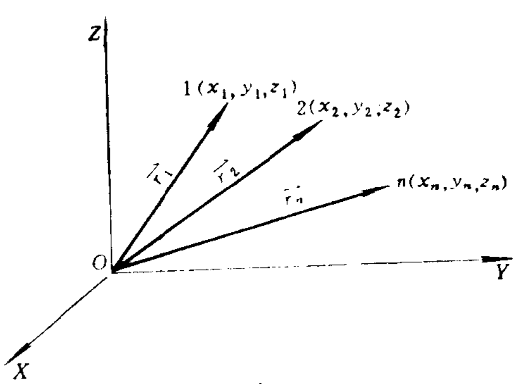

图 1-2

$$q_1 = x_1,\ q_2 = y_1,\ q_3 = z_1$$
$$q_4 = x_2,\ q_5 = y_2,\ q_6 = z_2$$
$$\cdots\cdots$$
$$q_{3n-2} = x_n,\ q_{3n-1} = y_n,\ q_{3n} = z_n$$

用 $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = m_1$ 表示质点 1 的质量；

$\mu_4 = \mu_5 = \mu_6 = m_2$ 表示质点 2 的质量；

……

$\mu_{3n-2} = \mu_{3n-1} = \mu_{3n} = m_n$ 表示质点 n 的质量。

根据牛顿第二定律 $m\boldsymbol{a} = \boldsymbol{f}$($\boldsymbol{a}$ 表示加速度，$\boldsymbol{f}$ 表示质点所受的外力)，由 n 个质点所受的外力列出牛顿第二定律，然后相加，得

$$\sum_{i=1}^{3n}\mu_i\ddot{q}_i=\sum_{i=1}^{3n}f_i(q_1,\ q_2,\ \cdots,\ q_{3n}) \tag{1-1-6}$$

式中 $f_1(q_1,\ \cdots,\ q_{3n})$表示第1个质点所受外力在 X 方向的分量;$f_2(q_1,\ \cdots,\ q_{3n})$表示第1个质点所受的外力在 Y 方向的分量;$f_3(q_1,\cdots,\ q_{3n})$表示第1个质点所受外力在 Z 方向的分量; $f_{3n-2}(q_1,\ \cdots,\ q_{3n})$表示第 n 个质点所受的外力在 X 方向的分量; $f_{3n-1}(q_1,\ \cdots,\ q_{3n})$表示第 n 个质点所受的外力在 Y 方向的分量; $f_{3n}(q_1,\ \cdots,\ q_{3n})$表示第 n 个质点所受的外力在 Z 方向的分量,它们都是 n 个质点坐标的函数。在保守力场的情况下,f_i 具有势,即是说 f_i 可写成一势函数对坐标的导数,即

$$f_i=-\frac{\partial U(q_1,\ \cdots,\ q_{3n})}{\partial q_i} \tag{1-1-7}$$

代入式(1-1-6)得

$$\sum_{i=1}^{3n}\mu_i\ddot{q}_i=-\sum_{i=1}^{3n}\frac{\partial U(q_1,\ \cdots,\ q_{3n})}{\partial q_i} \tag{1-1-8}$$

式(1-1-8)实际就是下列方程相加的结果:

$$\left.\begin{aligned}
\mu_1\ddot{q}_1&=-\frac{\partial U(q_1,\cdots,q_{3n})}{\partial q_1}\\
\mu_2\ddot{q}_2&=-\frac{\partial U(q_1,\ \cdots,\ q_{3n})}{\partial q_2}\\
\mu_3\ddot{q}_3&=-\frac{\partial U(q_1,\cdots,\ q_{3n})}{\partial q_3}\\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\
\mu_{3n-2}\ddot{q}_{3n-2}&=-\frac{\partial U(q_1,\ \cdots,\ q_{3n-2},\ q_{3n-1},\ q_{3n})}{\partial q_{3n-2}}\\
\mu_{3n-1}\ddot{q}_{3n-1}&=-\frac{\partial U(q_1,\ \cdots,\ q_{3n-2},\ q_{3n-1},\ q_{3n})}{\partial q_{3n-1}}\\
\mu_{3n}\ddot{q}_{3n}&=-\frac{\partial U(q_1,\ \cdots,\ q_{3n-2},\ q_{3n-1},\ q_{3n})}{\partial q_{3n}}
\end{aligned}\right\} \tag{1-1-9}$$

然后把式(1-1-9)中各式分别依次乘以 $\dot{q}_1dt,\ \dot{q}_2dt,\ \cdots,\ \dot{q}_{3n}dt$,最后加起来得

$$\sum_{i=1}^{3n}\mu_i\ddot{q}_i\frac{dq_i}{dt}dt=-\sum_{i=1}^{3n}\frac{\partial U}{\partial q_i}\dot{q}_idt$$

$$\sum_{i=1}^{3n}\mu_i\frac{d\dot{q}_i}{dt}\dot{q}_idt=-\sum_{i=1}^{3n}\frac{\partial U}{\partial q_i}dq_i$$

$$\sum\mu_i\dot{q}_id\dot{q}_i=-dU$$

两端积分得

$$\sum_{i=1}^{3n}\frac{1}{2}\mu_i\dot{q}_i^2=-U+C$$

$$\sum_{i=1}^{3n}\frac{1}{2}\mu_i\dot{q}_i^2+U=C=\text{常数}$$

上式第一项为动能,以 E_k 表示为

$$E_k=\sum_{i=1}^{3n}\frac{1}{2}\mu_i\dot{q}_i^2$$

则

$$E_k+U=C \tag{1-1-10}$$

式(1-1-10)表示总能量不变，即能量守恒定律。

§1-2 广 义 坐 标

上节中，我们讨论质点系的运动是以直角坐标表示的，但在分析力学中往往采用更为广泛形式的坐标，我们称之为广义坐标，用 Q_i 表示，由此可以把 $q_1, q_2, \cdots, q_{3n}$ 代换成广义坐标 $Q_i(i=1, 2, \cdots, 3n)$。广义坐标 Q_i 可以是极坐标或其他形式的坐标，比直角坐标更为广泛。直角坐标共有 $3n$ 个(无约束的情况下，自由度即为 $3n$，有约束的情况下，自由度可小于 $3n$)，广义坐标 Q_i 的数目在有约束力的情况下(如质点限制在某一曲面上运动，又如质量为 m 的质点的单摆运动)，自由度小于 $3(n=1$，一个质点)。在有约束的情况下，广义坐标 Q_i 的数目可小于 $3n$。例如，设有两个质点的系统，这两个质点的坐标为(x_1, y_1, z_1)，(x_2, y_2, z_2)，二质点间的距离 d 不变，则约束条件为 $(x_1-x_2)^2+(y_1-y_2)^2+(z_1-z_2)^2=d^2$。在这种情况下，自由度为 $3n-k=3\cdot 2-1=5$(k为约束条件的个数)，说明有五个广义坐标就够了。这里我们暂不考虑这种有约束的情况，仍把广义坐标数目定为 $3n$ 来讨论，即$Q_i(q_1, q_2, \cdots, q_{3n})$，$i=1, 2, \cdots, 3n$。我们采用广义坐标

$$Q_i=Q_i(q_1, q_2, \cdots, q_{3n}) \quad (i=1, 2, \cdots, 3n) \tag{1-2-1}$$

$$q_i=q_i(Q_1, Q_2, \cdots, Q_{3n}) \quad (i=1, 2, \cdots, 3n) \tag{1-2-2}$$

q_i 的微分为

$$dq_i=\frac{\partial q_i}{\partial Q_1}dQ_1+\frac{\partial q_i}{\partial Q_2}dQ_2+\cdots+\frac{\partial q_i}{\partial Q_{3n}}dQ_{3n}=\sum_{\lambda=1}^{3n}\frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}dQ_\lambda \quad (i=1, 2, \cdots, 3n)$$

用 q_i 表示 $\frac{dq_i}{dt}$，即 $\dot{q}_i\equiv\frac{dq_i}{dt}$；同样，$\dot{Q}_\lambda\equiv\frac{dQ_\lambda}{dt}$ 得到

$$\dot{q}_i=\sum_{\lambda=1}^{3n}\frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}\dot{Q}_\lambda \quad (i=1, 2, \cdots, 3n) \tag{1-2-3}$$

质点系动能

$$E_k=\sum_{i=1}^{3n}\frac{1}{2}\mu_i\dot{q}_i^2=\sum_{i=1}^{3n}\frac{1}{2}\mu_i\left(\sum_{\lambda=1}^{3n}\frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}\dot{Q}_\lambda\right)^2=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3n}\mu_i\sum_{\lambda=1}^{3n}\sum_{j=1}^{3n}\frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}\dot{Q}_\lambda\frac{\partial q_i}{\partial Q_j}\dot{Q}_j$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3n}\sum_{\lambda=1}^{3n}\sum_{j=1}^{3n}\mu_i\frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}\frac{\partial q_i}{\partial Q_j}\dot{Q}_\lambda\dot{Q}_j$$

用 $g_{\lambda j}$ 表示 $\sum_{i=1}^{3n}\mu_i\frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}\frac{\partial q_i}{\partial Q_j}$，则

$$E_k=\frac{1}{2}\sum_{\lambda=1}^{3n}\sum_{j=1}^{3n}g_{\lambda j}\dot{Q}_\lambda\dot{Q}_j \tag{1-2-4}$$

式(1-2-4)为广义坐标的动能表示式。

例　把质量为m的质点的动能表示成球坐标的形式(见图 1-3)。

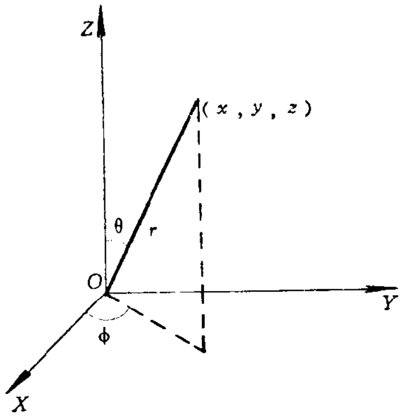

图 1-3

首先把直角坐标表示成球坐标：

$$q_1=x=r\sin\theta\cos\varphi$$

$$q_2=y=r\sin\theta\sin\varphi$$

$$q_3=z=r\cos\theta$$

令 $$Q_1=r,\ Q_2=\theta,\ Q_3=\varphi$$

动能 E_k 为

$$\begin{aligned}E_k&=\frac{1}{2}\sum_{\lambda=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}g_{\lambda j}\dot{Q}_\lambda\dot{Q}_j\quad(n=1,\text{只有一个质点})\\&=\frac{1}{2}\sum_{\lambda=1}^{3}\{g_{\lambda 1}\dot{Q}_\lambda\dot{Q}_1+g_{\lambda 2}\dot{Q}_\lambda\dot{Q}_2+g_{\lambda 3}\dot{Q}_\lambda\dot{Q}_3\}\\&=\frac{1}{2}\{g_{11}\dot{Q}_1^2+g_{21}\dot{Q}_2\dot{Q}_1+g_{31}\dot{Q}_3\dot{Q}_1+g_{12}\dot{Q}_1\dot{Q}_2+g_{22}\dot{Q}_2^2+g_{32}\dot{Q}_3\dot{Q}_2+g_{13}\dot{Q}_1\dot{Q}_3+g_{23}\dot{Q}_2\dot{Q}_3+g_{33}\dot{Q}_3^2\}\end{aligned}$$

若利用 $g_{\lambda j}=\sum\limits_{i=1}^{3}\mu_i\dfrac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}\dfrac{\partial q_i}{\partial Q_j}$ 计算 $g_{\lambda j}$

则得

$$\begin{aligned}g_{11}&=\sum_{i=1}^{3}\mu_i\left(\frac{\partial q_i}{\partial Q_1}\right)^2=m\left[\left(\frac{\partial x}{\partial r}\right)^2+\left(\frac{\partial y}{\partial r}\right)^2+\left(\frac{\partial z}{\partial r}\right)^2\right]\\&=m\,[\sin^2\theta\cos^2\varphi+\sin^2\theta\sin^2\varphi+\cos^2\theta]=m\\g_{22}&=\sum_{i=1}^{3}\mu_i\left(\frac{\partial q_i}{\partial Q_2}\right)^2=m\left[\left(\frac{\partial x}{\partial\theta}\right)^2+\left(\frac{\partial y}{\partial\theta}\right)^2+\left(\frac{\partial z}{\partial\theta}\right)^2\right]\\&=m\,[r^2\cos^2\theta\cos^2\varphi+r^2\cos^2\theta\sin^2\varphi+r^2\sin^2\theta]=mr^2\end{aligned}$$

同样 $g_{33}=r^2\sin^2\theta$

$$g_{12}=g_{21}=g_{23}=g_{32}=g_{13}=g_{31}=0$$

将以上假设和计算结果代入得

$$E_k=\frac{1}{2}\,m[\dot{r}^2+r^2\dot{Q}^2+r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2]$$

动能表达式 E_k 可直接通过三个互相垂直的速度平方分量得到，这样看来较为简单。但由上边引入广义坐标后，推导过程显得更为复杂了，不过当处理复杂的问题时，广义坐标即可显示出它的优越性。

§1-3　拉格朗日方程

因有许多力学问题用牛顿运动定律不容易写出，故在分析力学中引入了广义坐标的拉格朗日函数 L，这样可把一力学系统的运动方程，从原有的牛顿运动定律形式，转换到用广义坐标所满足的微分方程，或叫做拉格朗日方程。这一运动方程在处理许多力学问题时，比牛顿运动定律容易得多。

前已看到，质点系动能 E_k 为 $\dot{q}_1,\ \dot{q}_2,\ \dot{q}_3,\ \cdots,\ \dot{q}_{3n}$ 的函数，势函数 U 为质点位置 $q_1,\ q_2,\ q_3,\ \cdots,\ q_{3n}$ 的函数，我们现在引入一新的函数 L，令

$$\mathrm{L}=E_k-U$$

容易看到，L 为 $\dot{q}_i(i=1,\ 2,\ \cdots,\ 3n)$，$q_i(i=1,\ 2,\ \cdots,\ 3n)$的函数

$$\mathrm{L}(q_1,\ \cdots,q_{3n};\dot{q}_1,\ \cdots,\ \dot{q}_{3n})=E_k(\dot{q}_1,\ \cdots,\ \dot{q}_{3n})-U(q_1,\ \cdots,\ q_{3n})\tag{1-3-1}$$

这一新的函数称拉格朗日函数。

考虑到

$$E_k=\sum_{i=1}^{3n}\frac{1}{2}\mu_i\left(\frac{dq_i}{dt}\right)^2$$

得 $$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\mathrm{L}}{\partial\dot{q}_i}\right)=\frac{d}{dt}\frac{\partial E_k}{\partial q_i}=\mu_i\ddot{q}_i=-\frac{\partial U}{\partial q_i}(i=1,\ \cdots,\ 3n)$$

又
$$\frac{\partial L}{\partial q_i}=-\frac{\partial U}{\partial q_i}$$
则有
$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}-\frac{\partial L}{\partial q_i}=0 \quad (i=1, \cdots, 3n) \tag{1-3-2}$$
上式是用直角坐标表示的运动方程式，称拉格朗日方程。下面我们可以把式(1-3-2)转换成广义坐标形式，首先把 q_i 表示为广义坐标 Q_λ 的函数，这里 $i=1, 2, \cdots, 3n$。一般说来，在存在着约束力的情况下，$\lambda=1, 2, \cdots, s$，而 $s<3n$，在无约束的情况下，$s=3n$。例如，质量为m的质点，用一长为 l，质量忽略不计的细线栓住，线的另一端栓在固定点 O，质点在铅直平面(XOY 平面)内运动(见图 1-4)，这就是单摆情况，线的张力 T 就是约束力，约制质点在 XOY 平面内做摆动，在这里，质点的坐标 x, y，要满足以下方程:

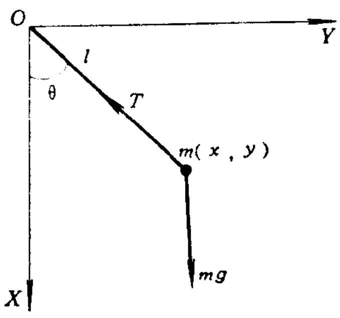

图 1-4

$$x^2+y^2=l^2$$
这一方程就叫做约束方程，它限制了 x、y 中只有一个独立变量，即自由度为 1 而不是 2，这时，$q_1=x=l\cos\theta$，$q_2=y=l\sin\theta$。由此看来，广义坐标 $Q_\lambda=\theta$，$\lambda=1$，广义坐标只有一个。一般说来，如有 k 个约束方程，如
$$\varphi_j(q_1, \cdots, q_{3n})=0 \quad (j=1, 2, \cdots, k)$$
则自由度不是 $3n$，而是 $3n-k=s$，在单摆情况下，质点在 $z=$ 常数的平面内运动，$q_i(i=1,2)$ 有两个，自由度不是 3 而是 2($2n$, $n=1$ 一个质点)。现有约束力为一个，且约束方程有一个，即 $k=1$，自由度数目为 $2n-k=2\cdot1-1=1$，广义坐标只有一个($Q=\theta$、$s=1$)。

首先从牛顿运动定律出发。n 个质点所受外力沿 X, Y, Z 三个方向的分量分别为
$$\left.\begin{array}{c}\mu_1\ddot{q}_1=f_1\\ \mu_2\ddot{q}_2=f_2\\ \cdots\cdots\\ \mu_{3n}\ddot{q}_{3n}=f_{3n}\end{array}\right\} \tag{1-3-3}$$
式(1-3-3)可统一写成如下形式
$$\mu_i\ddot{q}_i=f_i \quad (i=1,2, \cdots, 3n) \tag{1-3-4}$$
设约束方程为
$$\varphi_j(q_1, q_2, \cdots, q_{3n})=0 \quad (j=1,2, \cdots, k) \tag{1-3-5}$$
共 k 个方程式。把直角坐标表示成广义坐标的函数，则有
$$q_i=q_i(Q_1, Q_2, \cdots, Q_s) \quad (i=1,2, \cdots, 3n, s=3n-k) \tag{1-3-6}$$
把式(1-3-4)两边同乘以$\frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}$，然后对 i 求和，则有
$$\sum_{i=1}^{3n}\mu_i\ddot{q}_i\frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}=\sum_{i=1}^{3n}f_i\frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda} \quad (\lambda=1, 2, \cdots, s) \tag{1-3-7}$$
共 s 个方程式。
式(1-3-7)左边用 R_λ 表示，右边用 K_λ 表示，
$$R_\lambda\equiv\sum_{i=1}^{3n}\mu_i\ddot{q}_i\frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}$$
$$K_\lambda\equiv\sum_{i=1}^{3n}f_i\frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}$$

则有

$$R_\lambda = K_\lambda$$

$$R_\lambda = \frac{d}{dt}\left[\sum_{i=1}^{3n} \mu_i \dot{q}_i \frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}\right] - \sum_{i=1}^{3n} \mu_i \dot{q}_i \frac{d}{dt} \frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}$$

考虑到:

$$\frac{dq_i}{dt} = \dot{q}_i = \sum_{i=1}^{s} \frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda} \dot{Q}_\lambda$$

所以

$$\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{Q}_\lambda} = \frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda}$$

又因

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda} = \sum_{j=1}^{s} \frac{\partial^2 q_i}{\partial Q_j \partial Q_\lambda} \dot{Q}_j = \frac{\partial}{\partial Q_\lambda} \sum_{j=1}^{s} \frac{\partial q_i}{\partial Q_j} \dot{Q}_j$$

所以

$$R_\lambda = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^{3n} \mu_i \dot{q}_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{Q}_\lambda} - \sum_{i=1}^{3n} \mu_i \dot{q}_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial Q_\lambda}$$

这样 n 个质点的总动能为:

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3n} \mu_i \dot{q}_i^2$$

所以对于某一 R_λ 的动能为:

$$R_\lambda = \frac{d}{dt} \frac{\partial E_k}{\partial \dot{Q}_\lambda} - \frac{\partial E}{\partial Q_\lambda} \quad (\lambda = 1, 2, \cdots, s) \tag{1-3-8}$$

式(1-3-7)右边

$$K_\lambda \equiv \sum_{i=1}^{3n} f_i \frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda} = -\sum_{i=1}^{3n} \frac{\partial}{\partial q_i} U \frac{\partial q_i}{\partial Q_\lambda} = -\frac{\partial U}{\partial Q_\lambda} \quad (\lambda = 1, 2, \cdots, s) \tag{1-3-9}$$

拉格朗日函数

$$\mathrm{L} = E_k - U$$

又

$$R_\lambda = K_\lambda$$

则

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial E_k}{\partial \dot{Q}_\lambda} - \frac{\partial E_k}{\partial Q_\lambda} = -\frac{\partial U}{\partial Q_\lambda} \tag{1-3-10}$$

最后得:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathrm{L}}{\partial \dot{Q}_\lambda} - \frac{\partial \mathrm{L}}{\partial Q_\lambda} = 0 \quad (\lambda = 1, 2, \cdots, s) \tag{1-3-11}$$

式(1-3-11)称拉格朗日方程。在这一方程中,L 表示为广义坐标 Q_λ 和其对时间的一阶导数 $\dot{Q}_\lambda$ 的函数。式(1-3-2)和(1-3-11)均称拉格朗日方程，后者是用广义坐标表示的。在许多力学问题中，后者应用起来更为方便。由此看来，无论采用直角坐标 q_i，还是广义坐标 Q_λ，运动方程形式是不变的。

例 质量为 m 的质点，用长为 l，其质量可忽略不计的细绳固定在一端 0，在铅直平面内运动，分析其运动情况(见图 1-5)。

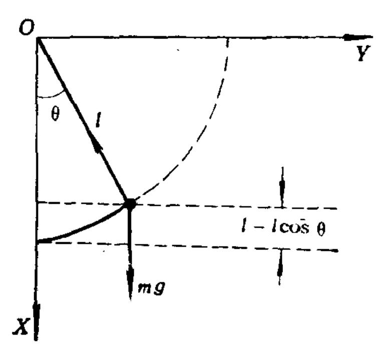

图 1-5

解 约束方程为:

$$\varphi(x, y) = x^2 + y^2 - l^2 = 0$$

即质点在平面内作二维运动。又因质点数为 1，即 $n=1$，约束方程数目为 1，即 $k=1$，所以广义坐标数 $s = 2n - k = 2\cdot1 - 1 = 1$。取广义坐标 $Q_\lambda = \theta$，

拉格朗日函数 L 为

$$L=E_k-V=\frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2-mg(l-l\cos\theta)$$

代入拉格朗日方程式(1-3-11)

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\lambda}-\frac{\partial L}{\partial Q_\lambda}=0$$

计算结果得

$$ml^2\ddot{\theta}+mgl\sin\theta=0$$

$$\ddot{\theta}=-\frac{g}{l}\sin\theta$$

当 θ 很小时,$\sin\theta\approx\theta$,则

$$\ddot{\theta}=-\frac{g}{l}\theta$$

与一维谐振动方程 $\ddot{x}=-\omega^2x$ 比较,即得单摆周期 T

$$T=2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$$

§1-4 哈密顿函数 H 哈密顿正则方程

(1) 哈密顿函数

拉格朗日函数 $L(q_1, \cdots, q_{3n}; \dot{q}_1, \cdots, \dot{q}_{3n})$,简写成 $L(q, \dot{q})$;用广义坐标表示为 $L(Q_1, \cdots, Q_s; \dot{Q}_1, \cdots, \dot{Q}_s)$,简写成 $L(Q, \dot{Q})$。引入一新的函数称哈密顿函数,其形式如下

$$H=\sum_{i=1}^{3n}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i-L(q, \dot{q}) \tag{1-4-1}$$

用广义坐标表示,哈密顿函数为

$$H'=\sum_{\lambda=1}^{s}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\lambda}\dot{Q}_\lambda-L(Q, \dot{Q}) \tag{1-4-2}$$

可以证明,无论用 q 或 Q 做自变量时,这一函数不变,现证明如下:

$$\dot{Q}_\lambda\equiv\frac{dQ_\lambda}{dt}=\sum_{i=1}^{3n}\frac{\partial Q_\lambda}{\partial q_i}\dot{q}_i \quad (\lambda=1, \cdots, s)$$

容易看出

$$\frac{\partial \dot{Q}_\lambda}{\partial \dot{q}_i}=\frac{\partial Q_\lambda}{\partial q_i} \quad (i=1, \cdots, 3n)$$

因 Q_λ 只是 q 的函数

所以

$$\frac{\partial Q_\lambda}{\partial \dot{q}_i}=0$$

则有

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=\sum_{\lambda=1}^{s}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\lambda}\frac{\partial \dot{Q}_\lambda}{\partial \dot{q}_i}+\sum_{\lambda=1}^{s}\frac{\partial L}{\partial Q_\lambda}\frac{\partial Q_\lambda}{\partial \dot{q}_i}=\sum_{\lambda=1}^{s}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\lambda}\frac{\partial \dot{Q}_\lambda}{\partial \dot{q}_i}$$

也可写成

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=\sum_{\lambda=1}^{s}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\lambda}\frac{\partial Q_\lambda}{\partial q_i}$$

因此

$$\sum_{i=1}^{3n}\dot{q}_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=\sum_i\sum_\lambda\dot{q}_i\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\lambda}\frac{\partial Q_\lambda}{\partial q_i}=\sum_{\lambda=1}^{s}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\lambda}\sum_{i=1}^{3n}\frac{\partial Q_\lambda}{\partial q_i}\dot{q}_i$$

又
$$\sum_{i=1}^{3n}\frac{\partial Q_\lambda}{\partial q_i}\dot{q}_i=\dot{Q}_\lambda$$
得
$$\sum_{i=1}^{3n}\dot{q}_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=\sum_{\lambda=1}^{s}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\lambda}\dot{Q}_\lambda$$
所以
$$H=H'$$

(2) 正则方程式

拉格朗日函数 L 由两部分组成: 一部分为动能 E_k; 另一部分为势函数 U。在 $L=E_k-U$ 中,U 只是位置的函数,而不含坐标对时间的导数。E_k 是坐标对时间求导数的函数。显然,有 $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=\frac{\partial E_k}{\partial \dot{q}_i}=$动量 $p_i(i=1,\ 2,\ \cdots,\ 3n)$。正因为如此,引入

$$\left.\begin{aligned}p_i&=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\quad(i=1,\ 2,\ \cdots,\ 3n)\\P_\lambda&=\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\lambda}\quad(\lambda=1,\ 2,\ \cdots,\ s)\end{aligned}\right\}\tag{1-4-3}$$

p_i 叫做动量。由上面已经看到,$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ 确是质点的动量。P_λ 称广义动量,它不一定具有一般动量的含义。例如在前边单摆的例题中,$\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}}=ml^2\dot{\theta}$,这一物理量正是质点运动的动量矩,或称角动量,在这种情况下,广义动量 P_λ 为角动量。现在来推导哈密顿正则方程式。
根据 H 函数的定义

$$H=\sum_{i=1}^{3n}p_i\dot{q}_i-L(q,\ \dot{q})$$

$$dH=\sum_{i=1}^{3n}(\dot{q}_i dp_i+p_i d\dot{q}_i)-\sum_{i=1}^{3n}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}dq_i+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}d\dot{q}_i\right)=\sum_{i=1}^{3n}\left(\dot{q}_i dp_i-\frac{\partial L}{\partial q_i}dq_i\right)\tag{1-4-4}$$

把 H 视为 p_i 及 q_i 的函数,则

$$dH=\sum_{i=1}^{3n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}dp_i+\frac{\partial H}{\partial q_i}dq_i\right)\tag{1-4-5}$$

与式(1-4-4)对比得

$$\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i},\qquad -\frac{\partial L}{\partial q_i}=\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

考虑到
$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}-\frac{\partial L}{\partial q_i}=0$$
所以
$$\frac{\partial L}{\partial q_i}=\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)=\frac{d}{dt}p_i\equiv\dot{p}_i$$
即
$$-\dot{p}_i=\frac{\partial H}{\partial q_i}$$
最后得到

$$q_i=\frac{\partial H}{\partial p_i}\quad(i=1,\ \cdots,\ 3n)\tag{1-4-6}$$

$$\dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}\quad(i=1,\ \cdots,\ 3n)\tag{1-4-7}$$

以上二式叫做正则方程式。把哈密顿函数表示成广义坐标时,利用和以上完全相同的方法可以得到

$$\dot{Q}_\lambda = \frac{\partial H}{\partial P_\lambda} \quad (\lambda = 1, \cdots, s) \tag{1-4-8}$$

$$\dot{P}_\lambda = -\frac{\partial H}{\partial Q_\lambda} \quad (\lambda = 1, \cdots, s) \tag{1-4-9}$$

现举例说明正则方程式的意义:

例 用正则方程式讨论三维空间中，质量为 m 的质点的运动。设势函数 U 为 x, y, z 的函数。

解 拉格朗日函数

$$\mathrm{L} = E_k - U = \frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - U(x, y, z)$$

$$p_1 = \frac{\partial \mathrm{L}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

$$p_2 = \frac{\partial \mathrm{L}}{\partial \dot{y}} = m\dot{y}$$

$$p_3 = \frac{\partial \mathrm{L}}{\partial \dot{z}} = m\dot{z}$$

哈密顿函数 H 为

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^{3} p_i \dot{q}_i - \mathrm{L} = p_1\dot{q}_1 + p_2\dot{q}_2 + p_3\dot{q}_3 - \mathrm{L} \\ &= m\dot{x}\dot{x} + m\dot{y}\dot{y} + m\dot{z}\dot{z} - \left[\frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - U(x, y, z)\right] \\ &= \frac{1}{2}(m\dot{x}^2 + m\dot{y}^2 + m\dot{z}^2) + U(x, y, z) = \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) + U(x, y, z) \end{aligned}$$

利用正则方程可以得到

$$\dot{q}_1 = \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_1} = \frac{p_1}{m} \qquad \dot{p}_1 = -\frac{\partial H}{\partial q_1} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial U}{\partial x}$$

$$\dot{q}_2 = \dot{y} = \frac{\partial H}{\partial p_2} = \frac{p_2}{m} \qquad \dot{p}_2 = -\frac{\partial H}{\partial q_2} = -\frac{\partial H}{\partial y} = -\frac{\partial U}{\partial y}$$

$$\dot{q}_3 = \dot{z} = \frac{\partial H}{\partial p_3} = \frac{p_3}{m} \qquad \dot{p}_3 = -\frac{\partial H}{\partial q_3} = -\frac{\partial H}{\partial z} = -\frac{\partial U}{\partial z}$$

最后得

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial U}{\partial x}$$

$$m\ddot{y} = -\frac{\partial U}{\partial y}$$

$$m\ddot{z} = -\frac{\partial U}{\partial z}$$

最后三个式子正是牛顿运动定律在三个方向的分量表示式。

(3) 哈密顿函数 H 的物理意义

已知哈密顿函数为

$$H = \sum_{i=1}^{3n} \frac{\partial \mathrm{L}}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - \mathrm{L} = \sum_{i=1}^{3n} p_i \dot{q}_i - \mathrm{L} = \sum_{i=1}^{3n} \frac{\partial E_k}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - \mathrm{L}$$

其中动能 E_k 为 $\dot{q}_i$ 的二次齐次函数。由数学上可知，当这类函数引入 ε 时，则有

$$E_k(\varepsilon\dot{q}_1, \varepsilon\dot{q}_2, \cdots) = \varepsilon^2 E_k(\dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots)$$

对 ε 求偏导数

$$\sum_{i=1}^{3n}\dot{q}_i\frac{\partial E_k}{\partial(\varepsilon\dot{q}_i)}=2\varepsilon E_k(\dot{q}_1,\ \dot{q}_2,\ \cdots)$$

取 $\varepsilon=1$。所以

$$\sum_{i=1}^{3n}\dot{q}_i\frac{\partial E_k}{\partial\dot{q}_i}=2E_k$$

因为

$$\mathrm{L}=E_k-U$$

故

$$H=2E_k-(E_k-U)=E_k+U=E$$

用广义坐标,同样可得

$$H=\sum_{\lambda=1}^{s}\dot{Q}_\lambda\frac{\partial\mathrm{L}}{\partial\dot{Q}_\lambda}-\mathrm{L}=E$$

下边我们证明,当 U 不明显含有时间 t 时,$H=E$ 为常数,不依时间而变,即得到能量守恒定律。势函数 U 不明显含有时间 t,则 L 只是 q, $\dot{q}$ 的函数,用广义坐标时,L 仅为 Q, $\dot{Q}$ 的函数。我们不去讨论 $Q_\lambda=Q_\lambda(q_1,\ q_2,\ \cdots,\ t)$ 的情况,只考虑 Q_λ 不明显含有 t 的情况。在这种情况下,H 也不明显含有时间 t,则

$$\frac{dH}{dt}=\sum_{i=1}^{3n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i+\frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i\right)=\sum_i\left[\frac{\partial H}{\partial p_i}\left(-\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)+\frac{\partial H}{\partial q_i}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\right)\right]=0$$

用广义坐标 Q 同样可证

$$\frac{dH}{dt}=0$$

即哈密顿函数 H 不随时间而变,这时 $H=E_k+U$ 具有总能量的意义。当 U 明显含有 t 时,$\frac{dH}{dt}\neq0$,则 H 不是常数,这时不具有总能量的意义。本章所讨论的内容仅是考虑 q_i 或 Q_λ 不明显含有时间 t 的情况。至于一般情况,这里不予以讨论。

§1-5 有心力场、角动量守恒定律

粒子在运动过程中始终受到一固定中心(叫做力心)的作用力(引力或斥力),作用力的方向永远同力心与粒子连线的方位相同,这种力场叫做有心力场。如电子受原子核的静电引力作用,这种力就是有心力,作用力的方向永远指向原子核。又如 α 粒子受原子核库仑场的散射也是有心力场的情况。对有心力场的情况,可以证明,角动量不随时间变化,这一结论叫做角动量守恒定律,下边先举一粒子在平面中运动为例来说明。

O 为固定中心,称力心。质量为 m 的粒子在固定中心力的作用下运动,此力永远沿 $\boldsymbol{r}$ 方位($\boldsymbol{r}$ 为从 O 指向粒子所在点的向径,方向是这样规定的:从 O 点指向粒子所在点。在引力情况下,作用力的方向与 $\boldsymbol{r}$ 相反,在斥力情况下,作用力的方向与 $\boldsymbol{r}$ 相同)。粒子在有心力场中运动,势函数 U 为 r 的函数,记作 $U(r)$(应当指出,$U(r)$ 表示势函数只与 $\boldsymbol{r}$ 的大小有关,而与其方向无关)。粒子的速度 $\boldsymbol{v}=\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}=\dot{\boldsymbol{r}}$,沿轨道的切线方向,

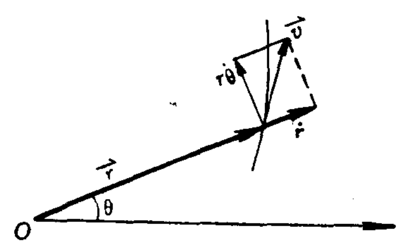

图 1-6