

# 目录

<b>第一章 哈密顿力学初步</b>	<b>2</b>
1.1 势能与力	3
1.1.1 能量与力	3
1.1.2 哈密顿正则方程	4
1.1.3 势能曲线	6
1.2 无磨损摩擦的一个物理模型	11
1.3 微分形式	14
1.3.1 微分形式	14
1.3.2 外微分与斯托克斯公式	17
1.3.3 保守力的特性	21

# 第一章 哈密顿力学初步

陈童

本章初步介绍哈密顿正则方程，并详细讨论力的概念如何定义，势能与力的关系，以及保守力有何特性。同时本章也详细讨论了势能曲线，并利用它讨论了一个重要的关于无磨损摩擦的物理模型，独立振子模型。最后，本章也为读者讲述了微分形式这一重要数学方法的初步知识。特别是阐述了3维矢量分析中的斯托克斯公式和高斯定理如何统一成一个漂亮的公式！

## 1.1 势能与力

### 1.1.1 能量与力

这本书要讲述的是力学，那么什么是力？学过牛顿运动定律的读者会回答力是物体运动状态改变的原因。不过，在现代物理中，我们并不这样定义力，这时候，力不再是一个最基本的概念，能量才是，力的概念是通过粒子间相互作用的能量来定义的，大体来说，力是相互作用能量随着粒子空间位置变化的剧烈程度。

从这个定义可以看出，对于粒子我们才能谈它受到的力，如果是场，比方说电磁场，由于它并不具有一个位置坐标，而是空间分布，所以我们就不能定义受力这一概念，但是场的相互作用能量始终是有定义的。

那么，什么是能量呢？通常的回答是，能量是做功的本领，但是为了定义功，我们又需要先定义力，这不符合我们这里采用的逻辑，我们这里是把能量而不是力作为第一概念的。能量是什么呢？这在现代物理中有直接定义，不过我们想将相关的讨论放在后面的章节中，暂时让我们不加定义地接受能量的概念。当然，我们还得接受能量的转化和守恒定律，根据这条定律，我们暂时可以含糊地说，能量是一种具有多种表现形式的东西，能量的这些不同形式可以相互转化，但是，对于一个孤立系统，能量的总量保持不变。

因此，力是相互作用能量随粒子空间位置的变化，不过，为了把这个概念进一步精确化，很多时候我们需要势能的概念。势能就是一种相互作用能量，通常它和粒子的运动速度无关，只和粒子的空间位置有关。假设一个粒子受某个外力场作用，则它和这个外力场之间就有相互作用势能，可以用函数 $V(\mathbf{x})$ 来表示。比方说，地面附近一个高度为 $z$ 的物体处于地球的重力场中，它和地球相互作用的势能为 $V(\mathbf{x}) = mgz$ 。再比方说，两个质点之间的万有引力势能为 $V(\mathbf{x}) = -G\frac{m_1m_2}{r}$ ，两个点电荷之间的库伦相互作用势能为 $V(\mathbf{x}) = \frac{e_1e_2}{4\pi\epsilon_0r}$ 。这些势能的表达式是如何得到的呢？回答是，最初都是从实验中归纳出来的，不过在现代物理中，我们往往可以通过研究场的规律来推导出它们，通过电磁场的麦克斯威方程可以得出点电荷之间的库伦相互作用势能，通过研究引力场的爱因斯坦方程可以得出万有引力势能。

现在，假设我们知道了在一个粒子与外力场的相互作用能量，也就是势

能 $V(\mathbf{x})$ , 则这个粒子受到的力 $\mathbf{F}$ 将由下式定义

$$\mathbf{F} \cdot d\mathbf{x} = -dV(\mathbf{x}), \quad (1.1)$$

或者也可以写作

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}} = -\nabla V = -\left(\frac{\partial V}{\partial x}, \frac{\partial V}{\partial y}, \frac{\partial V}{\partial z}\right). \quad (1.2)$$

这些式子中额外的那个负号是为了使得牛顿运动定律的形式或者机械能的表达式与通常的约定一致而引入的。

从上面两个式子可以看出, 即使给势能函数 $V(\mathbf{x})$ 加上一个任意的常数, 力的定义也将保持不变。实际上, 在非相对论物理中, 能量的定义本来就可以相差一个常数, 因为在非相对论物理中, 我们只能测量能量的差值, 而无法测量能量的绝对值。能量定义的这个不定常数反映在势能函数中, 就是势能函数可以相差一个常数, 为了确定这个常数, 我们需要人为地选定一个空间位置, 称之为势能参考点, 令粒子在这个点处的势能为零。

### 1.1.2 哈密顿正则方程

利用上面关于力的定义, 我们就可以将牛顿运动定律重写为

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}}. \quad (1.3)$$

其中 $\mathbf{p}$ 为粒子的动量, 其定义为

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad (1.4)$$

这里 $m$ 为粒子的质量。

假设我们定义物理量 $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$ , 并将 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{p}$ 看成是两个相互独立的变量, 则很容易验证上面关于牛顿运动定律的两个方程(1.3)、(1.4)可以重写成一种非常对称、非常漂亮的形式

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}, \quad \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}. \quad (1.5)$$

由这两个方程, 我们将有

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} = 0. \quad (1.6)$$

也即是说,  $H$ 是一个守恒量。实际上,  $H$ 就是粒子的总能量,  $\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ 是动能,  $V(\mathbf{x})$ 是势能,  $H$ 是动能势能的总和。因此, 除了重写了牛顿定律之外, 我们刚才只不过是证明了能量守恒定律。

(1.5)式也称作哈密顿正则方程, 很显然, 它和牛顿运动定律相互等价。物理量 $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ 也称作哈密顿量。值得强调的是, 作为一个物理量, 哈密顿量代表的是粒子的总能量, 但作为一个数学表达式,  $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ 得是将坐标 $\mathbf{x}$ 和动量 $\mathbf{p}$ 作为相互独立的变量表达出来的能量, 因此作为一个表达式, 哈密顿量 $H$ 与 $\frac{1}{2}m\left(\frac{d\mathbf{x}}{dt}\right)^2 + V(\mathbf{x})$ 是不同的。

哈密顿正则方程很容易推广到多粒子情形, 这时候系统的相互作用势能一般来说依赖于每一个粒子的位置坐标, 表示为函数 $V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ 。比方说, 两粒子系统的万有引力势能为 $V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = -G\frac{m_1 m_2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}$ 。多粒子系统的哈密顿量同样代表总能量, 是每个粒子的动能与系统的相互作用势能之和, 写成

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N). \quad (1.7)$$

可见, 这时候哈密顿量依然以粒子坐标和动量为独立变量, 不过是以每一个粒子的坐标和动量为独立变量。相应的, 多粒子体系的哈密顿正则方程为

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_i}, \quad \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}. \quad (1.8)$$

为了验证这个方程等价于多粒子体系的牛顿运动定律, 我们需要注意到现在第 $i$ 个粒子的受力 $\mathbf{F}_i$ 由下式定义

$$\sum_i \mathbf{F}_i \cdot d\mathbf{x}_i = -dV \Leftrightarrow \mathbf{F}_i = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}_i}. \quad (1.9)$$

完全类似于单粒子情形, 读者也可以证明多粒子体系的能量守恒定律。

以上关于多粒子哈密顿正则方程的讨论演示了现代物理研究一个物理系统的基本方法: 即首先我们找到系统的基本力学变量, 这在多粒子系统中就是所有的 $\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_i$ , 在场论系统中就是场位形和场的正则动量(读者可以先跳过关于场论系统的这句话, 后文在适当的时候会进一步讨论); 其次, 利用这些基本力学变量写出系统的哈密顿量, 也就是写出系统总能量的表达式; 最后, 写出形如(1.8)式的哈密顿正则方程。

所以, 在现代物理中, 力不是最基本的, 哈密顿量才是, 相应的, 牛顿运动定律也不是最基本的, 哈密顿正则方程才是。当然, 对于单粒子和

多粒子系统，正如我们已经看到的，这时候哈密顿正则方程和牛顿运动定律的 $F = ma$ 完全等价。哈密顿正则方程的好处是给力学设定了一个一般性的框架，使得我们的力学体系不仅可以研究粒子，还可以研究自旋系统，研究场等等。

哈密顿正则方程当然也有其局限，那就是它不能包括所有的力学系统。能被哈密顿正则方程描述的力学系统称之为哈密顿系统，它包括几乎所有的基本物理系统。但是，有一些力不属于自然界中的基本力，这时候相应的力学系统可能就不能用哈密顿正则方程来描述，比方说，摩擦力就不是基本力，如果我们关心摩擦力的表现，那相应的方程就不能是哈密顿正则方程。然而，即使对于摩擦力，从现代物理学的眼光来看，我们更关心的也是其本质为何，即如何从基本物理的角度理解摩擦力的起源，而这时候哈密顿正则方程又有用武之地了，后文我们会进一步考察摩擦力的物理模型。

### 1.1.3 势能曲线

作为例子，下面我们来分析一下单粒子的一维运动。这时候粒子的坐标为 $x$ ，相应的动量为 $p$ 。粒子的势能可以表示成一个单变量函数 $V(x)$ ，我们可以以 $x$ 为横坐标，以 $V$ 为纵坐标，画出势能函数 $V(x)$ 的曲线，如图(1.1)所示，这一曲线就是所谓的势能曲线。

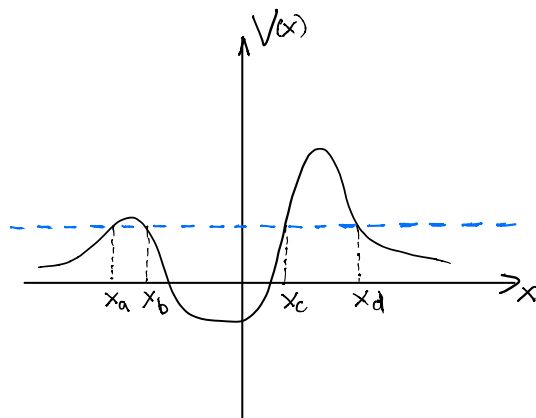


图 1.1: 势能曲线

给定能量 $E$ ，由于能量守恒，粒子运动到任何 $x$ 处其总能量将都是 $E$ ，我们可以画一条水平线表示它，如图(1.1)中虚线所示。根据能量守恒 $E =$

$\frac{p^2}{2m} + V(x)$ , 动能 $p^2/(2m)$ 总大于等于零, 由此可见, 粒子的可能运动区域必定满足

$$E \geq V(x), \quad (1.10)$$

如图(1.1)中的 $(-\infty, x_a] \cup [x_b, x_c] \cup [x_d, +\infty)$ 。很显然, 由于中间间隔的能量小山包(称之为势垒)是运动禁区, 所以 $(-\infty, x_a]$ 、 $[x_b, x_c]$ 、 $[x_d, +\infty)$ 这三个可能运动区域是相互隔绝的。

我们来分析一下粒子在 $[x_b, x_c]$ 区间上的运动。假定粒子从 $x_b$ 点出发, 在这一点上, 粒子的全部能量都是势能, 动能为零, 因此初速度等于零。由于 $x_b$ 点左侧的势垒将粒子挡住了, 所以粒子只能向右边运动, 这时候它的势能逐渐减少, 动能逐渐增加, 因此粒子会运动得越来越快, 当粒子到达 $[x_b, x_c]$ 区间上势能曲线的最低点时, 其势能达到最小, 动能达到最大, 粒子的运动速度达到最大。此后, 由于惯性, 粒子继续向右边运动, 但这时候势能在逐渐增加, 因此动能会逐渐减小, 粒子会逐渐减速。当达到 $x_c$ 点时, 所有的动能都转化为了势能, 粒子的速度将会减为零。由于 $x_c$ 的右边又是势垒, 所以在 $x_c$ 点的粒子只能掉头往回跑, 经过加速阶段和减速阶段, 粒子最终将回到 $x_b$ 点。此后, 粒子将重复上面的运动过程。所以, 粒子实际上是在 $[x_b, x_c]$ 区间上作周期性来回运动。

但是, 对于 $(-\infty, x_a]$ 运动区间, 假设粒子从 $-\infty$ 处出发往右边运动, 则它会一直运动到 $x_a$ 处, 然后被 $x_a$ 右边的势垒挡住, 从而掉头, 然后一直往左边跑, 一直跑到无穷远。但是,  $-\infty$ 处不再有势垒使得粒子再次掉头了! 所以, 粒子在 $(-\infty, x_a]$ 区间上的运动并没有周期性来回运动。同样, 由于右边没有足够高的势垒挡住粒子,  $[x_d, +\infty)$ 区间上的运动也是类似的。我们称 $(-\infty, x_a]$ 区间和 $[x_d, +\infty)$ 区间上的这种运动为**散射**, 它描述无穷远处的入射粒子被势垒散射回去的过程。相反, 我们称 $[x_b, x_c]$ 区间上的运动为**束缚运动**, 相应的运动轨道为**束缚轨道**, 因为这时粒子被束缚在一个势能的小山谷(称为势阱)中, 无法跑到无穷远处去。很显然, 散射不是一种束缚运动。

根据哈密顿正则方程的精神, 我们将 $x, p$ 看成两个独立变量, 以 $x$ 为横坐标,  $p$ 为纵坐标所构成的两维空间, 就称为粒子的**相空间**, 粒子在相空间中按照哈密顿正则方程演化。粒子在相空间中的运动轨迹就称为相空间轨道。在我们这个例子中, 相空间轨道显然由能量守恒方程给出, 即满足

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (1.11)$$

我们可以示意性地画出 $(-\infty, x_a]$ 、 $[x_b, x_c]$ 、 $[x_d, +\infty)$ 这三个运动区间的相空间轨道，如图(1.2)所示。很明显，这里的束缚轨道正好是闭合轨道<sup>1</sup>，而

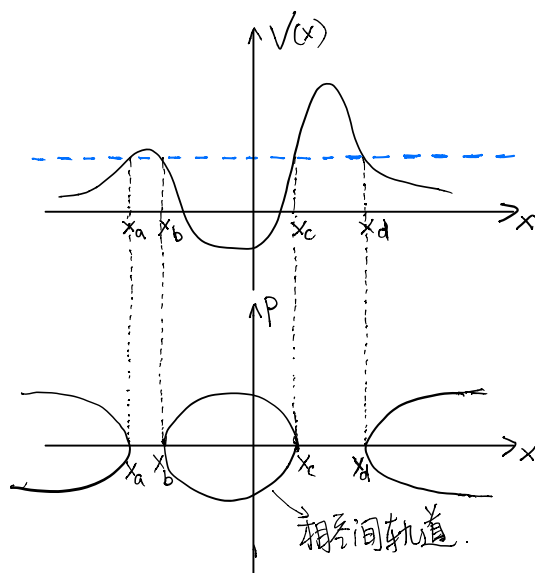


图 1.2: 给定能量 $E$ 的相空间轨道。

散射运动则对应非闭合轨道。

在现在的例子中，相空间轨道主要由其守恒能量 $E$ 刻画，不同的能量对应不同的相空间轨道，我们可以示意性地画出不同 $E$ 值的相空间轨道，如图(1.3)所示。

利用相空间轨道，我们很容易得出 $[x_b, x_c]$ 区间周期运动的周期公式，记周期为 $T$ ，显然它依赖于守恒能量 $E$ ，可以写作 $T(E)$ ，利用哈密顿正则方程 $\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$ ，我们很容易积分得出

$$T(E) = \oint_E dt = \oint_E \frac{m}{p} dx, \quad (1.12)$$

式中的积分沿着能量为 $E$ 的闭合相空间轨道进行。或者我们也可以代入相空间轨道的方程(1.11)，即代入 $p = \sqrt{2m(E - V(x))}$ ，进而将这个周期公式写成

$$T(E) = \oint_E \frac{m}{\sqrt{2m(E - V(x))}} dx. \quad (1.13)$$

<sup>1</sup>这个结论不能推广到一般情形，在非一维运动中，束缚轨道不一定是闭合轨道。



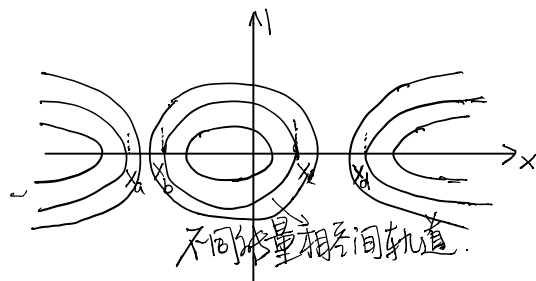


图 1.3: 不同能量的相空间轨道。

另一方面，我们很容易计算闭合相空间轨道所包围的相空间面积，通常记作 $2\pi I(E)$ ，很显然

$$2\pi I(E) = \oint_E p dx = \oint_E \sqrt{2m(E - V(x))} dx. \quad (1.14)$$

由于粒子总是沿着相空间轨道在“演化”，每一条相空间轨道在时间演化下都是不变的，因此 $I(E)$ 作为沿着闭合轨道积分的结果当然也是不变的，即 $I(E)$ 是一个守恒量，实际上，上面的公式告诉我们，它只依赖于守恒能量 $E$ 。从(1.14)这个式子出发，再利用上面的周期公式(1.13)，我们很容易得到

$$\frac{\partial I(E)}{\partial E} = \frac{1}{2\pi} \oint_E \frac{\partial}{\partial E} \sqrt{2m(E - V(x))} dx = \frac{T(E)}{2\pi}. \quad (1.15)$$

或者也可以反过来，将系统能量 $E$ 看成是相轨道包围“面积” $I$ 的函数，然后利用周期运动的角频率 $\omega = 2\pi/T$ ，进而将上面这个公式改写成

$$\frac{\partial E}{\partial I} = \omega(I). \quad (1.16)$$

这里只是对一维运动推导出这个结果，后面我们会把它推广到更一般的所谓可积系统的情形。

上面的结果(1.16)在量子物理的建立过程中起过重要的作用。根据玻尔的定态假设，一个作束缚运动的粒子，其能量是量子化的，能量的每一个量子化值称为能级，我们不妨记第 $n$ 能级的能量为 $E_n$ 。根据定态跃迁假设，粒子从第 $n$ 能级往下跃迁到第 $n-1$ 能级，会放出一个角频率为 $\omega$ 的光子，根

据爱因斯坦的光量子学说, 这个光子的能量将为 $\hbar\omega$ , 由能量守恒, 我们将有 $E_n - E_{n-1} = \hbar\omega$ , 当量子数 $n$ 很大时, 我们可以将这个方程近似写成

$$\frac{\partial E_n}{\partial n} = \hbar\omega. \quad (1.17)$$

将上式与前面的(1.16)式比较, 我们可以知道, 当 $n$ 很大时, 应该有

$$I = n\hbar. \quad (1.18)$$

这就是玻尔-索末菲量子化条件。

特别的, 我们可以考察所谓的一维线性谐振子, 也就是一个弹簧, 它的弹性势能当然是 $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ ,  $x$ 为弹簧的伸长量,  $k$ 为弹簧的劲度系数。通常人们会引入一个参数 $\omega = \sqrt{k/m}$ ( $\omega$ 的含义我们马上会看到), 进而将弹性势能写成

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (1.19)$$

从而相空间轨道是一个椭圆, 满足方程

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = E \Leftrightarrow \frac{x^2}{\left(\frac{2E}{m\omega^2}\right)} + \frac{p^2}{2mE} = 1. \quad (1.20)$$

利用椭圆的面积公式, 我们容易得到相空间轨道包围的面积为 $2\pi E/\omega$ , 进而有

$$2\pi I = 2\pi E/\omega \Leftrightarrow E = I\omega. \quad (1.21)$$

与前面的(1.16)式比较就可以知道,  $\omega$ 正是这个弹簧振子振动的角频率。

如果我们将玻尔-索末菲量子化条件代入(1.21)式, 就可以得到一维线性谐振子的量子化能级

$$E = n\hbar\omega. \quad (1.22)$$

谐振子的这一量子化能级最早是普朗克在推导其黑体辐射的普朗克公式时假设的, 就是著名的能量量子化假设, 正是这个假设引入了量子的概念。谐振子能级的第一个完全量子力学的正确推导由海森堡给出, 当时是作为他的矩阵力学的第一个应用。

从(1.22)式容易知道, 谐振子能级有一个重要的特点, 即假设 $E_1 = n_1\hbar\omega$ 是系统的一个能级,  $E_2 = n_2\hbar\omega$ 也是系统的能级, 则 $E_1 + E_2 = (n_1 +$

$n_2)\hbar\omega$ 也必定是系统的一个能级。即是说，谐振子能谱具有某种可加性。这一性质正好和粒子性吻合，假设系统的某个能态对应一个粒子，其能量为 $E_1$ ，另有一个能态对应粒子 $E_2$ ，则这两个粒子同时存在时的能态就具有能量 $E_1 + E_2$ ，也即是说，粒子系统的能谱也具有某种可加性。这两者的吻合并非某种巧合，因为在量子场论中，粒子是场的激发态，而自由场的行为正好如同一些谐振子。实际上，两者的吻合反过来从物理上(而不是从数学推导上)解释了为什么自由量子场可以看成是多自由度的谐振子。

## 1.2 无磨损摩擦的一个物理模型

前面我们提到，摩擦力起作用的力学系统不是一个哈密顿系统。然而，我们也说了，摩擦力不是一种基本力，它只是一种宏观表现，是有其微观机制的。对于理解摩擦力的微观机制而言，哈密顿系统的势能和势能曲线概念可能又会很重要。当然，实际中的摩擦力很复杂，机制也很复杂，这里我们主要讨论无磨损摩擦的一个简化物理模型，通常叫作独立振子模型<sup>2</sup>。

在讨论独立振子模型之前，我们简单地讨论一下稳定平衡和不稳定平衡的概念。首先，粒子在平衡位置受力为零，而力又是势能对空间位置的偏导，受力为零就意味着这个偏导等于零，这对应于势能函数的极值位置，所以平衡位置就是势能函数的极值位置。但是，极值有极大值和极小值之分，稳定平衡位置就是势能函数的极小值位置，这时候你将粒子从平衡位置偏离一点，它的势能就会升高，所以达成这种偏离需要一定量的能量输入，无限小的扰动不能使粒子偏离平衡位置，所以是稳定平衡。不稳定平衡则与之相反，是势能函数的极大值位置，因此任意小的偏离都能使粒子的势能降低，使粒子偏离平衡位置不需要能量输入，即是说，任意扰动都能使得粒子偏离得越来越远，因此是不稳定平衡。从势能曲线来说，图(1.4)中的左图粒子就处在稳定平衡位置，而右图的粒子就处在不稳定平衡位置。

下面回到关于摩擦力的独立振子模型。摩擦力是一种耗散力，它会将

---

<sup>2</sup>G. M. McClelland and J. N. Glosli, in Ref "Fundamentals of Friction", edited by I. L. Singer and H. M. Pollock (Kluwer, Dordrecht, 1992), p. 405.

知乎上贾明子老师的一篇有趣回答将我引导到了这个重要的物理模型，在此向贾明子老师表示感谢。贾明子回答的链接是

<https://www.zhihu.com/question/384020347/answer/1585610578>

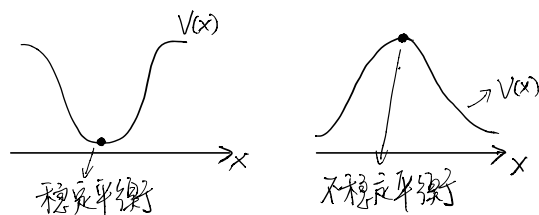


图 1.4: 稳定平衡和不稳定平衡。

机械能耗散为热能，要解释摩擦力的机制关键就是要解释能量是怎么耗散掉的。不妨考察  $A, B$  两块固体，它们沿着一个平整的接触面相对滑动，我们称这个接触面为界面。为了清楚地论述能量耗散的机制，我们不妨假设系统处在一个零温环境中，因此任何无规则热运动的能量都能迅速地被环境吸收掉。

所谓的独立振子模型，其关键是一个关于界面两边的固体原子结构的模型，如图(1.5)所示。我们假定  $B$  固体在界面附近是一些独立的原子，

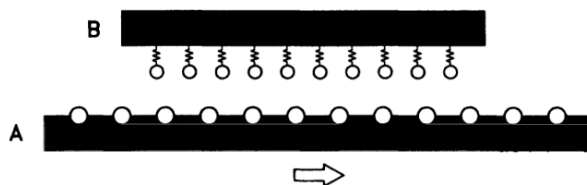


图 1.5: 独立振子模型

它们通过相互独立的弹簧振子(可以理解为化学键)连接到  $B$  的其余部分。而  $A$  固体在界面附近则是一些固定在固体上的规则排布的原子。现在，假定  $B$  固体固定，我们很缓慢地往右边，也就是  $x$  方向，推动  $A$  固体，使得两者相对滑动。

为了理解这个相对滑动过程，我们将注意力集中在  $B$  界面上的某个特定原子  $B_0$ ，如图(1.6)所示。 $B_0$  受到弹簧的弹力，因此有一个弹性势能(作为其水平位置  $x$  的函数)，我们记为  $V_{BB} = \frac{1}{2}k_{BB}x^2$ 。但是， $B_0$  和  $A$  界面上规则排布的原子之间有排斥相互作用，相应的势能我们记为  $V_{AB}$ 。显然  $V_{AB}$  在界面上每一个  $A$  原子位置都有一个峰值，如图(1.6)(a)图中的曲线  $V_{AB}$  所示。因此， $B_0$  原子的总势能为这两者的叠加，记为  $V_S = V_{BB} + V_{AB}$ ，其势能曲

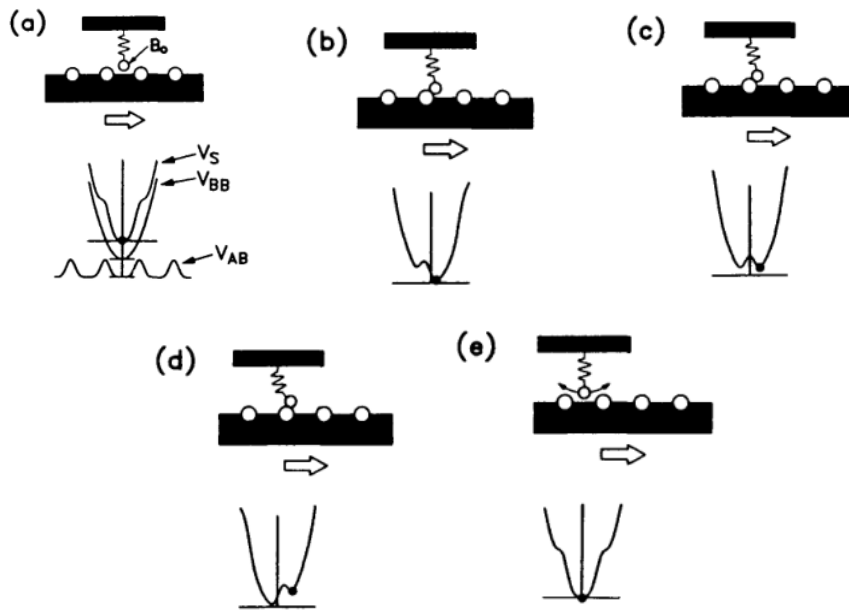


图 1.6: 独立振子模型

线如图(1.6)(a)所示。很显然，随着固体A往右边滑动，势能曲线 $V_S$ 的形状会连续地变化，如图(1.6)所示。

我们注意到图(1.6)(b),(c),(d)中势能曲线 $V_S$ 有两个局部极小， $B_0$ 原子最初待在右边的那个极小位置。假定固体A滑动得足够缓慢，那A往右边滑动的过程就不会激起 $B_0$ 原子的振动， $B_0$ 就会一直待在右边的极小中。但是，从(b)到(d)，右边这个极小的势能从比左边的极小更小，变成了比左边的极小更大。即是说，从(b)到(d)， $V_S$ 的整体最小位置从右边那个极小处切换到了左边。在图(b)中原子待在整体最小位置，因此它是“稳定”的，但在图(d)中整体最小切换到了左边，这样待在右边极小位置的原子就没有那么稳定了，这时候，只要稍微再推动一下固体A(即图中从(d)到(e)的过程)，就能使得右边的这个极小变平，从而待在右边的 $B_0$ 就会自发地掉落到左边的整体最小中，释放出来的势能将会转化为动能，使得连接 $B_0$ 的弹簧振动起来，这个振动将传向B固体的其余部分，最终变成热能耗散掉。这就是摩擦力耗散能量的一个最简单机制。

很显然，在上面的机制中，出现摩擦力的根本原因在于 $V_S$ 出现了两个相互切换的极小，如果 $V_S$ 始终只有一个极小，那就不会有摩擦力。特别

的, 从图(1.6)可以看得很清楚,  $V_S$ 有两个极小的这一要求等价于(c)图位置时 $V_S$ 有两个极小, 这也就是说, 等价于在这个位置处 $V_S$ 曲线中间要出现一个极大, 即在势能曲线正中间要满足

$$0 > \frac{\partial^2 V_S}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 V_{BB}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V_{AB}}{\partial x^2} = k_{BB} + \frac{\partial^2 V_{AB}}{\partial x^2}. \quad (1.23)$$

这是独立振子模型中出现摩擦力的基本判据, 如果这个条件被破坏, 那A、B间的摩擦力就可能消失, 出现超滑现象。

## 1.3 微分形式

前面我们用势能对位置的偏导给出了力的定义, 这一定义抓住了自然界中基本相互作用力的本质, 我们也看到, 满足这一定义的力学系统自动是一个哈密顿系统, 因此这样的定义对于理解自然界的基本规律来说非常有用。然而, 这一定义却不能包括日常生活中的所有力, 比如说, 它不能包括宏观表现出来的摩擦力。实际上, 这样定义出来的力常常也称之为**保守力**, 而日常生活中的力有一些是非保守力, 摩擦力就是非保守力, 那么保守力有什么特性呢? 这一节我们来回答这一问题。但本节更重要的一个目的是介绍一种重要的数学方法, 称之为微分形式。

### 1.3.1 微分形式

微分形式是人们在研究多变量微积分的时候引入的, 不妨让我们从两变量微积分开始。假设有一个二元函数 $f(x, y)$ , 我们要研究它的二重积分

$$A = \iint_D f(x, y) dx dy, \quad (1.24)$$

$D$ 表示积分区域。假设为了计算这个积分的方便, 我们要做如下变量代换(坐标变换)

$$\begin{cases} x = x(x', y') \\ y = y(x', y') \end{cases} \quad (1.25)$$

$(x', y')$ 为另外一组变量(另外一组坐标)。则坐标变换以后积分 $A$ 就变成

$$A = \iint f(x, y) \left| \frac{\partial(x, y)}{\partial(x', y')} \right| dx' dy', \quad (1.26)$$

式中  $|\frac{\partial(x,y)}{\partial(x',y')}| = \frac{\partial x}{\partial x'} \frac{\partial y}{\partial y'} - \frac{\partial x}{\partial y'} \frac{\partial y}{\partial x'}$  为坐标变换的雅可比行列式。即是说，坐标变换以后被积函数要多乘上一个雅可比行列式。

关于二元函数积分坐标变换这一结果的证明可以参看任何一本多变量微积分的教材。这里我们想介绍一种巧妙的代数办法来快速导出这一结果。我们将上面二元函数积分的积分微元  $dx dy$  重写为  $dx \wedge dy$ ，当这样写的时候我们实际上给  $dx, dy$  规定了一种巧妙的代数乘法，乘号写作  $\wedge$ ，通常称之为外积，称相应的代数为外代数，这种代数乘法满足

$$dx \wedge dy = -dy \wedge dx. \quad (1.27)$$

即是说，外积不满足乘法交换律，交换以后会多出一个负号，有时候称之为反交换。由于反交换，我们显然有

$$dx \wedge dx = -dx \wedge dx = 0, \quad dy \wedge dy = -dy \wedge dy = 0. \quad (1.28)$$

有了这个外代数以后，上面二元函数积分的积分微元在坐标变换下就会有

$$\begin{aligned} dx \wedge dy &= \left( \frac{\partial x}{\partial x'} dx' + \frac{\partial x}{\partial y'} dy' \right) \wedge \left( \frac{\partial y}{\partial x'} dx' + \frac{\partial y}{\partial y'} dy' \right) \\ &= \frac{\partial x}{\partial x'} \frac{\partial y}{\partial y'} dx' \wedge dy' + \frac{\partial x}{\partial y'} \frac{\partial y}{\partial x'} dy' \wedge dx' \\ &= \left( \frac{\partial x}{\partial x'} \frac{\partial y}{\partial y'} - \frac{\partial x}{\partial y'} \frac{\partial y}{\partial x'} \right) dx' \wedge dy' \\ &= \left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(x',y')} \right| dx' \wedge dy'. \end{aligned} \quad (1.29)$$

上面的推导过程利用了  $dx' \wedge dx' = dy' \wedge dy' = 0$ 。从推导的结果很容易看到，利用外代数，二元函数积分坐标变换多出来的雅可比行列式自动出现了。

以上的结果很容易推广到  $n$  元函数积分，这时候同样只要将  $n$  重积分微元  $dx^1 dx^2 \dots dx^n$  理解为外代数  $dx^1 \wedge dx^2 \wedge \dots \wedge dx^n$ ，它们满足

$$dx^i \wedge dx^j = -dx^j \wedge dx^i, \quad (1.30)$$

则坐标变换下多出来的雅可比行列式就会自动出现。我们将被积函数  $f(x^1, x^2, \dots, x^n)$  和  $dx^1 \wedge dx^2 \wedge \dots \wedge dx^n$  乘在一起称为一个  $n$  重微分形式，简称  $n$  形式，记为  $\omega$ ，

$$\omega = f(x^1, x^2, \dots, x^n) dx^1 \wedge dx^2 \wedge \dots \wedge dx^n. \quad (1.31)$$

则 $n$ 元函数的 $n$ 重积分实际上就是对 $n$ 形式 $\omega$ 的积分, 记为

$$A = \int \omega. \quad (1.32)$$

这里有两点值得说明: 第一, 以后我们往往将多重积分的积分号简单地记为 $\int$ , 然后根据上下文确定它是几重积分。第二, 上面我们是用上指标来区分不同的变量, 下指标我们一会儿也要用到, 读者需要注意上、下指标的区别。

对于 $n$ 个变量的情形, 我们可以推广 $n$ 形式的概念, 定义 $k$ -形式 $\alpha$ , 即 $k$ 重微分形式 $\alpha$ ,  $0 \leq k \leq n$ ,  $\alpha$ 的定义是

$$\alpha = \frac{1}{k!} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_k} dx^{i_1} \wedge dx^{i_2} \wedge \dots \wedge dx^{i_k}. \quad (1.33)$$

这里每一个指标的取值都是从1到 $n$ , 而且我们既使用了上指标又使用了下指标, 这里就有一个所谓的**求和约定**, 即默认对一个表达式中同时作为上指标和下指标出现的那些指标进行求和, 从1求到 $n$ , 而省略掉求和号。我们称(1.33)式中的 $\alpha_{i_1 i_2 \dots i_k}$ 为 $k$ 形式 $\alpha$ 的一个分量。由于外代数的反交换性质, 很显然(1.33)式中的 $k$ 个指标 $i_1, i_2, \dots, i_k$ 取值必须两两不同, 否则对 $\alpha$ 的贡献将为零。特别的, 这意味着,  $n$ -形式是最高重的非零形式, 任何 $k > n$ 的 $k$ 形式都必定为零, 因为这时候它的 $k$ 个指标取值必定会出现重复, 不可能两两不同。

不妨以2-形式为例进行进一步的考察。这时候 $\alpha$ 的表达式是 $\alpha = \frac{1}{2} \alpha_{ij} dx^i \wedge dx^j$ 。如果 $\alpha_{ij}$ 的两个指标对称, 即 $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$ , 则我们就有

$$\alpha_{ij} dx^i \wedge dx^j = \alpha_{ji} dx^i \wedge dx^j = -\alpha_{ji} dx^j \wedge dx^i = -\alpha_{ij} dx^i \wedge dx^j, \quad (1.34)$$

式中第3个等号是将求和指标 $i, j$ 重命名了一下(这不影响求和结果)。即是说, 这时候有 $\alpha = -\alpha$ , 从而 $\alpha = 0$ 。由此可见, 对于任何 $\alpha_{ij}$ , 其关于 $i, j$ 对称的部分对于2形式 $\alpha$ 的贡献都必定为零, 有贡献的是 $i, j$ 指标反对称的部分。所以, 我们可以自然地要求 $\alpha_{ij}$ 关于指标 $i, j$ 反对称, 即满足 $\alpha_{ji} = -\alpha_{ij}$ 。推广到任意的 $k$ 形式则有, 我们可以自然地要求 $k$ 形式的分量 $\alpha_{i_1 i_2 \dots i_k}$ 关于 $k$ 个下指标两两反对称, 称之为全反对称。

对于3维空间这种只有3个变量的情形。仅有0,1,2,3四种非零的微分形式。0形式就是一个3元的标量函数 $f(x, y, z)$ 。由于反对称性, 3-形式只有一个独立的非零分量, 即 $f(x, y, z) dx \wedge dy \wedge dz$ , 所以, 去掉微元 $dx \wedge dy \wedge dz$ , 3-形式其实和0-形式标量函数是等价的。



1-形式可以写成 $a_1 dx + a_2 dy + a_3 dz$ ，其三个分量 $(a_1, a_2, a_3)$ 刚好构成一个3维空间的矢量场，也可以记作 $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ ，所以3维空间的1-形式又可以写作

$$a_1 dx + a_2 dy + a_3 dz = \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x}. \quad (1.35)$$

3维空间的2-形式可以写成

$$a = \frac{1}{2} a_{ij}(\mathbf{x}) dx^i \wedge dx^j = a_{12} dx \wedge dy + a_{23} dy \wedge dz + a_{31} dz \wedge dx. \quad (1.36)$$

很显然，它也只有3个独立的非零分量，假设我们记 $a_{12} = b_3$ ,  $a_{23} = b_1$ ,  $a_{31} = b_2$ ，并且定义映射 $dx \wedge dy \rightarrow dz$ ,  $dy \wedge dz \rightarrow dx$ ,  $dz \wedge dx \rightarrow dy$ (注意指标1, 2, 3以及微分 $dx, dy, dz$ 各自的轮换)，则有

$$a_{12} dx \wedge dy + a_{23} dy \wedge dz + a_{31} dz \wedge dx \rightarrow b_1 dx + b_2 dy + b_3 dz. \quad (1.37)$$

可见，3维空间2形式和1形式之间能够建立1-1对映。因此，2-形式的3个独立非零分量 $(a_{23}, a_{31}, a_{12}) = (b_1, b_2, b_3) = \mathbf{b}$ 刚好构成一个3维空间矢量。

同时，上面这个对映也告诉我们， $(dy \wedge dz, dz \wedge dx, dx \wedge dy)$ 也完全类似于一个3维空间的矢量微元，通常将之定义为面积元矢量 $d\mathbf{S}$ ，

$$d\mathbf{S} = (dy \wedge dz, dz \wedge dx, dx \wedge dy). \quad (1.38)$$

利用面积元矢量，我们就可以将三维空间的2-形式写成

$$a = \frac{1}{2} a_{ij}(\mathbf{x}) dx^i \wedge dx^j = \mathbf{b} \cdot d\mathbf{S}. \quad (1.39)$$

类似于前面0,3形式以及1,2形式之间的对映关系可以推广到 $n$ 维空间，在 $k$ -形式和 $n - k$ 形式之间建立1-1对映关系，这种对映数学家常常称之为霍奇(Hodge)对偶。

### 1.3.2 外微分与斯托克斯公式

对于微分形式，我们可以定义一种很巧妙的微分运算，称作外微分。为了看清楚外微分如何定义，我们不妨先考察2维空间(以 $x, y$ 为坐标)中的1形式 $a = a_x dx + a_y dy$ ，我们定义 $a$ 的外微分 $da$ 为

$$da = da_x \wedge dx + da_y \wedge dy, \quad (1.40)$$

很显然这样定义的外微分是微分运算和外代数运算的结合体。我们来看一下 $da$ 等于什么

$$\begin{aligned} da &= da_x \wedge dx + da_y \wedge dy \\ &= (\partial_x a_x dx + \partial_y a_x dy) \wedge dx + (\partial_x a_y dx + \partial_y a_y dy) \wedge dy \\ &= \partial_y a_x dy \wedge dx + \partial_x a_y dx \wedge dy \\ &= (\partial_x a_y - \partial_y a_x) dx \wedge dy, \end{aligned} \quad (1.41)$$

式中 $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x^i}$ 。从计算结果很容易看出来， $da$ 只有一个分量，即 $(\partial_x a_y - \partial_y a_x)$ ，而它刚好是两维矢量 $\mathbf{a}$ 的旋度。

另一方面，我们知道2维空间有所谓的格林公式，即

$$\oint_{\partial D} (a_x dx + a_y dy) = \int_D (\partial_x a_y - \partial_y a_x) dx dy, \quad (1.42)$$

式中 $\partial D$ 为2维空间中的一条闭合回路， $D$ 是这条回路所包围的区域。现在，利用上面的外微分运算，显然可以将格林公式用微分形式重写成

$$\int_{\partial D} a = \int_D da. \quad (1.43)$$

这里 $\partial D$ 前面的 $\partial$ 符号不是表示偏导，而是表示取 $D$ 的边界。

下面我们来考察3维空间1形式 $a = \mathbf{a} \cdot d\mathbf{x} = a_x dx + a_y dy + a_z dz$ 的外微分 $da$ ，其定义同样是

$$da = da_x \wedge dx + da_y \wedge dy + da_z \wedge dz. \quad (1.44)$$

经过与两维情形完全类似的计算，我们可以得到

$$da = (\partial_x a_y - \partial_y a_x) dx \wedge dy + (\partial_y a_z - \partial_z a_y) dy \wedge dz + (\partial_z a_x - \partial_x a_z) dz \wedge dx.$$

这当然是一个3维空间中的2形式，这个计算结果清楚地告诉我们， $da$ 的3个独立分量刚好够成矢量 $\mathbf{a}$ 的旋度 $\nabla \times \mathbf{a}$ 。从而我们就能把刚才对 $da$ 的计算结果重写成

$$da = (\nabla \times \mathbf{a}) \cdot d\mathbf{S}. \quad (1.45)$$

再一次，我们看到，外微分自动给出了3维空间的旋度运算。

另一方面，我们知道，3维空间有斯托克斯公式，

$$\oint_{\partial D} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{x} = \int_D (\nabla \times \mathbf{a}) \cdot d\mathbf{S} \quad (1.46)$$

式中 $\partial D$ 表示3维空间的一条闭合回路， $D$ 是以这条回路为边界的一张曲面。现在，利用刚才从外微分运算中得到的结果，我们就能将这个公式用微分形式写成

$$\int_{\partial D} a = \int_D da. \quad (1.47)$$

看，形式上这个式子和2维格林公式的微分形式完全一样！

下面考察3维空间中2形式 $a = a_{12}dx \wedge dy + a_{23}dy \wedge dz + a_{31}dz \wedge dx$ 的外微分 $da$ ，其定义同样是，

$$da = da_{12} \wedge dx \wedge dy + da_{23} \wedge dy \wedge dz + da_{31} \wedge dz \wedge dx. \quad (1.48)$$

完全类似上面我们进行过的计算，可以得到

$$da = (\partial_3 a_{12} + \partial_1 a_{23} + \partial_2 a_{31})dx \wedge dy \wedge dz. \quad (1.49)$$

利用上一小节的定义 $(a_{23}, a_{31}, a_{12}) = (b_1, b_2, b_3) = \mathbf{b}$ ，我们可以把这个结果重写成

$$da = (\partial_1 b_1 + \partial_2 b_2 + \partial_3 b_3)dx \wedge dy \wedge dz = (\nabla \cdot \mathbf{b})dx \wedge dy \wedge dz. \quad (1.50)$$

很显然这是一个3-形式。从这里我们也看到，外微分也能给出3维矢量的散度。

另一方面，我们知道3维空间有所谓的高斯定理，它告诉我们

$$\oint_{\partial V} \mathbf{b} \cdot d\mathbf{S} = \int_V (\nabla \cdot \mathbf{b})dV, \quad (1.51)$$

式中3维体积元 $dV = dxdydz$ ， $\partial V$ 为3维空间中的一个闭合曲面， $V$ 为其包围的3维区域。很明显，利用上面关于2形式的外微分，以及上一小节的(1.39)式，我们可以用2-形式 $a$ 将高斯定理重写为

$$\int_{\partial V} a = \int_V da. \quad (1.52)$$

又一次，我们得到了与(1.47)式形式完全类似的公式。

实际上，我们完全可以将(1.47)式和(1.52)式综合写成

$$\int_{\partial D} \alpha = \int_D d\alpha, \quad (1.53)$$

式中 $\alpha$ 表示3维空间中的一个 $k-1$ 形式， $D$ 表示3维空间中一个以 $\partial D$ 为边界的 $k$ 维曲面(因此 $\partial D$ 是 $k-1$ 维的，而 $d\alpha$ 则是一个 $k$ -形式)。  $k=2$ 时，它就是斯托克斯公式， $k=3$ 时它就是高斯定理。可见，利用外微分运算，我们可以将矢量分析中那些著名的公式和定理统一起来。

不仅如此，我们还可以将上面的结果推广到 $n$ 维空间，对于 $n$ 维空间的一个 $k-1$ 形式 $\alpha = \frac{1}{(k-1)!} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_{k-1}} dx^{i_1} \wedge dx^{i_2} \wedge \dots \wedge dx^{i_{k-1}}$ ，我们可以一般性地定义其外微分 $d\alpha$ 为

$$d\alpha = \frac{1}{(k-1)!} (\partial_j \alpha_{i_1 i_2 \dots i_{k-1}}) dx^j \wedge dx^{i_1} \wedge dx^{i_2} \wedge \dots \wedge dx^{i_{k-1}}. \quad (1.54)$$

显然， $d\alpha$ 是一个 $k$ 形式。可以证明(请参考相关数学书)，我们将依然有(1.53)式！和前面的唯一区别是，现在，它不再限于3维空间中了，因此 $k$ 也不限于小于等于3了，而是 $k \leq n$ 。正因为如此，人们通常称(1.53)式为广义的斯托克斯公式，或者有时候就简称为斯托克斯公式。

外微分有一个非常优雅而重要的性质，即对任何微分形式进行两次外微分，结果恒等于零，通常将这个结果简写成

$$d^2 = 0. \quad (1.55)$$

它的含义就是对于任何 $k-1$ 形式 $\alpha$ ，必有

$$d^2 \alpha = d(d\alpha) = 0. \quad (1.56)$$

这个结果的证明非常简单，按照外微分的定义

$$d^2 \alpha = \frac{1}{(k-1)!} (\partial_i \partial_j \alpha_{i_1 i_2 \dots i_{k-1}}) dx^i \wedge dx^j \wedge dx^{i_1} \wedge dx^{i_2} \wedge \dots \wedge dx^{i_{k-1}}. \quad (1.57)$$

显然这是一个 $k+1$ 形式，但是这个 $k+1$ 形式的分量 $\partial_i \partial_j \alpha_{i_1 i_2 \dots i_{k-1}}$ 关于 $i, j$ 指标恒对称，而不是反对称，按照我们前面的分析，这就意味着这个 $k+1$ 形式等于零，从而就完成了证明。

下面介绍两个常用概念。首先，一个微分形式 $\alpha$ ，如果它的外微分等于零，即 $d\alpha = 0$ ，我们就称它为闭形式。其次，一个微分形式 $\alpha$ ，如果它是另一个微分形式 $\beta$ 的外微分，即有 $\alpha = d\beta$ ，我们就称这样的 $\alpha$ 为一个恰当形式。根据性质(1.55)，很显然，任何恰当形式都必定是闭形式！反过来，闭形式却不一定是恰当形式，闭形式什么时候是恰当形式什么时候不是，这往往和空间的拓扑有关系，是所谓的de Rahm 上同调研究的内容，不过，这超出本书的范围了。

### 1.3.3 保守力的特性

微分形式的语言在我们后面的章节中还有重要的应用，不过现在还是让我们用它来研究一下保守力的特性吧。

让我们先回顾一下前面给出的保守力的定义

$$\sum_i \mathbf{F}_i \cdot d\mathbf{x}_i = -dV. \quad (1.58)$$

为了将这个定义写得更漂亮一点，我们引入指标  $\mu = 1, 2, 3, \dots, 3N$ ，令它的前3个分量表示第1个粒子的三个直角坐标分量，次3个分量表示第2个粒子的三个直角坐标分量，依次类推，直到最后3个分量代表第  $N$  个粒子的三个直角坐标分量。从而我们可以将上面这个保守力的定义式重写成

$$F_\mu dx^\mu = -dV(x^1, \dots, x^{3N}). \quad (1.59)$$

当然，在这个式子中我们用了求和约定。我们可以称这样定义出来的  $F_\mu dx^\mu$  为力1形式，简记为  $F$ ，即  $F = F_\mu dx^\mu$ ，则上面这个保守力的定义式告诉了我们，保守力1形式是一个恰当形式，满足

$$F = -dV, \quad (1.60)$$

势能  $V$  是一个标量函数，也就是0形式，也称作势能0形式。则由恰当形式必定是闭形式的数学定理，我们立马知道

$$dF = 0. \quad (1.61)$$

根据外微分的定义，我们很容易计算  $dF$  (下面的  $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ )，

$$dF = (\partial_\mu F_\nu) dx^\mu \wedge dx^\nu = \left[ \frac{1}{2}(\partial_\mu F_\nu - \partial_\nu F_\mu) + \frac{1}{2}(\partial_\mu F_\nu + \partial_\nu F_\mu) \right] dx^\mu \wedge dx^\nu \quad (1.62)$$

根据微分形式分量表达的指标对称部分没有贡献，我们立马有

$$dF = \frac{1}{2}(\partial_\mu F_\nu - \partial_\nu F_\mu) dx^\mu \wedge dx^\nu. \quad (1.63)$$

因此  $dF = 0$  就等价于

$$\partial_\mu F_\nu - \partial_\nu F_\mu = 0. \quad (1.64)$$

特别的, 对于单个质点的情形(指标只能取1, 2, 3), 读者容易知道, 上面这个结果其实就是力矢量 $\mathbf{F}$ 的旋度等于零, 即

$$\nabla \times \mathbf{F} = 0. \quad (1.65)$$

另一方面, 注意到力1形式 $F$ 是 $3N$ 维坐标空间的1形式, 我们可以在 $3N$ 维坐标空间取一条闭合回路 $\partial D$ ,  $\partial D$ 是 $3N$ 维坐标空间中某个2维曲面 $D$ 的边界, 则由斯托克斯公式, 我们有

$$\int_{\partial D} F = \int_D dF = 0. \quad (1.66)$$

即是说, 保守力1形式在坐标空间任何闭合回路上的积分都等于零。人们通常称力1形式在某条路径上的积分为功, 因此这个结果就相当于说, 保守力在任何闭合回路上所做的功恒为零!

由此我们容易知道, 摩擦力必定不是保守力, 因为在摩擦力的作用下将粒子沿着闭合回路运动一圈, 摩擦力是要做非零的负功的, 正是这个负功将机械能耗散为了热量。