

КУРС ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ ДЛЯ ХИМИКОВ

К.А. Казаков*
Физический факультет МГУ

ПРЕДИСЛОВИЕ

Настоящий курс представляет собой запись лекций по теоретической механике, читаемых автором в течение ряда лет студентам второго курса химического факультета МГУ. Он имеет две основные задачи: во-первых, дать представление об основных методах теоретической механики, и, во-вторых, изложить материал, необходимый студентам для изучения квантовой механики, курс которой читается непосредственно вслед за курсом теоретической механики. В первых двух главах курса излагается метод Лагранжа, применение которого затем иллюстрируется в третьей и четвертой главах решением задачи двух тел, задачи о малых колебаний систем со многими степенями свободы и задачи о движении твердого тела. Последняя глава посвящена изложению канонического аппарата – методов Гамильтона и Гамильтона-Якоби, а также тесно связанных с ними метода канонических преобразований и формализма скобок Пуассона. Курс имеет два *отступления*, в которых классические системы рассматриваются с точки зрения квантовой механики (II §4 и V §6). Это сделано по двум причинам: во-первых, для их понимания знания квантовой механики не требуется, и во-вторых, в рамках курса собственно квантовой механики на рассмотрение квазиклассического приближения нет времени. В данном курсе материал этих отступлений нигде не используется, поэтому при желании они могут быть опущены. Однако автор не рекомендует этого делать, поскольку изложенный в них взгляд на эволюцию системы как на переход по множеству возможных траекторий дает хорошее интуитивное представление о связи классической механики с квантовой.

Все замечания, предложения, сообщения о замеченных опечатках и т.п. просьба передавать автору лично или по электронной почте.*

*Electronic address: kirill_kazakov@comtv.ru.

Contents

I. Формализм Лагранжа	3
§1. Основная задача механики	3
§2. Уравнения Лагранжа для одной материальной точки	4
§3. Уравнения Лагранжа для системы материальных точек при наличии связей	5
§4. Включение диссипативных и электромагнитных сил	10
II. Законы сохранения. Принцип наименьшего действия	12
§1. Законы сохранения импульса и момента импульса	13
§2. Закон сохранения энергии	16
§3. Принцип наименьшего действия	18
§4. Отступление в квантовую механику: принцип наименьшего действия и амплитуда перехода квазиклассической системы	20
III. Интегрирование уравнений движения	21
§1. Движение с одной степенью свободы	22
§2. Задача двух тел	25
§3. Движение в кулоновом поле	28
Кулоново поле притяжения. Законы Кеплера	31
§4. Задача рассеяния. Формула Резерфорда	33
IV. Интегрирование уравнений движения (продолжение)	36
§1. Колебания систем со многими степенями свободы	36
Невырожденный случай	39
Вырожденный случай	40
§2. Колебания молекул	41
§3. Движение твердого тела	48
V. Канонический формализм	58
§1. Уравнения Гамильтона	58
Интегрирование уравнений Гамильтона	59
Скобки Пуассона	61
Вычисление скобок Пуассона	63
§2. Принцип наименьшего действия	65
§3. Канонические преобразования	66
§4. Бесконечно-малые канонические преобразования	70
Теорема об инвариантности скобок Пуассона	70
Теорема об инвариантности фазового объема	71
§5. Действие как функция координат и времени. Теорема Лиувилля. Уравнение Гамильтона-Якоби	72
Зависимость действия от координат	72
Зависимость действия от времени	73
Теорема Лиувилля	75
Уравнение Гамильтона-Якоби	76
Разделение переменных в уравнении Гамильтона-Якоби	78
§6. Отступление в квантовую механику: уравнение Гамильтона-Якоби как квазиклассический предел уравнения Шредингера	82

I. ФОРМАЛИЗМ ЛАГРАНЖА

Основная задача механики. Уравнения Ньютона. Функция Лагранжа и уравнения Лагранжа в декартовых координатах. Связи. Число степеней свободы и обобщенные координаты системы. Уравнения Лагранжа при наличии идеальных голономных связей. Включение электромагнитных сил и сил трения.

§1. Основная задача механики

Предметом механики является изучение движения материальных тел под действием приложенных к ним сил. Любое тело можно представить как совокупность тел меньшего размера, поэтому фундаментальным для всей механики является понятие *материальной точки*. Если в условиях данной задачи размерами тела и его ориентацией в пространстве можно пренебречь, то такое тело называют материальной точкой. Например, при изучении орбитального движения планет вокруг Солнца их размерами можно с хорошей степенью точности пренебречь и рассматривать их как материальные точки. С другой стороны, характер прецессии оси вращения планеты под влиянием других планет и Солнца существенно зависит от ее строения.

Для задания пространственного положения материальной точки можно использовать, например, декартовы компоненты ее радиус-вектора $\mathbf{r} = (x, y, z)$. С течением времени положение тела в пространстве меняется, так что \mathbf{r} является функцией времени. Зависимость $\mathbf{r}(t)$ называется *законом движения* материальной точки. Определение этой зависимости (для каждой материальной точки системы) составляет *основную задачу* теоретической механики.

Дифференциальные уравнения, определяющие зависимость координат материальной точки от времени, называются *уравнениями движения*. В классической механике уравнения движения являются уравнения Ньютона

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}, \quad (1)$$

где m есть масса материальной точки, а \mathbf{F} – действующая на нее сила. Последняя зависит от положения тела, а также от его скорости $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt \equiv \dot{\mathbf{r}}$. Следовательно, уравнения (1) представляют собой систему трех дифференциальных уравнений для трех компонент вектора \mathbf{r} . Таким образом, основная задача теоретической механики сводится к интегрированию уравнений движения. Для того чтобы найти закон движения как решение уравнений Ньютона, необходимо еще задать совокупность *дополнительных условий*. Поскольку уравнения Ньютона являются дифференциальными уравнениями второго порядка относительно неизвестных функций $x(t), y(t), z(t)$, то для однозначного их определения требуется $2 \times 3 = 6$ дополнительных условий, которыми обычно являются значения координат и скоростей материальной точки в некоторый момент времени. Совокупность данных о системе, задание которых в некоторый момент времени является необходимым и достаточным для однозначного определения ее последующей эволюции, называют *состоянием системы*. Таким образом, состояние материальной точки в любой момент времени определяется заданием ее радиус-вектора и вектора ее скорости.

§2. Уравнения Лагранжа для одной материальной точки

Непосредственное интегрирование уравнений Ньютона является далеко не самым удобным способом решения основной задачи механики. Это связано с тем, что использование декартовых компонент радиус-вектора для задания пространственного положения материальной точки часто оказывается неудобным. Например, если поле силы \mathbf{F} имеет ту или иную симметрию, то целесообразным является такой выбор координат, при котором \mathbf{F} зависит не от всех, а только от части параметров, определяющих положение материальной точки. Для того чтобы эффективно производить переход от одного набора параметров к другому, удобно предварительно преобразовать уравнения Ньютона к так называемому лагранжеву виду.

Рассмотрим простейший случай движения одной материальной точки в потенциальном поле $U(\mathbf{r}, t)$. Сила, действующая на тело в таком поле, имеет вид

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}.$$

Здесь и в дальнейшем под производной по некоторому вектору понимается вектор, компоненты которого равны производным по соответствующим компонентам данного вектора, т.е., $\partial U/\partial \mathbf{r} = (\partial U/\partial x, \partial U/\partial y, \partial U/\partial z)$. Преобразование к лагранжеву виду состоит во введении некоторой скалярной функции координат и скоростей материальной точки, такой, что обе части векторного уравнения Ньютона (1) имеют вид производных от этой функции, аналогично тому как вектор силы выражается через производные скалярного потенциала. Используя введенные обозначения, левую часть уравнений Ньютона можно переписать следующим образом

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{\mathbf{r}}},$$

где T есть кинетическая энергия материальной точки,

$$T(\dot{\mathbf{r}}) = \frac{m \dot{\mathbf{r}}^2}{2},$$

а три компоненты вектора скорости рассматриваются как независимые переменные. Действительно, это тождество нетрудно проверить, записывая его покомпонентно. Мы имеем, например, для x -компоненты

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{x}} = \frac{m}{2} \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{x}} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = \frac{m}{2} \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{x}} \dot{x}^2 = m \frac{d\dot{x}}{dt} = m \frac{d^2 x}{dt^2}.$$

Введем теперь функцию $L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = T(\dot{\mathbf{r}}) - U(\mathbf{r}, t)$. По определению, L является функцией трех координат (x, y, z) , трех компонент скорости $(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$, а также времени, рассматриваемых как независимые переменные (т.е., любая из этих семи переменных считается независимой от остальных шести). Функция $L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t)$ называется *функцией Лагранжа*. С ее помощью уравнения Ньютона можно переписать в виде

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = 0, \quad (2)$$

поскольку $\partial T/\partial \mathbf{r} = 0$, $\partial U/\partial \dot{\mathbf{r}} = 0$ в силу независимости координат и скоростей. Записанные в таком виде, уравнения движения называются *уравнениями Лагранжа*.

Оказывается, что уравнения Лагранжа имеют один и тот же вид независимо от того, какие параметры используются для задания пространственного положения материальной точки. А именно, если вместо декартовых координат (x, y, z) выбрать другую тройку координат (q_1, q_2, q_3) , то уравнения движения в новых координатах будут иметь вид

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (3)$$

причем L предполагается выраженной через новые координаты q_α и соответствующие им “скорости” \dot{q}_α , снова рассматриваемые как независимые переменные. Это замечательное свойство уравнений Лагранжа, называемое *ковариантностью* относительно замены координат, будет доказано в следующем пункте.

§3. Уравнения Лагранжа для системы материальных точек при наличии связей

Мы докажем ковариантность уравнений Лагранжа сразу для системы, состоящей из N материальных точек, имеющих массы m_i и радиус-векторы \mathbf{r}_i , $i = 1, \dots, N$, допуская при этом, что на эту систему еще могут быть наложены так называемые идеальные голономные связи. Вообще, под связями понимают любые ограничения на возможные движения системы. Например, связи могут состоять в том, что взаимные расстояния между некоторыми материальными точками должны оставаться неизменными при движении системы, или же движение частиц может быть ограничено непроницаемыми стенками. Далее, связи могут также выражаться в виде определенных условий на скорости точек, и т.п. В том важном и часто встречающемся на практике случае, когда связь может быть выражена в виде уравнения, связывающего координаты точек системы, она называется *голономной*. Примером голономной связи может служить жесткий невесомый стержень, связывающий две частицы.

В случае наличия связей помимо потенциальных сил на точки системы будут действовать также силы реакции связей. Обозначая эти силы через \mathbf{R} , запишем уравнения Ньютона для каждой материальной точки, составляющей систему

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i} + \mathbf{R}_i, \quad i = 1, \dots, N. \quad (4)$$

Пусть имеется n независимых уравнений связи между \mathbf{r}_i , $i = 1, \dots, N$:

$$f_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = 0, \quad k = 1, \dots, n. \quad (5)$$

Мы считаем для простоты, что эти соотношения не содержат времени явно. Уравнения (5) означают, что n компонент из полного набора $3N$ декартовых компонент векторов \mathbf{r}_i могут быть выражены через остальные $(3N - n) \equiv s$. В свою очередь, может оказаться удобным выразить эти s компонент как функции некоторого другого набора s независимых параметров q_α , $\alpha = 1, \dots, s$. Для краткости, этот набор параметров мы будем обозначать просто q . Таким образом, все N радиус-векторов \mathbf{r}_i окажутся функциями q :

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(q), \quad i = 1, \dots, N. \quad (6)$$

Набор независимых переменных, однозначно определяющих положение системы в пространстве, называется *обобщенными координатами* системы, а число этих переменных – *числом степеней свободы* системы. В рассматриваемом случае q_α , $\alpha = 1, \dots, s$ являются обобщенными координатами системы материальных точек при наличии связей.

Покажем теперь, что в случае, когда связи являются идеальными, т.е. трение в системе отсутствует, уравнения движения по-прежнему имеют вид (3) по каждой из обобщенных координат q_α , $\alpha = 1, \dots, s$.

Обозначим символом $\delta \mathbf{r}_i$, $i = 1, \dots, N$ произвольное малое изменение (*вариацию*) координат частиц системы, согласованное с уравнениями связи. Согласованность с уравнениями связи означает, что выполняются следующие уравнения

$$f_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = 0, \quad f_k(\mathbf{r}_1 + \delta \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N + \delta \mathbf{r}_N) = 0, \quad k = 1, \dots, n.$$

Перемещения, удовлетворяющие этим условиям, называют *виртуальными* (т.е. возможными, допустимыми). Поскольку трение отсутствует, сила реакции связей, действующая на частицу, ортогональна виртуальному перемещению:

$$(\mathbf{R}_i, \delta \mathbf{r}_i) = 0, \quad i = 1, \dots, N,$$

где символом (\mathbf{a}, \mathbf{b}) обозначено скалярное произведение векторов \mathbf{a} и \mathbf{b} . Складывая эти уравнения и используя (4), получим

$$\sum_{i=1}^N m_i \left(\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2}, \delta \mathbf{r}_i \right) = - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}, \delta \mathbf{r}_i \right). \quad (7)$$

Это уравнение может быть преобразовано к виду, в котором суммирование ведется не по частицам системы, а по индексу α , нумерующему независимые обобщенные координаты системы. Для этого проварируем уравнения (6)

$$\delta \mathbf{r}_i = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha. \quad (8)$$

В отличие от $\delta \mathbf{r}_i$, вариации обобщенных координат δq_α являются независимыми друг от друга. Тогда согласно правилу дифференцирования сложной функции можно написать

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}, \delta \mathbf{r}_i \right) &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}, \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha \right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^s \delta q_\alpha \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}, \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) = \sum_{\alpha=1}^s \delta q_\alpha \frac{\partial U(\mathbf{r}(q), t)}{\partial q_\alpha}. \end{aligned} \quad (9)$$

Далее, левую часть уравнения (7) можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N m_i \left(\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2}, \delta \mathbf{r}_i \right) &= \sum_{i=1}^N m_i \left(\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2}, \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha \right) \\ &= \sum_{i=1}^N m_i \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \left(\dot{\mathbf{r}}_i, \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) - \left(\dot{\mathbf{r}}_i, \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) \right\} \delta q_\alpha. \end{aligned} \quad (10)$$

Для того чтобы выразить правую часть уравнения (10) в виде производных от функции Лагранжа, как и в рассмотренном выше случае одной частицы, мы расширим набор независимых переменных, включив в него величины \dot{q}_α , $\alpha = 1, \dots, s$, называемые *обобщенными скоростями*. Таким образом, по определению, любая из переменных q, \dot{q} является независимой от остальных. Заметим попутно, что поскольку уравнения Ньютона представляют собой систему дифференциальных уравнений второго порядка для неизвестных функций $\mathbf{r}_i(t)$, то после перехода к обобщенным координатам мы получим систему s независимых уравнений для s неизвестных функций $q_\alpha(t)$, которые также будут дифференциальными уравнениями второго порядка. Поэтому для решения этой системы требуется задание $2s$ дополнительных условий – значений s обобщенных координат и s обобщенных скоростей в некоторый момент времени. Другими словами, состояние системы при наличии связей определяется заданием независимых величин q, \dot{q} в некоторый момент времени.

Выразим декартовы скорости частиц через обобщенные скорости. Для этого возьмем полную производную по времени соотношений (6)

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha, \quad i = 1, \dots, N. \quad (11)$$

Имея в виду данное выше определение, продифференцируем уравнения (11) по \dot{q}_β :

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \dot{q}_\beta} = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \frac{\partial \dot{q}_\alpha}{\partial \dot{q}_\beta}, \quad \beta = 1, \dots, s. \quad (12)$$

В силу независимости скоростей \dot{q}_α производная $\partial \dot{q}_\alpha / \partial \dot{q}_\beta$ равна единице при $\alpha = \beta$, и нулю в противном случае, т.е.,

$$\frac{\partial \dot{q}_\alpha}{\partial \dot{q}_\beta} = \delta_{\alpha\beta},$$

где $\delta_{\alpha\beta}$ обозначает единичную матрицу

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta, \\ 0, & \alpha \neq \beta. \end{cases}$$

Поэтому сумма в правой части уравнения (12) сводится к одному члену:

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \dot{q}_\beta} = \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta}. \quad (13)$$

Далее, преобразуем еще полную производную по времени от $\partial \mathbf{r}_i / \partial q_\beta$:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta} = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \left(\frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta} \right) \dot{q}_\alpha = \frac{\partial}{\partial q_\beta} \left\{ \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) \dot{q}_\alpha \right\}.$$

Выражение в фигурных скобках есть не что иное, как $\dot{\mathbf{r}}_i$, так что

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta} = \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial q_\beta}. \quad (14)$$

С помощью соотношений (13) и (14) правая часть уравнения (10) теперь может быть преобразована следующим образом

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^N m_i \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \left(\dot{\mathbf{r}}_i, \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) - \left(\dot{\mathbf{r}}_i, \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) \right\} \delta q_\alpha \\
&= \sum_{i=1}^N m_i \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \left(\dot{\mathbf{r}}_i, \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) - \left(\dot{\mathbf{r}}_i, \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial q_\alpha} \right) \right\} \delta q_\alpha \\
&= \sum_{i=1}^N m_i \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i^2}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{1}{2} \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i^2}{\partial q_\alpha} \right\} \delta q_\alpha \\
&= \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} - \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} \right\} \delta q_\alpha \\
&= \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} \right\} \delta q_\alpha,
\end{aligned}$$

где

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2}$$

есть полная кинетическая энергия системы. Используя этот результат, а также уравнение (9), переписываем уравнение (7) в виде

$$\sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial(T - U)}{\partial q_\alpha} \right\} \delta q_\alpha = 0.$$

Учитывая, что потенциальная энергия не зависит от обобщенных скоростей, последнее уравнение можно также представить в виде

$$\sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \right\} \delta q_\alpha = 0, \quad (15)$$

где функция Лагранжа $L = T - U$ предполагается выраженной через обобщенные координаты и обобщенные скорости системы (а также время), а именно,

$$L(q, \dot{q}, t) = T(\dot{\mathbf{r}}(q, \dot{q})) - U(\mathbf{r}(q), t).$$

В силу независимости вариаций обобщенных координат левая часть уравнения (15) будет равна нулю, только если коэффициент при каждой из δq_α обращается в нуль независимо от остальных:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (16)$$

Итак, мы показали, что в случае, когда на систему наложены идеальные голономные связи, уравнения движения могут быть записаны в форме Лагранжа (16). Вид этих уравнений не зависит от конкретного выбора обобщенных координат системы, что, в частности, и доказывает их ковариантность. Можно также показать, что этот результат остается справедливым и в случае связей, зависящих от времени.

Пример 1. **Функция Лагранжа в цилиндрических координатах.** Рассмотрим движение материальной точки в аксиально-симметричном поле, т.е. поле, которое не меняется при поворотах на произвольный угол вокруг некоторой оси. Такого, например, поле прямого заряженного провода. В этом случае в качестве q целесообразно выбрать цилиндрические координаты (ρ, ϕ, z) , направив ось z по оси симметрии поля. Тогда поле не будет зависеть от угловой координаты ϕ . Переход от декартовых координат к цилиндрическим задается формулами

$$x = \rho \cos \phi, \quad y = \rho \sin \phi, \quad z = z. \quad (17)$$

Дифференцируя эти соотношения по времени, получаем

$$\dot{x} = \dot{\rho} \cos \phi - \rho \sin \phi \dot{\phi}, \quad \dot{y} = \dot{\rho} \sin \phi + \rho \cos \phi \dot{\phi},$$

а возводя их в квадрат и складывая, находим выражение для квадрата скорости материальной точки в цилиндрических координатах

$$\dot{\mathbf{r}}^2 = \dot{\rho}^2 + \rho^2 \dot{\phi}^2 + \dot{z}^2, \quad (18)$$

и затем ее функцию Лагранжа в аксиально-симметричном поле

$$L = \frac{m}{2}(\dot{\rho}^2 + \rho^2 \dot{\phi}^2 + \dot{z}^2) - U(\rho, z). \quad (19)$$

Запишем теперь уравнения Лагранжа в этих координатах. Мы имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \rho} = m\rho \dot{\phi}^2 - \frac{\partial U(\rho, z)}{\partial \rho}, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\rho}} = m\dot{\rho}.$$

Поэтому уравнение Лагранжа по переменной ρ имеет вид

$$m\ddot{\rho} - m\rho \dot{\phi}^2 + \frac{\partial U(\rho, z)}{\partial \rho} = 0.$$

По переменной z уравнение Лагранжа остается тем же, что и в декартовых координатах:

$$m\ddot{z} + \frac{\partial U(\rho, z)}{\partial z} = 0.$$

Наконец,

$$\frac{\partial L}{\partial \phi} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = m\rho^2 \dot{\phi},$$

так что соответствующее уравнение Лагранжа есть просто

$$\frac{d}{dt}(\rho^2 \dot{\phi}) = 0. \quad (20)$$

§4. Включение диссипативных и электромагнитных сил

После того, как мы представили уравнения движения в лагранжевой форме для систем с потенциальными силами и идеальными связями, естественно расширить класс допустимых взаимодействий, рассмотрев функции Лагранжа более общего вида, чем простейший $L = T - U$.

Рассмотрим функцию Лагранжа следующего вида

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = e^{\lambda t} \left(\frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(\mathbf{r}, t) \right), \quad (21)$$

где λ есть некоторый постоянный параметр. Составим уравнения Лагранжа. Мы имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = e^{\lambda t} m \dot{\mathbf{r}}, \quad \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = -e^{\lambda t} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}.$$

Подстановка в уравнение (16) дает

$$\frac{d}{dt} (e^{\lambda t} m \dot{\mathbf{r}}) = -e^{\lambda t} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}.$$

Выполняя дифференцирование и сокращая на $e^{\lambda t}$, получаем

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -k\dot{\mathbf{r}} - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}, \quad k \equiv m\lambda.$$

Таким образом, функция Лагранжа (21) описывает движение частицы массы m под действием потенциальной силы $\mathbf{F}_p = -\partial U / \partial \mathbf{r}$ и силы трения, пропорциональной скорости частицы, $\mathbf{F}_d = -k\dot{\mathbf{r}}$.

Рассмотрим, далее, функцию Лагранжа вида

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} + \frac{q}{c} (\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \dot{\mathbf{r}}) - q\varphi(\mathbf{r}, t), \quad (22)$$

где $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, $\varphi(\mathbf{r}, t)$ – заданные векторная и скалярная функции координат и времени, а q и c постоянные параметры. Член, линейный по скорости частицы в функции Лагранжа, называют *обобщенным потенциалом*.

Составим уравнения Лагранжа. Мы имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + \frac{q}{c} A_x, \quad \frac{\partial L}{\partial x} = \frac{q}{c} \left(\frac{\partial A_x}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial A_y}{\partial x} \dot{y} + \frac{\partial A_z}{\partial x} \dot{z} \right) - q \frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

и аналогичные выражения по переменным y, z . Подстановка в уравнение (16) дает

$$m\ddot{x} + \frac{q}{c} \left(\frac{\partial A_x}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \dot{y} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \dot{z} + \frac{\partial A_x}{\partial t} \right) = \frac{q}{c} \left(\frac{\partial A_x}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial A_y}{\partial x} \dot{y} + \frac{\partial A_z}{\partial x} \dot{z} \right) - q \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad (23)$$

или, перенося все силы в правую часть,

$$m\ddot{x} = -\frac{q}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} - q \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{q}{c} \left\{ \left[\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right] \dot{y} + \left[\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z} \right] \dot{z} \right\}. \quad (24)$$

Введем теперь следующие обозначения

$$E_x = -\frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} - \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad E_y = -\frac{1}{c} \frac{\partial A_y}{\partial t} - \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \quad E_z = -\frac{1}{c} \frac{\partial A_z}{\partial t} - \frac{\partial \varphi}{\partial z},$$

$$H_x = \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}, \quad H_y = \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}, \quad H_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}. \quad (25)$$

Определение вектора $\mathbf{H} = (H_x, H_y, H_z)$ нетрудно запомнить, если представлять его в виде формального векторного произведения “вектора” $\partial/\partial \mathbf{r}$ с \mathbf{A} :

$$\mathbf{H} = [\partial/\partial \mathbf{r}, \mathbf{A}].$$

Вектор \mathbf{H} называется *ротором* вектора \mathbf{A} . Операция взятия ротора данного вектора обозначается обычно символом rot , так что $\mathbf{H} = \text{rot} \mathbf{A}$. С помощью “вектора” $\partial/\partial \mathbf{r}$ определение вектора $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$ также может быть переписано компактно как

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}}.$$

Во введенных обозначениях уравнение (24) принимает вид

$$m\ddot{x} = qE_x + \frac{q}{c} [\dot{\mathbf{r}}, \mathbf{H}]_x, \quad (26)$$

где $[\dot{\mathbf{r}}, \mathbf{H}]_x = \dot{y}H_z - \dot{z}H_y$. Вместе с аналогичными уравнениями для координат y, z последнее уравнение можно переписать в форме одного векторного уравнения

$$m\ddot{\mathbf{r}} = q\mathbf{E} + \frac{q}{c} [\dot{\mathbf{r}}, \mathbf{H}]. \quad (27)$$

Выражение в правой части представляет собой силу Лоренца, причем \mathbf{E} и \mathbf{H} являются напряженностями электрического и магнитного полей, соответственно, а c есть скорость света. Мы видим, таким образом, что функция Лагранжа (22) описывает движение частицы с массой m и зарядом q в электромагнитном поле. Величины \mathbf{A} и φ называют соответственно векторным и скалярным потенциалами электромагнитного поля.

Пример 2. Движение в поле тяжести при наличии связей с трением. Рассмотрим движение материальной точки массы m по параболе, расположенной вертикально в поле тяжести, предполагая, что действующая на точку сила трения пропорциональна ее скорости (коэффициент трения k). Направим ось z вертикально вверх, и пусть уравнением параболы будет

$$z = \frac{ax^2}{2}, \quad y = 0, \quad a = \text{const}.$$

Примем x за обобщенную координату точки. Мы имеем

$$\dot{z} = ax\dot{x},$$

и поэтому

$$\dot{\mathbf{r}}^2 = \dot{x}^2 + a^2 x^2 \dot{x}^2.$$

Потенциальная энергия точки $U = mgax^2/2$, где g – ускорение силы тяжести. Подставляя эти выражения в уравнение (21), получаем функцию Лагранжа в виде

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{m}{2} e^{kt/m} \{ (1 + a^2 x^2) \dot{x}^2 - gax^2 \} . \quad (28)$$

Составим уравнение Лагранжа. Имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m e^{kt/m} (1 + a^2 x^2) \dot{x}, \quad \frac{\partial L}{\partial x} = m e^{kt/m} \{ a^2 x \dot{x}^2 - gax \} .$$

Подставляя эти выражения в уравнение (16), получаем после сокращения на $e^{kt/m}$

$$(1 + a^2 \dot{x}^2)(m\ddot{x} + k\dot{x}) + max(g + a\dot{x}^2) = 0 .$$

II. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ. ПРИНЦИП НАИМЕНЬШЕГО ДЕЙСТВИЯ

Законы сохранения обобщенных энергии, импульса и момента импульса и их связь со свойствами однородности времени и однородности и изотропии пространства. Теорема Эйлера об однородных функциях и выражение для обобщенной энергии. Функционал действия и принцип наименьшего действия. Вывод уравнений Лагранжа из принципа наименьшего действия. Отступление в квантовую механику: принцип наименьшего действия и амплитуда перехода квазиклассической системы.

В примере 1 (глава I) рассматривалась задача о движении точки в аксиально-симметричном поле. Мы нашли, что в этом случае функция Лагранжа не зависит явно от координаты ϕ , задающей угол поворота вокруг оси симметрии поля, а из уравнения Лагранжа по этой координате [см. уравнение (20)] следует, что величина $p_\phi = \rho^2 \dot{\phi}$ остается постоянной при движении системы. Вообще, любая комбинация обобщенных координат и обобщенных скоростей, сохранение которой следует из уравнений движения системы, называется *интегралом движения*. Как видно, p_ϕ является первым интегралом уравнений движения частицы. Поскольку для решения основной задачи механики требуется интегрировать уравнения движения, методы нахождения интегралов движения занимают в ней центральное место.

Важнейшей категорией интегралов движения являются *законы сохранения*, под которыми понимают величины, постоянство которых следует из свойств *симметрии пространства и времени*. Как показывает опыт, механические свойства *замкнутой системы*, т.е. системы, на которую не действуют внешние силы, не меняются при произвольных перемещениях системы как целого в пространстве (т.е. перемещениях, сохраняющих взаимные расстояния между точками системы). Любое такое перемещение можно представить как последовательность параллельных переносов (*трансляций*) системы в некотором направлении и ее поворотов вокруг некоторой оси. Неизменность свойств систем при таких частного вида перемещениях называют соответственно *однородностью* и *изотропией пространства*. Аналогично, механические свойства замкнутых систем оказываются одними и теми же независимо от того, на каком интервале времени рассматривается их эволюция. Это свойство называют *однородностью времени*.

Поскольку механические свойства системы полностью определяются заданием ее функции Лагранжа, то эти свойства будут оставаться неизменными при любом из указанных перемещений в пространстве или во времени, если данное перемещение не меняет функции Лагранжа системы.

§1. Законы сохранения импульса и момента импульса

Рассмотрим следствия, вытекающие из свойств симметрии пространства. Получим сперва общее выражение для вариации функции Лагранжа при перемещении системы в пространстве. Пусть силы, действующие на систему, а также наложенные на нее связи таковы, что функция Лагранжа не меняется при вариации обобщенных координат вида $\delta q_\alpha = Q_\alpha(q)\epsilon$, где $Q_\alpha(q)$ есть некоторые заданные функции обобщенных координат, а ϵ – малый постоянный параметр (независящий от q, t). Найдем соответствующее изменение обобщенных скоростей:

$$\begin{aligned}\delta \frac{dq_\alpha}{dt} &= \delta \left(\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{q_\alpha(t + \Delta t) - q_\alpha(t)}{\Delta t} \right) \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{(q_\alpha + \delta q_\alpha)(t + \Delta t) - (q_\alpha + \delta q_\alpha)(t)}{\Delta t} - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{q_\alpha(t + \Delta t) - q_\alpha(t)}{\Delta t} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\delta q_\alpha(t + \Delta t) - \delta q_\alpha(t)}{\Delta t},\end{aligned}$$

т.е.

$$\delta \frac{dq_\alpha}{dt} = \frac{d}{dt} \delta q_\alpha, \quad (29)$$

и следовательно, $\delta \dot{q}_\alpha = \dot{Q}_\alpha \epsilon$. Используя этот результат, а также уравнения Лагранжа (16), вариацию функции Лагранжа можно представить в виде

$$\delta L = \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \delta \dot{q}_\alpha \right\} = \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} Q_\alpha \epsilon + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{Q}_\alpha \epsilon \right\},$$

или

$$\delta L = \epsilon \frac{d}{dt} \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} Q_\alpha. \quad (30)$$

Таким образом, из условия неизменности функции Лагранжа, $\delta L = 0$, вытекает следующий закон сохранения

$$\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} Q_\alpha = \text{const}. \quad (31)$$

Если вспомнить, что функция Лагранжа в обобщенных координатах получается из функции Лагранжа в декартовых координатах согласно $L = L(\mathbf{r}(q), \dot{\mathbf{r}}(q, \dot{q}), t)$, то, применяя правило дифференцирования сложной функции, а также соотношение (13), левую часть уравнения (31) можно переписать так

$$\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} Q_\alpha = \sum_{\alpha=1}^s \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}, \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) Q_\alpha = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}, \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \frac{\delta q_\alpha}{\epsilon} \right),$$

или, учитывая формулу (8),

$$\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} Q_\alpha = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}, \frac{\delta \mathbf{r}_i}{\epsilon} \right). \quad (32)$$

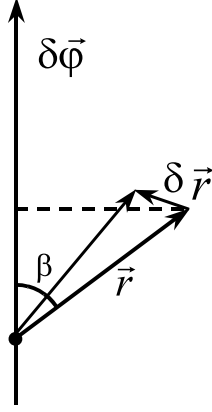


Рис. 1: К выводу формулы (34).

Рассмотрим теперь отдельно трансляции и повороты системы. Пусть внешние поля и связи, наложенные на систему, не нарушают однородности пространства в направлении, определяемом единичным вектором \mathbf{n} . При трансляции системы в направлении вектора \mathbf{n} на расстояние $\delta r = \epsilon$ радиус-векторы всех частиц системы получают одно и то же приращение $\delta \mathbf{r}_i = \mathbf{n}\epsilon$. По формулам (31), (32) находим закон сохранения

$$\left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}, \mathbf{n} \right) = \text{const.} \quad (33)$$

Мы видим, таким образом, что следствием однородности пространства по некоторому направлению является сохранение проекции на это направление вектора

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i, \quad \mathbf{p}_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i},$$

называемого *импульсом* системы. Относительно замкнутой системы пространство однородно по всем направлениям, и поэтому импульс такой системы сохраняется.

Рассмотрим теперь поворот системы как целого на угол $\delta\varphi = \epsilon$ относительно некоторой оси, направление которой задается единичным вектором \mathbf{n} по правилу правого винта. Выберем начало системы координат где-нибудь на оси поворота и определим, как при этом меняется радиус-вектор \mathbf{r} . Обозначим угол между векторами \mathbf{n} и \mathbf{r} через β (см. Рис. 1). Вектор $\delta \mathbf{r}$ ортогонален плоскости, проходящей через векторы \mathbf{n} , \mathbf{r} , а его величина

$$|\delta \mathbf{r}| = (|\mathbf{r}| \sin \beta) \delta\varphi.$$

Если ввести вектор $\delta\varphi = \mathbf{n}\delta\varphi$, то это выражение можно представить как модуль векторного произведения векторов $\delta\varphi$ и \mathbf{r} : $|\delta \mathbf{r}| = |[\delta\varphi, \mathbf{r}]|$. С другой стороны, направление вектора $[\delta\varphi, \mathbf{r}]$ совпадает с направлением $\delta \mathbf{r}$, поэтому справедливо векторное равенство

$$\delta \mathbf{r} = [\delta\varphi, \mathbf{r}]. \quad (34)$$

Таким образом, при повороте системы на угол $\delta\varphi$ радиус-векторы частиц системы получают приращение $\delta \mathbf{r}_i = [\delta\varphi, \mathbf{r}_i]$, $i = 1, \dots, N$. Используя формулу (32) и циклически

переставляя сомножители скалярно-векторного произведения, найдем

$$\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}, \frac{\delta \mathbf{r}_i}{\epsilon} \right) = \sum_{i=1}^N (\mathbf{p}_i, [\mathbf{n}, \mathbf{r}_i]) = \sum_{i=1}^N (\mathbf{n}, [\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i]) . \quad (35)$$

Закон сохранения (31) принимает вид

$$\left(\mathbf{n}, \sum_{i=1}^N [\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i] \right) = \text{const} . \quad (36)$$

Таким образом, из изотропии пространства относительно вращений вокруг направления \mathbf{n} следует сохранение проекции на это направление вектора

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i, \quad \mathbf{m}_i = [\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i],$$

называемого *моментом импульса* системы. Относительно замкнутой системы пространство изотропно по всем направлениям, и потому момент импульса такой системы сохраняется.

На величины, стоящие в левых частях уравнений (33) и (36) можно посмотреть также и с другой точки зрения. Вернемся к записи законов сохранения в форме (31). Обозначим через x декартову координату, определяющую положение системы как целого по оси, параллельной вектору \mathbf{n} . Если мы примем x за одну из обобщенных координат, скажем $x \equiv q_1$, то при трансляции в направлении \mathbf{n} вариации обобщенных координат будут иметь вид

$$\begin{cases} \delta q_1 = \epsilon, \\ \delta q_\alpha = 0, \end{cases} \quad \alpha = 2, \dots, s, \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} Q_1 = 1, \\ Q_\alpha = 0, \end{cases} \quad \alpha = 2, \dots, s,$$

Подстановка в уравнение (31) приводит к закону сохранения

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \text{const} . \quad (37)$$

Поскольку правая часть тождества (32) не зависит от выбора обобщенных координат, то величина const – та же, что и в уравнении (33), т.е.

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = (\mathbf{P}, \mathbf{n}) . \quad (38)$$

Другими словами, производная функции Лагранжа по x дает величину проекции импульса системы на направление \mathbf{n} . Аналогично, если мы выберем угол поворота φ системы как целого вокруг некоторой оси за одну из обобщенных координат, скажем, $\varphi \equiv q_2$, то вариации обобщенных координат при повороте вокруг данной оси будут иметь тот же вид, что и выше, а соответствующая сохраняющаяся величина

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \text{const} \quad (39)$$

в силу тождества (32) совпадает с величиной проекции момента импульса системы на эту ось:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = (\mathbf{M}, \mathbf{n}) . \quad (40)$$

Как мы видим, в данной формулировке оба закона сохранения являются следствием того, что функция Лагранжа не меняется при сдвигах какой-либо обобщенной координаты q_α на произвольную постоянную величину, $q_\alpha \rightarrow q_\alpha + \epsilon$, при фиксированных остальных q_β с $\beta \neq \alpha$. Такие обобщенные координаты называют *циклическими*. Если координата q_α циклическая, то при описанном сдвиге

$$0 = \delta L = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \delta \dot{q}_\alpha = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \epsilon,$$

так что критерием цикличности координаты q_α является условие

$$\frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0.$$

Соответствующая этой координате величина $p_{q_\alpha} = \partial L / \partial \dot{q}_\alpha$, называемая *обобщенным импульсом*, сохраняется при движении системы:

$$p_{q_\alpha} = \text{const} .$$

То, что p_{q_α} сохраняется, видно также непосредственно из уравнений Лагранжа (16).

Пример 3. В примере 1 (глава I) функция Лагранжа (19) материальной точки не зависит от угловой переменной ϕ (ϕ – циклическая координата). Поэтому сохраняется проекция ее момента импульса на ось z :

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = m\rho^2 \dot{\phi} = \text{const}.$$

§2. Закон сохранения энергии

Перейдем к выяснению следствий однородности времени. В силу этой однородности функция Лагранжа не может зависеть от времени явно, т.е. должно быть

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0 .$$

Вычислим полную производную функции Лагранжа по времени, учитывая это условие, а также уравнения Лагранжа (16)

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \ddot{q}_\alpha \right\} = \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \ddot{q}_\alpha \right\} = \sum_{\alpha=1}^s \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha \right\} ,$$

или

$$\frac{d}{dt} \left\{ \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha - L \right\} = 0 .$$

Отсюда следует, что величина

$$E = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha - L, \quad (41)$$

называемая *обобщенной энергией*, сохраняется при движении системы. Это есть наиболее общее выражение для обобщенной энергии, применимое к функции Лагранжа произвольного вида. Применим его к случаю когда функция Лагранжа имеет вид $L = T + V - U$, где V обозначает члены, линейные по скоростям частиц (см. I §4). Для этого мы сформулируем и докажем *теорему Эйлера об однородных функциях*. Пусть функция $f(x_1, \dots, x_n)$ дифференцируема и такова, что

$$f(ax_1, \dots, ax_s) = a^d f(x_1, \dots, x_s), \quad (42)$$

где a произвольное, а d – некоторое фиксированное число. В этом случае говорят, что функция $f(x_1, \dots, x_s)$ является *однородной функцией* своих аргументов, а число d называют *степеню однородности*. Продифференцировав определение (42) по a и положив затем $a = 1$, получим соотношение

$$\sum_{\alpha=1}^s x_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} f(x_1, \dots, x_s) = d f(x_1, \dots, x_s), \quad (43)$$

которое и составляет содержание теоремы Эйлера. При применении этой теоремы к выражению (41) переменными x_α являются обобщенные скорости \dot{q}_α . Поскольку согласно соотношению (13) декартовы скорости $\dot{\mathbf{r}}$ являются однородными функциями обобщенных скоростей \dot{q}_α первой степени, то при их подстановке в функцию Лагранжа мы получим, что кинетическая энергия T является однородной функцией обобщенных скоростей второй степени, обобщенный потенциал V – однородной функцией первой степени, а потенциальная энергия U – однородной функцией нулевой степени, поскольку U от скоростей вообще не зависит. Поэтому, применяя теорему Эйлера, мы получим

$$\sum_{\alpha=1}^s \dot{q}_\alpha \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} = 2T, \quad \sum_{\alpha=1}^s \dot{q}_\alpha \frac{\partial V}{\partial \dot{q}_\alpha} = V, \quad \sum_{\alpha=1}^s \dot{q}_\alpha \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_\alpha} = 0.$$

Подстановка в (41) дает

$$E = T + U. \quad (44)$$

Таким образом, для того чтобы получить обобщенную энергию, в функции Лагранжа следует опустить члены, линейные по обобщенным скоростям и поменять знак перед членами, от них не зависящими.

Пример 4. Применяя сформулированное правило, получаем обобщенную энергию, соответствующую функции Лагранжа (22) для частицы в электромагнитном поле

$$E = \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} + q\varphi(\mathbf{r}, t). \quad (45)$$

Она сохраняется, если потенциалы \mathbf{A}, φ не зависят от времени явно.

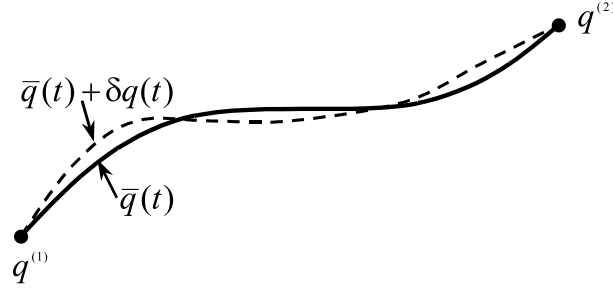


Рис. 2: Схематическое изображение действительной траектории (сплошная линия) и одной из близких к ней виртуальных траекторий (штриховая линия).

Пример 5. Функция Лагранжа (28) материальной точки, движущейся под действием силы трения, явно зависит от времени, поэтому ее обобщенная энергия не сохраняется.

§3. Принцип наименьшего действия

Пусть движение данной механической системы с s степенями свободы определяется функцией Лагранжа $L(q, \dot{q}, t)$, t_1, t_2 — некоторые моменты времени ($t_1 < t_2$), и $q_\alpha(t), \alpha = 1, \dots, s$ — набор дважды дифференцируемых функций времени, удовлетворяющих условиям

$$q_\alpha(t_1) = q_\alpha^{(1)}, \quad q_\alpha(t_2) = q_\alpha^{(2)}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (46)$$

где $q^{(1)}$ и $q^{(2)}$ — заданные значения обобщенных координат системы в моменты времени t_1 и t_2 , соответственно. Любой такой набор назовем *виртуальной траекторией* системы. Среди множества виртуальных траекторий имеется одна траектория, удовлетворяющая уравнениям Лагранжа, которую мы назовем *действительной*.

Для данной виртуальной траектории $q(t)$ построим интеграл

$$S[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt. \quad (47)$$

Таким образом, каждому набору функций $q(t)$ сопоставляется число $S[q(t)]$. Такие объекты, являющиеся функциями от функций, называют *функционалами*. Функционал $S[q(t)]$ называется *действием* системы.

Оказывается, что уравнения Лагранжа (16) могут быть получены из следующего вариационного принципа, называемого *принципом наименьшего действия*: *На любом временном отрезке $t \in [t_1, t_2]$ система движется таким образом, что ее действие принимает наименьшее возможное значение, причем сравниваются все виртуальные траектории, удовлетворяющие условиям (46).*

Доказательство. Обозначим через $\bar{q}(t)$ виртуальную траекторию, на которой действие системы принимает наименьшее значение, и рассмотрим близкие к ней траектории $q(t) = \bar{q}(t) + \delta q(t)$, где $\delta q(t)$ — малые функции времени (см. Рис. 2). При переходе от $\bar{q}(t)$ к $\bar{q}(t) + \delta q(t)$ действие возрастает. В первом порядке по малым $\delta q(t)$ изменение

действия будет равно

$$\begin{aligned}
\delta S &\equiv S[\bar{q}(t) + q(t)] - S[\bar{q}(t)] \\
&= \int_{t_1}^{t_2} L(\bar{q}(t) + \delta q(t), \dot{\bar{q}}(t) + \delta \dot{q}(t), t) dt - \int_{t_1}^{t_2} L(\bar{q}(t), \dot{\bar{q}}(t), t) dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \delta \dot{q}_\alpha(t) \right\} dt, \tag{48}
\end{aligned}$$

где производные $\partial L/\partial q$, $\partial L/\partial \dot{q}$ вычисляются на траектории $\bar{q}(t)$. Учитывая равенство (29), которое для вариаций виртуальных траекторий выводится в точности так же, как в II §1, проинтегрируем второй член в подынтегральном выражении по частям

$$\int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \delta \dot{q}_\alpha dt = \sum_{\alpha=1}^s \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \frac{d}{dt} \delta q_\alpha(t) dt = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \delta q_\alpha(t) \Big|_{t_1}^{t_2} - \sum_{\alpha=1}^s \int_{t_1}^{t_2} \delta q_\alpha(t) \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} dt.$$

Первый член в последнем выражении обращается в нуль, поскольку как функция $\bar{q}(t)$, так и функция $\bar{q}(t) + \delta q(t)$ удовлетворяет условиям (46), и следовательно, $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$. Поэтому вариация действия принимает вид

$$\delta S = \sum_{\alpha=1}^s \int_{t_1}^{t_2} \delta q_\alpha(t) \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \right\} dt. \tag{49}$$

По предположению, $\delta S \geq 0$. Покажем теперь, что δS на самом деле должно быть равно нулю. Действительно, допустим, что существует такая виртуальная траектория $\bar{q}(t) + \delta q(t)$, для которой $\delta S > 0$. Тогда из уравнения (49) следовало бы, что для виртуальной траектории $\bar{q}(t) - \delta q(t)$ вариация действия $\delta S < 0$, в противоречии с минимальностью величины $S[\bar{q}(t)]$. Таким образом,

$$\delta S = \sum_{\alpha=1}^s \int_{t_1}^{t_2} \delta q_\alpha(t) \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \right\} dt = 0. \tag{50}$$

В силу независимости обобщенных координат и произвольности их вариаций, последнее равенство будет удовлетворяться, только если коэффициенты при всех δq независимо друг от друга обращаются в нуль, т.е. функции $\bar{q}(t)$ удовлетворяют уравнениям Лагранжа

$$\frac{\partial L}{\partial q_\alpha} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s,$$

а это и означает, что $\bar{q}(t)$ — действительная траектория.

§4. Отступление в квантовую механику: принцип наименьшего действия и амплитуда перехода квазиклассической системы

В рамках самой теоретической механики действие не имеет какого-либо наглядного физического смысла. В действительности, однако, этот объект играет в физике фундаментальную роль. В частности, принцип наименьшего действия возникает естественным образом при рассмотрении классических механических систем с точки зрения квантовой физики.

Рассмотрим снова множество виртуальных траекторий и составим следующую величину

$$\Psi(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = C \sum_{q(t)} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[q(t)] \right\}, \quad (51)$$

где суммирование ведется по всем виртуальным траекториям, удовлетворяющим условиям (46), $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-27}$ г·см²/с есть так называемая *постоянная Планка*, а C – *нормировочная постоянная*. В качестве аргументов введенной функции Ψ указаны параметры, задающие множество виртуальных траекторий в соответствии с определением, данным в предыдущем пункте. Конечно, поскольку сколь угодно малая деформация данной виртуальной траектории переводит ее в другую виртуальную траекторию, то для придания реального смысла выражению (51) требуется указать, как именно вычисляется сумма по траекториям, т.е. задать “плотность траекторий” в каждом участке пространства. Однако поскольку в дальнейшем эти детали нам не понадобятся, мы лишь укажем, что эту “плотность” следует считать одинаковой во всех точках пространства и независимой от времени.

Функция $\Psi(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2)$ называется *амплитудой перехода* и играет центральную роль в квантовой механике. Квадрат ее модуля, $|\Psi|^2$, определяет вероятность найти систему в точке с координатами $q^{(2)}$ в момент времени t_2 , если в момент времени t_1 она находилась в точке с координатами $q^{(1)}$. Выражение (51) показывает, что амплитуда перехода из $q^{(1)}$ в $q^{(2)}$ складывается из элементарных амплитуд, каждая из которых соответствует переходу по какой-либо виртуальной траектории, соединяющей эти точки.

Предположим теперь, что действие $S[q(t)]$ соответствует некоторой *квазиклассической системе*, т.е. системе, движение которой хорошо описывается механикой Ньютона, например, солнечную систему. Для такой системы величина S на много порядков превосходит постоянную Планка,

$$S \gg \hbar. \quad (52)$$

Следовательно, экспонента, стоящая под знаком суммы в (51), имеет большой по модулю мнимый показатель. Поэтому уже сравнительно малая вариация траектории δq приводит к большому изменению показателя. Другими словами, экспонента является быстро осциллирующей функцией траектории. Это приводит к тому, что при суммировании вклады соседних траекторий практически полностью компенсируют друг друга, аналогично тому как интеграл от синуса дает тем меньшее значение, чем быстрее синус осциллирует. Только в одном случае вклады соседних траекторий не будут компенсировать друг друга, а именно в том, когда действие $S[q(t)]$ медленно меняется в окрестности какой-либо траектории $\bar{q}(t)$:

$$S[\bar{q}(t) + \delta q(t)] \approx S[\bar{q}(t)],$$

т.е.

$$S[\bar{q}(t) + \delta q(t)] - S[\bar{q}(t)] \equiv \delta S \approx 0. \quad (53)$$

В этом случае вклады соседних траекторий будут складываться, так что вся сумма в выражении (51) сведется к одному члену:

$$\Psi(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) \approx a \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[\bar{q}(t)] \right\}, \quad (54)$$

с некоторой постоянной a . В пределе $S/\hbar \rightarrow \infty$ приближенные равенства в приведенных выше соотношениях заменяются точными, в частности, условие (53) переходит в уравнение (50). Таким образом, амплитуда перехода квазиклассической системы эффективно выглядит так, как если бы эта система двигалась лишь по одной траектории $\bar{q}(t)$, определяемой уравнениями Лагранжа.

III. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ

Общий вид функции Лагранжа одномерного движения. Общее решение задачи в постоянном потенциале. Типы одномерного движения. Период финитного движения. Математический маятник. Задача двух тел. Сведение к одночастичной задаче, и общее решение задачи в квадратурах. Эффективный потенциал. Кулоново поле. Классификация возможных типов движения в кулоновом поле. Уравнение траектории. Законы Кеплера. Задача рассеяния. Дифференциальное сечение рассеяния. Формула Резерфорда.

Переходя к приложениям формализма Лагранжа к интегрированию уравнений движения различных систем, сформулируем сперва общий алгоритм применения этого формализма:

- A.** Определите число степеней свободы системы, s . Для системы N материальных точек $s = 3N - n$, где n – число голономных связей, наложенных на систему.
- B.** Выберите обобщенные координаты системы, q_α , $\alpha = 1, \dots, s$ и выразите через них декартовы координаты точек системы, $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(q)$, $i = 1, \dots, N$. Обобщенные координаты должны решать уравнения связей, т.е. выражения $\mathbf{r}_i(q)$ должны тождественно удовлетворять уравнениям (5). Кроме того, эти координаты следует выбирать так чтобы по возможности максимально полно учесть симметрии потенциалов взаимодействий частиц.
- C.** Вычислите полные производные по времени от функций $\mathbf{r}_i(q)$ и затем составьте функцию Лагранжа системы $L(\mathbf{r}(q), \dot{\mathbf{r}}(q, \dot{q}), t)$.
- D.** Исследуйте систему на наличие законов сохранения. Если внешние силы, действующие на систему, не меняются при трансляции в некотором направлении или повороте вокруг некоторой оси, причем связи, наложенные на систему, допускают такое перемещение, запишите законы сохранения соответствующих проекций импульса или момента импульса [см. уравнения (33), (36)]. Если обобщенные координаты выбраны таким образом, что изменение какой-либо из них при фиксированных остальных описывает указанное перемещение, то соответствующую

сохраняющуюся величину можно получить по формулам (38), (40). Наконец, если функция Лагранжа не зависит от времени явно, составьте закон сохранения обобщенной энергии [см. формулу (41)].

Е. Из получившихся уравнений выберите независимые. Если их число равно числу степеней свободы, то необходимости в построении уравнений Лагранжа нет, и следует переходить к интегрированию найденных s уравнений, связывающих q и \dot{q} . Если же число независимых законов сохранения меньше s , следует выписать недостающее число уравнений Лагранжа, так чтобы в результате получить систему s независимых уравнений, связывающих величины q, \dot{q}, \ddot{q} и затем ее интегрировать.

§1. Движение с одной степенью свободы

Рассмотрим движение системы с одной степенью свободы. В этом случае уравнения (11) имеют вид

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q} \dot{q}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (55)$$

подставляя которые в функцию Лагранжа $L = T - U$, получим

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q}, \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q} \right) \dot{q}^2 - U(\mathbf{r}(q), t) \equiv \frac{m(q)\dot{q}^2}{2} - U(q, t). \quad (56)$$

Для краткости, сложная функция $U(\mathbf{r}(q), t)$ обозначается просто $U(q, t)$. Заметим, что функция $m(q) > 0$. Закон движения системы, описываемой функцией Лагранжа такого вида, может быть найден в общем виде в случае, когда потенциальная энергия не зависит явно от времени. В этом случае $\partial L / \partial t = 0$, и поэтому сохраняется энергия системы [см. уравнение (44)]

$$E = \frac{m(q)\dot{q}^2}{2} + U(q). \quad (57)$$

Это уравнение может быть решено относительно $q(t)$ путем разделения дифференциалов. Мы имеем

$$\frac{dq}{dt} = \pm \sqrt{\frac{2}{m(q)} [E - U(q)]}, \quad (58)$$

откуда

$$dt = \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{\pm \sqrt{E - U(q)}}.$$

Интегрирование последнего равенства дает

$$t - t_0 = \int_{q_0}^q \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{\pm \sqrt{E - U(q)}}, \quad (59)$$

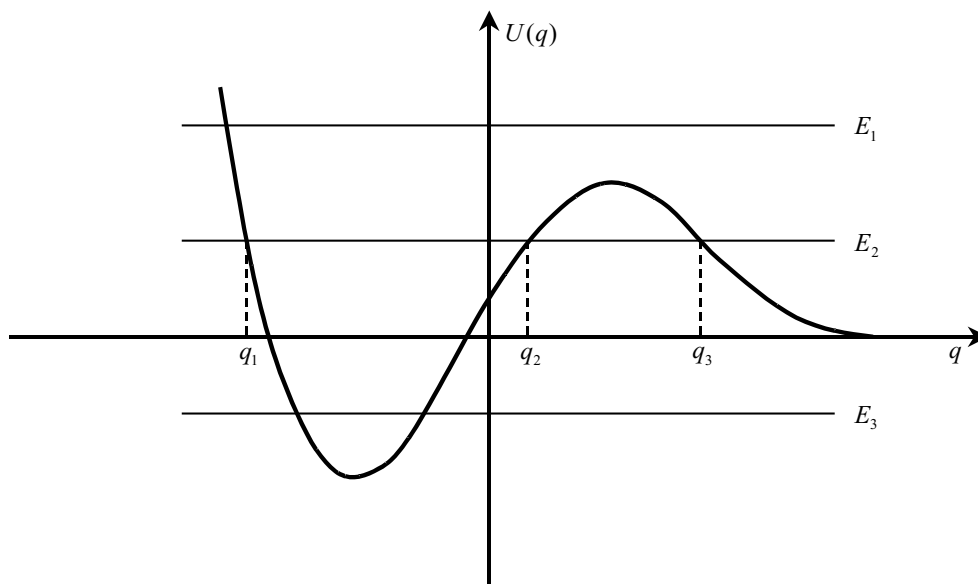


Рис. 3: Схематический вид потенциальной энергии одномерного движения. Функция $U(q)$ неограниченно возрастает при $q \rightarrow -\infty$ и стремится к нулю при $q \rightarrow +\infty$.

где q_0, q – значения обобщенной координаты в моменты времени t_0, t соответственно. Знак $+$ ($-$) перед корнем берется на тех участках траектории, где $\dot{q} > 0$ ($\dot{q} < 0$).

Таким образом, задача определения функции $q(t)$ сведена к вычислению интеграла от известной функции, или, как говорят, *задача решена в квадратурах*. После взятия интеграла функция $q(t)$ получается обращением функции $t(q)$, определяемой уравнением (59).

Исследуем качественно общие свойства движения с одной степенью свободы. Для этого достаточно рассмотреть график потенциальной энергии, изображенный на Рис. 3. Поскольку $m(q) > 0$, то из уравнения (58) следует, что при заданном значении энергии E система может двигаться лишь в областях, в которых

$$U(q) \leq E.$$

В точках, удовлетворяющих уравнению $U(q) = E$, обобщенная скорость обращается в нуль. Такие точки называются *точками остановки*. На Рис. 3 точки q_1, q_2, q_3 являются точками остановки при движении с энергией $E = E_2$. При этом допустимыми для движения областями являются $q \in [q_1, q_2]$ и $q \geq q_3$. Поскольку функция $q(t)$ непрерывна, система при своем движении не может “перескочить” из одной допустимой области в другую.

Пусть q' – точка остановки. Рассмотрим движение системы в малой окрестности этой точки. Если

$$\frac{dU}{dq}(q') > 0,$$

то область справа от точки q' недостижима для системы с данным значением E . Поэтому в точке остановки обобщенная скорость переходит от положительных к отрицательным значениям. Наоборот, если

$$\frac{dU}{dq}(q') < 0,$$

то недостижимой для системы является область слева от q' , и в этой точке обобщенная скорость переходит от отрицательных значений к положительным.

Если движение системы таково, что все составляющие ее материальные точки все время остаются в ограниченной области пространства, то такое движение называется *финитным*. В противном случае движение называется *инфинитным*. При финитном движении область изменения q ограничена двумя точками поворота: $q \in [q_1, q_2]$. Пусть в начальный момент времени t_0 система начинает движение из точки $q(t_0) = q_0 \in (q_1, q_2)$ с $\dot{q}(t_0) > 0$. По достижении точки q_2 обобщенная скорость изменит знак, и система будет двигаться от q_2 к q_1 , пройдя при этом точку q_0 с отрицательной скоростью. В точке q_1 скорость снова изменит знак на положительный, и в некоторый момент времени $t = t'$ система окажется в точке q_0 , имея положительную скорость в этой точке. Согласно формуле (58) абсолютная величина обобщенной скорости однозначно определяется значением q , поэтому $|\dot{q}(t_0)| = |\dot{q}(t')|$, а как мы только что видели, знаки \dot{q} в моменты времени t_0 и t' также одинаковы, и потому $\dot{q}(t_0) = \dot{q}(t')$. Другими словами, в моменты времени t_0 и t' система находится в одном и том же состоянии (понятие состояния см. в I §1). Из формулы (59) следует, что

$$t' - t_0 \equiv T = \int_{q_0}^{q_2} \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{\sqrt{E - U(q)}} + \int_{q_2}^{q_1} \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{-\sqrt{E - U(q)}} + \int_{q_1}^{q_0} \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{\sqrt{E - U(q)}},$$

или

$$T = \int_{q_1}^{q_2} \frac{\sqrt{2m(q)} dq}{\sqrt{E - U(q)}}. \quad (60)$$

Как мы видим, величина T не зависит от выбора точки q_0 . Поэтому для любой точки $q \in [q_1, q_2]$, которую система проходит в момент времени t , мы будем иметь

$$q(t) = q(t + T), \quad \dot{q}(t) = \dot{q}(t + T).$$

Поскольку соотношениями (6), (11) декартовы координаты и декартовы скорости точек системы однозначно выражаются через q, \dot{q} , то отсюда следует также, что

$$\mathbf{r}_i(t) = \mathbf{r}_i(t + T), \quad \dot{\mathbf{r}}_i(t) = \dot{\mathbf{r}}_i(t + T), \quad i = 1, \dots, N. \quad (61)$$

Движение системы, удовлетворяющее условиям (61), называется *периодическим*, а T — *периодом* движения. Это определение применимо к системам с любым числом степеней свободы.

Таким образом, финитное движение с одной степенью свободы периодически.

Пример 6. Вернемся к Рис. 3. Пусть q является декартовой координатой, задающей положение материальной точки на прямой, а $m(q) = m$ — ее масса. Тогда, по определению, движение с $E = E_2$ является финитным в области $q \in [q_1, q_2]$. Если же $q_0 > q_3$, то даже если $\dot{q}(t_0) < 0$, скорость поменяет знак через конечный промежуток времени

$$\Delta t = \int_{q_3}^{q_0} \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{\sqrt{E - U(q)}},$$

после чего будет оставаться все время положительной и конечной по величине. Поэтому $q \rightarrow \infty$ при $t \rightarrow \infty$. Таким образом, в области $q \geq q_3$ движение инфинитно. Аналогичные рассуждения показывают, что при $E = E_1$ возможно лишь инфинитное движение, а при $E = E_3$ — лишь финитное.

Пример 7. Математический маятник. Пусть материальная точка массы m , соединенная жестким невесомым стержнем длины l с неподвижной точкой подвеса, движется в вертикальной плоскости под действием силы тяжести. Такая система называется *математическим маятником*. Обобщенной координатой маятника выберем угол ϕ между вертикалью и стержнем. Тогда декартовы координаты точки выражаются через ϕ согласно

$$x = l \sin \phi, \quad y = -l \cos \phi.$$

Отсюда

$$\dot{x} = l\dot{\phi} \cos \phi, \quad \dot{y} = l\dot{\phi} \sin \phi, \quad \dot{x}^2 + \dot{y}^2 = l^2 \dot{\phi}^2.$$

Функция Лагранжа математического маятника имеет вид

$$L = \frac{ml^2 \dot{\phi}^2}{2} + mgl \cos \phi,$$

где g — ускорение силы тяжести. Подставляя $m(\phi) = ml^2$, $U = -mgl \cos \phi$ в уравнение (59), получаем

$$t - t_0 = \sqrt{\frac{ml^2}{2}} \int_{\phi_0}^{\phi} \frac{d\phi}{\pm \sqrt{E + mgl \cos \phi}}. \quad (62)$$

Рассмотрим движение маятника с энергией $E > mgl$. В этом случае уравнение $U(q) = E$ не имеет решений вовсе, и поэтому обобщенная скорость $\dot{\phi}$ имеет постоянный знак, т.е. движение маятника представляет собой *вращение*. Это движение является периодическим: $x(t + T) = x(t)$, $y(t + T) = y(t)$, где

$$T = \sqrt{\frac{ml^2}{2}} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{\sqrt{E + mgl \cos \phi}}.$$

Обратим внимание на то, что условие $\phi(t + T) = \phi(t)$ при этом не выполняется: с каждым оборотом угол ϕ увеличивается (или уменьшается) на 2π .

§2. Задача двух тел

Рассмотрим систему, состоящую из двух материальных точек, потенциальная энергия взаимодействия которых зависит лишь от расстояния между ними: $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, а связи отсутствуют. Число степеней свободы такой системы $s = 3 \times 2 = 6$. В качестве обобщенных координат выберем три компоненты радиус-вектора центра инерции системы

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}$$

и три компоненты вектора $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Выразим радиус-векторы точек через обобщенные координаты. Мы имеем

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2 \mathbf{r}}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1 \mathbf{r}}{m_1 + m_2}. \quad (63)$$

Дифференцируя эти соотношения по времени, получаем выражения для скоростей частиц

$$\dot{\mathbf{r}}_1 = \dot{\mathbf{R}} + \frac{m_2 \dot{\mathbf{r}}}{m_1 + m_2}, \quad \dot{\mathbf{r}}_2 = \dot{\mathbf{R}} - \frac{m_1 \dot{\mathbf{r}}}{m_1 + m_2}, \quad (64)$$

подстановка которых в функцию Лагранжа дает

$$L = \frac{m_1 \dot{\mathbf{r}}_1^2}{2} + \frac{m_2 \dot{\mathbf{r}}_2^2}{2} - U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{m \dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(r), \quad (65)$$

где $\mu = m_1 + m_2$, а величина $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ называется *приведенной массой* двух частиц. Мы видим, что в координатах \mathbf{R}, \mathbf{r} функция Лагранжа распадается на два слагаемых, зависящих от различных наборов переменных. А именно, первый член в (65) описывает свободное движение материальной точки с массой μ и радиус-вектором \mathbf{R} , а остальные – движение материальной точки с массой m и радиус-вектором \mathbf{r} в заданном потенциальном поле $U(r)$. Тот факт, что функция Лагранжа является суммой функций Лагранжа этих систем означает, что уравнения Лагранжа для первой системы не содержат координат второй, и наоборот, и потому их движения независимы. Таким образом, исходная *задача двух тел* сведена к одночастичной.

Компоненты \mathbf{R} являются циклическими координатами. В соответствии с формулой (38) $\partial L / \partial \dot{\mathbf{R}}$ есть сохраняющийся импульс системы:

$$\mathbf{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{R}}} = \mu \dot{\mathbf{R}},$$

откуда следует, что

$$\mathbf{R}(t) = \frac{\mathbf{P}t}{\mu} + \mathbf{R}(0).$$

Рассмотрим теперь движение точки с массой m . Оно описывается функцией Лагранжа

$$L = \frac{m \dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(r). \quad (66)$$

Поскольку потенциальная энергия зависит лишь от r , функция Лагранжа не меняется при поворотах относительно любой оси, проходящей через точку $\mathbf{r} = 0$. Поэтому сохраняется ее момент импульса

$$\mathbf{M} = [\mathbf{r}, \mathbf{p}], \quad \mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m \dot{\mathbf{r}}. \quad (67)$$

Отсюда следует, что

$$(\mathbf{r}, \mathbf{M}) = 0. \quad (68)$$

Другими словами, материальной точка движется все время в плоскости, перпендикулярной сохраняющемуся вектору \mathbf{M} . Выберем полярные координаты r, ϕ в этой плоскости (с полярной осью, направленной по вектору \mathbf{M})

$$x = r \cos \phi, \quad y = r \sin \phi.$$

Дифференцирование по времени этих соотношений дает

$$\dot{x} = \dot{r} \cos \phi - r \dot{\phi} \sin \phi, \quad \dot{y} = \dot{r} \sin \phi + r \dot{\phi} \cos \phi, \quad \dot{x}^2 + \dot{y}^2 = \dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2.$$

Функция Лагранжа в этих координатах принимает вид

$$L = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) - U(r). \quad (69)$$

В соответствии с формулой (40) дифференцирование этой функции по $\dot{\phi}$ дает величину момента импульса, поскольку угол ϕ задает угол поворота частицы вокруг оси, направленной по вектору \mathbf{M} . Итак,

$$M = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mr^2 \dot{\phi}. \quad (70)$$

Из этой формулы следует, что $\dot{\phi} > 0$ в течение всего движения точки. Далее, функция Лагранжа (69) не зависит от времени явно, $\partial L / \partial t = 0$, и поэтому сохраняется энергия (44)

$$E = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + U(r). \quad (71)$$

Итак, имеется два дифференциальных уравнения первого порядка (70), (71) для двух функций $r(t), \phi(t)$. Для того чтобы решить эту систему, выразим $\dot{\phi}$ из уравнения (70) и подставим результат в (71):

$$E = \frac{m\dot{r}^2}{2} + \frac{M^2}{2mr^2} + U(r). \quad (72)$$

Это уравнение имеет тот же вид, что и уравнение (57) при движении с одной степенью свободы $q = r$ в *эффективном* поле с потенциальной энергией

$$U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{M^2}{2mr^2}. \quad (73)$$

Второе слагаемое в этом выражении называется *центробежной энергией*. Поэтому мы можем применить формулу (59), заменяя в ней $U(r)$ на $U_{\text{eff}}(r)$

$$t - t_0 = \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{r_0}^r \frac{dr}{\pm \sqrt{E - U_{\text{eff}}(r)}}. \quad (74)$$

Найдем теперь *уравнение траектории* точки, т.е. связь координат r, ϕ . Для этого разделим дифференциалы в уравнении (70)

$$d\phi = \frac{M}{mr^2} dt, \quad (75)$$

подставляем

$$dt = \frac{\sqrt{\frac{m}{2}} dr}{\pm \sqrt{E - U_{\text{eff}}(r)}},$$

и получаем после интегрирования:

$$\phi - \phi_0 = \int_{r_0}^r \frac{\frac{M}{\sqrt{2m} r^2} dr}{\pm \sqrt{E - U_{\text{eff}}(r)}}, \quad \phi_0 = \phi(t_0). \quad (76)$$

Напомним, что в этой формуле корень берется со знаком плюс, если на данном участке траектории $\dot{r} > 0$, и со знаком минус, если $\dot{r} < 0$. Уравнение (74) определяет в неявном виде зависимость $r(t)$, а уравнение (76) – функцию $\phi(r)$, подставляя в которую $r(t)$ найдем зависимость ϕ от времени. Таким образом, мы получили полное решение задачи двух тел в квадратурах.

Из формулы (76) вытекает следующее следствие. Пусть момент времени $t = t_0$ соответствует какой-либо *точке поворота*, т.е. точке, в которой $\dot{r} = 0$. Договоримся отсчитывать угол ϕ от направления радиус-вектора материальной точки в этот момент, т.е. положим $\phi_0 = 0$, и рассмотрим движение в окрестности $\phi = 0$. Если на данном участке траектории $\dot{r} > 0$, то из формулы (76) найдем

$$\phi = \int_{r_0}^r \frac{\frac{M}{\sqrt{2m} r^2} dr}{+\sqrt{E - U_{\text{eff}}(r)}}, \quad (77)$$

Если же на данном участке траектории $\dot{r} < 0$, то будет

$$\phi = \int_{r_0}^r \frac{\frac{M}{\sqrt{2m} r^2} dr}{-\sqrt{E - U_{\text{eff}}(r)}}. \quad (78)$$

Сравнивая выражения (77), (78), заключаем, что $r(\phi) = r(-\phi)$. Таким образом, обе рассматриваемые ветви траектории переходят друг в друга при отражении относительно прямой $\phi = 0$. Поскольку это справедливо для любой точки поворота, то мы приходим к выводу, что при движении в центрально-симметричном поле вся траектория является симметричной при отражении относительно любой из прямых, соединяющих центр поля с точками поворота.

§3. Движение в кулоновом поле

Применим полученные результаты к важнейшему случаю кулонова поля

$$U(r) = \frac{\alpha}{r}.$$

Случай $\alpha > 0$ ($\alpha < 0$) соответствует полю отталкивания (притяжения). Определим сперва возможные типы движения в таком поле. Для этого следует обратиться к уравнению (72), определяющему функцию $r(t)$, поскольку движение точки происходит в

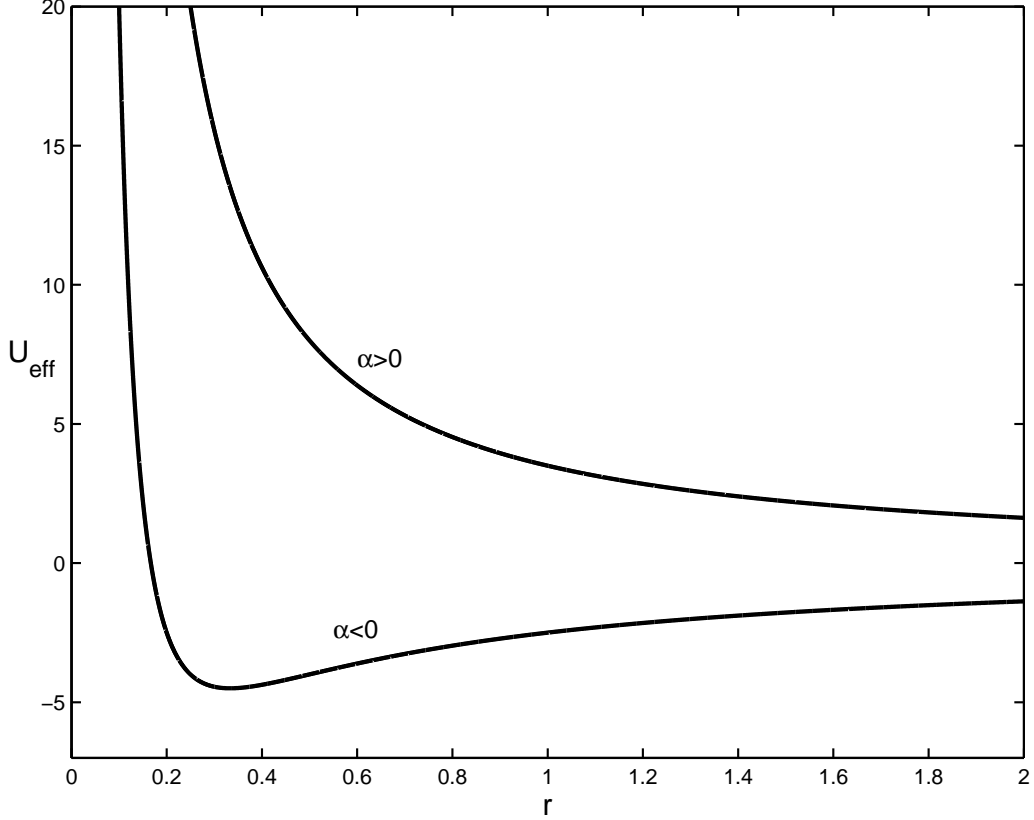


Рис. 4: Характерный вид эффективной потенциальной энергии в кулоновых полях отталкивания и притяжения (условные единицы).

ограниченной области пространства тогда и только тогда, когда эта функция ограничена при всех t . Эффективная потенциальная энергия имеет экстремумы в точках, удовлетворяющих уравнению

$$\frac{dU_{\text{eff}}}{dr} = -\frac{\alpha}{r^2} - \frac{M^2}{mr^3} = 0. \quad (79)$$

В случае поля отталкивания это уравнение не имеет решений вовсе, тогда как в случае поля притяжения единственный его корень есть

$$\bar{r} = \frac{M^2}{m|\alpha|}. \quad (80)$$

Поскольку $U_{\text{eff}} \rightarrow +\infty$ при $r \rightarrow 0$ и $U_{\text{eff}} \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, в точке (80) эффективная потенциальная энергия имеет абсолютный минимум

$$U_{\text{eff}}(\bar{r}) = -\frac{m\alpha^2}{2M^2}.$$

Графики эффективной потенциальной энергии в случаях $\alpha > 0$ и $\alpha < 0$ приведены на Рис. 4.

Найдем уравнение траектории. Пусть момент времени $t = t_0$ соответствует точке поворота траектории, в которой r имеет минимальное значение r_{min} . Договоримся отсчитывать угол ϕ от направления радиус-вектора материальной точки в этот момент,

т.е. положим $\phi_0 = 0$, и рассмотрим движение на отрезке времени $[t_0, t]$, на котором $\dot{r} > 0$. Поскольку всегда $\dot{\phi} \geq 0$, то условие $\dot{r} > 0$ означает, что на рассматриваемом участке траектории $\phi > 0$. Формула (76) дает

$$\begin{aligned} \phi &= \int_{r_{\min}}^r \frac{\frac{M}{r^2} dr}{\sqrt{2mE - \frac{M^2}{r^2} - \frac{2m\alpha}{r}}} = - \int_{r_{\min}}^r \frac{d\left(\frac{M}{r}\right)}{\sqrt{2mE + \frac{m^2\alpha^2}{M^2} - \left(\frac{M}{r} + \frac{m\alpha}{M}\right)^2}} \\ &= \arccos \frac{\frac{M}{r} + \frac{m\alpha}{M}}{\sqrt{2mE + \frac{m^2\alpha^2}{M^2}}} \Bigg|_{r_{\min}}^r. \end{aligned} \quad (81)$$

Вводя обозначения

$$e = \sqrt{1 + \frac{2EM^2}{m\alpha^2}}, \quad p = \frac{M^2}{m|\alpha|},$$

перепишем уравнение (81) в виде

$$\phi = \arccos \left\{ \frac{1}{e} \left[\frac{p}{r} + \frac{\alpha}{|\alpha|} \right] \right\} \Bigg|_{r_{\min}}^r \quad (82)$$

Точки остановки по координате r (т.е. точки, в которых $\dot{r} = 0$), в частности, точка r_{\min} , определяются нулями корня в подынтегральном выражении в этой формуле, т.е. уравнением

$$2mE + \frac{m^2\alpha^2}{M^2} = \left(\frac{M}{r} + \frac{m\alpha}{M} \right)^2, \quad (83)$$

решениями которого во вновь введенных обозначениях являются

$$r_{\min}^{\max} = \frac{p}{-\frac{\alpha}{|\alpha|} \pm e}. \quad (84)$$

В случае поля отталкивания $\alpha > 0, E > 0, e > 1$, следовательно, имеется лишь один положительный корень $r_{\min} = p/(e - 1)$. В случае поля притяжения $\alpha < 0$ возможны два варианта. При $E \geq 0$ мы имеем $e \geq 1$ и снова лишь один положительный корень $r_{\min} = p/(1 + e)$, а при $E < 0$ имеем $e < 1$, и поэтому оба корня (84) положительны: $r_{\min} = p/(1 + e)$, $r_{\max} = p/(1 - e)$. Во всех трех случаях при $r = r_{\min}$ аргумент \arccos в формуле (82) равен единице. Поскольку мы выбрали отсчет угла ϕ так, что $\phi = 0$ при $r = r_{\min}$, то следует положить $\arccos 1 = 0$. Таким образом, уравнение траектории на участке $\phi > 0$ принимает вид

$$\frac{p}{r} = -\frac{\alpha}{|\alpha|} + e \cos \phi. \quad (85)$$

Мы знаем, с другой стороны, что $r(\phi) = r(-\phi)$, поэтому на участке $\phi < 0$ уравнение траектории имеет тот же самый вид (85).

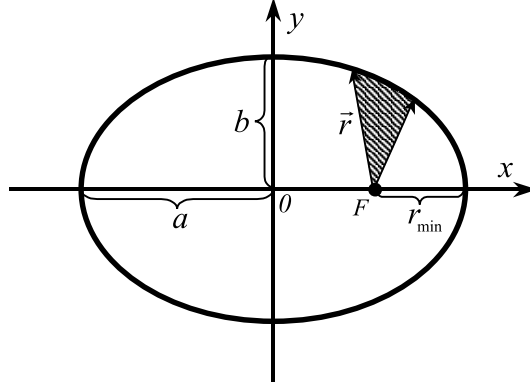


Рис. 5: Траектория финитного движения материальной точки в кулоновом поле. Центр поля обозначен через F .

Кулоново поле притяжения. Законы Кеплера

Рассмотрим движение с $E < 0$ в кулоновом поле притяжения более подробно. При $\alpha < 0$, $E < 0$ уравнение траектории имеет вид

$$\frac{p}{r} = 1 + e \cos \phi, \quad e = \sqrt{1 - \frac{2|E|M^2}{m\alpha^2}} < 1. \quad (86)$$

Покажем, прежде всего, что *финитное движение в кулоновом поле является периодическим*. Для этого рассмотрим движение материальной точки на отрезке $\phi \in [-\pi, +\pi]$. Согласно уравнению (86) на границах этого отрезка $r = p/(1 - e) = r_{\max}$, и поэтому $\dot{r}(-\pi) = \dot{r}(+\pi) = 0$. Далее, из уравнения (70) следует, что $\dot{\phi}$ также имеет одно и то же значение [равное $M/(mr_{\max}^2)$] в начале и конце пути. С другой стороны, значения $\phi = -\pi$ и $\phi = +\pi$ соответствуют одной и той же точке пространства. Таким образом, конечное состояние материальной точки совпадает с ее начальным состоянием. Поскольку задание состояния системы в некоторый момент времени полностью определяет ее дальнейшую эволюцию, то мы приходим к выводу о том, что движение материальной точки периодично. В частности, *траектории финитного движения в кулоновом поле замкнуты*.

Кривая, описываемая уравнением (86), представляет собой *эллипс*, один из фокусов которого совпадает с центром поля. В применении к движению планет солнечной системы это утверждение составляет содержание *первого закона Кеплера*. Введенные выше величины e и p называются *эксцентриситетом* и *параметром* эллипса, соответственно. Свяжем их с большой (a) и малой (b) полуосями эллипса, определяющими каноническую форму уравнения эллипса

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1, \quad (87)$$

где x, y – декартовы координаты точки эллипса (см. Рис. 5). Как видно из рисунка,

$$a = \frac{r_{\min} + r_{\max}}{2} = \frac{1}{2} \left[\frac{p}{1+e} + \frac{p}{1-e} \right] = \frac{p}{1-e^2}.$$

Далее, по определению эксцентриситета,

$$e = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}}.$$

Поэтому

$$b = a\sqrt{1 - e^2} = \frac{p}{\sqrt{1 - e^2}}.$$

Из Рис. 5 очевидна связь декартовых и полярных координат:

$$\begin{aligned} x &= a - r_{\min} + r \cos \phi = ea + r \cos \phi, \\ y &= r \sin \phi. \end{aligned} \quad (88)$$

Используя эти соотношения, нетрудно проверить эквивалентность уравнений (86) и (87). Наконец, используя определения e и p , можно выразить полуоси орбиты через энергию и момент материальной точки:

$$a = \frac{|\alpha|}{2|E|}, \quad b = \frac{M}{\sqrt{2m|E|}}. \quad (89)$$

Вернемся к закону сохранения момента импульса (70). Выражение, стоящее в правой части этого уравнения, пропорционально площади, заметаемой радиус-вектором материальной точки в единицу времени и называемой *секториальной скоростью* (заштрихованная площадь на Рис. 5). Действительно, рассмотрим перемещение точки за малый промежуток времени Δt . Тогда с точностью до величин порядка $(\Delta t)^2$ заметаемая площадь Δs есть площадь прямоугольного треугольника с катетами $r(t)$ и $r(t)\dot{\phi}\Delta t$: $\Delta s = r^2\dot{\phi}\Delta t/2$. В пределе $\Delta t \rightarrow 0$ мы получим

$$\frac{ds}{dt} = \frac{1}{2}r^2(t)\dot{\phi} = \frac{M}{2m} = \text{const}. \quad (90)$$

Таким образом, при движении в любом центральном поле секториальная скорость постоянна. В применении к движению планет солнечной системы постоянство секториальной скорости называется *вторым законом Кеплера*. Определим теперь полную площадь S , заметаемую радиус-вектором за период. Это есть площадь эллипса, равная πab . С помощью выражений (89) ее можно преобразовать так

$$S = \pi \frac{|\alpha|}{2|E|} \frac{M}{\sqrt{2m|E|}} = \frac{\pi M}{\sqrt{m|\alpha|}} \sqrt{\left(\frac{|\alpha|}{2|E|}\right)^3} = \frac{\pi M}{\sqrt{m|\alpha|}} a^{3/2}.$$

С другой стороны, интегрируя равенство (90) по времени, получим

$$S = \int_0^T \frac{ds}{dt} dt = \frac{MT}{2m}.$$

Из полученных уравнений следует выражение для периода движения

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{ma^3}{|\alpha|}}. \quad (91)$$

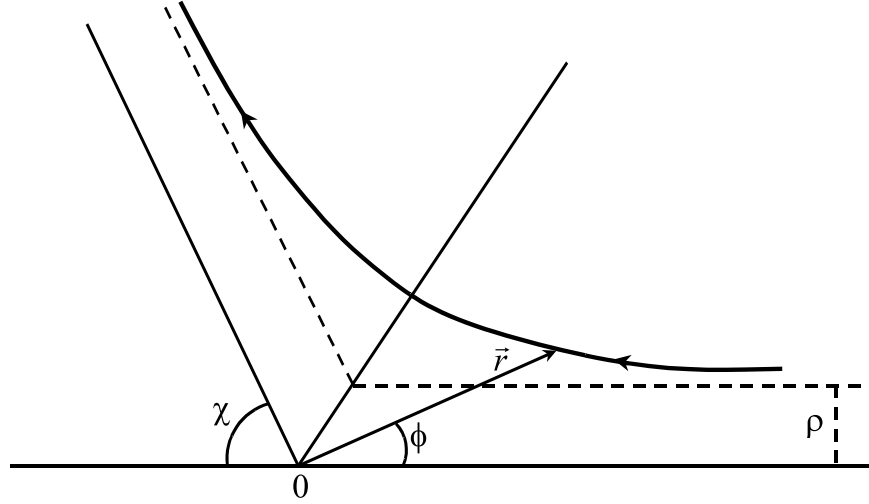


Рис. 6: Траектория материальной точки при рассеянии в центрально-симметричном поле. Штрихованные линии обозначают асимптоты траектории при $t \rightarrow \pm\infty$.

Если $U(r)$ есть потенциальная энергия тяготеющих материальных точек, то $\alpha = -Gm_1m_2$, и мы имеем

$$T = 2\pi\sqrt{\frac{a^3}{G(m_1 + m_2)}}.$$

В случае солнечной системы масса одной из точек (Солнца) намного превосходит массу другой (планеты)

$$m_1 \equiv M_{\odot} \gg m_2,$$

и поэтому приближенно

$$T = 2\pi\sqrt{\frac{a^3}{GM_{\odot}}}.$$

Из этой формулы следует, что между отношением a/a' больших полуосей орбит двух планет и отношением T/T' периодов их обращения вокруг Солнца имеет место следующая связь, называемая *третьим законом Кеплера*

$$\left(\frac{T}{T'}\right)^2 = \left(\frac{a}{a'}\right)^3.$$

§4. Задача рассеяния. Формула Резерфорда

Рассмотрим однородный поток одинаковых частиц, налетающих на неподвижный силовой центр из бесконечности, где все они имеют одинаковую скорость v_0 . Пусть потенциальная энергия частиц есть $U(r)$. Назовем частицу, прошедшую поле и ушедшую снова на бесконечность, рассеянной. *Задача рассеяния* состоит в том, чтобы определить распределение рассеянных частиц по углу рассеяния, под которым понимают угол между начальной и конечной скоростью частицы.

Задача рассеяния является частным случаем задачи двух тел, и решается с помощью общей формулы (76). Для того чтобы применить эту формулу, нужно выразить входящие в нее параметры E, M через начальные данные – начальную скорость v_0 и так называемое *прицельное расстояние* ρ , которое определяется как расстояние между асимптотой траектории частицы в начале ее движения и центром поля (см. Рис. 6). Другими словами, ρ есть минимальное расстояние, на котором частица прошла бы от точки $r = 0$ в отсутствие поля. Договоримся, далее, отсчитывать угол ϕ от начального направления радиус-вектора частицы, т.е. положим $\phi_0 = 0, r_0 = \infty$. Тогда $M = |[\mathbf{r}, m\mathbf{v}]| = mrv \sin \phi$. В начале движения, т.е. при $\phi \rightarrow 0, r \rightarrow \infty$, имеем, по определению прицельного расстояния, $r \sin \phi = \rho$. Поэтому

$$M = m\rho v_0.$$

Учитывая также, что $E = mv_0^2/2$, получаем

$$\phi = \int_{\infty}^r \frac{\frac{\rho}{r^2} dr}{\pm \sqrt{1 - \frac{2U(r)}{mv_0^2} - \frac{\rho^2}{r^2}}}.$$

Для рассеянной частицы $r \rightarrow \infty$, а значение угла ϕ в конце движения равно

$$\tilde{\phi} = \int_{\infty}^{r_{\min}} \frac{\frac{\rho}{r^2} dr}{-\sqrt{1 - \frac{2U(r)}{mv_0^2} - \frac{\rho^2}{r^2}}} + \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\frac{\rho}{r^2} dr}{+\sqrt{1 - \frac{2U(r)}{mv_0^2} - \frac{\rho^2}{r^2}}},$$

или

$$\tilde{\phi} = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\frac{2\rho}{r^2} dr}{\sqrt{1 - \frac{2U(r)}{mv_0^2} - \frac{\rho^2}{r^2}}}. \quad (92)$$

Напомним, что r_{\min} есть нуль корня в подынтегральном выражении. Как видно из Рис. 6, угол рассеяния $\chi = \pi - \tilde{\phi}$.

Для описания распределения рассеянных частиц по углу χ используют так называемое *дифференциальное сечение рассеяния*, $d\sigma$, которое определяется как число частиц, рассеянных в интервал углов $[\chi, \chi + d\chi]$ в единицу времени при единичной плотности потока налетающих частиц (плотностью потока называют число частиц, пролетающих в единицу времени через единичную площадку, расположенную перпендикулярно скорости частиц). Пусть интервал $[\rho, \rho + d\rho]$ есть тот интервал прицельных расстояний, которые имеют частицы, рассеиваемые в интервал углов $[\chi, \chi + d\chi]$. Тогда число этих частиц равно $2\pi\rho d\rho$. Для того чтобы получить эффективное сечение рассеяния, это число следует выразить через χ и $d\chi$. Для этого напишем

$$d\rho = \frac{d\rho}{d\chi} d\chi.$$

Обычно угол рассеяния уменьшается с увеличением прицельного расстояния, т.е. производная $d\rho/d\chi$ отрицательна. Поэтому для того чтобы при положительном $d\chi$ число частиц также было положительным, дифференциальное сечение рассеяния записывают в виде

$$d\sigma = 2\pi\rho \left| \frac{d\rho}{d\chi} \right| d\chi. \quad (93)$$

Число рассеянных частиц также можно относить не к $d\chi$, а к интервалу телесных углов do между двумя конусами с углами раствора χ и $\chi + d\chi$, образующими которых являются асимптоты траекторий рассеянных частиц. Величиной телесного угла с началом в некоторой точке называют площадь поверхности, вырезаемой этим углом на единичной сфере с центром в данной точке, поэтому в рассматриваемом случае $do = 2\pi \sin \chi d\chi$, и формула (93) принимает вид

$$d\sigma = \frac{\rho}{\sin \chi} \left| \frac{d\rho}{d\chi} \right| do. \quad (94)$$

Найдем дифференциальное сечение рассеяния в кулоновом поле. Воспользуемся для этого уравнением (85). В этой формуле угол ϕ отсчитывается от направления радиус-вектора точки в момент, когда $r = r_{\min}$. Поэтому угол $\tilde{\phi}$ равен удвоенной величине угла ϕ при $r = \infty$, а именно

$$\tilde{\phi} = 2 \arccos \left(\frac{\alpha}{e|\alpha|} \right),$$

или, подставляя $\tilde{\phi} = \pi - \chi$,

$$e \sin \frac{\chi}{2} = \frac{\alpha}{|\alpha|}.$$

Учитывая, что

$$e = \sqrt{1 + \frac{2EM^2}{m\alpha^2}} = \sqrt{1 + \left(\frac{m\rho v_0^2}{\alpha} \right)^2},$$

находим

$$\rho^2 = \left(\frac{\alpha}{mv_0^2} \right)^2 \operatorname{ctg}^2 \frac{\chi}{2},$$

поэтому дифференциальное сечение рассеяния (94)

$$d\sigma = \frac{\rho}{\sin \chi} \left| \frac{d\rho}{d\chi} \right| do = \left| \frac{d\rho^2}{d\chi} \right| \frac{do}{2 \sin \chi} = \left(\frac{\alpha}{mv_0^2} \right)^2 \frac{\cos \frac{\chi}{2}}{\sin^3 \frac{\chi}{2}} \frac{do}{2 \sin \chi},$$

или

$$d\sigma = \left(\frac{\alpha}{2mv_0^2} \right)^2 \frac{do}{\sin^4 \frac{\chi}{2}}. \quad (95)$$

Это выражение называется *формулой Резерфорда*.

IV. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ (ПРОДОЛЖЕНИЕ)

Функция Лагранжа системы со многими степенями свободы, совершающей малые колебания. Уравнения движения и общий вид решения задачи. Колебания молекул. Движение твердого тела. Кинетическая энергия поступательного и вращательного движений. Углы Эйлера. Движение симметрического волчка.

§1. Колебания систем со многими степенями свободы

Рассмотрим систему с произвольным числом степенями свободы s . Пусть для простоты $V = 0$, а потенциальная энергия $U(q)$ системы не зависит от времени и при $q = q^{(0)}$ имеет экстремум

$$\frac{\partial U}{\partial q_\alpha}(q^{(0)}) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

Исследуем движение системы в малой окрестности $q^{(0)}$. Для этого, во-первых, запишем функцию Лагранжа, подставляя выражения (6) для декартовых скоростей точек системы в $L = T - U$:

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \left(\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha, \sum_{\beta=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta} \dot{q}_\beta \right) - U(q) = \sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{m_{\alpha\beta}(q)}{2} \dot{q}_\alpha \dot{q}_\beta - U(q), \quad (96)$$

где

$$m_{\alpha\beta}(q) = \sum_{i=1}^N m_i \left(\frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha}, \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta} \right). \quad (97)$$

Введем новые переменные

$$\xi_\alpha = q_\alpha - q_\alpha^{(0)}, \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

ξ определяют величину отклонения системы от положения равновесия и по предположению малы. Предположим, что в начальный момент времени t_0 соответствующие скорости $\dot{q} = \dot{\xi}$ также малы, и будем рассматривать движение системы на при таких t , при которых эти предположения выполняются. Тогда можно разложить функцию Лагранжа (96) по степеням малых величин $\xi, \dot{\xi}$. Разложение потенциальной энергии имеет вид

$$\begin{aligned} U(q^{(0)} + \xi) &= U(q^{(0)}) + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial U}{\partial q_\alpha}(q^{(0)}) \xi_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{\partial^2 U}{\partial q_\alpha \partial q_\beta}(q^{(0)}) \xi_\alpha \xi_\beta + O(\xi^3) \\ &= U(q^{(0)}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^s k_{\alpha\beta} \xi_\alpha \xi_\beta + O(\xi^3), \end{aligned} \quad (98)$$

где

$$k_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 U}{\partial q_\alpha \partial q_\beta}(q^{(0)})$$

есть матрица постоянных коэффициентов. Заметим, что $k_{\alpha\beta} = k_{\beta\alpha}$, в силу перестановочности вторых производных. Член $U(q^{(0)})$ в выражении (98) может быть опущен. Поскольку в уравнения движения входят только производные от L , добавление постоянной к функции Лагранжа не меняет этих уравнений. Далее, кинетическая энергия является квадратичной по малым скоростям $\dot{\xi}$, поэтому в низшем порядке в коэффициентах $m(q)$ можно положить $q = q^{(0)}$: учет зависимости $m(q^{(0)} + \xi)$ от ξ привел бы к членам следующего порядка малости. Таким образом, в низшем порядке по малым $\xi, \dot{\xi}$ функция Лагранжа принимает вид

$$L = \sum_{\alpha,\beta=1}^s \frac{m_{\alpha\beta}}{2} \dot{\xi}_\alpha \dot{\xi}_\beta - \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^s k_{\alpha\beta} \xi_\alpha \xi_\beta, \quad (99)$$

где $m_{\alpha\beta} = m_{\alpha\beta}(q^{(0)})$. Составим уравнения Лагранжа. Мы имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}_\gamma} = \sum_{\alpha,\beta=1}^s \frac{m_{\alpha\beta}}{2} \left(\frac{\partial \dot{\xi}_\alpha}{\partial \dot{\xi}_\gamma} \dot{\xi}_\beta + \dot{\xi}_\alpha \frac{\partial \dot{\xi}_\beta}{\partial \dot{\xi}_\gamma} \right), \quad \gamma = 1, \dots, s.$$

В силу независимости обобщенных скоростей $\dot{\xi}$

$$\frac{\partial \dot{\xi}_\alpha}{\partial \dot{\xi}_\gamma} = \delta_{\alpha\gamma}.$$

Поэтому

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}_\gamma} = \sum_{\alpha,\beta=1}^s \frac{m_{\alpha\beta}}{2} (\delta_{\alpha\gamma} \dot{\xi}_\beta + \dot{\xi}_\alpha \delta_{\beta\gamma}) = \sum_{\beta=1}^s \frac{m_{\gamma\beta}}{2} \dot{\xi}_\beta + \sum_{\alpha=1}^s \frac{m_{\alpha\gamma}}{2} \dot{\xi}_\alpha, \quad \gamma = 1, \dots, s.$$

Из определения (97) следует, что $m_{\alpha\beta} = m_{\beta\alpha}$. Учитывая это и заменяя индекс суммирования в последнем уравнении на α , получим

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}_\gamma} = \sum_{\alpha=1}^s m_{\gamma\alpha} \dot{\xi}_\alpha, \quad \gamma = 1, \dots, s.$$

Аналогично,

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_\gamma} = - \sum_{\alpha=1}^s k_{\gamma\alpha} \xi_\alpha, \quad \gamma = 1, \dots, s.$$

Таким образом, уравнения Лагранжа имеют следующий вид

$$\sum_{\beta=1}^s (m_{\alpha\beta} \ddot{\xi}_\beta + k_{\alpha\beta} \xi_\beta) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (100)$$

Напоминание. В выводе уравнений (100) использовалась симметричность матриц $m_{\alpha\beta}$, $k_{\alpha\beta}$. Поэтому после “считывания” этих матриц с функции Лагранжа их следует симметризовать, т.е. заменить $m_{\alpha\beta} \rightarrow (m_{\alpha\beta} + m_{\beta\alpha})/2$, $k_{\alpha\beta} \rightarrow (k_{\alpha\beta} + k_{\beta\alpha})/2$.

Заметим, что $\xi_\alpha(t) = 0$, $\alpha = 1, \dots, s$ являются решением уравнений (100). Это означает, что если в начальный момент времени система находилась в состоянии $q = q^{(0)}$,

$\dot{q} = 0$, то она будет оставаться в этом состоянии неограниченно долго. Поэтому положение системы, определяемое набором $q^{(0)}$, называется *положением равновесия*. Если при $q = q^{(0)}$ $U(q)$ имеет локальный минимум, то при малом отклонении состояния системы от $q = q^{(0)}$, $\dot{q} = 0$ она будет стремиться вернуться обратно. Другими словами, при достаточно малом значении разности $E - U(q^{(0)})$ движение в окрестности $q^{(0)}$ будет финитным. Такое положение равновесия называют *устойчивым*.

Наряду с системой (100) рассмотрим аналогичную систему уравнений для *комплексных* функций $\eta_\alpha(t)$:

$$\sum_{\beta=1}^s (m_{\alpha\beta}\ddot{\eta}_\beta + k_{\alpha\beta}\eta_\beta) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (101)$$

Системы уравнений (100) и (101) эквивалентны. Действительно, любое решение (100) является также решением (101). С другой стороны, поскольку коэффициенты $m_{\alpha\beta}$, $k_{\alpha\beta}$ по определению вещественны, то беря вещественную либо мнимую части уравнений (101), получим

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \sum_{\beta=1}^s (m_{\alpha\beta}\ddot{\eta}_\beta + k_{\alpha\beta}\eta_\beta) &= \sum_{\beta=1}^s \left(m_{\alpha\beta} \frac{d^2}{dt^2} \operatorname{Re} \eta_\beta + k_{\alpha\beta} \operatorname{Re} \eta_\beta \right) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s, \\ \operatorname{Im} \sum_{\beta=1}^s (m_{\alpha\beta}\ddot{\eta}_\beta + k_{\alpha\beta}\eta_\beta) &= \sum_{\beta=1}^s \left(m_{\alpha\beta} \frac{d^2}{dt^2} \operatorname{Im} \eta_\beta + k_{\alpha\beta} \operatorname{Im} \eta_\beta \right) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \end{aligned}$$

Таким образом, вещественные величины $\operatorname{Re} \eta$ и $\operatorname{Im} \eta$ являются решениями системы (100). Итак, любое решение $\xi(t)$ системы (100) представимо в виде

$$\xi_\alpha(t) = \operatorname{Re} \eta_\alpha(t), \quad \alpha = 1, \dots, s,$$

где $\eta(t)$ – решение системы (101).

Будем искать частное решение системы уравнений (101) в виде

$$\eta_\alpha(t) = A_\alpha e^{i\omega t}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (102)$$

с постоянными *комплексными амплитудами* A_α и частотой ω . Соответствующий набор $\xi_\alpha(t)$, $\alpha = 1, \dots, s$ описывает *нормальное колебание* системы с частотой ω . Подставляя выражения (102) в (100), приходим к системе алгебраических уравнений

$$\sum_{\beta=1}^s (-m_{\alpha\beta}\omega^2 + k_{\alpha\beta}) A_\beta = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (103)$$

Условием совместности этой системы линейных однородных уравнений является обращение в нуль определителя, составленного из коэффициентов при A_β :

$$\det(-m_{\alpha\beta}\omega^2 + k_{\alpha\beta}) = 0. \quad (104)$$

Уравнение (104) называется *характеристическим уравнением*. Оно является алгебраическим уравнением порядка s относительно ω^2 , и по основной теореме алгебры имеет s корней ω_k^2 , $k = 1, \dots, s$. ω_k называют *собственными частотами* системы. Некоторые из

корней ω_k^2 могут оказаться кратными. В этом случае соответствующие частоты называются *вырожденными*. Подставляя решения характеристического уравнения поочередно в систему (103), найдем s линейно-независимых векторов $A_\alpha^{(k)}$, $k = 1, \dots, s$. Общее решение уравнений (100) является суммой всех частных решений:

$$\xi_\alpha(t) = \operatorname{Re} \left\{ \sum_{k=1}^s A_\alpha^{(k)} e^{i\omega_k t} \right\}, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (105)$$

Невырожденный случай

Как известно из курса линейной алгебры, в случае когда все корни характеристического уравнения различны, система (103) имеет для каждого ω_k ровно одно линейно-независимое решение $A_\alpha^{(k)}$. Для того чтобы записать закон движения в явно вещественном виде, определим вещественные величины $C_\alpha^{(k)}$ и $\phi_\alpha^{(k)}$ согласно

$$A_\alpha^{(k)} = C_\alpha^{(k)} \exp\{i\phi_\alpha^{(k)}\}, \quad \phi_\alpha^{(k)} \in [0, \pi). \quad (106)$$

Эта запись аналогична представлению комплексного числа через его модуль и фазу, за исключением того, что в данном случае величина $C_\alpha^{(k)}$ может быть как положительной, так и отрицательной, в соответствии с тем, что фаза $\phi_\alpha^{(k)}$ может принимать значения только из полуоткрытого отрезка $[0, \pi)$. В силу единственности решения все фазы $\phi_\alpha^{(k)}$ с данным k равны:

$$\phi_\alpha^{(k)} = \phi^{(k)}, \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

Действительно, если бы это было не так, система (103) имела бы для данного k два различных решения $\operatorname{Re} A_\alpha^{(k)} = C_\alpha^{(k)} \cos \phi_\alpha^{(k)}$ и $\operatorname{Im} A_\alpha^{(k)} = C_\alpha^{(k)} \sin \phi_\alpha^{(k)}$. Подставляя выражение (106) в уравнение (105), переписываем общее решение уравнений движения в виде

$$\xi_\alpha(t) = \sum_{k=1}^s C_\alpha^{(k)} \cos(\omega_k t + \phi^{(k)}), \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (107)$$

Заметим, что в невырожденном случае коэффициенты $C_\alpha^{(k)}$ могут быть выражены через элементы матрицы $(-m_{\alpha\beta}\omega_k^2 + k_{\alpha\beta})$ явно:

$$C_\alpha^{(k)} = C^{(k)} M_{\alpha_k \alpha}^{(k)}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (108)$$

где $C^{(k)}$ – произвольная комплексная постоянная, а $M_{\alpha_k \alpha}^{(k)}$ – миноры элементов α_k -ой строки матрицы $(-m_{\alpha\beta}\omega_k^2 + k_{\alpha\beta})$. Номер строки α_k может быть любым, лишь бы эта строка содержала хотя бы один элемент с отличным от нуля минором (такой элемент существует в силу предположения о невырожденности собственных частот). Таким образом, общее решение уравнений движения имеет следующий вид

$$\xi_\alpha(t) = \sum_{k=1}^s C^{(k)} M_{\alpha_k \alpha}^{(k)} \cos(\omega_k t + \phi^{(k)}), \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (109)$$

Это решение содержит $2s$ произвольных постоянных $C^{(k)}, \phi^{(k)}$, $k = 1, \dots, s$, определяемых из начальных условий.

Вырожденный случай

В случае наличия кратных частот решения уравнений (103), соответствующие невырожденным частотам, по-прежнему имеют вид (108), тогда как для вырожденных частот число линейно-независимых уравнений в системе (103) равно $s - r$, где $r > 1$ – кратность данного корня характеристического уравнения, и потому все миноры $s - 1$ -го порядка $M_{\alpha\beta} = 0$, так что решение не может быть записано в виде (108). Совпадение некоторых частот означает наличие произвола в выборе соответствующих им линейно-независимых решений системы (103). Действительно, если для каких-либо двух решений $A_\alpha^{(1)}, A_\alpha^{(2)}$ системы (103) соответствующие частоты $\omega_1^2 = \omega_2^2$, то и любая их линейная комбинация $c_1 A_\alpha^{(1)} + c_2 A_\alpha^{(2)}$ является решением системы (103) с той же частотой. Конкретный выбор линейно-независимых решений в вырожденном случае определяется соображениями удобства, в остальном же алгоритм решения задачи тот же, что и в невырожденном случае. В частности, общее решение уравнений движения имеет вид (107), где вещественные амплитуды $C_\alpha^{(k)}$ удовлетворяют системе уравнений

$$\sum_{\beta=1}^s (-m_{\alpha\beta}\omega_k^2 + k_{\alpha\beta}) C_\beta^{(k)} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (110)$$

Для уяснения природы вырождения укажем, что его появление связано с наличием той или иной непрерывной симметрии в системе. Рассмотрим, например, двумерный осциллятор, описываемый функцией Лагранжа

$$L = \frac{m_1 \dot{\xi}_1^2}{2} + \frac{m_2 \dot{\xi}_2^2}{2} - \frac{k_1 \xi_1^2}{2} - \frac{k_2 \xi_2^2}{2}. \quad (111)$$

Эта система вырождена, если $\omega_1^2 = k_1/m_1 = k_2/m_2 = \omega_2^2$. При выполнении этого условия преобразование независимых переменных

$$\xi_1 = \left(\xi'_1 \cos \gamma + \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} \xi'_2 \sin \gamma \right), \quad \xi_2 = \left(-\sqrt{\frac{m_1}{m_2}} \xi'_1 \sin \gamma + \xi'_2 \cos \gamma \right), \quad (112)$$

где γ произвольно, не меняет вида функции Лагранжа:

$$L = \frac{m_1 \dot{\xi}'_1{}^2}{2} + \frac{m_2 \dot{\xi}'_2{}^2}{2} - \frac{k_1 \xi'^2_1}{2} - \frac{k_2 \xi'^2_2}{2}. \quad (113)$$

Поэтому если пара функций $\xi'_1(t), \xi'_2(t)$ является решением уравнений движения, то решением является и их комбинация (112). Система (110) имеет в рассматриваемом случае вид

$$\begin{aligned} (-m_1 \omega_k^2 + k_1) C_1^{(k)} &= 0, \\ (-m_2 \omega_k^2 + k_2) C_2^{(k)} &= 0. \end{aligned} \quad (114)$$

Преобразование симметрии (112) определяет преобразование амплитуд $C_\alpha^{(k)}$:

$$C_1 = \left(C'_1 \cos \gamma + \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} C'_2 \sin \gamma \right), \quad C_2 = \left(-\sqrt{\frac{m_1}{m_2}} C'_1 \sin \gamma + C'_2 \cos \gamma \right). \quad (115)$$

Это преобразование переводит линейно-независимые решения системы уравнений (114) друг в друга. Например, решение

$$\begin{pmatrix} C_1^{(1)} \\ C_2^{(1)} \end{pmatrix} = C^{(1)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

переходит во второе линейно-независимое решение

$$\begin{pmatrix} C_1^{(2)} \\ C_2^{(2)} \end{pmatrix} = C^{(2)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

при $\gamma = \pi/2$.

§2. Колебания молекул

В силу малости массы электрона по сравнению с массой протона скорости электронов в атомах значительно превосходят ядерные скорости. Действительно, как следует из формулы (64), в системе центра масс двух частиц ($\dot{\mathbf{R}} = 0$) отношение их скоростей

$$\frac{|\dot{\mathbf{r}}_1|}{|\dot{\mathbf{r}}_2|} = \frac{m_2}{m_1}.$$

Оценивая с помощью этой формулы задачи двух тел порядок отношения скоростей электронов и ядер в сложных атомах, мы видим, что это отношение $\approx 10^3$. Этот факт имеет принципиальное значение при изучении движения молекул. Он означает, что при возмущении молекул изменение электронной конфигурации происходит значительно быстрее, чем ядерной. Отсюда следует, что в каждый данный момент времени состояние электронов таково, каким оно было бы если бы ядра покоились. Поэтому суммарные кинетическая и потенциальная энергия всех электронов в молекуле являются функциями лишь радиус-векторов ядер \mathbf{r}_i , $i = 1, \dots, N$, но не их скоростей, ускорений и т.д.:

$$E_e = T_e + U_{ee} + U_{en} = E_e(\mathbf{r}),$$

где U_{ee} и U_{en} обозначают, соответственно, потенциальную энергию взаимодействия электронов друг с другом и энергию их взаимодействия с ядрами. С другой стороны, полная энергия молекулы

$$E = T_n(\dot{\mathbf{r}}) + U_{nn}(\mathbf{r}) + E_e(\mathbf{r}),$$

где T_n есть суммарная кинетическая энергия ядер, а U_{nn} – потенциальная энергия их взаимодействия друг с другом. Мы видим, что сумму $U_{nn}(\mathbf{r}) + E_e(\mathbf{r}) \equiv U(\mathbf{r})$ можно рассматривать как эффективную потенциальную энергию взаимодействия ядер. Она называется *электронным термом* молекулы. Таким образом, в приближении, в котором массой электрона пренебрегается вовсе, функция Лагранжа ядер молекулы имеет вид

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} - U(\mathbf{r}). \quad (116)$$

Пусть \mathbf{r}_i^0 , $i = 1, \dots, N$ обозначают радиус-векторы ядер в положении равновесия. В этом положении $U(\mathbf{r})$ имеет наименьшее возможное значение. Это, однако, не означает, что в точке \mathbf{r}^0 $U(\mathbf{r})$ имеет минимум. Дело в том, что любой перенос или поворот молекулы как целого не меняет величины $U(\mathbf{r})$. Поэтому для того чтобы исследовать собственно колебательное движение молекулы, необходимо предварительно исключить ее поступательное и вращательное движения.

Рассмотрим сперва поступательное движение молекулы как целого. Интегрируя по времени закон сохранения импульса

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i} = \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{P}_0,$$

находим

$$\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i = \mathbf{P}_0 t + \mathbf{R}_0.$$

Здесь \mathbf{P}_0 , \mathbf{R}_0 – некоторые постоянные векторы. Отсюда следует, что радиус-вектор центра масс молекулы

$$\mathbf{R} = \frac{1}{\mu} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i,$$

где

$$\mu = \sum_{i=1}^N m_i$$

есть суммарная масса ядер молекулы, движется равномерно со скоростью \mathbf{P}_0/μ . Таким образом, условие отсутствия поступательного движения молекулы требует равенства нулю ее импульса: $\mathbf{P}_0 = 0$. Далее, расположим центр масс колеблющейся молекулы в той же точке, в которой он находился до возбуждения колебаний, т.е. когда ядра занимали положения равновесия. Это дает

$$\frac{1}{\mu} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i = \frac{1}{\mu} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i^0,$$

или

$$\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{u}_i = 0, \tag{117}$$

где $\mathbf{u}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_i^0$, $i = 1, \dots, N$.

Рассмотрим теперь вращательное движение молекулы. В отличие от закона сохранения импульса, закон сохранения момента импульса

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N [\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i] = \sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i, \dot{\mathbf{r}}_i] = \mathbf{M}_0$$

не может быть проинтегрирован в общем случае, т.к. выражение в левой части не является полной производной по времени какой-либо функции координат. Оно является

таковой, однако, в случае малых колебаний. В этом случае величины \mathbf{u}_i , определяющие отклонения ядер от их положений равновесия, остаются все время малыми в отсутствие вращения молекулы как целого. Переписывая закон сохранения момента импульса через \mathbf{u}_i и пренебрегая величинами второго порядка малости, получим

$$\sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i^0, \dot{\mathbf{u}}_i] = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i^0, \mathbf{u}_i] = \mathbf{M}_0,$$

откуда следует, что

$$\sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i^0, \mathbf{u}_i] = \mathbf{M}_0 t + \mathbf{N}_0, \quad (118)$$

где \mathbf{N}_0 есть некоторый постоянный вектор. Поскольку отклонения \mathbf{u}_i остаются все время малыми, то линейный по времени член в правой части последнего уравнения должен отсутствовать. Таким образом, условие отсутствия вращения молекулы как целого требует обращения в нуль ее момента импульса: $\mathbf{M}_0 = 0$. Покажем теперь, что и вектор \mathbf{N}_0 также следует положить равным нулю. Как мы знаем, произвольное малое колебание любой системы, в том числе и молекулы, является суперпозицией нормальных колебаний, каждое из которых соответствует одному члену суммы в решении (107). Рассмотрим, например, нормальное колебание с частотой ω_k :

$$\xi_\alpha(t) = C_\alpha^{(k)} \cos(\omega_k t + \phi^{(k)}), \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

Видно, что в момент времени

$$t_0^{(k)} = -\frac{\phi^{(k)}}{\omega_k} + \frac{\pi}{2\omega_k}$$

все частицы системы проходят через положение равновесия, т.к.

$$\xi_\alpha(t_0^{(k)}) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

Пусть набор функций $\mathbf{u}_i^{(k)}(t)$, $i = 1, \dots, N$ описывает k -е нормальное колебание молекулы. При этом формула (118) имеет вид

$$\sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i^0, \mathbf{u}_i^{(k)}] = \mathbf{N}_0^{(k)}, \quad k = 1, \dots, s. \quad (119)$$

Поскольку $\mathbf{u}_i^{(k)}(t_0^{(k)}) = 0$, $i = 1, \dots, N$, то из этих уравнений следует, что $\mathbf{N}_0^{(k)} = 0$, $k = 1, \dots, s$. Складывая уравнения (119), получаем

$$\sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i^0, \mathbf{u}_i] = 0, \quad (120)$$

где $\mathbf{u}_i = \sum_{k=1}^s \mathbf{u}_i^{(k)}$, $i = 1, \dots, N$ описывает уже произвольное колебание молекулы. Заметим, что в отличие от функций $\mathbf{u}_i^{(k)}(t)$ их сумма $\mathbf{u}_i(t)$ уже не обязана проходить через точку $\mathbf{u}_i = 0$, т.е. через положение равновесия.

В соответствии с определениями, данными в главе I, уравнения (117) и (120) представляют собой шесть идеальных голономных связей, наложенных на молекулу. Другими словами, число колебательных степеней свободы N -атомной молекулы равно $3N - 6$. Следуя алгоритму, указанному в начале главы III, мы принимаем какие-либо $3N - 6$ независимых компонент векторов \mathbf{u}_i за обобщенные координаты, выражаем через них остальные 6 компонент из соотношений (117), (120) и, подставляя их в функцию Лагранжа (116), разложенную по степеням $\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}$, получаем функцию Лагранжа, описывающую малые колебания молекулы.

Пример 8. Колебания трехатомной линейной молекулы. Рассмотрим движение произвольной трехатомной молекулы. Для нахождения нормальных колебаний такой молекулы достаточно рассматривать ее движение в какой-либо одной плоскости. Действительно, если молекула не является линейной, то колебания атомов молекулы должны происходить в плоскости, проходящей через положения равновесия атомов. В противном случае возникло бы вращение молекулы. В этом можно убедиться и простым подсчетом числа степеней свободы следующим образом. Число колебательных степеней свободы нелинейной трехатомной молекулы равно $3 \times 3 - 6 = 3$. С другой стороны, при движении в плоскости имеется две поступательные степени свободы и одна вращательная, поэтому число колебательных степеней свободы в этом случае также равно трем [$2 \times 3 - (2 + 1) = 3$]. Таким образом, плоскими колебаниями исчерпываются все колебательные степени свободы рассматриваемой молекулы. Если же молекула линейна, то число ее колебательных степеней свободы равно $3 \times 3 - 5 = 4$, т.к. число вращательных степеней свободы в этом случае на единицу меньше по сравнению с нелинейной молекулой (для задания ориентации линейной молекулы требуется лишь два параметра, т.к. поворот молекулы вокруг ее оси не меняет положений атомов). Это соответствует тому, что для линейной молекулы возможно наложение колебаний, происходящих в двух плоскостях, пересекающихся по оси молекулы. При этом частоты таких колебаний должны совпадать в силу симметрии молекулы относительно поворотов вокруг ее оси. Таким образом, собственные частоты колебаний линейной молекулы, при которых атомы отклоняются от оси молекулы, являются двукратно вырожденными. Для нахождения же всех независимых нормальных колебаний линейной молекулы по-прежнему достаточно рассматривать каждое такое колебание как плоское.

Применим изложенную в предыдущем пункте схему к определению малых колебаний линейной молекулы типа молекулы CO_2 . Совместим положение равновесия атома углерода с началом координат, а атомов кислорода – с осью x . Перенумеруем атомы слева направо и обозначим расстояние между атомами C и O в положении равновесия через l (см. Рис. 7). Тогда

$$\mathbf{r}_1^0 = (-l, 0, 0), \quad \mathbf{r}_2^0 = (0, 0, 0), \quad \mathbf{r}_3^0 = (l, 0, 0),$$

и условия (117), (120) принимают вид

$$m(\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_3) + M\mathbf{u}_2 = 0, \tag{121}$$

$$[\mathbf{r}_1^0, \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_3] = 0, \tag{122}$$

где m и M обозначают массы атомов кислорода и углерода, соответственно, а также учтено, что $\mathbf{r}_3^0 = -\mathbf{r}_1^0$. Пусть колебания происходят в плоскости x, y . Тогда левая часть условия (121) также лежит в этой плоскости, и условие отсутствия поступательного

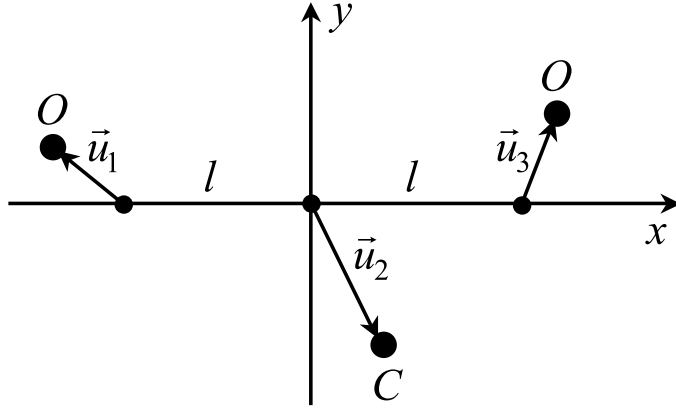


Рис. 7: Колебания молекулы CO_2 в плоскости x, y . Жирные точки на оси x обозначают положения равновесия атомов.

движения молекулы сводится к двум уравнениям

$$m(x_1 + x_3) + Mx_2 = 0, \quad (123)$$

$$m(y_1 + y_3) + My_2 = 0. \quad (124)$$

С другой стороны, поскольку все три вектора $\mathbf{r}_1^0, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ лежат в плоскости x, y , то левая часть условия (122) представляет собой вектор, параллельный оси z , поэтому условие отсутствия вращения молекулы как целого дает лишь одно уравнение

$$y_1 - y_3 = 0. \quad (125)$$

Запишем теперь выражение для потенциальной энергии атомов молекулы $U(\mathbf{r})$. Эта энергия меняется как при изменении расстояний между атомами (соответствующие колебания называются *валентными*), так и при изменении углов между различными валентными связями (такие колебания называют *деформационными*). Поэтому в рассматриваемом случае молекулы CO_2 $U(\mathbf{r})$ имеет вид

$$U(\mathbf{r}) = U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, |\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2|, \alpha),$$

где α есть угол между векторами $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ и $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3$. В окрестности положения равновесия функция $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, |\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2|, \alpha)$ квадратична по малым приращениям ее аргументов. Поэтому сами эти приращения достаточно найти в первом порядке по малым величинам \mathbf{u}_i . Имеем

$$\begin{aligned} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| &= |(\mathbf{r}_1^0 - \mathbf{r}_2^0) + (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)| = \sqrt{[(\mathbf{r}_1^0 - \mathbf{r}_2^0) + (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)]^2} \\ &\approx l \sqrt{1 + \frac{2(\mathbf{r}_1^0 - \mathbf{r}_2^0, \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)}{l^2}} \approx l + \frac{(\mathbf{r}_1^0 - \mathbf{r}_2^0, \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)}{l} = l + x_2 - x_1. \end{aligned} \quad (126)$$

Аналогично,

$$|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3| = l + x_3 - x_2.$$

Далее, при малых деформациях молекулы угол α мал, и поэтому

$$\alpha \approx \frac{y_1 - y_2}{l} + \frac{y_3 - y_2}{l}.$$

Разложение функции U по малым x_i, y_i, α содержит, вообще говоря, всевозможные произведения: $(x_1 - x_2)^2, (x_1 - x_2)(x_2 - x_3), (x_1 - x_2)\alpha$ и т.д. Однако для простоты мы рассмотрим случай, когда потенциальные энергии валентных связей $C - O$ независимы друг от друга, а также от потенциальной энергии деформационных колебаний. Это означает, что в разложении функции $U(\mathbf{r}) = U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, |\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2|, \alpha)$ отсутствуют перекрестные члены $(x_1 - x_2)(x_2 - x_3)$ и т.д., т.е.

$$U = U(l, l, 0) + \frac{k}{2}(x_1 - x_2)^2 + \frac{k}{2}(x_3 - x_2)^2 + \frac{\varkappa l^2 \alpha^2}{2},$$

где k, \varkappa – некоторые положительные константы.

Так как имеется три уравнения связей (123) – (125), то из шести переменных $x_1, x_2, x_3, y_1, y_2, y_3$ только три являются независимыми. Выберем в качестве обобщенных координат x_1, x_3 и y_1 . Тогда остальные переменные выражаются через обобщенные координаты из уравнений связи:

$$x_2 = -\frac{m(x_1 + x_3)}{M}, \quad y_3 = y_1, \quad y_2 = -\frac{2my_1}{M}.$$

Подставляя их в функцию Лагранжа

$$L = \frac{m(\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{x}_3^2 + \dot{y}_3^2)}{2} + \frac{M(\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2)}{2} - U,$$

получаем функцию Лагранжа, описывающую малые колебания молекулы:

$$\begin{aligned} L = & \frac{m}{2} \left(1 + \frac{m}{M}\right) (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_3^2) + \frac{m^2}{M} \dot{x}_1 \dot{x}_3 + m \left(1 + \frac{2m}{M}\right) \dot{y}_1^2 - 2\varkappa \left(1 + \frac{2m}{M}\right)^2 y_1^2 \\ & - \frac{k}{2} \left\{1 + \frac{2m}{M} \left(1 + \frac{m}{M}\right)\right\} (x_1^2 + x_3^2) - \frac{2km}{M} \left(1 + \frac{m}{M}\right) x_1 x_3. \end{aligned} \quad (127)$$

Как видно, функция Лагранжа представляется суммой двух функций, зависящих либо только от y_1 и \dot{y}_1 , либо от $x_1, x_3, \dot{x}_1, \dot{x}_3$. Это – следствие предположения о независимости валентных и деформационных колебаний. Поэтому общее решение уравнений движения по этим двум наборам переменных можно искать независимо друг от друга. Рассмотрим сперва уравнение движения по переменной y_1 . Имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{y}_1} = 2m \left(1 + \frac{2m}{M}\right) \dot{y}_1, \quad \frac{\partial L}{\partial y_1} = -4\varkappa \left(1 + \frac{2m}{M}\right)^2 y_1,$$

поэтому уравнение Лагранжа имеет вид

$$m\ddot{y}_1 + 2\varkappa \left(1 + \frac{2m}{M}\right) y_1 = 0.$$

Общее решение этого уравнения есть

$$y_1(t) = C^{(1)} \cos(\omega_1 t + \phi^{(1)}),$$

где $C^{(1)}$ и $\phi^{(1)}$ – произвольные амплитуда и фаза, а

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{2\kappa}{m} \left(1 + \frac{2m}{M}\right)}$$

– частота колебания. Таким образом, частное решение уравнений движения, описывающее деформационное колебание молекулы CO_2 , имеет вид

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_3(t) \\ y_1(t) \end{pmatrix} = C^{(1)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cos(\omega_1 t + \phi^{(1)}).$$

Рассмотрим теперь валентные колебания. Матрицы кинетической и потенциальной энергий имеют следующий вид

$$m_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} m\rho & m^2/M \\ m^2/M & m\rho \end{pmatrix}, \quad k_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} k(1 + 2m\rho/M) & 2km\rho/M \\ 2km\rho/M & k(1 + 2m\rho/M) \end{pmatrix},$$

где $\rho = 1 + m/M$. Характеристическое уравнение имеет вид

$$\det \begin{pmatrix} -m\rho\omega^2 + k(1 + 2m\rho/M) & -m^2/M\omega^2 + 2km\rho/M \\ -m^2/M\omega^2 + 2km\rho/M & -m\rho\omega^2 + k(1 + 2m\rho/M) \end{pmatrix} = 0,$$

или

$$-m\rho\omega^2 + k(1 + 2m\rho/M) = \pm(-m^2/M\omega^2 + 2km\rho/M).$$

Отсюда находим собственные частоты

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \omega_3 = \sqrt{\frac{k(2m + M)}{mM}}.$$

Эти частоты различны, т.е. система невырождена. Применяя формулу (108), находим частные решения, соответствующие частотам $\omega_{2,3}$

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_3(t) \\ y_1(t) \end{pmatrix} = C^{(2)} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos(\omega_2 t + \phi^{(2)}), \quad \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_3(t) \\ y_1(t) \end{pmatrix} = C^{(3)} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos(\omega_3 t + \phi^{(3)})$$

с произвольными амплитудами $C^{(2)}, C^{(3)}$ и фазами $\phi^{(2)}, \phi^{(3)}$. Таким образом, общее решение уравнений движения, описывающее колебания молекулы CO_2 в плоскости x, y имеет вид

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_3(t) \\ y_1(t) \end{pmatrix} = C^{(1)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cos(\omega_1 t + \phi^{(1)}) + C^{(2)} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos(\omega_2 t + \phi^{(2)}) + C^{(3)} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos(\omega_3 t + \phi^{(3)}).$$

Как было указано выше, линейная молекула может совершать одновременно колебания в двух плоскостях, пересекающихся по оси, проходящей через положения равновесия атомов. В рассматриваемом случае четвертым независимым нормальным колебанием является деформационное колебание в плоскости x, z . Соответствующее решение получится, если в вышеприведенных формулах заменить y на z .

§3. Движение твердого тела

Если в условиях данной задачи движение системы материальных точек таково, что изменением взаимных расстояний между этими точками можно пренебречь, то такую систему называют *твердым телом*. Исследуем движение твердого тела, следуя общему алгоритму применения лагранжева формализма, указанному в начале главы III.

А. Определим число степеней свободы твердого тела. Зафиксируем какую-либо его точку. Для этого требуется задать три ее пространственные координаты (например, декартовы). После этого зафиксируем какую-либо другую точку тела. Поскольку расстояния между всеми точками тела фиксированы, то для этого потребуется задать две ее координаты (например, два угла, определяющие направление вектора, соединяющего выбранные точки). Наконец, если в твердом теле имеются точки, не принадлежащие прямой, проходящей через первые две точки, то остающийся произвол в их положении соответствует поворотам вокруг указанной прямой, для фиксации которого необходимо задать один параметр, например, угол поворота. Таким образом, в этом случае число степеней свободы твердого тела $s = 3 + 2 + 1 = 6$. Если же все точки твердого тела лежат на одной прямой, то число степеней свободы такого тела $s = 3 + 2 = 5$.

В. Выберем теперь обобщенные координаты твердого тела. Для описания поступательного движения твердого тела удобно ввести радиус-вектор центра инерции тела, \mathbf{R} . За первые три обобщенные координаты мы примем декартовы компоненты \mathbf{R} в некоторой инерциальной системе отсчета (которую мы также будем называть *неподвижной*). Для описания же его вращательного движения определим три угловых координаты следующим образом. Введем подвижную систему отсчета, жестко связанную с твердым телом, а в ней – декартову координатную систему, начало которой поместим в центре инерции тела, а направления координатных осей выберем пока произвольно. Оси подвижной системы будем отличать штрихом, (x', y', z') . Любую данную ориентацию твердого тела можно получить из некоторой исходной, поворачивая подвижную систему координат относительно неподвижной. При этом удобно считать, что центры обеих систем совпадают. Этого всегда можно добиться с помощью параллельных переносов подвижной системы, поскольку такие переносы не меняют ее ориентации. Пусть исходной является ориентация, когда координатные оси обеих систем совпадают. Тогда повернем подвижную систему 1) вокруг оси z на угол ϕ , затем 2) вокруг нового положения оси x' на угол θ и, наконец, 3) вокруг нового положения оси z' на угол ψ (см. Рис. 8). Все повороты производятся по правилу правого винта. Определенные таким образом углы (ϕ, θ, ψ) называются *углами Эйлера*.

С. Для того чтобы вычислить полную производную по времени от функции $r_i(\mathbf{R}, \phi, \theta, \psi)$, $i = 1, \dots, N$, удобно ввести вектор $\rho_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{R}$, соединяющий центр масс тела с его i -ой материальной точкой. Поскольку расстояния между точками твердого тела неизменны, то вектор ρ_i остается постоянным по величине при движении твердого тела, меняя лишь свое направление. Обозначим через $d\varphi$ бесконечно малый вектор, направленный по оси поворота тела в данный момент времени, и по величине равный углу поворота за промежуток времени dt . Тогда согласно формуле (34) изменение вектора ρ_i за это время есть

$$d\rho_i = [d\varphi, \rho_i].$$

Подставляя $\rho_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{R}$ в левую часть этого равенства и деля его на dt , получаем

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \dot{\mathbf{R}} + [\boldsymbol{\Omega}, \rho_i], \quad (128)$$

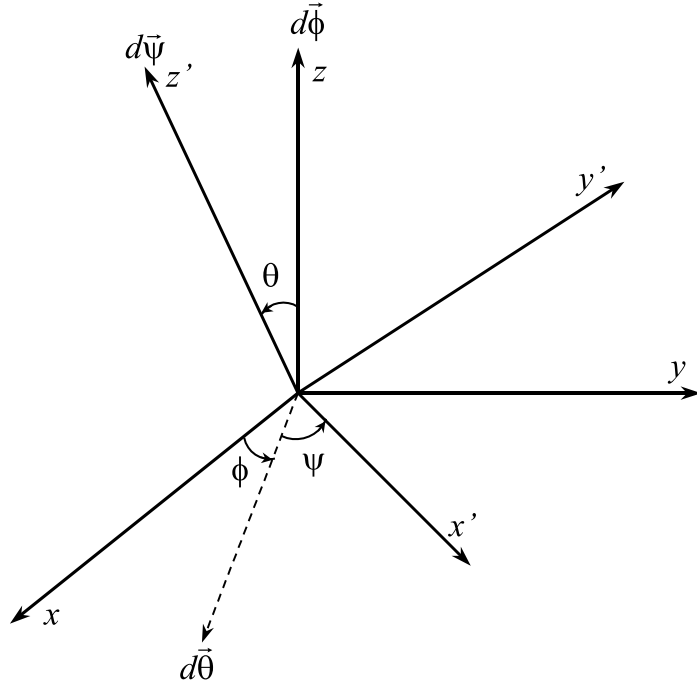


Рис. 8: Определение ориентации твердого тела с помощью углов Эйлера. Штрихованная линия – линия узлов.

где

$$\boldsymbol{\Omega} \equiv \frac{d\boldsymbol{\varphi}}{dt}. \quad (129)$$

Вектор $\boldsymbol{\Omega}$ называется *угловой скоростью* вращения твердого тела. В формуле (128) векторы $\boldsymbol{\rho}_i$ должны быть еще выражены через обобщенные координаты ϕ, θ, ψ , а вектор $\boldsymbol{\Omega}$ – через $\dot{\phi}, \dot{\theta}, \dot{\psi}$.

Теперь с помощью формулы (128) выразим кинетическую энергию твердого тела через обобщенные координаты и скорости. Имеем:

$$\begin{aligned} T &= \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \sum_{i=1}^N m_i (\dot{\mathbf{R}}, [\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\rho}_i]) + \sum_{i=1}^N \frac{m_i [\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\rho}_i]^2}{2} \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \left([\dot{\mathbf{R}}, \boldsymbol{\Omega}], \sum_{i=1}^N m_i \boldsymbol{\rho}_i \right) + \sum_{i=1}^N \frac{m_i [\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\rho}_i]^2}{2}, \end{aligned} \quad (130)$$

где $\mu = \sum_{i=1}^N m_i$ есть полная масса тела. Второй член в этой формуле тождественно равен нулю, поскольку начало подвижной системы выбрано в центре инерции тела, так что

$\sum_{i=1}^N m_i \boldsymbol{\rho}_i = 0$. Третий же член можно переписать так:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \frac{m_i [\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\rho}_i]^2}{2} &= \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \{ \boldsymbol{\Omega}^2 \boldsymbol{\rho}_i^2 - (\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\rho}_i)^2 \} \equiv \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \{ \Omega_\alpha \Omega_\beta \delta^{\alpha\beta} \boldsymbol{\rho}_i^2 - \Omega_\alpha \rho_i^\alpha \Omega_\beta \rho_i^\beta \} \\ &= \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \Omega_\alpha \Omega_\beta \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \{ \delta^{\alpha\beta} \boldsymbol{\rho}_i^2 - \rho_i^\alpha \rho_i^\beta \}, \end{aligned} \quad (131)$$

где греческие индексы нумеруют декартовы компоненты векторов $\boldsymbol{\Omega}$ и $\boldsymbol{\rho}_i$, а $\delta^{\alpha\beta}$ – единичная матрица. Поскольку кинетическая энергия выражается через скалярные произведения векторов $\boldsymbol{\Omega}$ и $\boldsymbol{\rho}_i$, то не имеет значения в какой системе вычисляются их компоненты. Однако в неподвижной системе они изменяются со временем из-за вращения тела, тогда как в подвижной системе ρ_i^α фиксированы. Поэтому в этой системе матрица

$$I^{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^N m_i \{ \delta^{\alpha\beta} \boldsymbol{\rho}_i^2 - \rho_i^\alpha \rho_i^\beta \} \quad (132)$$

постоянна и, в частности, не зависит от обобщенных координат. Эта матрица называется *тензором моментов инерции* тела и является основной его механической характеристикой. Итак, кинетическая энергия твердого тела принимает вид

$$T = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 I^{\alpha\beta} \Omega_\alpha \Omega_\beta, \quad (133)$$

где индексы α, β нумеруют оси подвижной системы координат. По определению, тензор моментов инерции симметричен: $I^{\alpha\beta} = I^{\beta\alpha}$. Как и всякая симметричная матрица, поворотом системы координат $I^{\alpha\beta}$ может быть приведена к диагональному виду, т.е. к виду, в котором $I^{\alpha\beta} = 0$ при $\alpha \neq \beta$. Координатные оси, в которых тензор моментов диагонален, называют *главными осями инерции*, а диагональные элементы $I^{\alpha\alpha} \equiv I_\alpha$ – *главными моментами инерции* тела. Теперь мы конкретизируем выбор системы координат, жестко связанной с твердым телом, договорившись выбирать оси этой системы вдоль главных осей инерции тела. Тогда выражение (133) существенно упрощается:

$$T = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{1}{2} (I_{x'} \Omega_{x'}^2 + I_{y'} \Omega_{y'}^2 + I_{z'} \Omega_{z'}^2). \quad (134)$$

Заметим, что из этой формулы нетрудно найти выражение для момента импульса вращающегося тела. Выберем произвольный момент времени t_0 и рассмотрим эволюцию тела за малый промежуток времени $[t_0, t_0 + dt]$. По определению угла $d\boldsymbol{\varphi}$, его проекции на оси подвижной системы $(d\boldsymbol{\varphi})_{x'}$, $(d\boldsymbol{\varphi})_{y'}$, $(d\boldsymbol{\varphi})_{z'}$ определяют углы поворота тела вокруг этих осей за время dt . Эти проекции однозначно определяют положение тела в любой момент времени от t_0 до $t_0 + dt$ по его положению в момент времени t_0 . Если временно принять их за обобщенные координаты, то компоненты $\Omega_{x'}$, $\Omega_{y'}$, $\Omega_{z'}$ будут играть роль соответствующих обобщенных скоростей. Поэтому согласно формуле (40)

дифференцирование функции Лагранжа по угловой скорости даст момент импульса тела:

$$M_{x'} = \frac{\partial L}{\partial \Omega_{x'}} = \frac{\partial T}{\partial \Omega_{x'}} = I_{x'} \Omega_{x'}, \quad M_{y'} = I_{y'} \Omega_{y'}, \quad M_{z'} = I_{z'} \Omega_{z'}. \quad (135)$$

В силу произвольности t_0 эти формулы будут справедливы для всех моментов времени.

Для того чтобы выразить T через эйлеровы углы, нам остается найти проекции угловой скорости на оси подвижной системы. Для этого снова рассмотрим движение тела на бесконечно малом промежутке времени $[t_0, t_0 + dt]$. За это время углы ϕ, θ, ψ получают приращения $d\phi, d\theta, d\psi$, соответственно. Данный поворот тела можно представить как последовательность трех элементарных поворотов, при которых меняется лишь одна угловая координата, а остальные две фиксированы. При этом, выполняя второй или третий поворот, можно пренебречь приращениями углов, которые они получили на предыдущих этапах, в силу малости этих приращений. По этой же причине порядок поворотов не важен. Тогда по определению углов Эйлера вектор $d\phi$ будет направлен по оси z , вектор $d\theta$ – по линии пересечения плоскостей (x, y) и (x', y') (называемой *линией узлов*), и вектор $d\psi$ – по оси z' (см. Рис. 8). Разлагая эти векторы по осям подвижной системы координат и суммируя три вклада, получим

$$\begin{aligned} (d\phi)_{x'} &= d\phi \sin \theta \sin \psi + d\theta \cos \psi, \\ (d\phi)_{y'} &= d\phi \sin \theta \cos \psi - d\theta \sin \psi, \\ (d\phi)_{z'} &= d\phi \cos \theta + d\psi. \end{aligned} \quad (136)$$

Деля эти уравнения на dt и учитывая определение (129) вектора угловой скорости, находим проекции этого вектора на оси подвижной системы

$$\begin{aligned} \Omega_{x'} &= \dot{\phi} \sin \theta \sin \psi + \dot{\theta} \cos \psi, \\ \Omega_{y'} &= \dot{\phi} \sin \theta \cos \psi - \dot{\theta} \sin \psi, \\ \Omega_{z'} &= \dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi}. \end{aligned} \quad (137)$$

Подстановка в выражение (134) дает

$$\begin{aligned} T &= \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{1}{2} \left\{ I_{x'} (\dot{\phi} \sin \theta \sin \psi + \dot{\theta} \cos \psi)^2 + I_{y'} (\dot{\phi} \sin \theta \cos \psi - \dot{\theta} \sin \psi)^2 \right. \\ &\quad \left. + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 \right\}. \end{aligned} \quad (138)$$

Наконец, функция Лагранжа твердого тела получается отсюда вычитанием потенциальной энергии тела как функции его обобщенных координат:

$$L = T(\theta, \psi, \dot{\phi}, \dot{\theta}, \dot{\psi}, \dot{\mathbf{R}}) - U(\mathbf{R}, \phi, \theta, \psi).$$

После этого следует переходить к пп. **D, E** алгоритма.

Рассмотрим теперь примеры.

Пример 9. Тензор моментов инерции жесткого ротатора. Рассмотрим систему, состоящую из двух материальных точек, скрепленных жестким невесомым стержнем. Такую систему называют *жестким ротатором*. Примером ротатора может служить двухатомная молекула, у которой не возбуждены колебания. Обозначим расстояние между

атомами через l и выберем ось z' по оси ротатора. Затем совместим начало координат с центром инерции ротатора, потребовав $m_1 z'_1 + m_2 z'_2 = 0$. Поскольку $|z'_1 - z'_2| = l$, то из этих соотношений следует, что $z'_1 = -m_2 l / (m_1 + m_2)$, $z'_2 = m_1 l / (m_1 + m_2)$ (считая, что $z'_2 > z'_1$.) Поскольку x', y' -координаты точек равны нулю, то из формулы (132) следует, что из всех компонент тензора инерции отличны от нуля лишь $I_{x'x'}, I_{y'y'}$, причем

$$I_{x'x'} = I_{y'y'} = \sum_{i=1}^2 m_i \rho_i^2 = m_1 \left(\frac{m_2 l}{m_1 + m_2} \right)^2 + m_2 \left(\frac{m_1 l}{m_1 + m_2} \right)^2 = m l^2,$$

где m есть приведенная масса ротатора. Поскольку тензор $I^{\alpha\beta}$ получился диагональным, то найденные значения являются главными моментами инерции ротатора.

Пример 10. Тензор моментов инерции однородного шара. Вычислим тензор моментов однородного шара массы M и радиуса R . В силу сферической симметрии центр инерции шара находится в его центре, а тензор инерции диагонален, причем $I_{x'} = I_{y'} = I_{z'} \equiv I$. Имеем:

$$\begin{aligned} 3I &= I_{x'} + I_{y'} + I_{z'} = \sum_{i=1}^N m_i \{ \delta^{11} \rho_i^2 - x_i'^2 \} + \sum_{i=1}^N m_i \{ \delta^{22} \rho_i^2 - y_i'^2 \} + \sum_{i=1}^N m_i \{ \delta^{33} \rho_i^2 - z_i'^2 \} \\ &= 2 \sum_{i=1}^N m_i \rho_i^2. \end{aligned} \quad (139)$$

Здесь под m_i следует понимать бесконечно малую массу, заключенную в элементе объема dV шара: $m_i = \rho dV$, где $\rho = M/V$ есть плотность тела, а под суммой по i – интеграл по всему его объему. Таким образом,

$$I = \frac{2}{3} \int_V r^2 \rho dV = \frac{2\rho}{3} \int_0^R r^2 4\pi r^2 dr = \frac{8\pi}{15} \rho R^5,$$

или

$$I = \frac{2}{5} M R^2. \quad (140)$$

Пример 11. Свободное движение симметрического волчка. Твердое тело, у которого какие-либо два главных момента инерции равны, называют *симметрическим волчком*. Таковым будет, например, любое тело, обладающее осью симметрии четвертого (или выше) порядка. Договоримся нумеровать оси так, чтобы $I_{x'} = I_{y'}$. В отсутствие внешних сил функция Лагранжа симметрического волчка имеет вид

$$L = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{1}{2} \left\{ I_{x'} (\dot{\phi}^2 \sin^2 \theta + \dot{\theta}^2) + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 \right\}. \quad (141)$$

Координаты \mathbf{R}, ϕ, ψ являются циклическими. Соответствующие им обобщенные импульсы сохраняются:

$$\mathbf{p}_R = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{R}}} = \mu \dot{\mathbf{R}}, \quad (142)$$

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = I_{x'} \dot{\phi} \sin^2 \theta + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi}) \cos \theta, \quad (143)$$

$$p_\psi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi}). \quad (144)$$

Первый из этих интегралов движения выражает сохранение полного импульса твердого тела. Из него следует, как всегда, что центр инерции тела движется с постоянной скоростью $\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{p}_R/\mu$. Будем рассматривать движение в системе центра инерции тела, положив $\dot{\mathbf{R}} = 0$. Далее, координаты ϕ и ψ являются, по определению, углами поворота тела вокруг осей z и z' . Поэтому соответствующие им обобщенные импульсы p_ϕ и p_ψ представляют собой проекции полного момента импульса тела на эти оси [см. формулу (40)]. Выберем ось z неподвижной системы координат вдоль сохраняющегося вектора момента импульса \mathbf{M} . Тогда

$$p_\phi = M, \quad p_\psi = M \cos \theta.$$

Поскольку M, p_ψ постоянны, то из второго уравнения вытекает, что постоянен и угол θ . С другой стороны, из уравнений (143), (144) следует, что

$$p_\phi = I_{x'} \dot{\phi} \sin^2 \theta + p_\psi \cos \theta.$$

Комбинируя это уравнение с двумя предыдущими, получаем

$$\dot{\phi} = \frac{M}{I_{x'}},$$

т.е., обобщенная скорость $\dot{\phi}$ также постоянна. Наконец, из уравнения (144) следует постоянство обобщенной скорости $\dot{\psi}$:

$$\dot{\psi} = M \cos \theta \left(\frac{1}{I_{z'}} - \frac{1}{I_{x'}} \right).$$

Таким образом, ось z' равномерно вращается со скоростью $M/I_{x'}$ вокруг оси z , образуя с ней постоянный угол (*регулярная прецессия* оси). При этом сам волчок равномерно вращается вокруг оси z' с постоянной угловой скоростью [см. уравнение (137)]

$$\Omega_{z'} = \dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi} = \frac{M}{I_{z'}} \cos \theta.$$

Заметим, что энергия волчка (в рассматриваемом случае $E = L$) также сохраняется (L не зависит явно от времени!). Однако закон сохранения энергии не дает ничего нового, так как он является следствием законов сохранения (142) – (144).

Пример 12. Движение тяжелого симметрического волчка. Рассмотрим движение твердого тела в однородном поле. Потенциальная энергия i -ой материальной точки тела в таком поле есть

$$U_i = -g_i(\mathbf{F}, \mathbf{r}_i),$$

где \mathbf{F} обозначает напряженность поля, а g_i – заряд точки. Подставляя $\mathbf{r}_i = \mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}_i$ и суммируя по всем точкам тела, получаем потенциальную энергию тела

$$U = -G(\mathbf{F}, \mathbf{R}) - (\mathbf{F}, \mathbf{d}),$$

где $G = \sum_{i=1}^N g_i$ есть полный заряд тела, а $\mathbf{d} = \sum_{i=1}^N g_i \boldsymbol{\rho}_i$ – его *дипольный момент*. Аналогично тензору моментов, компоненты вектора \mathbf{d} имеют постоянные значения в подвижной

системе. Поэтому при движении тела \mathbf{d} меняет лишь свое направление, оставаясь постоянным по величине. В случае электрического поля заряды g_i – электрические заряды, а вектор \mathbf{d} есть электрический дипольный момент, в случае же гравитационного поля g_i – это массы точек тела, $G \equiv \mu$, а вектор $\mathbf{d} \equiv 0$, поскольку начало подвижной системы координат выбрано в центре инерции тела.

Рассмотрим движение симметрического волчка в поле тяжести (*тяжелый волчок*). Пусть волчок имеет точку опоры, расположенную на оси z' , которая может скользить без трения в плоскости x, y . Расстояние от центра инерции волчка до точки опоры обозначим через l . Ось z направим вертикально вверх. Тогда функция Лагранжа волчка будет иметь вид

$$L = \frac{\mu (\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2)}{2} + \frac{1}{2} \left\{ I_{x'} (\dot{\phi}^2 \sin^2 \theta + \dot{\theta}^2) + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 \right\} - \mu g Z, \quad (145)$$

где X, Y, Z – проекции вектора \mathbf{R} на оси неподвижной системы координат, а g – ускорение силы тяжести. Наличие опоры налагает следующую связь на волчок:

$$Z = l \cos \theta.$$

Эта связь голономна. Она уменьшает на единицу число степеней свободы волчка. Выбрав в качестве обобщенных координат X, Y, ϕ, θ, ψ , выражаем функцию Лагранжа через обобщенные координаты и скорости

$$L = \frac{\mu (\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + l^2 \dot{\theta}^2 \sin^2 \theta)}{2} + \frac{1}{2} \left\{ I_{x'} (\dot{\phi}^2 \sin^2 \theta + \dot{\theta}^2) + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 \right\} - \mu g l \cos \theta. \quad (146)$$

Координаты X, Y, ϕ, ψ – циклические. Соответствующие сохраняющиеся обобщенные импульсы имеют вид

$$p_X = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}} = \mu \dot{X}, \quad (147)$$

$$p_Y = \frac{\partial L}{\partial \dot{Y}} = \mu \dot{Y}, \quad (148)$$

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = I_{x'} \dot{\phi} \sin^2 \theta + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi}) \cos \theta, \quad (149)$$

$$p_\psi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi}). \quad (150)$$

Функция Лагранжа (146) также не зависит от времени явно, поэтому сохраняется обобщенная энергия

$$E = \frac{\mu (\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + l^2 \dot{\theta}^2 \sin^2 \theta)}{2} + \frac{1}{2} \left\{ I_{x'} (\dot{\phi}^2 \sin^2 \theta + \dot{\theta}^2) + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 \right\} + \mu g l \cos \theta. \quad (151)$$

Смысл законов сохранения (147) – (150) тот же, что и в случае свободного волчка. В отличие от последнего, однако, при наличии поля тяжести сохраняется не весь вектор \mathbf{M} , а лишь его проекция на ось z .

Итак, мы имеем систему из пяти интегралов движения для пяти неизвестных функций $X(t), Y(t), \phi(t), \theta(t), \psi(t)$.

Перейдем к интегрированию этой системы. Как и в случае свободного волчка, мы для простоты исключим поступательное движение волчка, перейдя в систему отсчета, в которой $p_X = p_Y = 0$ (и следовательно, $X(t) = X(t_0), Y(t) = Y(t_0)$). Из уравнения (150) следует, что второй член в фигурных скобках в выражении для E есть постоянная, равная $p_\psi^2/I_{z'}$. Далее, из уравнений (149), (150) следует, что

$$p_\phi = I_{x'} \dot{\phi} \sin^2 \theta + p_\psi \cos \theta. \quad (152)$$

Выражая отсюда $\dot{\phi}$ и подставляя в уравнение (151), получим

$$E' = \frac{\mu l^2}{2} \dot{\theta}^2 \sin^2 \theta + \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta)^2}{2I_{x'} \sin^2 \theta} + \frac{I_{x'}}{2} \dot{\theta}^2 + \mu g l \cos \theta, \quad E' = E - \frac{p_\psi^2}{2I_{z'}}. \quad (153)$$

Разделение переменных в этом уравнении даёт

$$dt = \pm \frac{\sqrt{\mu l^2 \sin^2 \theta + I_{x'}} d\theta}{\sqrt{2E' - \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta)^2}{I_{x'} \sin^2 \theta} - 2\mu g l \cos \theta}}, \quad (154)$$

откуда интегрированием получаем

$$t - t_0 = \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{\sqrt{\mu l^2 \sin^2 \theta + I_{x'}} d\theta}{\pm \sqrt{2E' - \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta)^2}{I_{x'} \sin^2 \theta} - 2\mu g l \cos \theta}}, \quad \theta_0 = \theta(t_0). \quad (155)$$

Знак $+$ ($-$) в правой части этой формулы берется на участках траектории, на которых $\dot{\theta} > 0$ ($\dot{\theta} < 0$). Далее, разделяя переменные ϕ и t в уравнении (152), и используя равенство (154), находим

$$d\phi = \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta) dt}{I_{x'} \sin^2 \theta} = \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta)}{I_{x'} \sin^2 \theta} \frac{\sqrt{\mu l^2 \sin^2 \theta + I_{x'}} d\theta}{\pm \sqrt{2E' - \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta)^2}{I_{x'} \sin^2 \theta} - 2\mu g l \cos \theta}}, \quad (156)$$

откуда

$$\phi - \phi_0 = \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta)}{I_{x'} \sin^2 \theta} \frac{\sqrt{\mu l^2 \sin^2 \theta + I_{x'}} d\theta}{\pm \sqrt{2E' - \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta)^2}{I_{x'} \sin^2 \theta} - 2\mu g l \cos \theta}}, \quad \phi_0 = \phi(t_0). \quad (157)$$

Наконец, разделение переменных в уравнении (150) с учетом уравнения (156) дает

$$\psi - \psi_0 = \frac{p_\psi}{I_{z'}} (t - t_0) + \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta) \cos \theta}{I_{x'} \sin^2 \theta} \frac{\sqrt{\mu l^2 \sin^2 \theta + I_{x'}} d\theta}{\pm \sqrt{2E' - \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta)^2}{I_{x'} \sin^2 \theta} - 2\mu g l \cos \theta}} \quad (158)$$

$$\psi_0 = \psi(t_0).$$

Формулы (155), (157) и (158) определяют закон движения волчка в квадратурах.

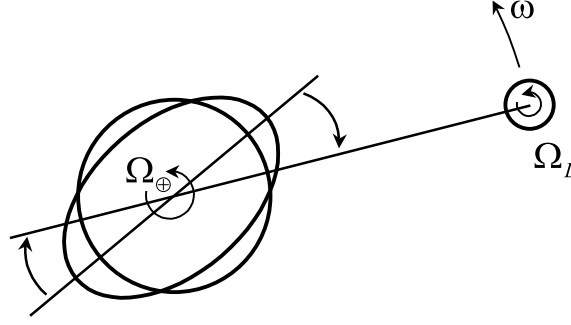


Рис. 9: Возникновение приливного бугра на Земле под влиянием гравитационного поля Луны. Скорость вращения Земли Ω_{\oplus} больше угловой орбитальной скорости Луны ω , поэтому бугор смещается от линии Земля-Луна в направлении вращения Земли.

Пример 13. Влияние приливных сил на движение системы Земля-Луна. Если бы силы тяготения между планетами были строго центральными (зависящими лишь от положения их центров масс), приближение, в котором планеты рассматриваются как материальные точки, было бы точным. Однако в действительности имеются отклонения от центральности, связанные с тем, что распределения масс в планетах не являются строго сферически-симметричными. Одной из причин этой несимметричности являются сами силы тяготения между планетами, приводящие к тому, что взаимодействующие планеты слегка вытягиваются в направлении, соединяющем их центры. Примером такого рода влияния Луны на Землю являются морские приливы. Однако из-за того, что скорость вращения Земли больше угловой орбитальной скорости Луны, приливный бугор несколько смещается от направления Земля-Луна в направлении вращения Земли, поскольку массам воды для перемещения требуется некоторое время. Получающаяся конфигурация показана схематически на Рис. 9. Сила тяготения Луны, действующая на приливный бугор, стремится вернуть его на линию Земля-Луна. Возникающая своеобразная “сила трения,” называемая *приливной силой*, тормозит вращение Земли. Однако поскольку сила тяготения является потенциальной, это трение не приводит к уменьшению полной механической энергии или полного момента импульса системы. Исходя только лишь из этих законов можно ответить на интересный вопрос о том, как будет двигаться система, когда приливные силы полностью затормозят относительное вращение Земли и Луны, т.е. когда угловые скорости их вращения сравняются. Сделаем это, предполагая для простоты, что орбиты тел являются круговыми, а оси их вращения перпендикулярны плоскости орбиты. Для этого запишем выражение сохраняющегося момента импульса системы. Он складывается из момента импульса орбитального движения тел и момента импульса их вращения. Орбитальный момент импульса находим по формуле (70) задачи двух тел:

$$M_{\text{orb}} = m r^2 \omega, \quad (159)$$

где m обозначает приведенную массу системы

$$m = \frac{m_{\oplus} m_L}{m_{\oplus} + m_L},$$

а ω – угловая скорость вращения вектора $\mathbf{r} = \mathbf{r}_L - \mathbf{r}_{\oplus}$; нижние индексы \oplus, L относятся к Земле и Луне, соответственно. По условию задачи моменты импульса вращения Земли

и Луны перпендикулярны плоскости орбиты и, согласно формуле (135), по величине равны

$$M_{\oplus} = I_{\oplus}\Omega_{\oplus}, \quad M_L = I_L\Omega_L. \quad (160)$$

При вычислении моментов инерции Земли и Луны их можно считать шаровыми волчками, поскольку изменение распределения массы планеты под действием приливных сил относительно малó. Таким образом, полный момент импульса системы равен

$$M = mr^2\omega + I_{\oplus}\Omega_{\oplus} + I_L\Omega_L = \text{const}. \quad (161)$$

С другой стороны, поскольку изменение орбит под действием приливных сил происходит очень медленно, движение системы на каждом витке хорошо описывается решением задачи двух тел, полученным в III §3. Подставляя $T = 2\pi/\omega$, $a = r$, $|\alpha| = Gm_{\oplus}m_L$ в формулу (91), получаем

$$\omega = \sqrt{\frac{G(m_{\oplus} + m_L)}{r^3}},$$

откуда следует, что текущие значения параметров ω, r связаны с их конечными значениями ω', r' третьим законом Кеплера

$$\left(\frac{\omega'}{\omega}\right)^2 = \left(\frac{r}{r'}\right)^3. \quad (162)$$

Учитывая, что в конечном состоянии

$$\omega' = \Omega'_L = \Omega'_{\oplus},$$

находим из уравнения (161)

$$mr^2\omega + I_{\oplus}\Omega_{\oplus} + I_L\Omega_L = \omega' (mr'^2 + I_{\oplus} + I_L).$$

Подставляя сюда r' из уравнения (162), получаем уравнение для конечной угловой скорости

$$mr^2\omega + I_{\oplus}\Omega_{\oplus} + I_L\Omega_L = \omega' \left(mr^2 \left(\frac{\omega}{\omega'}\right)^{4/3} + I_{\oplus} + I_L \right). \quad (163)$$

Используя формулу (140) и учитывая, что масса Луны примерно в восемьдесят раз меньше массы Земли, а ее радиус – почти в четыре раза меньше земного, пренебрегаем I_L по сравнению с I_{\oplus} , полагаем $m \approx m_L$ и переписываем уравнение (163) в виде

$$1 + \frac{2m_{\oplus}}{5m_L} \left(\frac{R_{\oplus}}{r}\right)^2 \left(\frac{\Omega_{\oplus}}{\omega} - x\right) = x^{-1/3}, \quad (164)$$

где $x = \omega'/\omega$, причем нас интересуют решения $x < 1$ (т.к. приливные силы замедляют вращение). Текущие значения параметров, входящих в это уравнения, таковы:

$$\frac{m_{\oplus}}{m_L} = 81, \quad \frac{\Omega_{\oplus}}{\omega} = 27, \quad \frac{R_{\oplus}}{r} = 1/60.$$

При этих значениях решением уравнения (164) является $x \approx 0,53$, т.е. продолжительность земных суток составит $27/0,53 \cdot 24 \text{ч.} \approx 1220 \text{ч.}$ При этом $r' = rx^{-2/3} \approx 1,53r$.

V. КАНОНИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ

Уравнения Гамильтона. Скобки Пуассона. Тождество Якоби и теорема Пуассона. Принцип наименьшего действия. Канонические преобразования. Теоремы об инвариантности скобок Пуассона и фазового объема при канонических преобразованиях. Действие как функция координат и времени. Теорема Лиувилля. Уравнение Гамильтона-Якоби. Разделение переменных. Отступление в квантовую механику: уравнение Гамильтона-Якоби как квазиклассический предел уравнения Шредингера.

§1. Уравнения Гамильтона

Основной величиной, определяющей механические свойства систем в формализме Лагранжа, является функция Лагранжа $L(q, \dot{q}, t)$. В рамках самой классической механики эта функция не имеет непосредственного физического смысла. Для решения ряда задач классической механики, а также при формулировке перехода к квантовой теории удобно работать с величинами, более тесно связанными с механическими свойствами систем. Оказывается, что уравнения движения механики можно представить в виде, в котором роль основной величины, определяющей механические свойства системы, играет обобщенная энергия системы, а в качестве независимых переменных используются обобщенные координаты и обобщенные импульсы системы. Математически такой переход осуществляется с помощью так называемого *преобразования Лежандра*, которое состоит в следующем. Построим полный дифференциал функции Лагранжа

$$dL(q, \dot{q}, t) = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial q_{\alpha}} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} d\dot{q}_{\alpha} + \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (165)$$

Величина $\partial L / \partial \dot{q}_{\alpha}$ есть, по определению, обобщенный импульс $p_{q_{\alpha}}$, соответствующий обобщенной координате q_{α} . Для краткости, обозначение $p_{q_{\alpha}}$ будет сокращаться ниже до p_{α} . С этим обозначением, а также с помощью уравнений Лагранжа равенство (165) можно переписать так:

$$dL(q, \dot{q}, t) = \sum_{\alpha=1}^s \dot{p}_{\alpha} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s p_{\alpha} d\dot{q}_{\alpha} + \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (166)$$

Правая часть уравнения (166) содержит дифференциалы независимых переменных q, \dot{q} и t . Для того чтобы перейти от этого набора к новому набору независимых переменных q, p, t , напомним тождественно

$$p_{\alpha} d\dot{q}_{\alpha} = d(p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha}) - \dot{q}_{\alpha} dp_{\alpha}, \quad \alpha = 1, \dots, s$$

и представим уравнение (166) в виде

$$d \left(\sum_{\alpha=1}^s p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - L(q, \dot{q}, t) \right) = - \sum_{\alpha=1}^s \dot{p}_{\alpha} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s \dot{q}_{\alpha} dp_{\alpha} - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (167)$$

Тот факт, что правая часть этого тождества содержит дифференциалы переменных q, p, t означает, что величина, стоящая в его левой части под знаком полного дифференциала, также может быть выражена как функция этого набора переменных. В соответствии с определением (41), эта величина численно совпадает с обобщенной энергией

системы. Выраженная через обобщенные координаты и импульсы (и время), она называется *функцией Гамильтона* системы и обозначается через $H(q, p, t)$. Таким образом, по определению, при построении функции Гамильтона переменные q, p рассматриваются как независимые переменные, аналогично тому, как в функции Лагранжа независимыми являются переменные q, \dot{q} . Для того чтобы получить эту функцию, следует разрешить определение $p = \partial L / \partial \dot{q}$ относительно \dot{q} и подставить результат в функцию $E(q, \dot{q}, t)$. Расписав явно полный дифференциал функции $H(q, p, t)$ в левой части (167), получим

$$\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} dp_{\alpha} + \frac{\partial H}{\partial t} dt = - \sum_{\alpha=1}^s \dot{p}_{\alpha} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s \dot{q}_{\alpha} dp_{\alpha} - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (168)$$

Наконец, приравнивая коэффициенты при дифференциалах независимых переменных в этом тождестве, находим следующие уравнения

$$\dot{p}_{\alpha} = - \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (169)$$

$$\dot{q}_{\alpha} = \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (170)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = - \frac{\partial L}{\partial t}. \quad (171)$$

Уравнения (169), (170) представляют собой систему $2s$ дифференциальных уравнений первого порядка для $2s$ функций $q_{\alpha}(t), p_{\alpha}(t), \alpha = 1, \dots, s$, которые заменяют s уравнений второго порядка (16) лагранжева формализма. Эти уравнения называются *уравнениями Гамильтона* или *каноническими уравнениями*.

Интегрирование уравнений Гамильтона

Для нахождения закона движения системы необходимо проинтегрировать дифференциальные уравнения (169), (170). Так же как и в формализме Лагранжа, для этого надо сначала исследовать систему на наличие законов сохранения. Если пространство однородно или изотропно по каким-либо направлениям, следует выписать соответствующие законы сохранения (33), (36), выразив левые их части через обобщенные координаты и обобщенные импульсы. В таком виде они будут представлять интегралы уравнений Гамильтона. В случае однородности задачи по времени следует записать закон сохранения обобщенной энергии (41). Как мы знаем, признаком сохранения обобщенной энергии является равенство нулю частной производной $\partial L / \partial t$. Из уравнения (171) следует, что при этом и $\partial H / \partial t = 0$. Таким образом, если функция Гамильтона системы не зависит явно от времени, то имеет место закон сохранения

$$H(q, p) = \text{const}.$$

Найденные законы сохранения следует дополнить уравнениями из набора (169), (170) так, чтобы в результате получить $2s$ независимых уравнений для $2s$ функций $q_{\alpha}(t), p_{\alpha}(t), \alpha = 1, \dots, s$ и проинтегрировать полученную систему уравнений.

Пример 14. Функция Гамильтона гармонического осциллятора. Функция Лагранжа гармонического осциллятора

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

где m, ω – масса и частота осциллятора. Обобщенный импульс осциллятора

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}.$$

Отсюда выражаем обобщенную скорость через обобщенный импульс

$$\dot{x} = \frac{p}{m}.$$

Обобщенная энергия

$$E = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Подставляя выражение для \dot{x} , находим функцию Гамильтона осциллятора

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (172)$$

Пример 15. Функция Гамильтона заряженной частицы в электромагнитном поле. Из функции Лагранжа (22) находим обобщенный импульс частицы в электромагнитном поле

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}} + \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t).$$

Отсюда

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right). \quad (173)$$

Подставляя это выражение в обобщенную энергию (45), получаем функцию Гамильтона

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + q\varphi(\mathbf{r}, t).$$

Пример 16. Гармонический осциллятор с частотой, зависящей от амплитуды. Рассмотрим одномерную систему, функция Гамильтона которой имеет вид

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \lambda \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)^2, \quad (174)$$

где m, ω, λ – постоянные положительные параметры. Найдем закон движения системы. Поскольку функция Гамильтона (174) не зависит от времени явно, то имеем закон сохранения

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \lambda \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)^2 = \text{const},$$

откуда следует, что

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = C, \quad (175)$$

с некоторой положительной постоянной C . Это уравнение связывает две неизвестных функции $x(t), p(t)$. Дополним его уравнением (170):

$$\dot{x} = \frac{\partial H(x, p)}{\partial p} = \frac{p}{m} + 2\lambda \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \frac{p}{m}.$$

Выражая здесь p через x с помощью (175), получаем дифференциальное уравнение для функции $x(t)$:

$$\dot{x} = \pm(1 + 2\lambda C) \sqrt{\frac{2C}{m} - \omega^2 x^2},$$

интегрируя которое путем разделения переменных, находим

$$x(t) = x_0 + \sqrt{\frac{2C}{m\omega^2}} \sin \{(1 + 2\lambda C)\omega(t - t_0)\}, \quad x_0 = x(t_0).$$

Этот закон описывает гармоническое колебание с частотой $\Omega = (1 + 2\lambda C)\omega$ и амплитудой $A = \sqrt{2C/m\omega^2}$. Другими словами, частота рассматриваемых колебаний зависит от их амплитуды согласно

$$\Omega = \omega(1 + \lambda m\omega^2 A^2).$$

Скобки Пуассона

Уравнения Гамильтона можно представить в формально симметричном виде, если ввести так называемую *скобку Пуассона*, определенную для двух функций обобщенных координат и обобщенных импульсов $f(q, p), g(q, p)$ (эти функции также могут зависеть от времени или от каких-либо других параметров):

$$\{f, g\} = \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \frac{\partial g}{\partial q_\alpha} - \frac{\partial f}{\partial q_\alpha} \frac{\partial g}{\partial p_\alpha} \right). \quad (176)$$

Тогда уравнения (169) и (170) могут быть переписаны в виде

$$\dot{p}_\alpha = \{H, p_\alpha\}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (177)$$

$$\dot{q}_\alpha = \{H, q_\alpha\}, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (178)$$

Действительно, учитывая независимость переменных q, p , имеем, например,

$$\{H, p_\alpha\} = \sum_{\beta=1}^s \left(\frac{\partial H}{\partial p_\beta} \frac{\partial p_\alpha}{\partial q_\beta} - \frac{\partial H}{\partial q_\beta} \frac{\partial p_\alpha}{\partial p_\beta} \right) = - \sum_{\beta=1}^s \frac{\partial H}{\partial q_\beta} \delta_{\alpha\beta} = - \frac{\partial H}{\partial q_\alpha}.$$

Заметим, что с помощью скобок Пуассона можно компактно записать выражение для полной производной по времени от произвольной функции $f(q, p, t)$, а именно, используя уравнения Гамильтона, получаем

$$\frac{df}{dt} = \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial f}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \dot{p}_\alpha \right) + \frac{\partial f}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial f}{\partial q_\alpha} \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \right) + \frac{\partial f}{\partial t},$$

или

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\} + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (179)$$

Оказывается, что значение операции, определенной в (176), простирается гораздо дальше простых соображений удобства. Скобки Пуассона обладают рядом важных свойств, для вывода которых приведем сначала несколько простых правил их вычисления, непосредственно следующих из определения. Для любых функций f, g, h , зависящих от обобщенных координат и импульсов, а также, возможно, от некоторого параметра λ (роль которого может играть, например, время t)

$$\{f, g\} = -\{g, f\}, \quad (180)$$

$$\{f + h, g\} = \{f, g\} + \{h, g\}, \quad (181)$$

$$\{fh, g\} = h\{f, g\} + f\{h, g\}, \quad (182)$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \{f, g\} = \left\{ \frac{\partial f}{\partial \lambda}, g \right\} + \left\{ f, \frac{\partial g}{\partial \lambda} \right\}. \quad (183)$$

Докажем, например, свойство (182). Имеем

$$\begin{aligned} \{fh, g\} &= \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial(fh)}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} - \frac{\partial(fh)}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} \right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^s \left(h \frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} + f \frac{\partial h}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} - h \frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} - f \frac{\partial h}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} \right) \\ &= h \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} - \frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} \right) + f \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial h}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} - \frac{\partial h}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} \right) \\ &= h\{f, g\} + f\{h, g\}. \end{aligned}$$

Докажем теперь следующее важное и нетривиальное свойство скобок Пуассона: для любых трех функций f, g, h справедливо *тождество Якоби*

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0. \quad (184)$$

Это тождество проверяется прямым вычислением. Левая его часть представляет собой сумму членов, каждый из которых пропорционален второй производной одной из функций f, g, h по переменным q, p . В силу симметрии относительно перестановки этих функций, достаточно доказать, что каждая из производных $\partial^2 f / \partial p_{\alpha} \partial p_{\beta}$, $\partial^2 f / \partial q_{\alpha} \partial q_{\beta}$, $\partial^2 f / \partial q_{\alpha} \partial p_{\beta}$ входит в левую часть (184) с нулевым коэффициентом. Проверим это, например, для вторых производных $\partial^2 f / \partial p_{\alpha} \partial p_{\beta}$. Отмечая члены, не содержащие произ-

водных $\partial^2 f / \partial p_\alpha \partial p_\beta$, многоточием, имеем

$$\begin{aligned}
\{f, \{g, h\}\} &= 0 + \dots, \\
\{g, \{h, f\}\} &= \left\{ g, -\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial h}{\partial q_\alpha} \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \right\} + \dots = -\sum_{\beta=1}^s \frac{\partial g}{\partial q_\beta} \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left(-\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial h}{\partial q_\alpha} \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \right) + \dots \\
&= \sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{\partial g}{\partial q_\beta} \frac{\partial h}{\partial q_\alpha} \frac{\partial^2 f}{\partial p_\beta \partial p_\alpha} + \dots, \\
\{h, \{f, g\}\} &= \left\{ h, \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \frac{\partial g}{\partial q_\alpha} \right\} + \dots = -\sum_{\beta=1}^s \frac{\partial h}{\partial q_\beta} \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left(\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \frac{\partial g}{\partial q_\alpha} \right) + \dots \\
&= -\sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{\partial h}{\partial q_\beta} \frac{\partial^2 f}{\partial p_\beta \partial p_\alpha} \frac{\partial g}{\partial q_\alpha} + \dots = -\sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{\partial h}{\partial q_\alpha} \frac{\partial^2 f}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} \frac{\partial g}{\partial q_\beta} + \dots.
\end{aligned}$$

Складывая эти выражения и учитывая перестановочность вторых производных, мы видим, что члены, содержащие производные $\partial^2 f / \partial p_\alpha \partial p_\beta$, действительно сокращаются.

Теперь с помощью тождества Якоби мы докажем следующее интересное утверждение, называемое *теоремой Пуассона*: Если две функции $f(q, p, t)$ и $g(q, p, t)$ являются интегралами движения, т.е. $\dot{f} = \dot{g} = 0$, то интегралом движения является и их скобка Пуассона $\{f, g\}$. *Доказательство*. Поскольку по условию теоремы f и g остаются постоянными при движении системы, то из формулы (179) следует, что

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\{H, f\}, \quad \frac{\partial g}{\partial t} = -\{H, g\}. \quad (185)$$

Вычислим полную производную по времени от $\{f, g\}$ по формуле (179):

$$\frac{d\{f, g\}}{dt} = \{H, \{f, g\}\} + \frac{\partial \{f, g\}}{\partial t}.$$

Применяя правило (183) дифференцирования скобки Пуассона по параметру и учитывая уравнения (185), получаем

$$\frac{d\{f, g\}}{dt} = \{H, \{f, g\}\} - \{\{H, f\}, g\} - \{f, \{H, g\}\},$$

или, переставляя аргументы скобок Пуассона по правилу (180),

$$\frac{d\{f, g\}}{dt} = \{H, \{f, g\}\} + \{g, \{H, f\}\} + \{f, \{g, H\}\}.$$

Правая часть последнего равенства равна нулю в силу тождества Якоби. Теорема доказана.

Вычисление скобок Пуассона

Практически наиболее удобно вычислять скобки Пуассона, последовательно упрощая их с помощью правил (180) – (182). Если хотя бы один из аргументов данной

скобки Пуассона является полиномом по обобщенным координатам и обобщенным импульсам, то в результате такого упрощения приходят к скобкам Пуассона вида $\{q_\alpha, f\}$ или $\{p_\alpha, f\}$. Из определения (176) следует, что

$$\{q_\alpha, f\} = -\frac{\partial f}{\partial p_\alpha}, \quad \{p_\alpha, f\} = \frac{\partial f}{\partial q_\alpha}. \quad (186)$$

В частности,

$$\{p_\alpha, q_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \{q_\alpha, q_\beta\} = 0, \quad \{p_\alpha, p_\beta\} = 0. \quad (187)$$

Скобки (187) называют *фундаментальными скобками Пуассона*.

Пример 17. Скобки Пуассона компонент момента импульса. Найдем скобки Пуассона x, y -компонент момента импульса частицы, предполагая, что обобщенными координатами являются декартовы компоненты ее радиус-вектора. Имеем

$$\begin{aligned} \{M_x, M_y\} &= \{(yp_z - zp_y), (zp_x - xp_z)\} \\ &= \{yp_z, zp_x\} - \{zp_y, zp_x\} - \{yp_z, xp_z\} + \{zp_y, xp_z\} \\ &= y\{p_z, z\}p_x + p_y\{z, p_z\}x. \end{aligned} \quad (188)$$

Для краткости, в последней строке здесь выписаны лишь члены, содержащие ненулевые фундаментальные скобки Пуассона. Подставляя сюда $\{p_z, z\} = -\{z, p_z\} = 1$, находим

$$\{M_x, M_y\} = yp_x - p_yx = -M_z.$$

Аналогично можно получить формулы

$$\{M_y, M_z\} = -M_x, \quad \{M_z, M_x\} = -M_y.$$

Из этих формул и теоремы Пуассона следует, что если проекции момента импульса на какие-либо две декартовы оси (инерциальной) системы отсчета сохраняются, то сохраняется также и его проекция на третью ось.

Пример 18. Скобки Пуассона компонент скорости частицы в электромагнитном поле. Рассмотрим, далее, заряженную частицу в электромагнитном поле и вычислим скобки Пуассона компонент вектора ее скорости \mathbf{v} , например, $\{v_x, v_y\}$. Для этого необходимо сначала выразить компоненты вектора \mathbf{v} через обобщенные координаты и обобщенные импульсы частицы с помощью формулы (173). Выписывая опять лишь нетривиальные скобки Пуассона, получаем

$$\begin{aligned} \{v_x, v_y\} &= \left\{ \frac{1}{m} \left(p_x - \frac{q}{c} A_x(\mathbf{r}, t) \right), \frac{1}{m} \left(p_y - \frac{q}{c} A_y(\mathbf{r}, t) \right) \right\} \\ &= -\frac{q}{m^2 c} [\{A_x(\mathbf{r}, t), p_y\} + \{p_x, A_y(\mathbf{r}, t)\}] \\ &= \frac{q}{m^2 c} \left[\frac{\partial A_x(\mathbf{r}, t)}{\partial y} - \frac{\partial A_y(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \right], \end{aligned} \quad (189)$$

или, используя обозначение (25),

$$\{v_x, v_y\} = -\frac{q}{m^2 c} H_z.$$

§2. Принцип наименьшего действия

Аналогично тому, как уравнения Лагранжа могут быть получены из принципа минимальности действия (47), так и уравнения Гамильтона могут быть получены из условия минимальности следующего функционала действия

$$S[q(t), p(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{\alpha=1}^s p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - H(q, p, t) \right) dt, \quad (190)$$

в котором по-прежнему предполагаются фиксированными значения обобщенных координат в начальный и конечный моменты времени:

$$q_{\alpha}(t_1) = q_{\alpha}^{(1)}, \quad q_{\alpha}(t_2) = q_{\alpha}^{(2)}, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (191)$$

причем при отыскании минимума действия $S[q(t), p(t)]$ функции $p(t)$ варьируются независимо от функций $q(t)$, что и отражено добавлением второго аргумента в обозначении функционала действия.

Вывод уравнений Гамильтона из принципа наименьшего действия вполне аналогичен выводу уравнений Лагранжа, подробно разобранному в II §3. Пусть функционал $S[q(t), p(t)]$ принимает наименьшее значение на функциях $\bar{q}(t)$, $\bar{p}(t)$, где $\bar{q}(t)$ удовлетворяют условиям (191). Рассмотрим виртуальную траекторию, описываемую функциями $\bar{q}(t) + \delta q(t)$, $\bar{p}(t)$, где малые функции $\delta q(t)$ удовлетворяют условиям

$$\delta q_{\alpha}(t_1) = \delta q_{\alpha}(t_2) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (192)$$

При этом действие получает приращение

$$\delta S = S[\bar{q}(t) + \delta q(t), \bar{p}(t)] - S[\bar{q}(t), \bar{p}(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_{\alpha} \delta(\dot{q}_{\alpha}) - \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_{\alpha}} \Big|_{q=\bar{q}} \delta q_{\alpha} \right) dt.$$

Используя уравнение (29) и интегрируя по частям, получаем

$$\delta S = \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_{\alpha} \delta q_{\alpha} \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \left(\dot{\bar{p}}_{\alpha} + \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_{\alpha}} \Big|_{q=\bar{q}} \right) \delta q_{\alpha} dt.$$

Поскольку правая часть уравнения (190) линейна по вариации $\delta q(t)$, необходимым условием минимума действия является $\delta S = 0$. Первый член в правой части (193) равен нулю в силу условий (192), интегральный же член может быть равен нулю, только если равны нулю множители при всех независимых произвольных вариациях δq_{α} , $\alpha = 1, \dots, s$:

$$\dot{\bar{p}}_{\alpha} + \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_{\alpha}} \Big|_{q=\bar{q}} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

Таким образом, функции $\bar{q}(t)$, $\bar{p}(t)$ должны удовлетворять первым s уравнениям Гамильтона (169).

Рассмотрим теперь вариацию действия при переходе от траектории $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$ к близкой виртуальной траектории $\bar{q}(t), \bar{p}(t) + \delta p(t)$, где $\delta p(t)$ – произвольные малые функции времени:

$$\delta S = S[\bar{q}(t), \bar{p}(t) + \delta p(t)] - S[\bar{q}(t), \bar{p}(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \left(\dot{\bar{q}}_{\alpha} - \frac{\partial H(\bar{q}, p, t)}{\partial p_{\alpha}} \Big|_{p=\bar{p}} \right) \delta p_{\alpha} dt. \quad (193)$$

Снова необходимым условием минимальности действия является обращение правой части равенства (193) в нуль, откуда ввиду независимости и произвольности вариаций δp_{α} , $\alpha = 1, \dots, s$ следует, что функции $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$ должны удовлетворять уравнениям

$$\dot{\bar{q}}_{\alpha} - \frac{\partial H(\bar{q}, p, t)}{\partial p_{\alpha}} \Big|_{p=\bar{p}} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s,$$

т.е. оставшимся s уравнениям Гамильтона (170).

§3. Канонические преобразования

Как было установлено в I §3, уравнения Лагранжа ковариантны относительно преобразований обобщенных координат, т.е. имеют один и тот же вид при любом их выборе. Отсюда следует, что и уравнения Гамильтона также ковариантны, поскольку по построению они имеют один и тот же вид (169), (170) независимо от конкретного выбора обобщенных координат. С другой стороны, как мы видели в предыдущем пункте, в гамильтоновой формулировке принципа наименьшего действия функции $p(t)$, заменяющие обобщенные скорости $\dot{q}(t)$ лагранжева формализма, являются независимыми от функций $q(t)$. Этот факт позволяет расширить понятие преобразования переменных в гамильтоновом формализме, включив в него наряду с преобразованиями обобщенных координат также и преобразования обобщенных импульсов системы. Итак, в общем случае такое преобразование имеет вид

$$Q_{\alpha} = Q_{\alpha}(q, p, t), \quad P_{\alpha} = P_{\alpha}(q, p, t), \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (194)$$

где q, p и Q, P – наборы старых и новых обобщенных координат и обобщенных импульсов, соответственно. Из всех таких преобразований особый интерес представляют преобразования, относительно которых уравнения Гамильтона *ковариантны*. Именно, назовем преобразование (194) *каноническим*, если в новых переменных Q, P уравнения движения имеют канонический вид

$$\dot{P}_{\alpha} = -\frac{\partial H'}{\partial Q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (195)$$

$$\dot{Q}_{\alpha} = \frac{\partial H'}{\partial P_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (196)$$

с некоторой новой функцией Гамильтона $H' = H'(Q, P, t)$.

Гамильтонова формулировка принципа наименьшего действия, изложенная в предыдущем пункте, дает возможность очень просто выделить важный и широкий подкласс

канонических преобразований. Как мы видели, уравнения Гамильтона (195), (196) могут быть получены из условия минимальности действия

$$S'[Q(t), P(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{\alpha=1}^s P_{\alpha} \dot{Q}_{\alpha} - H'(Q, P, t) \right) dt, \quad (197)$$

при условии

$$Q_{\alpha}(t_1) = Q_{\alpha}^{(1)}, \quad Q_{\alpha}(t_2) = Q_{\alpha}^{(2)}, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (198)$$

Допустим, что нам удалось задать такое соотношение между двумя функционалами $S[q(t), p(t)]$ и $S'[Q(t), P(t)]$, что если $S[q(t), p(t)]$ принимает минимальное значение на функциях $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$, то $S'[Q(t), P(t)]$ принимает минимальное значение на функциях $\bar{Q}(t), \bar{P}(t)$, связанных с $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$ соотношениями вида (194), и наоборот. Поскольку уравнения Гамильтона получаются именно из условия минимальности действия, то это означало бы, что при преобразовании (194) уравнения (169), (170) переходят в уравнения (195), (196), т.е. как раз ковариантность уравнений Гамильтона.

Свяжем теперь функционалы $S[q(t), p(t)]$ и $S'[Q(t), P(t)]$ следующим соотношением

$$S[q(t), p(t)] = S'[Q(t), P(t)] + \int_{t_1}^{t_2} \frac{dF(q, Q, t)}{dt} dt, \quad (199)$$

с некоторой функцией $F(q, Q, t)$ старых и новых обобщенных координат. Это соотношение задает желаемое соответствие между минимумами функционалов $S[q(t), p(t)]$ и $S'[Q(t), P(t)]$. Действительно, второй член в его правой части можно переписать так:

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{dF(q, Q, t)}{dt} dt = F(q, Q, t)|_{t_1}^{t_2} = F(q^{(2)}, Q^{(2)}, t_2) - F(q^{(1)}, Q^{(1)}, t_1). \quad (200)$$

В силу условий (191), (198) правая часть последнего равенства представляет собой некоторую фиксированную постоянную, значение которой не зависит от выбора виртуальной траектории на промежутке $t \in [t_1, t_2]$, и поэтому из минимальности действия S следует минимальность S' , и наоборот.

Равенство (199) будет выполняться для всех моментов времени t_1, t_2 , только если подынтегральные выражения в обоих его частях тождественно совпадают:

$$\sum_{\alpha=1}^s p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - H(q, p, t) = \sum_{\alpha=1}^s P_{\alpha} \dot{Q}_{\alpha} - H'(Q, P, t) + \frac{dF(q, Q, t)}{dt}.$$

Последнее равенство может быть также переписано в виде соотношения для дифференциалов

$$\sum_{\alpha=1}^s p_{\alpha} dq_{\alpha} - H(q, p, t) dt = \sum_{\alpha=1}^s P_{\alpha} dQ_{\alpha} - H'(Q, P, t) dt + dF(q, Q, t). \quad (201)$$

Подставляя сюда выражение для дифференциала функции $F(q, Q, t)$

$$dF(q, Q, t) = \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial F}{\partial q_{\alpha}} dq_{\alpha} + \frac{\partial F}{\partial Q_{\alpha}} dQ_{\alpha} \right) + \frac{\partial F}{\partial t} dt,$$

и приравнявая коэффициенты при независимых дифференциалах dq_{α} , dQ_{α} и dt , получим формулы перехода от набора переменных q, p к Q, P в виде

$$p_{\alpha} = \frac{\partial F}{\partial q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (202)$$

$$P_{\alpha} = -\frac{\partial F}{\partial Q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (203)$$

$$H' = H + \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (204)$$

Таким образом, канонические преобразования рассматриваемого типа определяются заданием некоторой функции старых и новых обобщенных координат системы и времени, в связи с чем эту функцию называют *производящей функцией* канонического преобразования.

То же самое преобразование можно также задать с помощью производящей функции, зависящей от старых координат и новых импульсов (и времени). Для этого совершим в уравнении (201) преобразование Лежандра от переменных q, P, t к переменным q, Q, t , написав тождественно в его правой части

$$P_{\alpha} dQ_{\alpha} = d(P_{\alpha} Q_{\alpha}) - Q_{\alpha} dP_{\alpha}.$$

Получим

$$\sum_{\alpha=1}^s (p_{\alpha} dq_{\alpha} + Q_{\alpha} dP_{\alpha}) + (H' - H) dt = d \left(F(q, Q, t) + \sum_{\alpha=1}^s P_{\alpha} Q_{\alpha} \right). \quad (205)$$

Обозначим величину, стоящую под знаком полного дифференциала в правой части этого тождества через Φ и выразим ее через переменные q, P, t с помощью уравнений (202), (203):

$$\Phi(q, P, t) = \left[F(q, Q, t) + \sum_{\alpha=1}^s P_{\alpha} Q_{\alpha} \right]_{Q=Q(q, P, t)}.$$

Подставляя выражение для дифференциала этой функции

$$d\Phi(q, P, t) = \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial \Phi}{\partial q_{\alpha}} dq_{\alpha} + \frac{\partial \Phi}{\partial P_{\alpha}} dP_{\alpha} \right) + \frac{\partial \Phi}{\partial t} dt$$

в уравнение (205) и приравнявая коэффициенты при независимых дифференциалах dq_{α} , dP_{α} , dt , получим формулы канонического преобразования в виде

$$p_{\alpha} = \frac{\partial \Phi}{\partial q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (206)$$

$$Q_{\alpha} = \frac{\partial \Phi}{\partial P_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (207)$$

$$H' = H + \frac{\partial \Phi}{\partial t}. \quad (208)$$

Аналогичным образом можно было бы задать переход $q, p \rightarrow Q, P$ помощью производящей функции, зависящей от переменных p, Q или p, P .

Пример 19. Точечные преобразования. Рассмотрим каноническое преобразование, задаваемое производящей функцией

$$\Phi(q, P, t) = \sum_{\alpha=1}^s f_{\alpha}(q) P_{\alpha}, \quad (209)$$

где $f_{\alpha}(q)$ – некоторые функции. По формулам (206) – (208) находим

$$p_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^s \frac{\partial f_{\beta}(q)}{\partial q_{\alpha}} P_{\beta}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (210)$$

$$Q_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^s f_{\beta}(q) \frac{\partial P_{\beta}}{\partial P_{\alpha}} = \sum_{\beta=1}^s f_{\beta}(q) \delta_{\alpha\beta} = f_{\alpha}(q), \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (211)$$

$$H' = H. \quad (212)$$

Уравнение (211) показывает, что канонические преобразования, порождаемые функциями вида (209) являются не чем иным, как обычными заменами обобщенных координат $q \rightarrow f(q)$, с которыми мы имели дело в лагранжевом формализме (их обычно называют *точечными*).

Пример 20. Гармонический осциллятор. Совершим каноническое преобразование переменных линейного гармонического осциллятора [см. пример 14], задаваемое производящей функцией

$$F(x, Q, t) = \frac{m\omega x^2}{2} \operatorname{ctg} Q.$$

По формулам (202) – (204) находим

$$p = \frac{\partial F}{\partial x} = m\omega x \operatorname{ctg} Q, \quad P = -\frac{\partial F}{\partial Q} = \frac{m\omega x^2}{2} \frac{1}{\sin^2 Q}, \quad H' = H.$$

Отсюда

$$x = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}} \sin Q, \quad p = \sqrt{2Pm\omega} \sin Q. \quad (213)$$

Подставляя эти выражения в старую функцию Гамильтона (172), получаем новую функцию Гамильтона в виде

$$H' = \omega P.$$

Уравнения Гамильтона в новых переменных

$$\dot{P} = -\frac{\partial H'}{\partial Q} = 0, \quad \dot{Q} = \frac{\partial H'}{\partial P} = \omega.$$

Их решением является

$$P = P_0, \quad Q = \omega t + Q_0,$$

где P_0, Q_0 – некоторые постоянные. Подставляя его в (213), получаем закон движения в исходных координатах

$$x(t) = \sqrt{\frac{2P_0}{m\omega}} \sin(\omega t + Q_0).$$

§4. Бесконечно-малые канонические преобразования

Любое преобразование переменных, в том числе и каноническое, можно представить как последовательность большого числа преобразований, каждое из которых близко к тождественному. Для таких преобразований многие формулы и доказательства существенно упрощаются. Рассмотрим каноническое преобразование, задаваемое производящей функцией

$$\Phi(q, P, t) = \sum_{\alpha=1}^s q_{\alpha} P_{\alpha} + \phi(q, P, t).$$

Согласно формулам (206) – (208)

$$p_{\alpha} = P_{\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (214)$$

$$Q_{\alpha} = q_{\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial P_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (215)$$

$$H' = H + \frac{\partial \phi}{\partial t}.$$

Видно, что если функция $\phi(q, P, t)$ является малой, то старые и новые переменные мало отличаются друг от друга. В этом случае формулы перехода можно переписать в компактном виде с помощью скобок Пуассона. Для этого заметим, что поскольку $\phi(q, P, t)$ мала, то пренебрегая величинами порядка $O(\phi^2)$ ее аргумент P можно заменить на p . Например, производные $\partial \phi(q, P, t)/\partial P$ можно заменить на $\partial \phi(q, p, t)/\partial p$. Тогда используя формулы (186), перепишем формулы перехода от старых переменных к новым в виде

$$P_{\alpha} = p_{\alpha} + \{\phi, p_{\alpha}\}_{q,p}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (216)$$

$$Q_{\alpha} = q_{\alpha} + \{\phi, q_{\alpha}\}_{q,p}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (217)$$

где нижний индекс у скобок Пуассона указывает переменные, относительно которых они определены. Заметим, что преобразование произвольной функции $F(Q, P)$ также можно представить в аналогичном виде, а именно, имеем

$$F(Q, P) = F\left(q + \frac{\partial \phi}{\partial p}, p - \frac{\partial \phi}{\partial q}\right) = F(q, p) + \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial F}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial \phi}{\partial p_{\alpha}} - \frac{\partial F}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial \phi}{\partial q_{\alpha}} \right),$$

т.е.

$$F(Q, P) = F(q, p) + \{\phi, F\}_{q,p}. \quad (218)$$

Теорема об инвариантности скобок Пуассона

Рассмотрим две произвольные функции обобщенных координат и обобщенных импульсов F, G . Оказывается, что если преобразование от переменных q, p к Q, P является каноническим, то значение величины $\{F, G\}$ не зависит от того, вычисляется ли она по старым переменным или по новым, т.е.

$$\{F, G\}_{q,p} = \{F, G\}_{Q,P}.$$

Доказательство. Будем рассматривать F и G как функции новых переменных и рассмотрим скобки Пуассона $\{F(Q, P), G(Q, P)\}_{q,p}$. Используя формулу (218) и пренебрегая величинами порядка $O(\phi^2)$, эти скобки можно преобразовать так:

$$\begin{aligned} \{F(Q, P), G(Q, P)\}_{q,p} &= \{F(q, p) + \{\phi, F\}_{q,p}, G(q, p) + \{\phi, G\}_{q,p}\}_{q,p} \\ &= \{F(q, p), G(q, p)\}_{q,p} + \{F, \{\phi, G\}_{q,p}\}_{q,p} + \{\{\phi, F\}_{q,p}, G\}_{q,p} \\ &= \{F(q, p), G(q, p)\}_{q,p} + \{F, \{\phi, G\}_{q,p}\}_{q,p} + \{G, \{F, \phi\}_{q,p}\}_{q,p}. \end{aligned}$$

Согласно тождеству Якоби, сумма второго и третьего членов в последнем выражении равна $-\{\phi, \{G, F\}\}_{q,p}$. Таким образом,

$$\{F(Q, P), G(Q, P)\}_{q,p} = \{F(q, p), G(q, p)\}_{q,p} + \{\phi, \{F, G\}\}_{q,p}.$$

В силу формулы (218) правая часть этого равенства есть в точности $\{F(Q, P), G(Q, P)\}_{Q,P}$, что и доказывает инвариантность скобок Пуассона.

Теорема об инвариантности фазового объема

Рассмотрим систему, имеющую s степеней свободы и введем $2s$ -мерное пространство, снабженное декартовой системой координат, по осям которой откладываются значения обобщенных координат и обобщенных импульсов системы. Это пространство называют *фазовым пространством* системы. Каждая его точка определяет некоторое состояние системы. Действительно, согласно определению, данному в главе I, состояние системы в некоторый момент времени определяется значениями ее обобщенных координат и обобщенных скоростей в этот момент, обобщенные же скорости взаимно-однозначно связаны с обобщенными импульсами соотношениями $p_\alpha = \partial L / \partial \dot{q}_\alpha$, $\alpha = 1, \dots, s$.

Рассмотрим некоторую область g фазового пространства и определим ее *объем* γ :

$$\gamma = \int_g d\gamma, \quad d\gamma = \prod_{\alpha=1}^s dq_\alpha dp_\alpha. \quad (219)$$

Рассмотрим, далее, произвольное каноническое преобразование от переменных q, p к новым переменным Q, P . Область в фазовом пространстве, образованном новыми переменными, на которую отображается область g , обозначим через G . Определим объем Γ этой области формулой, аналогичной (219):

$$\Gamma = \int_G d\Gamma, \quad d\Gamma = \prod_{\alpha=1}^s dQ_\alpha dP_\alpha.$$

Оказывается, что имеет место равенство

$$\gamma = \Gamma. \quad (220)$$

Доказательство достаточно провести для бесконечно-малого канонического преобразования. Согласно известной формуле замены переменных интегрирования в кратном интеграле,

$$\int_G d\Gamma = \int_g J d\gamma,$$

где J есть якобиан преобразования от переменных q, p к переменным Q, P . Он представляет собой определитель матрицы, составленной из частных производных новых координат по старым:

$$J = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial Q_1}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial Q_1}{\partial q_s} & \frac{\partial Q_1}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial Q_1}{\partial p_s} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial Q_s}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial Q_s}{\partial q_s} & \frac{\partial Q_s}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial Q_s}{\partial p_s} \\ \frac{\partial P_1}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial P_1}{\partial q_s} & \frac{\partial P_1}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial P_1}{\partial p_s} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial P_s}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial P_s}{\partial q_s} & \frac{\partial P_s}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial P_s}{\partial p_s} \end{pmatrix}$$

Для бесконечно-малого преобразования (216), (217) эта матрица отличается от единичной на члены порядка $O(\phi)$. Если элементы некоторой матрицы A имеют вид $A_{ik} = \delta_{ik} + a_{ik}$, $i, k = 1, \dots, n$, где все величины a_{ik} малы, то, пренебрегая величинами порядка $O(a^2)$, имеем для ее определителя:

$$\det(\delta_{ik} + a_{ik}) = 1 + \sum_{i=1}^n a_{ii}.$$

Применяя эту формулу к матрице якобиана преобразования (216), (217), находим

$$J = 1 + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial\{\phi, q_\alpha\}}{\partial q_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial\{\phi, p_\alpha\}}{\partial p_\alpha} = 1 + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial^2 \phi}{\partial q_\alpha \partial p_\alpha} - \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial^2 \phi}{\partial p_\alpha \partial q_\alpha} = 1,$$

что и доказывает равенство (220).

§5. Действие как функция координат и времени. Теорема Лиувилля. Уравнение Гамильтона-Якоби

Как мы видели в II §4, значение функционала действия на действительной траектории имеет важный физический смысл – оно определяет амплитуду перехода системы в квазиклассическом случае. Теперь мы займемся более подробным изучением этой величины.

Полагая в $q(t) = \bar{q}(t)$, $p(t) = \bar{p}(t)$ функционале $S[q(t), p(t)]$, мы получим некоторую функцию параметров $q^{(1)}, t_1, q^{(2)}, t_2$, которые определяют действительную траекторию. Обозначим эту функцию через $S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2)$. Структуру этой функции можно определить, исследуя как меняется величина действия при малом изменении какого-либо из параметров $q^{(1)}, t_1, q^{(2)}, t_2$.

Зависимость действия от координат

Рассмотрим две близкие действительные траектории системы, одна из которых определяется условиями (46), а другая – условиями

$$q_\alpha(t_1) = q_\alpha^{(1)}, \quad q_\alpha(t_2) = q_\alpha^{(2)} + \delta q_\alpha^{(2)}, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (221)$$

Функции, описывающие эти траектории, обозначим соответственно через $[\bar{q}(t), \bar{p}(t)]$ и $[\bar{q}(t) + \delta\bar{q}(t), \bar{p}(t) + \delta\bar{p}(t)]$. Другими словами, в обоих случаях система выходит из точки с координатами $q^{(1)}$ в момент времени t_1 , но в момент времени t_2 приходит в точки, разность координат которых равна $\delta q^{(2)}$. Разность значений функционала действия (190) для этих двух траекторий есть

$$\begin{aligned} & S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)} + \delta q^{(2)}, t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \left(\bar{p}_\alpha \delta \dot{\bar{q}}_\alpha + \dot{\bar{q}}_\alpha \delta \bar{p}_\alpha - \left. \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_\alpha} \right|_{q=\bar{q}} \delta \bar{q}_\alpha - \left. \frac{\partial H(\bar{q}, p, t)}{\partial p_\alpha} \right|_{p=\bar{p}} \delta \bar{p}_\alpha \right) dt \\ &= \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha \delta \bar{q}_\alpha \Big|_{t_1}^{t_2} + \sum_{\alpha=1}^s \int_{t_1}^{t_2} \left(- \left[\dot{\bar{p}}_\alpha + \left. \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_\alpha} \right|_{q=\bar{q}} \right] \delta \bar{q}_\alpha + \left[\dot{\bar{q}}_\alpha - \left. \frac{\partial H(\bar{q}, p, t)}{\partial p_\alpha} \right|_{p=\bar{p}} \right] \delta \bar{p}_\alpha \right) dt. \end{aligned}$$

Интегральный член в последнем выражении тождественно равен нулю, поскольку траектория $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$ – действительная, т.е. удовлетворяет уравнениям Гамильтона (169), (170). Поэтому с учетом условий (221) находим

$$S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)} + \delta q^{(2)}, t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha(t_2) \delta q_\alpha^{(2)}. \quad (222)$$

С другой стороны, согласно определению частной производной

$$S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)} + \delta q^{(2)}, t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \frac{\partial S}{\partial q^{(2)}} \delta q^{(2)}.$$

Подставляя это в уравнение (222) и сравнивая коэффициенты при независимых вариациях $\delta q_\alpha^{(2)}$, $\alpha = 1, \dots, s$, получаем

$$\frac{\partial S}{\partial q_\alpha^{(2)}} = \bar{p}_\alpha(t_2), \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (223)$$

Аналогичным образом можно вывести соотношение

$$\frac{\partial S}{\partial q_\alpha^{(1)}} = -\bar{p}_\alpha(t_1), \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (224)$$

Зависимость действия от времени

Рассмотрим теперь две близкие траектории, одна из которых по-прежнему определяется условиями (46), а другая – условиями

$$q_\alpha(t_1) = q_\alpha^{(1)}, \quad q_\alpha(t_2 + \delta t_2) = q_\alpha^{(2)}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (225)$$

снова обозначая функции, описывающие эти траектории, эти траектории через $[\bar{q}(t), \bar{p}(t)]$ и $[\bar{q}(t) + \delta\bar{q}(t), \bar{p}(t) + \delta\bar{p}(t)]$, соответственно. Другими словами, в обоих случаях система выходит из точки с координатами $q^{(1)}$ в момент времени t_1 , но в точку

с координатами $q^{(2)}$ приходит с разницей во времени, равной δt_2 . Соответствующая разность в величине действия есть

$$S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2 + \delta t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \int_{t_1}^{t_2 + \delta t_2} \left(\sum_{\alpha=1}^s (\bar{p}_\alpha + \delta \bar{p}_\alpha) (\dot{\bar{q}}_\alpha + \delta \dot{\bar{q}}_\alpha) - H(\bar{q} + \delta \bar{q}, \bar{p} + \delta \bar{p}, t) \right) dt - \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha \dot{\bar{q}}_\alpha - H(\bar{q}, \bar{p}, t) \right) dt.$$

Разлагая первый интеграл по δt_2 с помощью формулы Ньютона-Лейбница, находим

$$S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2 + \delta t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \left(\sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha \dot{\bar{q}}_\alpha - \bar{H} \right)_{t=t_2} \delta t_2 + \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \left(\bar{p}_\alpha \delta \dot{\bar{q}}_\alpha + \dot{\bar{q}}_\alpha \delta \bar{p}_\alpha - \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_\alpha} \Big|_{q=\bar{q}} \delta \bar{q}_\alpha - \frac{\partial H(\bar{q}, p, t)}{\partial p_\alpha} \Big|_{p=\bar{p}} \delta \bar{p}_\alpha \right) dt,$$

где $\bar{H} \equiv H(\bar{q}, \bar{p}, t)$ есть значение функции Гамильтона на действительной траектории. Преобразуя интегральный член как и выше с помощью интегрирования по частям и учитывая, что $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$ удовлетворяют уравнения Гамильтона, получаем

$$S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2 + \delta t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \left(\sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha \dot{\bar{q}}_\alpha - \bar{H} \right)_{t=t_2} \delta t_2 + \left[\sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha \delta \bar{q}_\alpha \right]_{t_1}^{t_2}.$$

Для определения величины $\delta \bar{q}(t_2)$ запишем условие (225) для функции $\bar{q}(t) + \delta \bar{q}(t)$:

$$(\bar{q}_\alpha + \delta \bar{q}_\alpha)(t_2 + \delta t_2) = q_\alpha^{(2)},$$

откуда, разлагая левую часть равенства по малому δt_2 , найдем

$$\bar{q}_\alpha(t_2) + \dot{\bar{q}}_\alpha(t_2) \delta t_2 + \delta \bar{q}_\alpha(t_2) = q_\alpha^{(2)}.$$

Учитывая, что в силу условий (46) для функции $\bar{q}(t)$

$$\bar{q}_\alpha(t_2) = q_\alpha^{(2)},$$

получаем

$$\delta \bar{q}_\alpha(t_2) = -\dot{\bar{q}}_\alpha(t_2) \delta t_2.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} & S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2 + \delta t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) \\ &= \left(\sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha(t_2) \dot{\bar{q}}_\alpha(t_2) - \bar{H}(t_2) \right) \delta t_2 - \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha(t_2) \dot{\bar{q}}_\alpha(t_2) \delta t_2 = -\bar{H}(t_2) \delta t_2, \end{aligned} \quad (226)$$

С другой стороны, согласно определению частной производной

$$S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2 + \delta t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \frac{\partial S}{\partial t_2} \delta t_2.$$

Подставляя это в уравнение (226) и сокращая на δt_2 , получаем

$$\frac{\partial S}{\partial t_2} = -\bar{H}(t_2). \quad (227)$$

Аналогично выводится соотношение

$$\frac{\partial S}{\partial t_1} = \bar{H}(t_1). \quad (228)$$

Теорема Лиувилля

Рассмотрим некоторую область g в фазовом пространстве данной системы. Как мы знаем, каждая точка этой области определяет некоторое состояние системы. Будем считать, что все эти состояния заданы в момент времени t_1 и рассмотрим их эволюцию за фиксированный промежуток времени $t_2 - t_1 = t$. По его истечении каждое состояние $(q^{(1)}, p^{(1)}) \in g$ перейдет в некоторое конечное состояние $(q^{(2)}, p^{(2)})$, так что область g отобразится на некоторую новую область G фазового пространства системы (см. Рис. 10). Выясним, как соотносятся фазовые объемы этих областей. Для этого заметим, что соотношения (223), (224), (227), (228) эквивалентны следующему выражению для полного дифференциала действия как функции координат и времени:

$$dS(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \sum_{\alpha=1}^s [\bar{p}_\alpha(t_2) dq_\alpha^{(2)} - \bar{p}_\alpha(t_1) dq_\alpha^{(1)}] - \bar{H}(t_2) dt_2 + \bar{H}(t_1) dt_1. \quad (229)$$

Учитывая, что при фиксированном t

$$dt_2 = dt_1,$$

перепишем уравнение (229) в виде

$$\sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha(t_1) dq_\alpha^{(1)} - \bar{H}(t_1) dt_1 = \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha(t_2) dq_\alpha^{(2)} - \bar{H}(t_2) dt_1 - dS(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_1 + t). \quad (230)$$

Поскольку конечное состояние системы однозначно определяется начальным, соответствие между точками областей g, G можно рассматривать как преобразование координат $(q^{(1)}, p^{(1)}) \rightarrow (q^{(2)}, p^{(2)})$. Сравнение уравнений (201) (230) показывает тогда, что это преобразование является каноническим с производящей функцией

$$F(q^{(1)}, q^{(2)}, t_1) = -S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_1 + t),$$

причем $q^{(1)}, p^{(1)}$ играют роль старых обобщенных координат и обобщенных импульсов, а $q^{(2)}, p^{(2)}$ – новых. С другой стороны, выше было доказано, что фазовый объем инвариантен относительно канонических преобразований. Таким образом, мы приходим к выводу, что объемы областей g и G равны, т.е. фазовый объем сохраняется при движении системы. Этот результат, называемый *теоремой Лиувилля*, играет важнейшую роль в статистической физике.

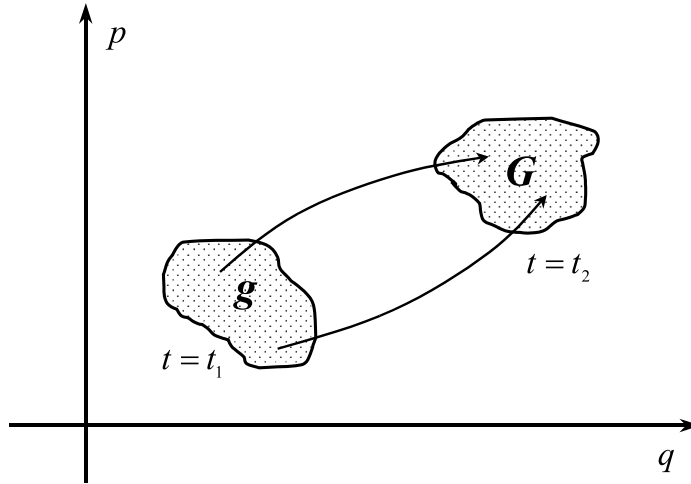


Рис. 10: Эволюция области в фазовом пространстве в случае одномерной системы.

Уравнение Гамильтона-Якоби

Соотношения (223), (227) позволяют записать замкнутое уравнение для функции $S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2)$. Для этого зафиксируем момент времени t_1 и начальные координаты $q^{(1)}$ и будем рассматривать зависимость действия лишь от параметров $t_2, q^{(2)}$, обозначая их для краткости просто t, q . Соответственно, обозначение $S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2)$ сократим до $S(q, t)$. Поскольку в дальнейшем все величины вычисляются на действительной траектории, черта над q, p, H будет опускаться. Выражая аргументы p функции Гамильтона в правой части (227) через производные от действия с помощью (223), приходим к уравнению Гамильтона-Якоби

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) = 0. \quad (231)$$

Уравнение (231) является нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных первого порядка для действия $S(q, t)$, являющегося функцией от $s + 1$ независимых переменных: s координат q_α и времени t . Оказывается, что уравнение Гамильтона-Якоби вполне эквивалентно уравнениям Гамильтона (или Лагранжа), в том смысле что решениями этого уравнения определяется также и закон движения системы. Однако для этого подходит далеко не всякое решение. Например, уравнение (231) имеет такое малоинтересное решение: $S(q, t) = A$ с произвольной постоянной A . Выделим нужный нам класс решений следующим определением: *полным интегралом* уравнения Гамильтона-Якоби для системы с s степенями свободы называется его решение, содержащее ровно $s + 1$ независимых произвольных постоянных интегрирования. Одной из этих постоянных будет аддитивная постоянная, поскольку S входит в уравнение (231) только через свои производные, так что если некоторое $S(q, t)$ является его решением, то решением является и $S'(q, t) = S(q, t) + A$. Полный интеграл будем обозначать через $S(q, C, t) + A$, где $C = \{C_\alpha\}, \alpha = 1, \dots, s$ есть набор s независимых произвольных постоянных.

Покажем теперь каким образом можно найти закон движения системы, если известен полный интеграл уравнения Гамильтона-Якоби. Для этого совершим канониче-

ское преобразование переменных $q, p \rightarrow Q, P$, выбрав в качестве производящей функции $\Phi(q, P, t) = S(q, P, t)$. Другими словами, функциональная зависимость действия от $C_\alpha, \alpha = 1, \dots, s$ рассматривается как зависимость от новых обобщенных импульсов $P_\alpha, \alpha = 1, \dots, s$. Такое рассмотрение допустимо, т.к. постоянные C по условию независимы и произвольны. Тогда согласно формулам перехода (206) – (208) будем иметь

$$p_\alpha = \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (232)$$

$$Q_\alpha = \frac{\partial S}{\partial P_\alpha}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (233)$$

$$H' = H + \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (234)$$

Поскольку S удовлетворяет уравнению (231), то новая функция Гамильтона $H' \equiv 0$. Поэтому уравнения Гамильтона в новых переменных Q, P имеют следующий простой вид

$$\dot{P}_\alpha = -\frac{\partial H'}{\partial Q_\alpha} = 0, \quad (235)$$

$$\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial H'}{\partial C_\alpha} = 0. \quad (236)$$

Из уравнения (235) следует постоянство новых импульсов $P_\alpha, \alpha = 1, \dots, s$ (эти постоянные мы будем по-прежнему обозначать через C_α), а из уравнения (236) – постоянство новых координат $Q_\alpha, \alpha = 1, \dots, s$. Учитывая это обстоятельство, вернемся снова к уравнениям (232) – (233). Первое из этих уравнений воспроизводит соотношение (223), определяющее обобщенные импульсы в данной точке траектории по действию системы. Второе же связывает обобщенные координаты системы и время, т.е. определяет закон движения системы.

Итак, сформулируем общий алгоритм решения основной задачи механики в методе Гамильтона-Якоби.

- а. По функции Лагранжа системы построить ее функцию Гамильтона [см. V §1].
- б. С помощью найденной функции Гамильтона записать уравнение Гамильтона-Якоби (231).
- в. Найти решение этого уравнения $S(q, C, t) + A$, содержащее независимые произвольные постоянные C (помимо аддитивной постоянной A) в числе, равном числу степеней свободы системы.
- г. Продифференцировать найденную функцию $S(q, C, t)$ по произвольным постоянным C , приравнивая результаты дифференцирования новым произвольным постоянным Q :

$$\frac{\partial S(q, C, t)}{\partial C_\alpha} = Q_\alpha \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

Полный интеграл уравнения Гамильтона-Якоби может быть найден в квадратурах в случае так называемых *разделяющихся переменных*. Перепишем уравнение (231) схематически в виде

$$F\left(q_1, \dots, q_s, t, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_s}, \frac{\partial S}{\partial t}\right) = 0. \quad (237)$$

Пусть какая-либо из независимых переменных, скажем q_1 , входит в это уравнение вместе с соответствующей производной $\partial S/\partial q_1$ в некоторой комбинации, не содержащей явно других переменных (неявно в S входят все переменные). Это означает, что уравнение (237) имеет специальный вид

$$F\left(f\left(q_1, \frac{\partial S}{\partial q_1}\right), q_2, \dots, q_s, t, \frac{\partial S}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_s}, \frac{\partial S}{\partial t}\right) = 0. \quad (238)$$

В этом случае говорят, что переменная q_1 *отделяется*. Тогда решение уравнения Гамильтона-Якоби можно искать в виде

$$S(q, t) = S_1(q_1) + S'(q_2, \dots, q_s, t). \quad (239)$$

Подставляя это выражение в уравнение (238), получаем

$$F\left(f\left(q_1, \frac{dS_1}{dq_1}\right), q_2, \dots, q_s, t, \frac{\partial S'}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial S'}{\partial q_s}, \frac{\partial S'}{\partial t}\right) = 0. \quad (240)$$

В результате в уравнении Гамильтона-Якоби выделилась комбинация $f(q_1, dS_1/dq_1)$, которая ни явно, ни неявно не содержит переменные q_2, \dots, q_s, t . Поскольку же все переменные q_1, \dots, q_s, t в уравнении Гамильтона-Якоби являются независимыми, то равенство (240) может выполняться только в том случае, когда эта комбинация тождественно равна некоторой постоянной:

$$f\left(q_1, \frac{dS_1}{dq_1}\right) = C_1. \quad (241)$$

Уравнение (241) является уже обыкновенным дифференциальным уравнением первого порядка, которое может быть решено в квадратурах. Уравнение же (240) принимает вид

$$F\left(C_1, q_2, \dots, q_s, t, \frac{\partial S'}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial S'}{\partial q_s}, \frac{\partial S'}{\partial t}\right) = 0. \quad (242)$$

Это уравнение имеет тот же вид, что и исходное уравнение (237), но содержит на одну независимую переменную меньше. Может оказаться, что в уравнении (242) некоторая из переменных q_2, \dots, t снова отделяется. Тогда к ней следует применить описанную выше процедуру. Если таким образом удастся отделить все переменные, то в результате мы получаем решение уравнения Гамильтона-Якоби в виде

$$S = A + S_0(t) + \sum_{\alpha=1}^s S_\alpha(q_\alpha, C), \quad (243)$$

содержащее $s+1$ независимых произвольных постоянных $A, C_\alpha, \alpha = 1, \dots, s$, т.е. полный интеграл уравнения.

Пример 21. Движение в поле электрического диполя. Рассмотрим заряженную материальную точку, движущуюся в поле системы зарядов на расстояниях, больших по сравнению с характерными размерами системы. Даже если система является в целом электрически нейтральной, на точку будет действовать некоторая сила благодаря тому, что кулоновы поля частиц, составляющих систему, не вполне компенсируют друг друга. Например, при движении электрона в поле молекулы HCl электрон будет притягиваться к молекуле, облетая ее со стороны атома водорода, и отталкиваться со стороны атома хлора. Определим потенциал поля такой системы. Выберем начало декартовой системы координат где-нибудь внутри системы и обозначим через \mathbf{r}_i , $i = 1, \dots, n$ радиус-векторы составляющих ее частиц, а через \mathbf{r} – радиус-вектор материальной точки. По условию,

$$|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}_i|, \quad i = 1, \dots, n.$$

Для кулонова потенциала i -ой частицы в точке \mathbf{r} можно приближенно написать (q_i – ее заряд)

$$\varphi_i = \frac{q_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} = \frac{q_i}{\sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)^2}} \approx \frac{q_i}{r\sqrt{1 - \frac{2(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)}{r^2}}} \approx \frac{q_i}{r\left(1 - \frac{(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)}{r^2}\right)} \approx \frac{q_i}{r} + \frac{q_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)}{r^3}.$$

Суммируя по всем частицам и учитывая нейтральность системы ($\sum_{i=1}^n q_i = 0$), получаем

$$\varphi = \frac{(\mathbf{d}, \mathbf{r})}{r^3}, \quad \mathbf{d} = \sum_{i=1}^n q_i \mathbf{r}_i.$$

Вектор \mathbf{d} называется *дипольным моментом* системы. Найдем закон движения точки в случае, когда \mathbf{d} не зависит от времени. Выберем сферическую систему координат с началом в точке $\mathbf{r} = 0$ и полярной осью, направленной параллельно вектору \mathbf{d} . Тогда функция Лагранжа точки будет иметь вид

$$L = \frac{m}{2} \left(\dot{r}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 \right) - \frac{d \cos \theta}{r^2}, \quad d \equiv |\mathbf{d}|. \quad (244)$$

Отсюда находим обобщенные импульсы и обобщенную энергию точки

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \quad p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mr^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}, \quad p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2 \dot{\theta}, \quad (245)$$

$$E = \frac{m}{2} \left(\dot{r}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 \right) + \frac{d \cos \theta}{r^2}.$$

Выражая обобщенные скорости через обобщенные импульсы и подставляя результат в обобщенную энергию, находим функцию Гамильтона

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{p_\theta^2}{r^2} \right) + \frac{d \cos \theta}{r^2}.$$

Наконец, по функции Гамильтона записываем уравнение Гамильтона-Якоби

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial S}{\partial \phi} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 \right\} + \frac{d \cos \theta}{r^2} = 0. \quad (246)$$

Переменные t, ϕ входят в это уравнение лишь через производные $\partial S/\partial t, \partial S/\partial \phi$. В соответствии с методом разделения переменных ищем решение в виде

$$S = S_0(t) + S_1(\phi) + S'(r, \theta)$$

и приходим к уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{dS_0}{dt} &= C_1, & \frac{dS_1}{d\phi} &= C_2, \\ C_1 + \frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial S'}{\partial r} \right)^2 + \frac{C_2^2}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S'}{\partial \theta} \right)^2 \right\} + \frac{d \cos \theta}{r^2} &= 0. \end{aligned}$$

Первые два из этих уравнений интегрируются тривиально:

$$S_0 = C_1 t, \quad S_1 = C_2 \phi.$$

Перепишем последнее уравнение в виде

$$2mC_1 + \left(\frac{\partial S'}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left[\frac{C_2^2}{\sin^2 \theta} + \left(\frac{\partial S'}{\partial \theta} \right)^2 + 2md \cos \theta \right] = 0.$$

Из этой записи видно, что переменная θ отделяется, поэтому мы полагаем

$$S' = S_3(\theta) + S_4(r)$$

и получаем уравнения

$$\begin{aligned} \frac{C_2^2}{\sin^2 \theta} + \left(\frac{dS_3}{d\theta} \right)^2 + 2md \cos \theta &= C_3, \\ 2mC_1 + \left(\frac{dS_4}{dr} \right)^2 + \frac{C_3}{r^2} &= 0. \end{aligned}$$

Их решения имеют вид

$$\begin{aligned} S_3 &= \int_{\theta_0}^{\theta} \pm \sqrt{C_3 - 2md \cos \theta - \frac{C_2^2}{\sin^2 \theta}} d\theta, \\ S_4 &= \int_{r_0}^r \pm \sqrt{-2mC_1 - \frac{C_3}{r^2}} dr. \end{aligned}$$

Итак, мы нашли решение уравнения Гамильтона-Якоби в виде

$$S = A + C_1 t + C_2 \phi + \int_{\theta_0}^{\theta} \pm \sqrt{C_3 - 2md \cos \theta - \frac{C_2^2}{\sin^2 \theta}} d\theta + \int_{r_0}^r \pm \sqrt{-2mC_1 - \frac{C_3}{r^2}} dr. \quad (247)$$

Это решение содержит, помимо произвольной аддитивной постоянной A , произвольные постоянные $C_1, C_2, C_3, \theta_0, r_0$. Однако изменение θ_0, r_0 эквивалентно переопределению A ,

так что независимыми являются лишь постоянные C_1, C_2, C_3 . Их число равно числу степеней свободы материальной точки, следовательно, выражение (247) представляет собой полный интеграл уравнения (246). Определим знаки, с которыми следует брать корни в этом решении. Подставляя его в соотношения (232), находим значения обобщенных импульсов p_r, p_θ в данной точке траектории:

$$p_r = \pm \sqrt{-2mC_1 - \frac{C_3}{r^2}}, \quad p_\theta = \pm \sqrt{C_3 - 2md \cos \theta - \frac{C_2^2}{\sin^2 \theta}}.$$

С другой стороны, согласно формулам (245) знаки этих импульсов совпадают со знаками соответствующих обобщенных скоростей. Таким образом, подынтегральное выражение в интеграле по r в формуле (247) следует брать с верхним (нижним) знаком, если на данном участке траектории $\dot{r} > 0$ ($\dot{r} < 0$), и аналогично для интеграла по θ .

Выясним теперь физический смысл постоянных C_1, C_2, C_3 . Подставляя решение (247) в уравнение Гамильтона-Якоби находим

$$C_1 + H(q, p, t) = 0,$$

т.е. постоянная C_1 есть величина обобщенной энергии точки, взятая со знаком минус. Подстановка же решения в соотношения (232) дает

$$p_\phi = \frac{\partial S}{\partial \phi} = C_2.$$

Таким образом, постоянная C_2 есть величина сохраняющейся проекции момента импульса точки на направление вектора \mathbf{d} .

То, что величины E, p_ϕ в рассматриваемой задаче сохраняются, можно было утверждать заранее, поскольку время в ней однородно, а пространство изотропно относительно поворотов системы (материальной точки) вокруг направления \mathbf{d} [функция Лагранжа (244) не зависит от переменных t, ϕ явно]. Сохранение же комбинации $(C_2^2/\sin^2 \theta + p_\theta^2 + 2md \cos \theta)$ никак не связано с подобными симметриями и является специфическим для данной задачи. В том, что метод Гамильтона-Якоби позволяет регулярным образом находить такие интегралы движения, заключается его существенное преимущество по сравнению с лагранжевым методом.

Наконец, найдем закон движения материальной точки. Дифференцируя решение (247) по постоянным $C_1 \equiv -E, C_2 \equiv M_z, C_3$ и приравнявая результат новым произвольным постоянным, получаем

$$-t + \int_{r_0}^r \frac{m dr}{\pm \sqrt{2mE - \frac{C_3}{r^2}}} = Q_1, \quad (248)$$

$$\phi - \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{M_z d\theta}{\pm \sin^2 \theta \sqrt{C_3 - 2md \cos \theta - \frac{M_z^2}{\sin^2 \theta}}} = Q_2, \quad (249)$$

$$+ \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{d\theta}{\pm \sqrt{C_3 - 2md \cos \theta - \frac{M_z^2}{\sin^2 \theta}}} - \int_{r_0}^r \frac{dr}{\pm r^2 \sqrt{2mE - \frac{C_3}{r^2}}} = Q_3. \quad (250)$$

Уравнение (248) определяет в неявном виде зависимость $r(t)$, а уравнения (249), (250) – зависимости $\phi(\theta)$ и $\theta(r)$. Таким образом, мы нашли решение уравнений движения материальной точки в квадратурах. Оно содержит 6 независимых произвольных постоянных $E, M_z, C_3, Q_1, Q_2, Q_3$, которые могут быть определены из начальных условий.

§6. Отступление в квантовую механику: уравнение Гамильтона-Якоби как квазиклассический предел уравнения Шредингера

Как было указано в II §4, величина функционала действия на действительной траектории $S[\bar{q}(t)] \equiv S(q^{(1)}, t_1, q^{(2)}, t_2)$ определяет амплитуду перехода $\Psi(q^{(1)}, t_1, q^{(2)}, t_2)$ квазиклассической системы из точки с координатами $q^{(1)}$ в точку $q^{(2)}$ на интервале времени от t_1 до t_2 [см. формулу (54)]. Рассматриваемая как функция аргументов $q^{(2)}, t_2$, величина $S(q^{(1)}, t_1, q^{(2)}, t_2)$ удовлетворяет уравнению Гамильтона-Якоби (231). Аналогично этому, будем рассматривать величину $\Psi(q^{(1)}, t_1, q^{(2)}, t_2)$ как функцию аргументов $q^{(2)}, t_2$, не интересуясь положением системы в момент времени t_1 . Обозначим эту функцию через $\Psi(q, t)$. Функции $S(q, t), \Psi(q, t)$ по-прежнему связаны соотношением (54)

$$\Psi(q, t) = a \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(q, t) \right\}. \quad (251)$$

Преобразуем теперь уравнение Гамильтона-Якоби (231) к виду, в котором неизвестной функцией является функция $\Psi(q, t)$, рассматривая для простоты случай одной материальной точки массы m , движущейся в потенциальном поле $U(\mathbf{r}, t)$. Декартовы компоненты радиус-вектора \mathbf{r} точки обозначим через (x_1, x_2, x_3) и примем их за обобщенные координаты. Уравнение Гамильтона-Якоби в этом случае имеет вид

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \sum_{k=1}^3 \left(\frac{\partial S}{\partial x_k} \right)^2 + U(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (252)$$

Дифференцируя соотношение (251) один раз по времени и дважды по координатам, получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} a \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi, \\ \Delta \Psi &\equiv \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_k^2} = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x_k} a \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\} \right] \\ &= \sum_{k=1}^3 \left[-\frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S}{\partial x_k} \right)^2 a \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x_k^2} a \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\} \right] \\ &= \sum_{k=1}^3 \left[-\frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S}{\partial x_k} \right)^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x_k^2} \right] \Psi. \end{aligned} \quad (253)$$

В силу условия квазиклассичности системы (52) второй член в квадратных скобках в последнем выражении мал по сравнению с первым. Поэтому можно приближенно написать

$$\Delta \Psi = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{k=1}^3 \left(\frac{\partial S}{\partial x_k} \right)^2 \Psi. \quad (254)$$

Умножив уравнение (252) на Ψ , переписываем его с помощью соотношений (253), (254) в следующем виде

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(\mathbf{r}, t)\Psi, \quad (255)$$

Это уравнение называется *уравнением Шредингера* и является основным уравнением квантовой механики. Несмотря на то, что мы получили его приближенно из уравнения Гамильтона-Якоби, именно уравнение (255) оказывается точным, т.е. описывающим любые системы, а не только те, что удовлетворяют условию (52). Таким образом, проделанный выше “вывод” уравнения Шредингера следует рассматривать как демонстрацию того, что уравнение Гамильтона-Якоби является квазиклассическим пределом уравнения Шредингера.