Poisson 括号

Poisson 括号在量子力学中有很重要的作用。它与量子力学的联系最早是由 Dirac 提出的，他发现量子力学中力学量的对易关系与经典力学中的 Poisson 括号非常相像，在这个基础上，Dirac 创立了量子力学的符号法，根据这种类比，我们只要在下面所讨论的力学量的运动方程左边乘上一个因子$i\hbar$，就得到了量子力学的 Heisenberg 方程；只要在下面基本 Poisson 括号等号的右边乘上一个相同的因子$i\hbar$，就得到了量子 Poisson 括号（量子力学中将它称为对易子）。

首先我们看一下，对于任意一个力学量$f\left(p,q,t\right)$，Hamilton 力学中是如何判断它是否为运动积分的。为此我们将它对时间求导数

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial q_k}\dot{q}_k+\frac{\partial f}{\partial p_k}\dot{p}_k \tag{1}$$

利用 Hamilton 方程把$\dot{q}_k$和$\dot{p}_k$的值代入上式得到

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+\left[f,H\right] \tag{2}$$

其中

$$\left[f,H\right]=\frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial H}{\partial p_k}-\frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial H}{\partial q_k} \tag{3}$$

称为f和H的 Poisson 括号（f和H的次序是很重要的）。方程(2) 通常称为力学量f的（用 Poisson 括号表示的）运动方程。

正如我们所知，在体系运动过程中保持不变的力学变量称为运动积分。从上面的方程(2)可以看出，量f为运动积分（$df/dt=0$）的条件可以写为

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\left[f,H\right]=0 \tag{4}$$

特别是，如果力学量f不明显地依赖于时间（$\partial f/\partial t=0$），那么这个条件就是

$$\left[f,H\right]=0 \tag{5}$$

即运动积分与 Hamilton 函数的 Poisson 括号为零。以前我们要判断一个力学量 f 是否是运动积分，一般需要先解出运动方程，得到 $q_i = q_i(t)$ 和 $p_i = p_i(t)$，然后把它们代入 $f(q,p,t)$ 中，才能看出 f 是否和时间无关。而现在，我们可以直接从 f 和 H 的关系判断是否为运动积分。最简单的例子是：若 f 就是 H 本身，那么由(3)式，显然 $[H,H]=0$，代入(4)得到 Hamilton 函数为运动积分的条件是 $\partial H/\partial t = 0$，这是我们早已熟悉的结论。再看一个例子，考虑中心势场中粒子的运动，笛卡尔坐标系中 Hamilton 函数为

$$H = \frac{p_i p_i}{2m} + U(r) \tag{6}$$

角动量 $L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k$ 不显含时间，它只是位置和广义动量的函数，因此

$$\begin{aligned} \frac{dL_i}{dt} &= [L_i, H] = \frac{\partial L_i}{\partial x_l}\frac{\partial H}{\partial p_l} - \frac{\partial L_i}{\partial p_l}\frac{\partial H}{\partial x_l} \\ &= \varepsilon_{ijk}\delta_{jl} p_k \cdot \frac{p_l}{m} - \varepsilon_{ijk}\delta_{kl} x_j \cdot \frac{\partial U}{\partial x_l} \\ &= \varepsilon_{ijk}\frac{p_k p_j}{m} - \varepsilon_{ijk}\frac{x_j x_k}{r}\frac{dU}{dr} \end{aligned} \tag{7}$$

其中用到中心力条件，即势能仅仅依赖于粒子到力心的距离 r：

$$\frac{\partial U}{\partial x_k} = \frac{dU}{dr}\frac{\partial r}{\partial x_k} = \frac{x_k}{r}\frac{dU}{dr} \tag{8}$$

方程(7)中的第一项要对指标 j,k 求和，但是，ε_{ijk} 关于指标交换 j,k 是反对称的，而 $p_k p_j$ 则是对称的，因此该求和项必为零（你也可以这样来做，由于 j,k 是求和指标，我把这两个指标互换不会改变它的数值，即 $\varepsilon_{ijk} p_k p_j = \varepsilon_{ikj} p_j p_k = -\varepsilon_{ijk} p_j p_k$，也就是说，这个量等于它的负值，当然它必须等于零），类似的，第二项也等于零。因此

$$\frac{dL_i}{dt} = [L_i, H] = 0 \tag{9}$$

也就是说，粒子相对于力心的角动量是守恒的（想想前面的过程中“相对于力心”是如何体现的？）。

利用 Poisson 括号，我们还可以把正则方程写成完全对称的形式（让 f 分别等于 q_i 和 p_i）

$$\dot{q}_i = [q_i, H], \quad \dot{p}_i = [p_i, H] \tag{10}$$

Poisson 括号还有其它很重要的应用，在介绍它们以前，先来了解一下 Poisson 括号的性质会使我们的计算更加简明。为此，我将把 Poisson 括号稍作推广：任意两个力学量 f 和 g，其 Poisson 括号类似地定义为：

$$[f, g] = \frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial g}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial g}{\partial q_k} \tag{11}$$

从定义很容易导出 Poisson 括号具有以下性质。

把两个函数对调，Poisson 括号改变符号（反对称）；如果其中一个是常数 c，那么 Poisson 括号等于零：

$$[f, g] = -[g, f] \tag{12}$$

其次还有（双线性，因为对第一个力学量 f 也有类似的关系）

$$\begin{gathered}[f, g_1 + g_2] = [f, g_1] + [f, g_2] \\ [f, cg] = c[f, g]\end{gathered} \tag{14}$$

另外还有（Leibniz 法则，这只是类似于微分的链式法则的一个不同称呼而已）

$$[f, g_1 g_2] = [f, g_1] g_2 + g_1 [f, g_2] \tag{15a}$$

如果 f 仅仅是 q 或者仅仅是 p 的函数，那么由定义可直接得到

$$[f(q), g] = \frac{\partial f}{\partial q_i}[q_i, g], \quad [f(p), g] = \frac{\partial f}{\partial p_i}[p_i, g] \tag{15b}$$

从(15a)你还可以得到一个非常有用的关系

$$[f, g^n] = n g^{n-1} [f, g] \tag{15c}$$

如果函数 f 和 g 中有一个是坐标或动量，那么 Poisson 括号简化为偏导数

$$\left[q_i, f\right] = \frac{\partial f}{\partial p_i}, \quad \left[p_i, f\right] = -\frac{\partial f}{\partial q_i} \tag{16}$$

第一个式子可以在定义(11)中令 $g = q_i$ 得到，此时由于 $\partial q_k / \partial q_l = \delta_{kl}$ 以及 $\partial q_k / \partial p_l = 0$，求和只有一项有贡献。在上式中让 f 等于 q_j 和 p_j，我们可以得到

$$\left[q_i, q_j\right] = 0, \quad \left[p_i, p_j\right] = 0, \quad \left[q_i, p_j\right] = \delta_{ij} \tag{17}$$

[只要把最后一个式子右边乘上因子 $i\hbar$，上面三个等式就给出了量子力学中的基本对易关系。**]**

一般的 Poisson 括号都可以利用上面这些性质将其化为(15)或(16)的线性组合从而很容易地得到。例如角动量 $L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k$，这里 x_j 是广义坐标。从基本 Poisson 括号

$$\left[x_i, x_j\right] = 0, \qquad \left[p_i, p_j\right] = 0, \qquad \left[x_i, p_j\right] = \delta_{ij} \tag{18}$$

不难得到

$$\left[x_i, L_j\right] = \varepsilon_{ijk} x_k, \quad \left[p_i, L_j\right] = \varepsilon_{ijk} p_k, \quad \left[L_i, L_j\right] = \varepsilon_{ijk} L_k \tag{19}$$

比如第一个关系

$$\left[x_i, L_j\right] = \left[x_i, \varepsilon_{jmn} x_m p_n\right] = \varepsilon_{jmn} x_m \left[x_i, p_n\right] = \varepsilon_{jmn} x_m \delta_{in} = \varepsilon_{ijm} x_m$$

类似的

$$\left[p_i, L_j\right] = \left[p_i, \varepsilon_{jmn} x_m p_n\right] = \varepsilon_{jmn} \left[p_i, x_m\right] p_n = -\varepsilon_{jmn} \delta_{im} p_n = +\varepsilon_{ijn} p_n$$

利用此二式有

$$\begin{aligned}\left[L_i, L_j\right] &= \left[\varepsilon_{ikl} x_k p_l, L_j\right] = \varepsilon_{ikl} \left[x_k p_l, L_j\right] = \varepsilon_{ikl} \left[x_k, L_j\right] p_l + \varepsilon_{ikl} x_k \left[p_l, L_j\right] \\ &= \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{kjm} x_m p_l + \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{ljm} x_k p_m = -\varepsilon_{lik} \varepsilon_{ljm} \left(x_m p_k - x_k p_m\right) \\ &= -\left(\delta_{ij} \delta_{km} - \delta_{im} \delta_{kj}\right) \left(x_m p_k - x_k p_m\right) = x_i p_j - x_j p_i = \varepsilon_{ijk} L_k\end{aligned}$$

在三个函数所组成的 Poisson 括号之间，有下列关系式成立：

$$\left[f, \left[g, h\right]\right] + \left[g, \left[h, f\right]\right] + \left[h, \left[f, g\right]\right] = 0$$

$$\big[[f,g],h\big]+\big[[g,h],f\big]+\big[[h,f],g\big]=0 \tag{20}$$

称为 Jacobi 恒等式。为了证明它，首先注意 Poisson 括号$[f,g]$是f和g的一阶微商的双线性齐次函数，因此，$\big[h,[f,g]\big]$是f和g的二阶微商的线性齐次函数，所以等式的左边是所有三个函数f、g和h的二阶微商的线性齐次函数。我们来把包含f的二阶微商的项放在一起，第一个括号内没有这类项，它里面只有f的一阶微商。定义微分算子$D_g(\phi)=[g,\phi]$和$D_h(\phi)=[h,\phi]$，最后两项之和可以用D_g和D_g形式地表示为：

$$\begin{aligned}\big[g,[h,f]\big]+\big[h,[f,g]\big]&=\big[g,[h,f]\big]-\big[h,[g,f]\big]\\&=D_g\big[D_h(f)\big]-D_h\big[D_g(f)\big]\\&=\left(D_gD_h-D_hD_g\right)f\end{aligned} \tag{21}$$

很容易看出，线性微分算子的这个组合中不可能含有f的二阶导数。事实上，线性微分算子的一般形式是

$$D_g=a_k\frac{\partial}{\partial\xi_k},\qquad D_h=b_k\frac{\partial}{\partial\xi_k} \tag{22}$$

其中a_k和b_k是变量$\xi_1,\xi_2,\cdots$的任意函数，那么

$$\begin{aligned}D_gD_h&=a_kb_l\frac{\partial^2}{\partial\xi_k\partial\xi_l}+a_k\frac{\partial b_l}{\partial\xi_k}\frac{\partial}{\partial\xi_l}\\D_hD_g&=b_ka_l\frac{\partial^2}{\partial\xi_k\partial\xi_l}+b_k\frac{\partial a_l}{\partial\xi_k}\frac{\partial}{\partial\xi_l}\end{aligned} \tag{23}$$

而它们的差

$$D_gD_h-D_hD_g=\left(a_k\frac{\partial b_l}{\partial\xi_k}-b_k\frac{\partial a_l}{\partial\xi_k}\right)\frac{\partial}{\partial\xi_l} \tag{24}$$

也是一个只包含一阶导数的算子。由此可见，在等式(20)的左边，所有含f二阶导数的项都相互抵消掉了。当然这个结论对于g和h也成立，因此整个的表达式

恒等于零。

介绍 Poisson 括号的最后一个性质。

$$\frac{\partial}{\partial t}[f,g]=\left[\frac{\partial f}{\partial t},g\right]+\left[f,\frac{\partial g}{\partial t}\right] \tag{25a}$$

这个性质很容易从定义看出，不仅如此，如果你把上面对时间的偏导数换成全微商也是成立的，也就是说

$$\frac{d}{dt}[f,g]=\left[\frac{df}{dt},g\right]+\left[f,\frac{dg}{dt}\right] \tag{25b}$$

这个关系可以利用 Jacobi 恒等式以及(25*a*)得到证明，这是因为从(2)得到

$$\frac{d}{dt}[f,g]=\frac{\partial}{\partial t}[f,g]+\left[[f,g],H\right] \tag{26}$$

而

$$\begin{aligned}\left[[f,g],H\right]&=-\left[[g,H],f\right]-\left[[H,f],g\right]\\&=\left[f,[g,H]\right]+\left[[f,H],g\right]\end{aligned} \tag{27}$$

最后一个等式用到了 Poisson 括号的反对称性，将第一项按照(25*a*)展开并且作适当整理就得到

$$\frac{d}{dt}[f,g]=\left[\frac{\partial f}{\partial t}+[H,f],g\right]+\left[f,\frac{\partial g}{\partial t}+[H,g]\right] \tag{28}$$

这样就证明了性质(25*b*)。

从性质(25*b*)我们马上可以得到关于 Poisson 括号的一个非常重要的结论：如果 f 和 g 是两个运动积分，那么它们的 Poisson 括号也是一个运动积分：

$$[f,g]=\text{const.} \tag{29}$$

这就是所谓的 Poisson 定理。因为如果力学量 f 和 g 是两个运动积分，也就是说 $\dot{f}=\dot{g}=0$，因此，(25*b*)式就告诉我们$[f,g]$对时间的微商也是等于零的，即它是一个运动积分

当然，运动积分的数目是有限的（$2s-1$），因此 Poisson 定理并不总是能为我们提供新的运动积分，在某些情形下，我们可能得到一些毫无意义的结果

—Poisson 括号等于常数。而在另外一些情况中，新得到的运动积分简单地就是原来运动积分 f 和 g 的函数。但是，除此二情形外，Poisson 括号会给出新的运动积分。

一个简单的例子是如果一个粒子对 x_1 轴和 x_2 轴的角动量守恒，由于 $L_3=[L_1,L_2]$，因此这个粒子对 x_3 轴的角动量也守恒。而且从这三个守恒量你再也不可能利用 Poisson 括号构造别的守恒量了。【角动量在某个方向的投影守恒意味着力矩在该方向的投影为零，那么刚才的结论似乎就意味着如果 $\tau_1=0$ 和 $\tau_2=0$，那就必然有 $\tau_3=0$，而这显然是错误的！那么问题出在什么地方呢？请思考之！】

最后简单介绍 Poisson 括号的另一个应用：如果力学量和 Hamilton 函数都不显含时间，那么

$$\begin{aligned}&\frac{df}{dt}=[f,H]\\&\frac{d^2f}{dt^2}=\left[\frac{df}{dt},H\right]=[[f,H],H],\quad\cdots\end{aligned}\tag{30}$$

而我们知道

$$f=f_0+\left.\frac{df}{dt}\right|_0 t+\frac{1}{2!}\left.\frac{d^2f}{dt^2}\right|_0 t^2+\cdots\tag{31}$$

也就是说，我们可以利用 Poisson 括号把力学量作 Taylor 展开

$$f=f_0+[f,H]_0 t+\frac{1}{2!}[[f,H],H]_0 t^2+\cdots\tag{32}$$

实际上，由于 f 不显含时间，因此

$$\frac{df}{dt}=[f,H]=-D_H f\tag{33}$$

也就是说 f 对时间的导数等于算子 $-D_H$ 对 f 的作用，$D_H f\equiv[H,f]$。如果 H 也不显含时间，那么我们可以把上面方程的解形式地写为

$$f\left(t\right)=\exp\left(-D_H t\right)f\Big|_0 \tag{34}$$

这非常类似于你所熟悉的常微分方程 $y'=-ay$ 的解 $y=\exp\left(-ax\right)y_0$。这个式子确切的含义（或者说它的定义）是

$$f\left(t\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\left(-1\right)^n\frac{D_H^n f}{n!}\Bigg|_0 t^n \tag{35}$$

即方程(9)的右边（令 $D_H^0 f=f$）。

举一个例子，重力场中粒子（一维）运动的 Hamilton 量为

$$H=\frac{p_x^2}{2m}+mgx \tag{36}$$

取 $f=x$，由于

$$\begin{aligned}\left[x,H\right]&=\left[x,\frac{p_x^2}{2m}\right]=\frac{p_x}{m}\left[x,p_x\right]=\frac{p_x}{m}\\ \left[\left[x,H\right],H\right]&=\left[\frac{p_x}{m},mgx\right]=g\left[p_x,x\right]=-g\end{aligned} \tag{37}$$

由于 g 是常数，因此由关系式(13)知道其余的 Poisson 括号都等于零，因此

$$\begin{aligned}x\left(t\right)&=x_0+\left[x,H\right]_0 t+\frac{1}{2}\left[\left[x,H\right],H\right]_0 t^2\\ &=x_0+\frac{p_{x0}}{m}t-\frac{1}{2}gt^2\end{aligned} \tag{38}$$

再举一例。一维谐振子的 Hamilton 量为

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kq^2 \tag{39}$$

取 $f=q$，由于

$$\begin{aligned}&D_H^0 q=q\\ &D_H^1 q=\left[H,q\right]=\left[p^2/2m,q\right]=-p/m\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
D_H^2 q &= \left[H, D_H^1 q\right] = -\left[kq^2/2, p/m\right] = -\omega^2 q \\
D_H^3 q &= \left[H, D_H^2 q\right] = -\omega^2 D_H^1 q \\
D_H^4 q &= \left[H, D_H^3 q\right] = -\omega^2\left[H, D_H^1 q\right] = \left(-\omega^2\right)^2 q
\end{aligned} \tag{40}
$$

其中$\omega^2 \equiv k/m$。不难看出它有以下规律

$$
\begin{cases}
D_H^{2n} q = (-1)^n \omega^{2n} q \\
D_H^{2n+1} q = (-1)^{n+1} \omega^{2n} \dfrac{p}{m}
\end{cases}
\qquad n = 0,1,2,\cdots \tag{41}
$$

由于 f 和 H 都不显含时间，因此

$$
\begin{aligned}
q(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\left(D_H^n q\right)_0}{n!} t^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{2n} \frac{\left(D_H^{2n} q\right)_0}{(2n)!} t^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{2n+1} \frac{\left(D_H^{2n+1} q\right)_0}{(2n+1)!} t^{2n+1} \\
&= q_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (\omega t)^{2n}}{(2n)!} + \frac{p_0}{m\omega} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (\omega t)^{2n+1}}{(2n+1)!} \\
&= q_0 \cos\omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin\omega t
\end{aligned} \tag{42}
$$

附录：Dirac 回忆关于 Poisson 括号的一段趣闻

“*I went back to Cambridge at the beginning of October 1925, and resumed my previous style of life, intense thinking about these problems during the week and relaxing on Sunday, going for a long walk in the country alone. The main purpose of these long walks was to have a rest so that I would start refreshed on the following Monday.*

It was during one of the Sunday walks in October 1925, when

I was thinking about this $(uv - vu)$, *in spite of my intention to relax, that I thought about Poisson brackets. I remembered something which I had read up previously, and from what I could remember, there seemed to be a close similarity between a Poisson bracket of two quantities and the commutator. The idea came in a flash, I suppose, and provided of course some excitement, and then came the reaction "No, this is probably wrong".*

I did not remember very well the precise formula for a Poisson bracket, and only had some vague recollections. But there were exciting possibilities there, and I thought that I might be getting to some big idea. It was really a very disturbing situation, and it became imperative for me to brush up on my knowledge of Poisson brackets. Of course, I could not do that when I was right out in the countryside. I just had to hurry home and see what I could find about Poisson brackets.

I looked through my lecture notes, the notes that I had taken at various lectures, and there was no reference there anywhere to Poisson brackets. The textbooks which I had at home were all too elementary to mention them. There was nothing I could do, because it was Sunday evening then and the libraries were all closed. I just had to wait impatiently through that night without knowing whether this idea was really any good or not, but I still think that my confidence gradually grew during the course of the night.

The next morning I hurried along to one of the libraries as soon as it was open, and then I looked up Poisson brackets in Whitackers Analytical Dynamics*, and I found that they were just what I needed."*