

漫谈几何量子化

作者：季候风

整理：苏剑林

<http://spaces.ac.cn>

2014年2月12日

目录

1 小史	2
2 闲话	3
3 源头	4
4 表象	5
5 真空	6
6 实例	8
7 流形	10
8 力学	11
9 几何	12
10 量子条件	13
11 丛与联络	14
12 正则变换	17

1 小史	2
13 正则变换2	20
14 复极化	22
15 时间演化	23
参考文献	24

1 小史

从数学上理解“量子化”是数学物理的课题之一。应用量子理论来探索新的数学对象和新的数学性质，根据某些学者提议，可以叫做“物理数学”。自从量子力学诞生，数学家就一直在思索量子化的数学本质。我个人来揣度Weyl当初对量子化的理解，可以说是用代数来细化几何。在广义相对论提出以后，量子力学尚在酝酿之时，Weyl已经试图把电磁学纳入几何框架，即所谓 $U(1)$ 规范场论。在他看来，经典物理基础理论对应于几何。矩阵力学和波动力学出现以后，Weyl第一个从数学上描述了量子力学，这就是他的著作《群论与量子力学》，他的语言基本上是当时的抽象代数。“经典物理用几何描述，量子物理用代数描述”，这可以视为对量子化的一种理解。

矩阵力学和波动力学统一在“变换理论”框架下，这使得具有深刻分析背景的von Neumann意识到，某种函数空间上的微分算子理论对应于波动力学，而这种空间的代数结构可以用来归纳矩阵力学。因为这种函数空间已经被Hilbert的学生Schmidt研究过，而大家普遍相信是Hilbert的思想引导了对这种函数空间的研究，所以von Neumann用了Hilbert space这个名字。据数学史研究者澄清，Hilbert space的主要思想基本来自于Schmidt本人。von Neumann的名著《量子力学的数学基础》用分析和代数的结合体——算子代数来描述量子物理，他的基本定理是Stone-vonNeumann定理：由坐标和动量生成的“Heisenberg代数” $[Q, P] = i\hbar$ 只有唯一的自伴表示等价类，其中一个代表的表示空间是坐标的平方可积函数空间，坐标和动量分别表示为算子

$$(Qf)(q) = qf(q), Pf = -i\hbar D_q f. \quad (1)$$

这种对量子理论的理解可以大致总结为“非交换”观点，因为Hilbert空间 L^2 可以被理解为来源于力学变量的“非交换性”（更准确地说是“几乎交

换性”)。由 von Neumann 这一脉相承而来的是我个人认为最有希望切入量子化本质的“非交换几何”。

2 闲话

Feynman 发明了路径积分以后，量子理论看起来便不那么反传统了，路径积分的被积函数都是经典的，交换的力学量，被一个幺模复值泛函 $e^{iI/\hbar}$ 加权，得到经典观测值。由量子力学的概率解释，经典观测值应该是可观察量特征值的期望，这样路径积分非常像概率模型，权泛函就像概率密度一样。这里其实我很不理解的是，作为传播子（又叫 Green 函数或基本解）

$$\int_{\{\text{path } \omega \text{ from } a \text{ to } b\}} e^{iI(\omega)/\hbar} \mathcal{D}\omega \quad (2)$$

的模方是粒子从 a 到 b 的迁移概率，而权函数本身的模方永远是 1，因而不能被视同任何同概率密度有关的量。从这个角度来说，可观察量 \mathcal{O} 的期望为什么是

$$\frac{\int \mathcal{O}(\omega) e^{iI(\omega)/\hbar} \mathcal{D}\omega}{\int e^{iI(\omega)/\hbar} \mathcal{D}\omega} \quad (3)$$

是非常难以理解的一个巧合。

在从算子描述推演路径积分的过程中，如果用虚时间，就得到完美的概率解释。这相当于考虑欧氏指标的时空背景。在这种数学模型中，量子理论可以理解成某些无穷维空间上的特殊概率测度理论。由于路径积分在 non-abelian 规范理论，弦论中的关键作用，这个解释也是很多数学物理学家努力探索的方向。近些年在随机面的数学理论方向有很多发展，这相当于研究二维欧氏时空量子理论的数学基础。

在“一维欧氏时空”，量子的运动完全由 Brownian motion 的数学理论刻画。显然，这种刻画不适用于真实世界，因为时间是实数而不是虚数。Brownian motion 非常适合描述股票等金融产品的价格随机性，如今已广泛用于金融市场理论。股票价格可以视为以时间为指标的一个随机过程（或者本质等价的，路径空间上的一个高斯测度），而随机面理论相当于研究有两个实指标的随机过程，我们应该期望这个理论会有一些跟我们社会生活相关的重要应用。

对于量子这个概念有着许多种不同理解，也许说明这个概念还不是基本概念（至少从数学上来说）。现在言归正传，说说量子化与几何的微妙关

系。

3 源头

先从有限维自由度系统的量子化说起。最简单的是一维谐振子，其Hamiltonian 是

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2. \quad (4)$$

经典相空间是余切丛($T^*\mathbb{R}, \Omega = dq \wedge dp$)，正则量子化把坐标和动量看成算子，满足交换关系

$$[Q, P] = i\hbar \{q, p\} = i\hbar \quad (5)$$

如果要求这个系统描述一个粒子的运动，态空间必须是不可约的，而以上交换关系的所有不可约表示都等价于前面提到的Schrodinger 表示，表示空间是坐标的平方可积函数空间，坐标表示为乘法算子，动量表示为求导算子。Hamiltonian 现在成为一个线性微分算子，如果要求波函数在无穷远消失，Hamiltonian 的谱必须是离散的，而它本身是正定算子，所以存在最小本征值，所属的本征波函数代表的态叫做“真空”，可以显式解出。

从数学上来说，以上过程相当于先利用经典相空间上的辛形式定义出一个Lie 代数— Heisenberg代数，再直接运用Stone-von Neumann 定理写出Heisenberg 代数的唯一自伴表示，表示空间里的真空态则由Hamiltonian 的本征值问题给出。用物理学的说法，这相当于在Schrodinger 表象或者（等价的）动量表象中进行计算。

现代量子力学教材上常见的是使用Fock 表象，即构造复变量

$$z = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(q + \frac{ip}{m\omega} \right), \quad (6)$$

正则量子化把这个复变量看作算子，满足 $[Z, \bar{Z}] = 1$ 。如果有一态矢满足 $Z|0\rangle = 0$ ，那么所有矢量

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n \bar{Z}^n |0\rangle \quad (7)$$

组成以上交换关系的不可约表示，从而可以被视为单粒子系统的态空间¹。容易看到在Schrodinger 表象下， $|0\rangle = e^{-m\omega q^2/2\hbar}$ 满足以上湮灭方程。既然

¹这种构造不可约表示的方法是Lie 代数表示论的核心方法，“最高权表示”。至于是数学家先找到这种方法还是物理学家先找到这种方法，我没有仔细考证，不过Elie Cartan 对Lie 代数的分类应该在量子力学出现之前。

对所有多项式 p , $p(\bar{Z})e^{-m\omega q^2/2\hbar} \in L^2(\mathbb{R})$, 而且它们组成稠密子集, 所以从代数上构造的Fock space 可以等同于从分析上构造的Schrodinger 表示空间。

$$\overline{\{p(\bar{Z})|0\rangle\}} = \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} c_n \bar{Z}^n |0\rangle \right\} = L^2(\mathbb{R}) \quad (8)$$

从数学上来说, Fock 表象相当于在经典相空间上选取了一个“复结构”, 使经典相空间成为一个复空间, 而系统的态空间可以视为这个复空间上所有的“反全纯函数”组成的空间。这个空间如果要跟Schrodinger 表象中的平方可积空间保持一致, 我们选取的这个复结构就最好跟原来的辛结构有很密切的关系, 这种“好”的复结构叫做辛空间上的“相容复结构”, 后面再详细说明。

以上这两种从经典相空间构造态空间和真空态的方式, 在数学中被总结为“实极化”和“复极化”, 这里的“极化”当然跟物理学里的“极化”没有任何关系, 我不知道这个名称的来源是什么。

4 表象

在场论中, 经典相空间一般都是无穷维空间。无穷维缺少有限维的一个重要性质, 即平移旋转不变的Lebesgue 测度的存在性。我们已经看到在Stone-von Neumann 的处理中(即Schrodinger 表示), 平方可积函数空间 $L^2(\mathbb{R})$ 可以作为态空间, 而平方可积是对Lebesgue 测度而言的。但是在无穷维, 没有这么一个“典则”的测度。

再来看Fock 表象。重新审视对有限维相空间的处理。在没有约束的情况下, 只要固定了坐标系, 有限维相空间可以看作向量空间。所有可能的位置组成向量空间 $V \cong \mathbb{R}^n$, 所有可能的动量应该被视为对偶空间(线性泛函组成的空间) V^* (这是因为动量由Legendre 变换定义, 数学上来说是一种对偶), 使得经典相空间可以写成 $X = V \oplus V^*$ 。这是一个“辛向量空间”, 就是说, 上面配备了一个非退化的反对称双线性型 $\sigma : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$,

$$\sigma((v_1, \alpha_1), (v_2, \alpha_2)) = \alpha_2(v_1) - \alpha_1(v_2) \quad (9)$$

实向量空间上的“复结构”是指一个线性变换, 其平方是负恒等, $J^2 = -I$ 。辛向量空间上的“相容复结构”是指这个复结构要保持辛形式, 即,

$$\sigma(J_x, J_y) = \sigma(x, y), \forall x, y \quad (10)$$

容易看到复结构的本征值是 $\pm i$ 。要谈论它的本征向量，必须把原来的实向量空间“复化”，即考虑复向量空间 $X_{\mathbb{C}} = X \otimes \mathbb{C} = X \oplus iX$ ，把 J 扩张到这个复向量空间上成为复线性变换。这个复向量空间可以分解成 J 的本征子空间的直和， $X_{\mathbb{C}} = W \oplus \bar{W}$ 。不同的复结构对应不同的这种直和分解。如果复结构还是跟辛结构相容的，那么以上直和分解必须满足“正性条件”

$$i\sigma(\bar{w}, w) > 0, \forall w \in W \quad (11)$$

和Lagrange 条件，即 W 是极大的迷向子空间，所谓迷向是指

$$\sigma|_W = 0. \quad (12)$$

之前讨论谐振子的时候采用的复结构是（省略系数）

$$W = \langle e_q + ie_p \rangle, J(e_q) = -e_p, J(e_p) = e_q. \quad (13)$$

那么容易看到，Fock 表象中的态矢量一一对应到反全纯部分的多项式，用多重线性代数的语言，即 \bar{W} 上的对称张量。 $Fock\ space = S(\bar{W})$ 。

这个程序可以用于无穷维辛向量空间，即，固定一个正性直和分解（复结构），态空间就可以用反全纯部分的对称张量来组成。不过注意这只适用于玻色理论，其中正则关系是交换子。对费米理论，有类似的程序，以后再谈。

真空态的构造问题涉及复结构的第三种形式，下节继续。

5 真空

（本节参考文献[1][2]）

在Fock 表象中，真空态被全纯部分湮灭， $Z|0\rangle = 0$ 。现在考查有限维相空间，取一个一般的复结构 $(V \oplus V^*)_{\mathbb{C}} = W \oplus \bar{W}$ ，希望把“全纯部分”的元素用某种方式写出来。

先来说明，投影 $W \rightarrow V_{\mathbb{C}} : (v, \alpha) \mapsto v$ 是同构。首先，它是单射，这是因为，如果 $0 \neq w = (0, \alpha) \in W$ ，那么

$$i\sigma(\bar{w}, w) = i\sigma(\bar{\alpha}(0) - \alpha(0)) = 0 \quad (14)$$

与正性条件矛盾。又因为它们维数相同，所以是同构。（在无穷维的时候应该有其它办法可以论证这一点，我暂时还没有想到。）这样，对每一

个 $v \in V_{\mathbb{C}}$, 有唯一的 $(v, \alpha_v) \in W$ 。现在就可以定义线性算子

$$A : V_{\mathbb{C}} \mapsto V_{\mathbb{C}}^*, Av = \alpha_v. \quad (15)$$

迷向条件说明这个算子作为 $V_{\mathbb{C}}^* \otimes V_{\mathbb{C}}^*$ 的元素是对称的, 而正性条件说明它的虚部是正定的。和的关系可以总结为: 前者是后者作为映射的图像。

反之, 只要有了一个虚部正定的对称双线性型, 它的图像就给出一个复结构。这是辛向量空间上复结构的第三种形式— Gauss 测度。现在“全纯部分”的元素可以写作 (v, Av) 。

上一节只说了经典相空间上的复结构, 由谐振子的类比, 态空间与反全纯函数空间同构。然而, 还没有涉及可观察量及其在态空间上的作用。有限维情形, 可以用 Stone-von Neumann 定理。在谐振子的时候用了 Schrodinger 表象, 现在对于多维相空间, 采用新的表象 (等价于 Schrodinger 表象), 即, 态空间是 $L^2(V)$,

$$v \mapsto iD_v, \quad \alpha \mapsto m_\alpha, \text{ meaning, } (m_\alpha f)(u) = \alpha(u)f(u) \quad (16)$$

计算交换子,

$$(D_v m_\alpha f)(u) = D_v(\alpha(u)f(u)) f(u) = \alpha(v)f(u) + \alpha(u)D_v f(u) \quad (17)$$

就是说,

$$[iD_v, m_\alpha] = i\alpha(v)id = i\sigma((v, 0), (0, \alpha)). \quad (18)$$

这是 Heisenberg 正则量子化。

结合关于 Gauss 测度的讨论, 来看什么样的函数被全纯部分湮灭。简单计算一下,

$$iD_v e^{i(Au)(u)/2} = -A(v)(u)e^{i(Au)(u)/2} \quad (19)$$

形式地重写以上等式,

$$(iD_v + m_{Av}) L_A = 0 \quad (20)$$

左边括号里的算子其实是经典变量 $(v, Av) \in W$ 在 Stone-von Neumann 表示里对应的算子。这个简单计算就是说, 以上 Gauss 指数函数被全纯部分 $W = \text{Graph}(A)$ 对应的所有算子湮灭。相容复结构通过 Gauss 测度的形式给出了真空态。

总结一下:

- (1) 辛向量空间 $V \oplus V^*$, $\sigma((v_1, \alpha_1), (v_2, \alpha_2))$;
- (2) $V \oplus V^*$ 上相容复结构的三种形式:
- (一) 辛同构 $J: V \oplus V^* \rightarrow V \oplus V^*$ s.t. $\sigma(J_x, J_y) = (x, y)$;
- (二) 极大正性迷向子空间 $W \subset (V \oplus V^*)_{\mathbb{C}}$ s.t. $(V \oplus V^*)_{\mathbb{C}} = W \oplus \bar{W}$;
- (三) V 上的 Gauss 测度 A , 即虚部正定的对称双线性型。
- (3) 选取一个相空间上的相容复结构, Fock 空间即为对称张量空间. 它同平方可积函数空间 $L^2(V)$ 的关系如下:

$$S(\bar{W}) \rightarrow L^2(V), \quad \bar{w}_1 \cdots \bar{w}_s \mapsto \rho(\bar{w}_1 \cdots \bar{w}_s) e^{i(Av)(v)/2} \quad (21)$$

这里 ρ 指 Stone-von Neumann 表示。

如果 V 是一个无穷维的拓扑向量空间, 比如某个时空场方程的所有解在等时截面附近的“芽”(场的初值)组成的空间, 那么以上概念和程序都依然有效(需要更加精细的定义)。相容的复结构将给出一个 Fock 表象及真空态。与有限维不同的是, 所有这些 Fock 表象并不等价, 而且平方可积空间没有自然的定义, 这时候(3)里面的式子应当被视为在选取的相容复结构(Gauss 测度)意义下的 $L^2(V)_A$ 的定义。在一个带边的时空流形上, Lagrange 作用量和类空边界将给出经典相空间, 时空内部(即系统的历史)将给出一个特殊的复结构, 这个复结构帮助确定 Fock 空间及真空态。下一节准备将以上概念体现于自由玻色场。

6 实例

一个带边的 n 维时空流形 M 上的自由玻色场作用量是

$$I = \int_M \left(-\frac{1}{2} d\phi \wedge *d\phi - \frac{1}{2} m^2 \phi \cdot *\phi \right) \quad (22)$$

或者更清楚一点,

$$I = \int_M \left(-\frac{1}{2} \|d\phi\|^2 - \frac{1}{2} m^2 \|\phi\|^2 \right) dV \quad (23)$$

在它的类空边界上, 可以进行“正则量子化”程序。首先, 找到时空里的经典场位形, 即, 对作用量作变分, 得到 Euler-Lagrange 方程 (Klein-Gordon)

$$(\square^2 - m^2)\phi = 0 \quad (24)$$

这个方程的算子解 $\phi(\mathbf{x}, t)$ 经常称为“在壳”的场。它们被视为相互作用图像中随时间演化的力学变量，在现在的自由理论情形，实际上也是Heisenberg 图像中随时间演化的力学变量。在一个固定的时刻 t ，不同空间位置的场算子 $\phi(\mathbf{x}, t)_{\mathbf{x}}$ 组成系统的“正则位形”。经过Legendre 变换，找到系统的“正则动量”空间 $\partial_t \phi(\mathbf{x}, t)_{\mathbf{x}}$ 。所有的正则位形和正则动量实际上给出了Klein-Gordon 方程的初值（或者末值），根据方程的性质，这组初值是颇为任意的，比如，对任何光滑的初值，总能找到方程的解。

如果一个类空边界分支 $K \subset \partial M$ 是等时面，那么系统的经典相空间（所有正则位形和动量），用几何的语言，就是 $\Omega^0(K) \oplus \Omega^{n-1}(K)$ ，即，场的初值及法向导数。这里的记号分别指 K 上的0阶微分形式（即函数）和 $(n-1)$ 阶微分形式。它们正好互为对偶，通过配对

$$(f, \alpha) \mapsto \int_K f \alpha \quad (25)$$

这个积分有意义是因为函数乘上顶阶形式还是顶阶形式，从而可以在流形上积分。这样经典相空间成为之前研究过的标准的辛向量空间。

要构造Fock 表象和真空态，必须引进相容复结构。这个复结构来自于整个时空流形（可以被视为系统的历史，如果把经典相空间作为末值的话）。时空里场方程的所有解（在壳的场）组成空间 W ，它可以嵌入 $(\Omega^0(K) \oplus \Omega^{n-1}(K))_{\mathbb{C}}$ 作为子空间，

$$\phi \mapsto (\phi|_K, i(*d\phi)|_K) \quad (26)$$

就是把场方程的解对应到其初值，再用虚数单位“扭”一下。这个映射是嵌入由初值问题解的唯一性以及连续依赖性保证（双曲方程好像没有这么好的性质，所以这里在严格性上有很大的问题，解决的办法是归结为另一个不够严格的过程—先用虚时间，把双曲方程化为椭圆方程，在完成量子化手续，算出散射概率或者关联函数以后再回到Lorentz 时空指标）。

这么巧的是，这个嵌入的像定义了一个相容复结构，

$$(\Omega^0(K) \oplus \Omega^{n-1}(K))_{\mathbb{C}} = W \oplus \bar{W} \quad (27)$$

这样就可以构造出Fock 空间和真空态（有兴趣的同修可以考虑一下这里的细节）。事实证明，这个表象只依赖于边界 K 的邻域，而与任一有限时间之前的时空无关。这个现象，我还没有领会。盼熟悉物理的同修加以点拨。

7 流形

经典相空间一般都是辛空间，从历史角度来说就是可以写下Hamilton运动方程的空间。数学上把量子化总结为从一个辛空间出发构造Hilbert空间及其上一系列满足Heisenberg交换关系的算子的问题。谐振子的例子里，这个辛空间本质上只是一个向量空间，物理学家往往称这种空间为“拓扑平凡的”。数学上非常感兴趣的是，给一个“拓扑非平凡”的辛空间，量子化到底是什么意思。

一类拓扑非平凡的空间都落在一个比较好的范畴中，它们在数学上就叫“流形”。一个 n 维“流形”是一个拓扑空间，它的每个局部在拓扑上都等价于 \mathbb{R}^n 的开集，就是说，局部上每个点对应到 \mathbb{R}^n 的一个点，有一组坐标，这就是局部坐标系。两个局部重叠的地方，就有两个局部坐标系，它们相差一个坐标变换。由以上定义，这些坐标变换自然是拓扑等价（即双方连续的一一对应）。如果其中某些坐标变换还是无穷次可微的，而且它们涉及到的局部可以合起来覆盖整个流形，那么这个流形就是“光滑”的。把所有互为光滑变换的局部坐标系都收集起来，它们叫做这个光滑流形的“容许坐标系”。

在光滑流形上，可以谈论“光滑”函数。一个函数如果在一个容许坐标系下是光滑的，那么在另一个重叠的容许坐标系下也光滑，因为坐标变换是光滑的。通常这么叙述这种好处：光滑性不依赖于局部坐标选取。在流形上，与局部坐标选取无关的“概念”，“性质”，和与局部坐标变换相容的“量”，才是有几何意义的。这一点，微分几何的创始人Gauss, Riemann应该都心里有数。Einstein在他的物理学里也强调了这一点。

在流形上没有线性结构，不能把两个点加在一起，也不能连接两个点成为一个“向量”。不过在每一点的局部，就好像在欧氏空间一样，可以在这一点对函数“求方向导数”，这种运算是局部函数空间上的线性算子。以它们为模型的整体对象叫做在该点的“切向量”。在局部上还有一个有趣的东西就是函数在一点的“微分”，

$$df_a = \sum_i \left. \frac{\partial f_a}{\partial x^i} \right|_a dx^i \quad (28)$$

以它为模型的整体对象叫做一个“余切向量”（或者仍然叫做微分）。然后顾名思义，一个“光滑切向量场”就是在每一点有一个切向量，以光滑方式依赖于基点。对偶的概念是“微分1-形式”，即，光滑余切向量场。在

局部坐标系下，切向量场和微分1-形式通常写成

$$X = X^i(x) \frac{\partial}{\partial x^i}, \xi = \xi_i(x) dx^i \quad (29)$$

这里用了Einstein 求和约定。系数都是局部坐标系里的光滑函数（但不是整体的光滑函数，将随坐标变换而变）。

在每一点上，由方向导数和微分组成的多重线性对象，以整体方式定义以后，叫“张量”。张量场跟前面类似。搞数学的喜欢用整体记号，就像上面那个式子一样，把分量和基写在一起，变换局部坐标的时候，基底和分量同时变，而它们的组合不变，从而左边的字母代表一个不依赖于局部坐标系的量；搞物理的喜欢只写出分量而省略基底，这样的记号明显依赖于局部坐标系。

8 力学

如果一个系统包含N 个粒子，它们在空间的位置受到s 个独立方程的限制。满足这些方程的位置组成 $3N$ 维欧氏空间的一个子集M, 称为“位形空间”。

$$F_i(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N) = 0, i = 1, 2, \dots, s \quad (30)$$

这些方程独立的意思是，Jacobi 矩阵 DF 的秩处处是s. 根据隐函数定理，在M 的每一点，存在一个邻域 $U \subset M$ ，在这个邻域里，可以找到 $3N-s$ 个独立坐标函数，其它s 个坐标函数由这 $3N-s$ 个独立坐标的函数决定。这相当于说，M 的每个局部都拓扑等价于 \mathbb{R}^{3N-s} 的开子集，即，M是一个 $3N-s$ 维的流形。如果F 还是光滑的，那么M 是一个光滑流形。局部坐标系里的坐标就是Lagrange 分析力学的“正则坐标”。

Lagrange 的方法是定义一个函数L, 变量为正则坐标和该坐标点的“虚速度”（在考虑粒子运动轨迹之前，无法谈论速度。这里的虚速度是位形空间M 的切向量，也就是粒子在这一位置的可能速度）。用流形的语言，指定一个切向量的同时，也就指定了它的基点，而所有切向量的集合称为“切丛”。所以Lagrange 量L 实际上是切丛上的函数。

Legendre 变换利用Lagrange 量把虚速度变为动量。用流形的语言，就是把切向量映到余切向量，把切丛 TM 映到余切丛 T^*M 。在余切丛上，局部坐标是正则坐标和正则动量，它们满足Hamilton 运动方程。它们的函数

也满足相应的运动方程，而所有运动方程都能写成统一的形式，

$$\frac{df(t, q(t), p(t))}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}. \quad (31)$$

这里的Poisson 括号局部定义为

$$\{f, g\} = \sum_{i=1}^{3N-s} \left(\frac{\partial f}{\partial q^i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q^i} \right) \quad (32)$$

Poisson括号是双线性，反对称的，满足Jacobi 恒等式和Leibniz 法则，这里就不详述了。要用到的时候其意自明。需要单独列出的是，

$$\{q^i, p_j\} = \delta_j^i \quad (33)$$

Hamilton 力学的特征被数学家总结为辛几何。位形空间的余切丛 T^*M （物理学家称为相空间）是所谓“辛流形”的范例。

9 几何

观察Poisson 括号的形式，发现它隐含正则坐标和正则动量的反对称。这种反对称性被抽象为流形上的一个“二阶外微分形式”

$$\omega = \sum_i dq^i \wedge dp_i \quad (34)$$

它具有以下性质：它是闭形式， $d\omega = 0$ ；非退化；它是恰当形式， $\omega = d(\sum q dp) = d(-\sum p dq)$ 。

如果想推广到一般流形，第三条性质似乎不是那么必要。仅凭前两条，已经基本可以模拟所有Hamilton 力学的特征。带有这么一个闭的，非退化2-形式的流形就叫做“辛流形”，这个形式就叫做“辛形式”。

现在用流形上整体的语言定义Poisson 括号。首先，注意到辛形式是非退化的，所以我们可以利用它来实现“指标升降”，用数学的话来说，实现切空间和余切空间的同构。它可以把一个微分转化成一个切向量场。流形上的每个光滑函数给出一个微分 df ，用辛形式对偶一下，就得到由 f 给出的切向量场 X_f ，满足如下等式，

$$\omega(X, X_f) = df(X) \quad \forall X \quad (35)$$

要看到它跟Poisson 括号的关系，需要Darboux 定理：辛流形里每一点附近都存在一个局部坐标系，使得辛形式在该坐标系下具有之前写下的标准形式。这个定理给出一个好的局部坐标系，在这个坐标系下计算，

$$X_f = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q^i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q^i} \right). \quad (36)$$

非常明显，Poisson 括号应该定义为

$$\{f, g\} = X_f g = dg(X_f) = \omega(X_f, X_g). \quad (37)$$

从这个定义立即看到双线性，反对称和Leibniz 法则。要证明Jacobi 恒等式，需要注意到 $\mathcal{L}_{X_f}\omega = 0, \forall f \in C^\infty(M)$ 。即，光滑函数通过辛形式给出的切向量场保持辛形式。一个重要推论是，

$$[X_f, X_g] = X_{\{f, g\}} \quad (38)$$

这个式子是如此接近Dirac 量子条件。可以预料到它将直接与量子化相关。

Hamilton 力学如果用几何的语言来描述，就是说，辛流形上有一个特殊的光滑函数，叫做Hamilton 函数，它通过辛形式产生的切向量场就是Hamilton 正则方程。这组方程的解，几何上就是相应的切向量场生成的流形的单参数光滑同胚群，它描述系统的“相”随时间的演化。

10 量子条件

“量子化”问题在数学上可以这么说：给一个辛流形 (M, ω) ，希望构造一个Hilbert 空间，使得M 上的函数对应到这个Hilbert 空间上的算子， $f \mapsto \hat{f}$ ，满足以下条件：（1）线性。函数的加法和数乘保持为相应算子的加法和数乘。（2）常函数对应到常数算子。这样物理常数才能作用于波函数。（3）Dirac 量子条件 $[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar \widehat{\{f, g\}}$ 。

把量子条件和上一节提到的Poisson 括号同切向量场的关系作一比较，发现 $f \mapsto i\hbar X_f$ 满足线性和量子条件。切向量场作为算子，作用于M 上的光滑函数。包含光滑函数的Hilbert 空间，最方便的当然是平方可积函数空间 $L^2(M)$ 。好像胜利就在眼前。可惜，常函数对应的切向量场是0，不符合条件（2）。立即想到的办法是，稍微修正一下， $f \mapsto i\hbar X_f + \mathcal{M}_f$ 。这里 $(\mathcal{M}_f\psi)(x) = f(x)\psi(x)$ 。这样条件（2）满足了，再计算交换子，

$$[i\hbar X_f + \mathcal{M}_f, i\hbar X_g + \mathcal{M}_g] = i\hbar (i\hbar X_{\{f, g\}} + 2\mathcal{M}_{\{f, g\}}) \quad (39)$$

第一遍算的时候肯定会怀疑算错了，一切都那么完美，除了那个2倍。还需要再想办法修正。首先，必须保证条件(2)，所以修正项最好含有 X_f 。然而希望消去的是一个“乘上函数”的算子，那么修正项最好也是乘上函数。从切向量场得到函数的办法，无非是用一个1-形式 θ 作用一下。看看最简单的例子，粒子的动量是相空间上的函数，它决定的切向量场是 $-d/dq$ ，按照现在的计划， $p \mapsto -i\hbar d/dq - \theta(-d/dq) + p$ 。跟Schrodinger表示相比较，发现 $\theta = -pdq$ 。它是辛形式的“原形式”， $d\theta = dq \wedge dp$ 。从这个例子得到提示，假设有一个1-形式满足 $d\theta = \omega$ ，那么可以把相空间上的函数对应到算子

$$\hat{f} = i\hbar X_f - \mathcal{M}_{\theta(X_f)} + \mathcal{M}_f \quad (40)$$

计算交换子，

$$[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar (i\hbar X_{\{f,g\}} - \mathcal{M}_{X_f(\theta(X_g))} + \mathcal{M}_{X_g(\theta(X_f))} + 2\mathcal{M}_{\{f,g\}}) \quad (41)$$

再应用外微分公式

$$\omega(X_f, X_g) = d\theta(X_f, X_g) = X_f(\theta(X_g)) - X_g(\theta(X_f)) - \theta([X_f, X_g]) \quad (42)$$

就得到完美结果 $[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar \widehat{\{f, g\}}$ 。如果辛形式的确有一个“原形式”，那么以上构造就给出了Hilbert空间和代表可观察量的算子。需要指出，这并没有得到跟量子力学原理吻合的量子化，只要计算一下粒子的正则坐标对应的算子就能看到。其原因是，现在的Hilbert空间是坐标和动量的函数，而量子力学原理要求波函数要么只是坐标的函数，要么只是动量的函数。因此以上过程称为“预量子化”。

一般的辛流形，其辛形式并不是恰当的，就是说，不存在一个“原形式”。但是如果限制在局部，就像欧氏空间一样，闭形式总是恰当形式。因此在每个局部都可以进行预量子化。这显然强烈依赖于局部坐标的选取。怎样把这些局部的数据“拼接”起来是下一节要说的的问题。

11 丛与联络

取流形 M 的一个开覆盖，就是一族开集 $\{U_\alpha\}$ 使得 $\cup_\alpha U_\alpha = M$ 。它们可以取得比较好，比如，它们都同胚于欧氏空间，它们之间任意的交集也都同胚于欧氏空间。这种覆盖叫一个好的覆盖。它的好处是，在它们重叠的地方，Poincare引理总成立：闭形式一定是恰当形式。

这样在每一个开集 U_α 上，辛形式有原形式 θ_α 。上一节的程序就构造了算子 \hat{f}_α ，作用在局部的函数上，

$$i\hbar X_f \psi(x) - \theta_\alpha(X_f)\psi(x) + f(x)\psi(x) \quad (43)$$

如果 $U_\alpha \cap U_\beta \neq \emptyset$ ，在这个交集上就有两个算子 $\hat{f}_\alpha, \hat{f}_\beta$ ，来自两个开集上的预量子化程序。它们作用在同一函数上得到不同的结果，相差 $(\theta_\beta - \theta_\alpha)(X_f)\psi(x)$ 。因为两个1-形式的外微分都是辛形式，所以在重叠部分它们的差是一个闭的1-形式，这个闭的1-形式是局部恰当的，可以写成一个局部函数（定义在重叠部分）的微分，

$$\theta_\beta - \theta_\alpha = d\lambda_{\alpha\beta} \quad (44)$$

对每一对开集，都有这么一个定义在重叠区域上的函数。这些局部函数可以用来拼接局部数据。做法如下。既然来自于两个开集的算子作用在同一函数上得到不同结果，那么最好各司其职，只作用在自己那个开集的局部函数 ψ_α 上。在两个开集重叠的部分，自然希望两个算子作用在各自的局部函数上得到的结果之间有某种简单关系。也就是说，希望把

$$(\theta_\beta - \theta_\alpha)(X_f)\psi = d\lambda_{\alpha\beta}(X_f)\psi \quad (45)$$

吸收到某种简单关系中去。解过微分方程的人都比较熟悉的技巧是，将函数乘上积分因子可以把线性项吸收到导数之中。这提示我们可以通过积分因子 $e^{i\lambda_{\alpha\beta}/\hbar}$ 将不同开集的局部函数联系起来，即，如果在 U_β 上取了局部函数 ψ_β ，那么在 U_α 上就相应地取局部函数 $\psi_\alpha = e^{i\lambda_{\alpha\beta}/\hbar}\psi_\beta$ ，再分别用 $\hat{f}_\alpha, \hat{f}_\beta$ 作用，得到，

$$\hat{f}_\alpha \psi_\alpha = e^{i\lambda_{\alpha\beta}/\hbar} \hat{f}_\beta \psi_\beta \quad (46)$$

也就是说，作用以后的局部函数之间的关系跟作用以前局部函数之间的关系是一样的。有了这个结果，就可以定义流形上一个整体的量（暂时叫做一个“波”），它在各个开集上的限制都是局部函数，在两个开集重叠的部分满足以上变换关系。再定义一个整体的算子，它作用在一个“波”上面，就是之前的分片作用 $\{\hat{f}_\alpha\}$ ，作用之后，发现局部得到的结果还可以拼成一个“波”。（上一个式子保证这一点。）所以可以把所有的“波”放在一起组成一个空间，它上面有可观察量 \hat{f} 的作用。现在可以说，在辛形式不是恰当的时候，也可以做预量子化，只不过这个时候的Hilbert空间里面不再是流形上整体定义的函数了，而是由局部函数根据某种变换规则拼接起来的“波”。

以上的拼接过程并不严密。比如，如果有三个开集，两两相交，那么从开集1的局部函数得到开集3的相应局部函数的办法有两个：直接乘上1, 3之间的积分因子，或者先乘上1, 2之间的积分因子找到开集2里相应的局部函数，再通过2, 3之间的变换找到开集3里相应的局部函数。如果三个开集没有共同的部分，那就不会有什么问题。如果三个开集的交不空，在这个交上面，第三个局部函数的值可能因为上述两种方式而不相符。这就是说，如果局部函数要能拼接成一个整体对象，这些积分因子必须满足条件

$$e^{i\lambda_{\alpha\beta}/\hbar} e^{i\lambda_{\beta\gamma}/\hbar} e^{i\lambda_{\gamma\alpha}/\hbar} = 1, \quad \text{or} \quad \lambda_{\alpha\beta}\lambda_{\beta\gamma}\lambda_{\gamma\alpha} \in 2\pi\hbar\mathbb{Z} \quad (47)$$

这个条件并不容易满足。虽然这些和一定是常数（微分一下就看到了），不过注意到固定了 θ_α 以后， $\lambda_{\alpha\beta}$ 的选取也不是唯一的，还可以加上任意的实常数。

这个整性条件有一个同调论的解释。在覆盖中的每个开集里取一个点，如果两个开集的交非空，就用一条线段连接两个开集里的点（使线段在它们的并里面），如果三个开集的交非空，就填入相应的三角形（也在并里面），……这些单形可能在流形中是退化的（比如二维流形的四个开集相交的情况）。流形的上同调可以用这个单纯复形来计算。特别地，容易看到辛形式 ω 在每个这样的三角形上的积分都是 $\lambda_{\alpha\beta}\lambda_{\beta\gamma}\lambda_{\gamma\alpha}$ 加上一些边界修正项。这样辛形式在单纯复形的一个2维闭链上的积分就等于所有这种形式的“三项和”加在一起（边界修正都抵消了）。因此，如果存在 λ 使得这些“三项和”都是 2π 的整数倍，那么辛形式 ω 在M里的闭曲面上积分一定是的整数倍，或者用同调的语言， $\omega/(2\pi\hbar)$ 所在的de Rham同调类一定要落在整系数同调群在实系数同调群的像里。

这一节已经涉及到了很不浅显的数学。将局部函数拼接成整体对象，在数学上是构造了一个M上的“复线丛”。一个“波”就是这个复线丛的一个“截面”。对任何M上的光滑函数f构造的算子的前两项（某个局部坐标系下）

$$i\hbar \left(X_f + \frac{i\theta_\alpha}{\hbar}(X_f) \right) \quad (48)$$

合起来称为“协变导数”，是流形上的整体对象，记作 ∇_{X_f} 。它作用于线丛的截面。其中只在局部有定义的1-形式 θ_α 称为“联络形式”，在坐标变换下作“规范变换” $\theta_\beta = \theta_\alpha + d\lambda_{\alpha\beta}$ 。

在对辛形式“整性”的分析中，用到了Cech上同调的想法，就是通过好的开覆盖的相交性质来计算和看待流形的同调群。那些“三项和”放在

一起称为一个Cech 2-上链，它来自于“函数值的Cech 1-上链” λ 。积分因子也组成一个“函数值的1-上链”。“整性条件”用同调的语言，就是说这个积分因子的1-上链是闭的。闭上链一般称为“上循环”。所以在一般的纤维丛上，转移函数（积分因子）需要满足这个“上循环”条件。Cech 上同调可以看作好的开覆盖给出的那个单纯复形的上同调。

用数学语言总结一下：对于辛形式满足整性条件的辛流形 (M, ω) ，可以进行预量子化。首先，构造一个线丛和丛上一个联络，使得这个联络的曲率是 $i\omega/\hbar$ 。然后，取线丛的所有光滑截面，组成线性空间 V ，这些截面是“波函数”的推广。最后，对 M 上每一个光滑函数 f （经典力学变量），构造作用在 V 上的算子 $f \mapsto i\hbar X_f + \mathcal{M}_f$ 。这些算子满足Dirac量子条件，且常数变量对应到常数算子。

虽然这里的数学很漂亮，但这还不是真正的量子化。要同量子力学原理相一致，需要去掉一些“波函数”（截面），还要在剩下的截面之间定义内积，使量子力学的概率解释有效。

12 正则变换

量子力学的波函数只依赖于相空间的“一半”坐标。一般的辛流形没有自然的“坐标”，“动量”分离，或者说，在局部上有多种选择“坐标”“动量”分离的方式。在经典力学里，虽然有自然的坐标和动量，但仍然可以通过所谓“正则变换”选择新的“坐标”“动量”，它们没有物理上的含义，但可以把运动方程化为比较简单的形式。Hamilton-Jacobi方法假定有一个正则变换可以把运动方程化为“最简”形式，然后得到这个变换的“生成函数”所满足的方程，这就是著名的Hamilton-Jacobi方程。

当年量子力学以两种形式出现，矩阵力学实现为Hamilton正则方程形式，波动力学受到Hamilton-Jacobi方程的启发。这不是偶然，因为早在19世纪初年，Hamilton就已经非常深刻地理解了“波”和“粒子”的统一性。说到这里，想起来上周还看到这里图书馆门口放着有人还回来的《Hamilton论文集》。我自己一直没有勇气去读他的东西，但我想对于做数学物理的人来说，Hamilton的全集值得挖掘。

现在用微分几何的语言描述一下正则变换和Hamilton-Jacobi方法。为了同先贤们保持一致，我们就研究最原始的辛流形—位形空间的余切丛 T^*Q 。首先来看这个辛流形上有趣的数学。

它上面的辛形式是恰当的，有一个原形式 θ 。在局部坐标下的表达式大家都熟悉了。这个原形式有一个有趣的内在描述。它是一个1-形式，要定义它，只需定义它在任何切向量 $\xi \in T(T^*Q)$ 的值。这里涉及到两个投影， $\Pi : T(T^*Q) \rightarrow T^*Q$ ， $\pi_* : T(T^*Q) \rightarrow TQ$ 。定义 $\theta(\xi) = -(\Pi\xi, \pi_*\xi)$ 。这里的尖括号是 Q 的余切空间和切空间的配对。在局部坐标下， $\theta = -\sum p_i dq^i$ 。（这里的负号看上去很不和谐，它说明 $\sum dp_i \wedge dq^i$ 才是更自然的辛形式。不过为了同经典力学保持一致，还是采用 dq 在前的辛形式。）

位形空间的一个1-形式 $\alpha \in \Omega^1(Q)$ 是向量丛 T^*Q 的一个截面，也就是一个光滑映射 $\alpha : Q \rightarrow T^*Q$ ， $q \mapsto \alpha_q$ 使得 $\pi \circ \alpha = \text{id}$ 。有趣的是， $\alpha^*(-\theta)$ ，因为

$$(\alpha^*(-\theta))_q(X) = -\theta((\alpha_*)_q X) = \langle \alpha_q, X_q \rangle \quad (49)$$

的像 $R(\alpha)$ 与 Q 微分同胚。那么以上关系实际上意味着， α 是闭形式当且仅当 $R(\alpha)$ 是Lagrange子流形，即，辛形式在其上的限制恒等于0的极大子流形。局部上闭形式是恰当形式，所以局部上存在 Q 上的函数 S ，使得 $dS = \alpha$ 。这个函数叫做相应的Lagrange子流形 $R(\alpha)$ 的“生成函数”。

下面先把正则变换同Lagrange子流形联系起来，这样正则变换也会有生成函数。本来正则变换是在一个相空间上发生的，但为了让符号更清晰，来看两个同维数的位形空间。正则变换就是保持辛形式的微分同胚，

$$\rho : T^*Q \rightarrow T^*Q' \quad \text{such that} \quad \rho^*\omega' = \omega \quad (50)$$

两个辛流形的乘积还是一个辛流形 $(T^*Q \times T^*Q', \omega + \omega')$ 。计算两个辛形式的和在正则变换的“图像” $Gr(\rho) = \{(m, \rho(m)) | m \in T^*Q\} \subset T^*Q \times T^*Q'$ 上的限制，

$$\omega(\xi) + \omega'(\rho_*\xi) = \omega(\xi) + \rho^*\omega(\xi) = \omega(\xi) + \omega(\xi) \quad (51)$$

如果其中一个辛形式有个负号，就正好抵消。引入“反正则变换” $\bar{\rho}(\alpha_q) = -\rho(\alpha_q)$ ，则它的图像 $Gr(\bar{\rho})$ 是乘积空间的Lagrange子流形。

要写出这个Lagrange子流形的局部生成函数，需要它局部上是一个 $Q \times Q'$ 上的1-形式的图像。引入局部辛坐标，假定 $\rho : (q, p) \mapsto (q', p')$ 。它对应的反正则变换 $\bar{\rho} : (q, p) \mapsto (q', -p')$ 的图像如果是一个1-形式 $(\alpha_{(q, q')}, \alpha'_{(q, q')})$ 的像集，那么对任何 $(q^*, q'^*) \in Q \times Q'$ ，存在唯一的 p^* ，使得 $\pi_1 \circ \bar{\rho}(q^*, p^*) = q^*$ 。由隐函数定理，这个方程在局部有唯一解的条件是Jacobi矩阵 $\partial q' / \partial p$ 处处非退化。解出 $p^* = p^*(q^*, q'^*)$ 之后，记

$$p'^* = \pi_2 \circ \rho(q^*, p^*(q^*, q'^*)) =: p^*(q^*, q'^*) \quad (52)$$

则可写出1-形式 $p^*(q, q')dq - p'^*(q, q')dq'$, 它是闭的 (因为对应于Lagrange子流形), 所以局部存在原函数

$$S(q, q') = \int^{(q, q')} p^*(q, q')dq - p'^*(q, q')dq' \quad (53)$$

定义到相差一个常数。这个函数就称为正则变换 ρ 的局部生成函数。

反过来, 如果有一函数 $S(q, q') \in C^\infty(Q \times Q')$, 它的微分给出 $T^*(Q \times Q') = T^*Q \times T^*Q'$ 的一个Lagrange子流形。这个子流形可以实现为一个反正则变换的图像的条件为 (用局部坐标), 对任意 (q^*, p^*) , 存在唯一的 q'^* , 满足方程

$$\frac{\partial S}{\partial q}(q^*, q'^*) = p^* \quad (54)$$

这个方程在局部有唯一解的条件是Hessian 矩阵 $\frac{\partial^2 S}{\partial q' \partial q}$ 处处非退化。解出 $q'^* = q'^*(q^*, p^*)$ 之后, 得到S生成的局部正则变换

$$(q, p) \mapsto \left(q'^*(q, p), -\frac{\partial S}{\partial q'}(q, q'^*(q, p)) \right). \quad (55)$$

看一个重要例子。经典系统的时间演化由一个相空间上的函数H (Hamiltonian) 决定如下: 它对应到切向量场 X_H , 而切向量场会在局部生成单参数变换群 $\rho_t: T^*Q \rightarrow T^*Q$ 。这个群里每一个变换都保持辛形式, 所以是正则变换。现在固定一个时间t, 看怎样写出 ρ_t 的局部生成函数。回顾之前的讨论, 首先要对任意 (q, q') 找到相应的 p 使得具有初相 (q, p) 的系统在t 时间后位置为 q' 。这是Hamilton 运动方程的边值问题。解边值问题, 得到 $(q(t), p(t))$, 那么初动量和末动量就分别为 $p=p(0)$ 和 $p'=p(t)$ 。这个由边值得到初动量的过程可以看作是一个局部微分同胚 $h: Q \times Q \mapsto T^*Q$ 。这个微分同胚把我们寻找的 $Q \times Q$ 上的1-形式 (见前面两段分析) “推进” 到相空间上的1-形式 $-\theta + \rho_t^* \theta$ 。因为

$$\frac{d}{dt}(\rho_t^* \theta - \theta) = \mathcal{L}_{X_H} \theta = X_H \lrcorner d\theta + d(\theta(X_H)) = d(\theta(X_H) - H). \quad (56)$$

右边外微分符号里面实际上是H 的Legendre 变换, 即Lagrange 量。所以这个1-形式在相空间上可以写成Lagrange 量 (作为相空间上的函数) 的微分dL 沿真实运动轨迹的积分

$$\int_0^t dL(q(s), p(s)) ds = d \left(\int_0^t L(q(s), p(s)) ds \right). \quad (57)$$

很明显这个形式的原函数是所谓“Hamilton 主函数”(Lagrange 量的时间积分)

$$\tilde{S}(q, p, t) = \int_0^t L(q(s), p(s)) ds \quad \text{with} \quad (q(0), p(0)) = (q, p). \quad (58)$$

它是相空间上的函数(系统初相的函数)。而 $Q \times Q$ 上的生成函数就是复合

$$S(q, q', t) = \tilde{S}(h(q, q'), t). \quad (59)$$

反过来, 由这个生成函数得到等价于系统演化的一系列正则变换 ρ_t 的过程实际上蕴涵了所谓“Hamilton 原理”(最小作用量原理之一), 即, 系统用时间 t 从 q 到 q' 的真实演化使 $S(q, q', t)$ 作为运动轨迹的泛函取到临界值。

用Lagrange 子流形来代表正则变换, 是几何学家Weinstein 的创见。用这个观点来看待经典力学, 更容易把正则变换, 生成函数, 系统演化之间的关系理清楚。

13 正则变换2

上一节联系了正则变换, Lagrange 子流形和生成函数。现在来寻找一个正则变换, 使Hamilton 正则方程组具有最简单的形式。

Hamilton 方程具有整体形式 $\dot{\phi}_t = X_H(\phi_t)$, 即系统的演化是由Hamilton 量 H 的“辛梯度”生成的。所以Hamilton 方程在任何辛局部坐标下具有相同的形式。如果能选取一个局部辛坐标系 (q', p') 使得Hamilton 量只依赖于 q' , 而不依赖于 p' , 那么Hamilton 方程就成为

$$\dot{q}' = 0 \quad \dot{p}' = -\frac{\partial H}{\partial q'}(q'). \quad (60)$$

从而直接得到所有的解

$$q' = a(\text{constant array}) \quad p' = b + ct. \quad (61)$$

这里 a, b 是积分常数, 由初始条件决定, 而常数 $c = -\frac{\partial H}{\partial q'}(a)$ 。再用逆变换得到物理的坐标和动量 (q, p) 随时间的演化。

如果局部生成函数 $S(q, q')$ 生成具有以上性质的变换, 那么首先根据上一节

$$p = \frac{\partial S}{\partial q} \quad p' = -\frac{\partial S}{\partial q'} \quad (62)$$

Hamilton 量独立于新正则坐标的条件为

$$\frac{\partial H}{\partial p'} \left(q(q', p'), \frac{\partial S}{\partial q}(q(q', p'), q') \right) = 0 \quad (63)$$

这个条件等价于

$$H \left(q(q', p'), \frac{\partial S}{\partial q}(q(q', p'), q') \right) = C(q') \quad (64)$$

这里 $C(q')$ 是只依赖于 q' 的数。

寻找满足这个条件的函数 $S(q, q')$ 的方法就是解以下这个以 q 为变量, 以 $S(q)$ 为未知函数, 以 $C(q')$ 为参数的方程,

$$p = \frac{\partial S}{\partial q} \quad p' = -\frac{\partial S}{\partial q'} \quad (65)$$

这个偏微分方程就叫做不含时的 Hamilton-Jacobi 方程。如果这个方程有一族以 q' 为参数的解 $S(q, q')$, 则这一族解作为 (q, q') 的函数生成的变换 $(q, p) \mapsto (q', p')$ 满足上一段那个较为复杂的条件, 从而是此节开头要求的“好”的正则变换。

看看最简单的例子, 一维谐振子。Hamilton-Jacobi 方程的形式为

$$\left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + m^2 \omega^2 q^2 = C(q') \quad (66)$$

本质上是一个线性常微分方程, 可以直接积分。做一个方便的选择, 取 $C(q') = (q')^2$, 则得到一族解

$$S(q, q') = \frac{(q')^2}{2m\omega} \arcsin \left(\frac{m\omega q}{q'} \right) + \frac{qq'}{2} \sqrt{1 - \left(\frac{m\omega q}{q'} \right)^2} \quad (67)$$

它生成的正则变换

$$q' = \sqrt{p^2 + m^2 \omega^2 q^2}, \quad p' = a \text{ complicated function} \quad (68)$$

是满足 $\dot{q}' = 0$, $\dot{p}' = 0$ 的正则坐标。(新正则坐标 q' 实际上是 Hamilton 量的函数 $\sqrt{2mH}$, 在系统演化中守恒。)

当然, 在谐振子的情况, 直接解 Hamilton 方程要容易得多。其它很多系统也是如此。Hamilton-Jacobi 方法只有理论上的意义。

H-J 方程有一个几何解释。它的一个局部解 $S(q)$ 生成相空间里局部的一个 Lagrange 子流形 (dS 的图像), Hamilton 量沿着这个子流形是

常数。H-J 方程的一族解就生成一族局部Lagrange 子流形。如果这一族局部Lagrange 子流形充满相空间的一个邻域（被新正则坐标 q' 参数化），那么它们给出新的非常方便的正则坐标（由 $S(q, q')$ 生成的正则变换，每一Lagrange 子流形就是新动量空间 $\{(q', p') | q' = \text{const.}\}$ ）。

一般的辛流形并不一定能实现为某个位形空间的余切丛。寻找新的正则坐标在一般辛流形情形的类似过程就是寻找 Lagrange 分叶结构，即，找一族Lagrange 子流形来充满整个辛流形。波函数只依赖于一半正则坐标这个特点就被搬到一般辛流形上，成为实极化这个概念。

14 复极化

在辛向量空间量子化的例子里，实极化是Schrodinger 表象，复极化是Fock 表象。Fock 表象中的态矢量是复变量 $q + ip$ 的反全纯函数。而数学传统用全纯函数讨论问题比较方便，所以在预量子化时做一个小变动，即让Heisenberg 量子条件成为 $[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar \widehat{\{f, g\}}$ 。这样预量子化得到的复线丛的曲率形式是 $F = -i\omega$ 。

如果M 有一个复结构J，而且复结构同原来的辛结构有某种相容性，即，M 在此复结构下是一个Kahler 流形（选取这样一个Kahler 结构叫做“复极化”），那么复线丛的联络 $-i\theta$ 给了复线丛一个“全纯结构”，使它成为一个“全纯线丛”，即可以选择M 的开覆盖使线丛的转移函数是M 局部的全纯函数。有了全纯结构，就可以谈论“全纯截面”，即可以用转移函数拼成整体截面的局部全纯函数。这些“全纯截面”是Fock 表象全纯函数的推广，它们代表系统的不同状态。把所有的全纯截面收集起来，就得到了系统的态空间。如果想严格地得到Hilbert 空间，就需要定义一个内积。这个内积可以由线丛的全纯结构自然给出。在这个内积下，取所有平方可积的全纯截面，就得到一个真正的Hilbert 空间。如果M 上的一个光滑函数f 的Hamilton 向量场保持复结构J，那么它在预量子化时对应的算子把全纯截面映到全纯截面，从而是态空间上的算子，这样的f 被量子化了。由此，并非所有的经典力学变量都可以在几何量子化的框架中被量子化。保持复极化的力学量可以量子化，当然，还有一些不保持复极化的力学量在特殊的情况下也可以量子化。以后会谈到。

复极化方法使几何量子化同复几何联系起来，更有趣的是，同代数几何联系起来。这是因为，Kodaira 嵌入定理保证，对紧致Kahler 流形M，

以上构造的这个线丛可以把 M 作为解析子流形嵌入复射影空间。这个结果加上周炜良定理（复射影空间的紧致光滑解析子流形一定是代数流形），就说明容许复极化的可量子化紧致辛流形一定是代数流形。（可量子化就是以上线丛的存在性。）

不妨看看最简单的代数流形，复射影直线 CP^1 ，它自然是一个Kahler流形，它上面有自然线丛（射影直线上每一点是仿射平面里的一条直线），这个线丛的对偶线丛正好是预量子化线丛，它的全纯截面就是齐次坐标，所以量子化得到一个二维的Hilbert 空间。以后会看到， CP^1 是 $spin-1/2$ 粒子的经典相空间，而量子化得到的二维Hilbert 空间中的矢量就是自旋波函数。将复射影直线的辛形式乘上 k ，得到一个新的辛流形，它的预量子化线丛是原来预量子化线丛的 k 次张量积，这个新线丛的截面其实是 k 次齐次二元多项式，它们张成 $k+1$ 维空间，这是 $spin-k/2$ 波函数的取值空间。

这是一个很典型的代数几何—表示论—几何量子化相互关联的例子，它是所谓Borel-Weil-Bott定理在李群 $SU(2)$ 时候的特殊形式。

15 时间演化

说年底之前要完成这个系列的，一转眼就到了。逝者如斯夫，不舍昼夜。各位一定要珍惜自己的黄金时代，多学多想多做。

在这一节也许应该谈谈Schrodinger 方程了。一般认为这是量子力学最核心的基本假设。几何量子化理论试图从经典几何的概念“重构”Schrodinger 方程，注意，是重构，而不是导出。正如sage 所说，量子化程序本身就是假设，即令通过这套程序使Schrodinger 方程成为推论，也只能说明关于量子化程序的假设同关于Schrodinger 方程的假设等价。何况，“极化”的过程导致，并不是所有的经典力学变量都能实现为量子力学变量，特别地，并不是任意形式的经典Hamiltonian 都能实现为态空间上的自伴算子。

现在回忆几何量子化程序。从一个辛流形出发，构造一个“预量子化”复线丛 L ，再给这个线丛一个Hermitian 度量（即，在每一点定义复向量的长度），使得这个Hermitian 度量的曲率正好是 $-i\omega$ 。然后再取辛流形上一个 ω 相容的复结构（复极化），这样 L 成为一个全纯线丛。取这个线丛的所有全纯且平方可积的截面，组成系统的Hilbert 空间 V 。

Schrodinger 方程给出系统状态的时间演化。在经典力学里，系统的时

间演化由Hamilton函数的“相流”给出，即，由Hamilton 函数H 得到向量场 X_H ，使 $\omega(X, X_H) = dH(X)$ 。如果 X_H 生成单参数变换群 $\rho_t : M \rightarrow M$ ，则必有 $\rho_t^* \omega = \omega$ ，即，它一定是单参数正则变换群，它就是经典系统的时间演化。由向量场得到单参数变换群的过程，就是求解Hamilton 正则方程组的过程。

如果假设 ρ_t 保持“极化”（在复极化的情形，就是保持复结构，即每一变换都是全纯同胚），那么线丛L 的每一平方可积全纯截面s 被拉回到L 的另一平方可积全纯截面 $\rho_t^* s$ ，取值为 $(\rho_t^* s)(x) = \rho_t^{-1} s(\rho_t x)$ 。而截面的时间演化是这个拉回的逆， $\tilde{\rho}_t = (\rho_t^*)^{-1} : V \rightarrow V$ ，满足方程

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}_t s = \mathcal{L}_{X_H} s = -\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} \tilde{\rho}_t s \quad (69)$$

这里 $\hat{\mathcal{H}}$ 就是函数H 的量子对应 $i\hbar \nabla_{X_H} + \mathcal{M}_H$ 。

以上是Schrodinger 方程，但是这里假设了 ρ_t 保持极化。这个条件太强，以至于在最简单的情形下都不成立。所以需要寻找另外的办法来重构Schrodinger 方程。如果 ρ_t 不保持极化，那么问题在于 $\tilde{\rho}_t s$ 不再是全纯截面，但它仍然在一个更大的Hilbert 空间里，就是L 的所有（不必全纯）平方可积截面空间U。令pr 为U 到V 的正交投影，则总可以定义 $s_t = pr(\tilde{\rho}_t s) \in V$ 。只是在正交投影以后，不能保证 $|s_t| = |s|$ ，时间演化不一定么正，或者说Hamiltonian 不一定能实现为自伴算子。幸运的是，对物理中经常出现的Hamiltonian，这样定义的演化正好是么正的。这个巧合还不能从数学角度理解。

参考文献

- [1] Graeme Segal's notes on QFT.
- [2] Gerald B. Folland: Harmonic Analysis in Phase Space. (AM-122)