單擺：運動的基元

文/吳國禎

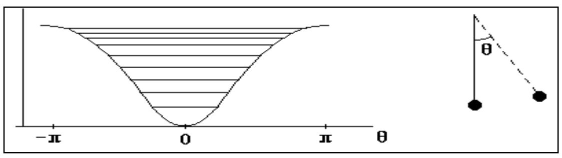
摘要

本文從分析單擺運動的特點出發，著重闡述單擺運動是複雜運動的基本組成單元。進而說明我們可以從單擺的運動瞭解到許多分子振動譜學的性質以及其中蘊涵的混沌性質。

一、單擺

單擺的運動是一個很基本和重要的物理現象。三百多年前，伽利略（西元 1564-1642 年）首先對它進行了研究。當單擺的振幅很小時，其頻率是個常數和振幅的大小無關。這是一個簡諧運動。這就是鐘擺的原理。當單擺的振幅變大時，它的頻率就不再是個常數，而和振幅或說是能量有關了。當體系的振動頻率和它的能量有關時，就是非線性運動。

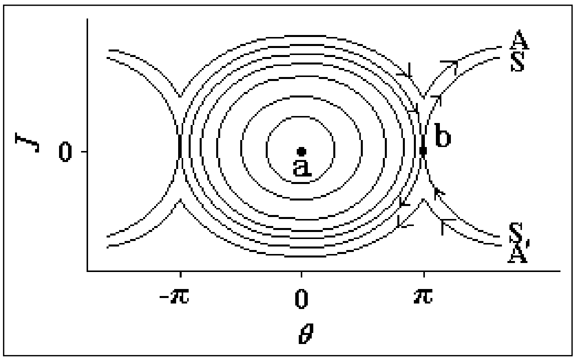
單擺的勢能V和擺所在的位置有關。設θ是振動所對應的角度。$V(\theta)$的函數圖，如圖一所示，正比於$1-\cos\theta = 2\sin^2\theta/2$。當$\theta$較小時，$\sin\theta \sim \theta$, 所以$V(\theta) \sim \theta^2$，是個拋物線，而當$\theta$接近於$\pm\pi$時，$V(\theta)$明顯地不隨$\theta$而有很大的變化。



圖一：單擺的勢能。勢阱中的橫線表示各種能量時的情形。

單擺運動可以用如圖二的方式來表示。圖中的 J 是單擺的速度（嚴格地說是角動量）。J和θ的關係圖也稱作相空間圖，簡稱相圖，θ也因此稱爲相角。當單擺的能量不足以使θ超出π（或-π）時（相角π相當於單擺位於最高處），體系呈現的是穩定的週期運動，即來回的，周而復始的擺動。對於這類運動，它的相圖結構是封閉的橢圓形。其中心點 a ($J=0,\ \theta=0$)是個穩定的不動點，對應於處於最低能量靜止的單擺。而當單擺運動的能量足夠大時，θ便會超出（-π，π）之範圍。這時的單擺是個圓周運動，即不停地轉動，相角θ便不斷地增加。圖中的箭頭表示單擺運動的方向。上述這兩類運動的分界線（separatrix）所對應的 b 點（$J=0$, $\theta=\pm\pi$）是個不穩定的不動點。說 b 是不動點是指單擺雖然可以停留在該處，但這是不穩定的。只要有很小的外力，單擺便會離開 b 處，而往下墜落。我們稱它爲雙曲點（hyperbolic point），這是因爲在該點附近，既有穩定的相空間區域也有不穩定的相空間區域。穩定的相空間區域是指箭頭往 b 處的運動，單擺這時往 b 處集中，趨於穩定。不穩定

的相空間區域是指箭頭離開 b 處的運動，單擺這時遠離 b 處而去，呈現不穩定的運動。此外，我們應注意到沿著分界線到達 b 點，且停留在該點，所需的時間是無窮長。這是因爲越靠近 b 點時，運動的速度越小，直至爲零！



圖二：單擺運動的相圖。J 爲速度，θ 爲相角。曲線對應於不同能量的軌跡。箭頭表示軌跡的方向。A，A´表示方向相反的轉動，S 爲分界線。

以上有關單擺運動的敍述體現了幾個非常重要的物理概念：簡諧，非線性，穩定和不穩定的不動點，分界線等。

二、單擺是複雜運動的基元

設想一個具有多個相互獨立的週期運動的體系。如果這些週期運動的頻率具有整數比的關係，則體系仍爲週期運動（這些週期運動週期的最小公倍數就是體系的週期）；否則（即其頻率之比不能爲整數比的關係），體系爲贗（准）週期 （不是週期運動，但仍是很規則的運動）。當這些運動相互作用，也就是有耦合後，體系就變爲非常複雜了。相互作用可以是複雜的，但我們總可以將相互作用表示爲各種級次（order）的共振。例如對於 2 維體系，它的共振項可以是 1:1（對應的頻率比爲 1:1），1:2（對應的頻率比爲 2:1），…等，對應的耦合作用量正比於 $\sin(\theta_1-\theta_2)$，$\sin(\theta_1-2\theta_2)$，…等（即將相互作用項展開爲傅立葉級數）。我們下面將要說明：共振導致相空間結構的變化。局部地看，它總是可以近似於一個單擺的運動。我們且以 2 維（分別用下標 1，2 表示）體系的 1：1 共振來說明這個觀點。

在以下的討論中，爲了方便，我們可以將 H_0, H 視爲體系沒有共振和有共振時的能量，J_1 和 J_2 爲速度（嚴格地說是動量=速度乘以質量），ω_1^0,ω_2^0 爲頻率。上（下）標‘0’表示沒有共振時的量。對於有關的公式，讀者可以將之視爲當然。它們不會影響以後的討論和理解。如果讀者對以下的部分有困難，則可跳過，從最後一個公式接著讀下去。設體系沒有共振時的能量爲 $H_0(J_1,J_2)$，其頻率爲:

$$\omega_1^0=\partial H_0/\partial J_1，\omega_2^0=\partial H_0/\partial J_2$$

並且假設 $\omega_1^0\cong\omega_2^0$ 或 $\omega_1^0-\omega_2^0=0$

（考慮對應的頻率比爲 1：1）

因此，在 1:1 共振條件下的體系能量爲:

$$H=H_0(J_1,J_2)+C_0(J_1J_2)\sin(\theta_1-\theta_2)$$

（共振條件下的總能量等於原先沒有共振時的能量加上相互作用的能量）

我們做如下的座標變換：

$$I_1=J_1-J_2，\phi_1=\theta_1-\theta_2$$

$$I_2=J_1+J_2，\phi_2=\theta_1+\theta_2$$

則：

$$H=H_0(I_1,I_2)+C_0(I_1I_2)\sin\phi_1$$

因爲 H 和 ϕ_2 無關，可知（請讀者就這樣認爲）I_2

爲守恆量，即 J_1 和 J_2 的總和是不變的，相當於總能量是不變的。這時

$$H \cong (\partial H_0/\partial I_1)_0 (I_1 - I_1^0) + \frac{1}{2} (\partial^2 H_0/\partial I_1^2)_0 (I_1 - I_1^0)^2 + C_0 (I_1^0, I_2^0) \sin\phi_1$$

（此表示相當於圍繞 I_1^0 附近多項式的展開！）

但是

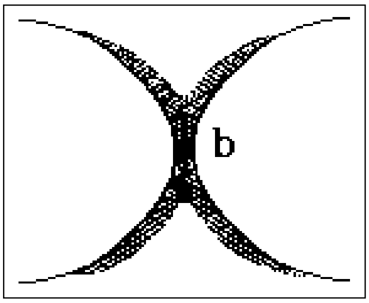
$$(\partial H_0 / \partial I_1)_0 = \frac{\partial H_0}{\partial J_1}\frac{\partial J_1}{\partial I_1} + \frac{\partial H_0}{\partial J_2}\frac{\partial J_2}{\partial I_1} = \omega_1^0 - \omega_2^0 = 0$$

（這是微分中的‘鏈式規則’，chain rule）

因此

$$H \sim \frac{1}{2}\alpha I_1^{\ 2} + C_0 \sin\phi_1$$ （α，C_0 爲常量）

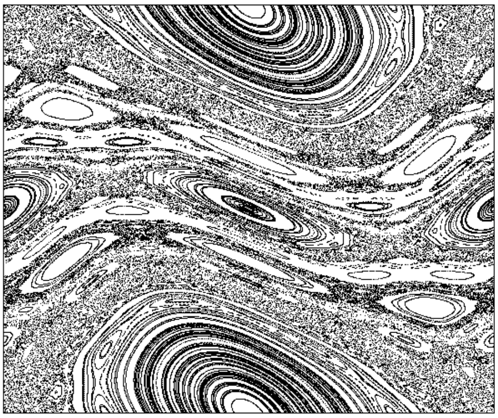
上式正好等同於一個在勢能爲 $C_0 \sin\phi_1$（勢能只和位置有關）中（此處，雖不是 sin 函數的平方，但是和前面單擺勢能並沒有本質上的區別。），動能爲 $\frac{1}{2}\alpha I_1^{\ 2}$（動能和速度有關）的單擺能量。注意 ϕ_1 指的是兩個振子對應的相角差。因此，我們說：共振下，相空間中的局部總是近似於一個單擺的運動。這就是單擺作爲運動的基元的由來。它的結構仍如圖二所示。我們應該注意到：當沒有共振時（也就是在產生等價的單擺運動前），因爲 J_1, J_2 爲常量（即速度爲常量），圖二中的曲線應皆爲直線。共振的作用，使得它們變曲折了。突出的是這時產生了一對不動點：一個爲穩定的（a 點），一個爲不穩定的（b 點）。另外，我們應注意到具有非局域 ϕ_1（$\pi \le \phi_1 \le \pi$）的運動對應於弱耦合，而局域 ϕ_1 的運動對應于強耦合。兩個振子的弱耦合，使得其間之相角相對獨立，因此 ϕ_1 可在（$-\pi, \pi$）之間延伸。而對於強耦合，兩個振子之相角差會固定在一個範圍。顯然，局域 ϕ_1 所對應的能量會比非局域的高。此與單擺中的小角度 θ 具有較低能量，而延伸的 θ 具有較高的能量不同！但不是本質的不同。前面曾提及 b 點處在穩定和不穩定相空間的交叉處。因此，從靠近 b 點的某處出發往 b 處運動時，軌跡是永遠不會回到出發處的（否則就是週期運動了）。同時，當軌跡越靠近 b 點時走得越慢。因此，軌跡將在 b 點附近‘糾纏’在一起（因爲有穩定和不穩定的空間區域），形成一個混沌區域（混沌，或混亂，不規則的軌跡）！如圖三所示。（對平面的單擺運動，這個情形比較難想像，考慮立體空間中的單擺運動就容易理解這個現象。這好比一個人站在一個球體的最頂端，這時對他而言，各個方向都是一樣的。這時他自然會有所遲疑，應該往何處而去，至而舉棋不定，原地踏步，這就造成了不規則的，混沌的軌跡。）



圖三：在不穩定不動點，b，附近的軌跡糾纏在一起，從而產生混沌結構。

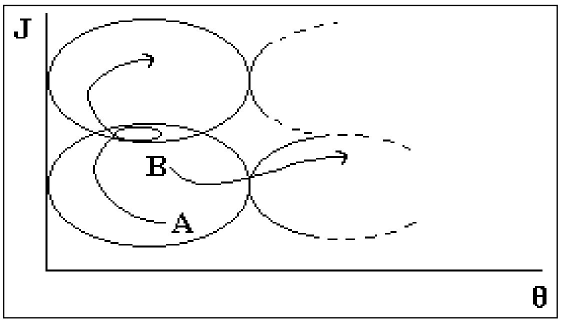
因此，我們說共振造成了相空間中局部混沌現象，而混沌就首先在不穩定的 b 點產生。以上說明共振在相空間中的局部生成了一個穩定的不動點，一個不穩定的不動點，以及在其附近的混沌軌跡。這些不動點，事實上可以是週期點（即對應於週期運動）。這個‘破壞’過程首先發生在週期運動上（即前面提到的頻率具有整數比的情形）。當

共振較弱時，擬週期運動反而較‘穩定’，只有當共振較強時，它才逐漸受到‘破壞’。因爲體系的相互作用，可以表示爲很多高級次的共振（即傅立葉級數表示），所以新生成的穩定不動點附近的軌跡還會受到高級次共振的破壞，而再產生新的穩定，不穩定的不動點（或週期點）以及混沌軌跡。這好比我們看遠處的山，只是綠綠的一片。但當我們用逐步高倍的望遠鏡來觀察時，就會看到一層層的細部景觀。這些細部結構間又顯現著層層相似的特點。顯然，當體系的相互作用逐漸變強時，更多的週期，擬週期運動受到破壞，相空間中的混沌區域也逐漸增大，直至最後淹沒了整個相空間。以上所敍述的就是有名的 KAM(Kolmogorov, Arnold, Moser)定理。它說明了運動體系的基本特徵。以上說明雖然以單擺爲例，但整個物理圖像卻是普適的，是物理世界的共性。圖四就是顯示這個相空間的結構。確實，從中我們是可以看到許多小的單擺的結構，以及許多交織在一起的混沌區域。



圖四： 運動相空間的結構。其中包含許多小的單擺的結構以及許多交織在一起的混沌區域。

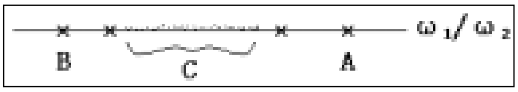
以上說的是相空間中局部混沌的現象。相空間中大範圍的混沌則來源於相空間中不同‘共振區’（即爲單擺的相圖，如圖二所示）的相互重疊。這可以從圖五的示意圖瞭解到。當軌跡 A 從某個共振區運行至兩個共振區的重疊處，軌跡是可以越入另一個共振區，繼續向前運行。因此軌跡就如同擴散（diffusion）一般在相空間漫遊，這就產生了大範圍的混沌了。共振區域的重疊會產生混沌是 Chirikov 有名的論斷(參考文獻 1)。此外，擴散運動還可以沿著圖五中的 B 軌跡方向，此類運動稱作 Arnold 擴散。因爲 Arnold 擴散需經過不穩定的雙曲點，所以它的擴散速率要比 Chirikov 擴散慢。



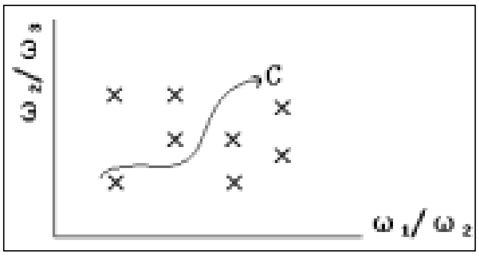
圖五：A 軌跡的‘擴散’稱爲 Chirikov 擴散。B 軌跡的‘擴散’稱爲 Arnold 擴散。

二維相空間中的擴散會受到週期和擬週期運動的限制，而三維以上的相空間中的擴散就不受此限制。這可以很容易地在‘頻率空間’中瞭解到。圖 6(a)爲二維的情形。圖中 A 點之 ω_1/ω_2 若爲有理數，（即 ω_1, ω_2 二者之比爲整數比的關係），則爲週期運動，B 點之 ω_1/ω_2 若爲無理數（即 ω_1, ω_2 二者之比不能爲整數比的關係），則爲擬週期運動。C 區域對應於混沌運動（混沌運動可視爲具有多種頻率運動的綜合）。因爲運動是連續的，故混沌運動只能在所限制的範圍內。圖六(b)爲三維的情

形。顯然混沌軌跡可在相空間中無限制地漫遊了。以上說明，在一般的情況下（即大於三維的情形），混沌軌跡是不會被局限住的，它們會在相空間中無限制地漫遊。換句話說，體系總體的混亂是不可避免，必然的。富有想像力的讀者會連想到這些概念可能與統計力學或熱力學的一些觀念，例如火商，（entropy）有關！甚而連想到是否可以用混沌（軌跡）的觀念來重新理解統計力學或熱力學的問題。確實如此，這是近來新興起來的一個研究領域。



(a)

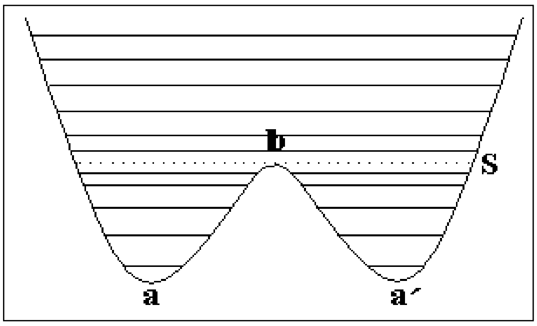


(b)

圖六：(a) 二維頻率空間，(b) 三維頻率空間。表示週期，贗週期運動，C 爲混沌運動。

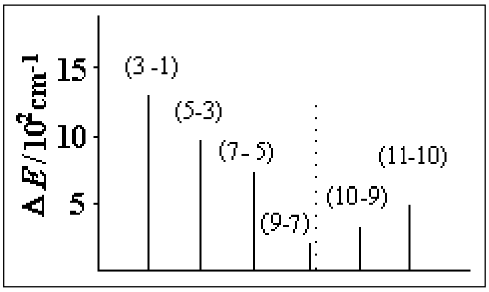
三、分子振動的聯想

兩個化學鍵振動的耦合，可以看作是兩個具有相互作用單擺的運動。圖七所示爲其勢能曲線。其中虛線對應於分界線，a, a´爲穩定的不動點，b 爲不穩定的不動點。兩個化學鍵各自處於 a, a´兩處附近的振動模式爲弱耦合的局域模，此時兩個化學鍵振動的相角各自獨立，沒有固定的關係，即各顧自己的振動，故稱爲局域模。而對於超過分界線的高能級的振動，由於強耦合的作用（能量可在兩

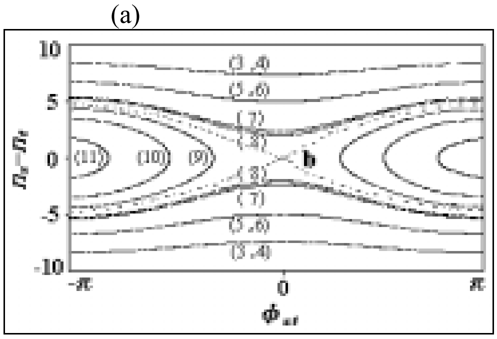


圖七：兩個化學鍵振動耦合的勢能。水平線表示能級。a, a✓爲穩定的不動點，b 爲不穩定的不動點。S 爲分界線。

個振子間往返！），兩個化學鍵振動的相角有一定的關聯，故稱爲簡正模。



(a)

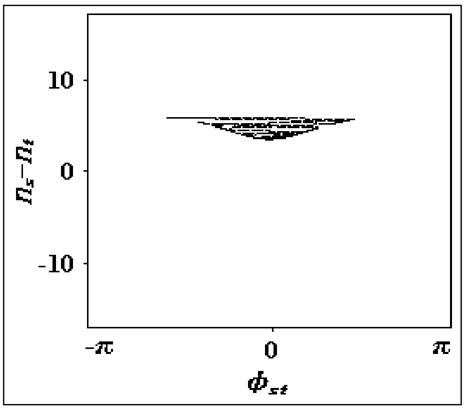


(b)

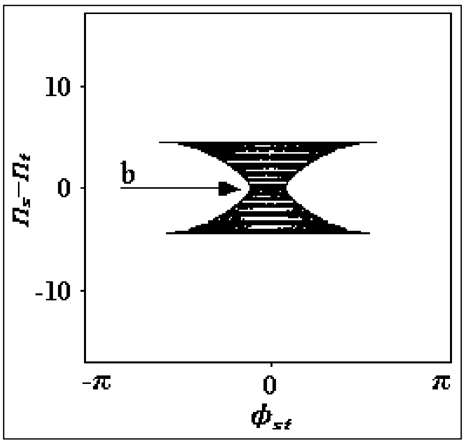
圖八：(a)水分子中兩個 O-H 鍵伸縮振動的相圖(b）能級間距 ΔE（cm^{-1} 是能量的單位）。圖中括弧“()”中的數字爲能級標號，虛線表示分界線所在的位置。

圖八(a) 是運用以上單擺運動的概念，計算得到的水分子兩個 O-H 鍵振動的相圖。（注意，此相圖一如單擺運動的相圖。） 圖中，n_s 和 n_t 為水分子兩個 O-H 鍵伸縮振動的能量，相當於前面提到的單擺的速度。φ_{st} 為其間的相角差。此處，只標出 11 個能級。注意，這時的能量不能如單擺那樣的連續，而只能是孤立的一些能級。這是微觀世界的所謂量子化，即能量不能是連續的現象。從圖中可以看出，低能級具有能級相近的現象。這是因為兩個 O-H 鍵是等同的，具有相同的頻率 。能級低時，二者耦合較弱，故仍具有相近的能級。這時，兩個鍵振動的弱耦合使得其間的相角相對獨立，因而它們的相角差 φ_{st} 可在（$-\pi,\pi$）之間延伸，這是局域模的特徵。能級較高時，二者耦合變強，同時，相角關係也比較明確，接近於 π（$-\pi$），這時便呈現出（近似等間距的）簡正模的特點。此外，我們應注意到，不穩定點 b 和分界線的所在。分界線區隔開了局域模和簡正模！從圖八(a) 中還可看到，由局域模到簡正模的分界線處在第 8 和第 9 能級之間。圖八(b) 顯示，相鄰能級的間距 $\varDelta E$（不考慮近似簡並的能級間距）在分界線附近時最小，這與單擺量子化能級間距在靠近分界線時變小是一致的。這是因為這時對應的勢能曲線最為平坦。

類比於單擺的運動，兩個鍵振動耦合的結果將使得靠近分界線不穩定點 (圖八(a) 中的 b 點 ($n_s = n_t, \varphi_{st} = 0$)) 處的能級的相空間中出現混沌軌跡，如圖九 a) 所示。從圖中可見，該點的軌跡在 b 點附近“糾纏”在一起，形成一個混沌區域！可見，共振造成了相空間中的局部混沌現象，而混沌就首先在不穩定的 b 點產生。對於不在 b 點附近的初始



(a)



(b)

圖九： (a)分界線附近靠近 b 點的混沌軌跡，(b)較遠離 b 點的比較規則的運動軌跡。

點，則其軌跡一般均較規則。對於較高或較低的能級，如果相空間中的初始點在 b 點附近，則軌跡亦具混沌特徵，但此類點少得多。圖九(b) 是第 11 能級的相空間中遠離 b 點的一個初始點的相空間軌跡圖。可以看到，該初始點的軌跡為比較規則的運動。由此可見，水分子中兩個 O-H 鍵之間伸縮振動耦合 (共振) 的結果，使得靠近分界線的中間能級的相空間中出現了混沌軌跡，而較高或較低能級的相空間中則具有比較規則的軌跡。這一現象似

乎和人們的常識 (能量越大，運動越不規則) 相反。仔細分析，能級低時兩個振子的耦合弱，相空間中的運動自然較規則。能級高時，兩個振子的強耦合，會造成“鎖相”（phase-locking）的現象（即運動的強烈耦合，造成相角間的關聯）。因此，相空間中的運動也仍會是比較規則的。

總結地說，可以運用單擺的運動特點來理解，描述分子振動態的耦合特性。通過對水分子中兩個 O-H 鍵伸縮振動動力學的研究表明，對於低能級，由於鍵之間的耦合較弱，能級具有近似相同的現象，呈現出局域模的特徵；而高能級，由於強耦合，使得能級呈現出等間距的簡正模特點。在分界線附近的能級的相空間中，對應於單擺相圖中的不穩定點 b 處出現了混沌運動，而較高或較低能級的相空間中則具有比較規則的運動。同時，對應於單擺分界線附近能級間距較小，H_2O 的中間能級（指振動態）的間距也較小，這和光譜實驗的結果相同！比較令人感興趣的是有關從穩定點，不穩定點和週期運動，混沌運動的角度來看待分子振動能級的觀念。這是一個聯結非線性力學和分子光譜學的切入點，值得注意，也是作者這些年來關注的問題。

參考資料：

[1] B. V. Chirikov, Phys. Rep. **52**, 263 (1979).

[2] 本文部分取材自：吳國禎，分子振動的混沌理論，科學出版社出版，北京，2003。

作者簡介

吳國禎，現任職北京清華大學物理系教授。

Email: wgz-dmp@tsinghua.edu.cn